

Moállison Ferreira Cavalcante

**Modelo de Baxter-Wu em uma, duas e três
dimensões para spin $1/2$**

João Pessoa - PB

2019

Moállison Ferreira Cavalcante

Modelo de Baxter-Wu em uma, duas e três dimensões para spin $1/2$

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Universidade Federal da Paraíba, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física, área de concentração Física Estatística e Fenômenos Críticos.

Universidade Federal da Paraíba

Centro de Ciências Exatas e da Natureza

Programa de Pós-Graduação Stricto Sensu em Física

Orientador: João Antônio Plascak

João Pessoa - PB

2019

Catálogo na publicação
Seção de Catalogação e Classificação

C376m Cavalcante, Moallison Ferreira.

Modelo de Baxter-Wu em uma, duas e três dimensões para spin 1/2 / Moallison Ferreira Cavalcante. - João Pessoa, 2019.

65 f. : il.

Orientação: João Antônio Plascak.

Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN.

1. Física. 2. Transição de fases. 3. Modelo de Baxter-Wu. 4. Teoria de campo médio. I. Plascak, João Antônio. II. Título.

UFPB/BC

CDU 53(043)

Agradecimentos

Este trabalho é consequência de meus esforços como aluno de graduação e mestrado, mas, sem dúvida, algumas pessoas precisavam estar ali, participando direta- ou indiretamente de todo esse processo, para que tudo pudesse ser feito.

De início agradeço ao seguinte conjunto de pessoas: Moacir, Janaina, Moacia e Livia. Minha família. Com certeza sem o apoio que eles sempre (sempre) me deram este trabalho não teria sido realizado.

Aos meus colegas de curso, Rafael, Alberto, Letícia, Samuel, Debora e Alexsander, pelos diversos momentos divertidos que compartilhamos. Foi muito mais tranquilo percorrer o caminho até aqui na companhia deles.

Ao meu professor de matemática no ensino médio, Marcos. Me fez enxergar a disciplina com outros olhos.

À pessoa que me deu a oportunidade de fazer a primeira iniciação científica (e depois outras duas), professor Jorge Gabriel. Obrigado pelas oportunidades e ensinamentos.

Ao meu orientador de mestrado, João Plascak, uma inspiração como profissional e pessoa. Um grande amigo.

Ao suporte financeiro dado pelo contribuinte brasileiro em forma de uma bolsa repassada pelo CNPq.

Les joies du matin
Sivuca.

Resumo

Este trabalho consiste em investigar as fases e a transição entre estas de um modelo magnético cristalino, o modelo de Baxter-Wu (B-W), em *diferentes dimensões*. Apesar do modelo ter sido proposto em uma rede triangular bidimensional, aqui será feita uma generalização para as redes unidimensionais e tridimensionais. Em uma dimensão, o modelo pode ser tratado por meio da técnica da matriz de transferência. Embora seja um procedimento exato, que o sistema não apresenta uma transição de fases, os resultados não podem ser escritos de uma maneira analítica para campo externo não nulo, sendo dados através dos autovalores de uma matriz não-hermitiana. Para o caso do campo externo nulo, foi possível calcular a função de partição do sistema e obter toda a termodinâmica. Em duas e três dimensões o modelo é estudado com o emprego da Teoria de Campo Médio (TCM), utilizando-se o esquema variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov. Neste tratamento utilizou-se blocos de um spin, blocos triangulares e os resultados exatos da rede unidimensional. Embora os valores da temperatura de transição aproximem-se dos valores esperados para cada rede, a transição que se obtém é sempre de primeira ordem, enquanto que os resultados exatos para a rede triangular bidimensional confirmam uma transição de segunda ordem.

Palavras-chaves: Transição de Fases; Modelo de Baxter-Wu; Teoria de Campo Médio.

Abstract

This work consists in investigating the phases and transition between them in a magnetic model, namely the Baxter-Wu (B-W) model, in *different spatial dimensions*. Although the model was originally proposed for a two-dimensional triangular lattice, we will here make a generalization for one- and three-dimensional lattices as well. In one-dimension, the model can be treated by means of the transfer matrix technique. Although it is an exact procedure, in which the system does not present any phase transition, the results can not be written in a closed analytical form for non-zero external field, and are given by the eigenvalues of a non-Hermitian matrix. For zero external field, the partition function is calculated. In two and three dimensions the model is studied using the Mean Field Theory (MFT), using the scheme based on the Bogoliubov inequality. In this treatment, we use blocks of a single spin, a triangle of spins, and in two and three dimensions the exact results for the one-dimensional network. Although the values of the transition temperature are close to the expected values for each lattice, the transition is always of first order, whereas the exact results for the two-dimensional triangular lattice confirm a second-order transition.

Key-words: Phase Transition; Baxter-Wu model; Mean field theory.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Diagrama de fases para uma substância pura (a) e um magneto simples (b). Retirada e adaptada da referência (STANLEY, 1987).	14
Figura 2 – Isotermas em torno de T_c para um fluido simples. Retirada de (STANLEY, 1987).	16
Figura 3 – Isotermas em torno de T_c para um magneto simples. Retirada de (STANLEY, 1987).	18
Figura 4 – Probabilidade de encontrar dois elétrons em função da distância entre eles. Retirada de (ANNETT, 2004).	19
Figura 5 – Triângulo arbitrário da rede.	21
Figura 6 – Cadeia unidimensional (a). Representação da cadeia unidimensional como uma tira (b).	22
Figura 7 – Energia livre por spin.	26
Figura 8 – Entropia por spin.	26
Figura 9 – Calor específico para o modelo de Baxter-Wu em uma dimensão.	27
Figura 10 – Energia livre do modelo de Ising via aproximação bloco de um spin em uma dimensão.	34
Figura 11 – Magnetização para o modelo de Ising via aproximação bloco de um spin, onde $K = \beta J$	34
Figura 12 – Rede triangular bidimensional. Os triângulos em marrom estão desconexos, isto é, os seus três vértices só pertencem a eles próprios. Destacamos dois tipos de triângulos: A e B. Os triângulos tipo A possuem dois dos seus vértices no mesmo triângulo desconexo e os do tipo B possuem cada vértice em um triângulo desconexo distinto.	35
Figura 13 – Soluções da equação transcendental (4.5) quando $\frac{k_B T}{J} = 0.5$	37
Figura 14 – Magnetização segundo o primeiro hamiltoniano tentativa, onde $K = \beta J$	38
Figura 15 – Energia livre em função da magnetização para o modelo de B-W segundo a aproximação de spins livres.	39
Figura 16 – Grafico do lado esquerdo da equação transcendental (4.16). Em vermelho temos a curva para $t=3.1$, em preto para $t=6$ e em verde para $t=1.5$	42
Figura 17 – Energia livre obtida pela aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$. Para $t \rightarrow \infty$ a energia livre se comporta como uma reta de inclinação $-\ln(2)$	43
Figura 18 – Magnetização de acordo com a aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$	44
Figura 19 – Entropia de acordo com a aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$	45

Figura 20 – Calor específico de acordo com a aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$	46
Figura 21 – Placa com 4 spins.	49
Figura 22 – Esquema da rede 3d. Em (a) temos o conjunto de 3 planos transladados. Em (b) temos a sobreposição de três hexágonos dos planos.	55
Figura 23 – Rede triangular tridimensional. Notamos a existência de 3 hexágonos fora dos planos: (6,7,8,3,11,10), (5,7,9,2,11,12) e (4,8,9,1,10,12). Além dos triângulos nos hexágonos temos 6 provenientes de faces externas: (4,5,12), (3,4,8), (2,3,11), (1,2,9), (1,6,10) e (5,6,7). Retirada de (JORGE et al., 2018).	55

Lista de tabelas

Tabela 1 – Resultados	58
---------------------------------	----

Sumário

	Lista de ilustrações	7
	Lista de tabelas	9
1	INTRODUÇÃO	11
1.1	Transição de Fases e Fenômenos Críticos	11
1.1.1	Fluidos	14
1.1.2	Magnetos	16
1.1.3	Modelos Magnéticos	18
2	MODELO DE BAXTER-WU EM UMA DIMENSÃO	22
3	TEORIA DE CAMPO MÉDIO	28
3.1	Desigualdade de Bogoliubov	29
3.2	Método Variacional	30
3.3	Aplicação no Modelo de Ising	31
4	MODELO DE BAXTER-WU EM DUAS E TRÊS DIMENSÕES	35
4.1	H_0 como uma soma de spins livres	36
4.2	H_0 como uma soma de triângulos desconexos	39
4.3	H_0 como uma soma de tiras desconexas	45
4.3.1	4 spins pelo modelo de Ising	49
4.4	Modelo de Baxter-Wu em três dimensões	54
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	58
	REFERÊNCIAS	60
	APÊNDICES	63
	APÊNDICE A – MATRIZ U	64

1 Introdução

1.1 Transição de Fases e Fenômenos Críticos

A matéria como é vista diariamente apresenta-se em fases. As três fases mais comuns que se tem acesso são: sólida, líquida e gasosa. De longe essas não são as únicas. Uma fase da matéria, ou estado, é identificada por propriedades térmicas e mecânicas do material. As propriedades mecânicas estão relacionadas com a agregação das moléculas que compõem a substância, por exemplo, devido ao arranjo cristalino apresentado pela fase sólida, esta possui uma baixa compressibilidade (resistência a deformação), diferente da fase gasosa, em que as moléculas estão dispersas, quase livres, e conseqüentemente produz uma alta compressibilidade. A investigação destas fases é imprescindível para uma melhor compreensão da matéria nas mais diversas situações. Do ponto de vista prático, o estudo de tal tema está diretamente ligado com aplicações tecnológicas, como é o caso do aparelho de ressonância magnética, que tem seu funcionamento graças aos estudos da fase supercondutora nos metais.

A matéria vai existir em uma dada fase quando certos parâmetros do sistema forem compatíveis com a mesma. Desta forma, a modificação contínua de tais parâmetros permite uma transição entre fases. Por exemplo, quando aquecemos a água à pressão atmosférica, ao atingir a temperatura de 100°C (todas as informações numéricas nesse capítulo são retiradas de (OLIVEIRA, 2005)) o sistema muda para a fase gasosa. De uma forma similar, quando resfriamos a água até 0°C a substância passa para a fase sólida. Ambas transições ocorrem sempre a uma temperatura e pressão constantes. Nos dois casos o fator causador da transição é a agitação térmica: no primeiro caso, a fase líquida é formada por moléculas que estão fracamente ligadas, com o aumento da temperatura a energia térmica, $k_B T$, se torna maior que a energia de ligação média, fazendo com que as ligações sejam rompidas. Já no segundo caso, a diminuição da temperatura faz com que a distância inter-molecular também diminua, efetivamente a energia de ligação aumenta, fazendo com que a substância se arranje em uma estrutura cristalina.

Existem ainda outras fases da matéria não muito comuns, como as fases magnéticas, metálicas, superfluídas, etc. Como será visto mais a frente, as transições entre fases possuem características em comum, levando à ideia de *Universalidade*. Abaixo segue uma breve explicação sobre algumas fases e as respectivas transições:

- Transição magnética: Ao aquecermos gradualmente uma amostra de um material magnético, como um ímã de geladeira, existe uma temperatura, conhecida como temperatura de Curie (para o níquel: 358°C), em que a amostra deixa de possuir uma

magnetização espontânea. Abaixo dessa temperatura tínhamos a fase ferromagnética e acima passamos a observar a fase paramagnética.

- Transição metal-supercondutor: Quando expostos a temperaturas suficientemente baixas (para supercondutores convencionais, ([BARDEEN et al., 1957](#)), ([DAHL, 1984](#))), metais como mercúrio (4.15K), chumbo (7.19K) e estanho (3.72K) sofrem uma perda total da sua resistência elétrica. Esta nova fase que os elétrons conseguem se mover sem dissipar energia é chamada de supercondutora. Existem ainda os chamados supercondutores de alta temperatura crítica, mas o mecanismo físico que gera tal fase não é igual ao de temperaturas baixas (BCS), permanecendo assim um problema ainda em aberto.
- Transição superfluida no hélio-4: Novamente à temperaturas baixas, onde os efeitos quânticos se fazem presente, o hélio-4 (2.17K) atinge uma nova fase líquida (o hélio não se solidifica à pressões ambiente) em que o fluido deixa de apresentar viscosidade. Para uma breve introdução consultar ([BALIBAR, 2007](#)).

Nas transições de fases térmicas, que o causador da transição é a temperatura, há uma intensa disputa entre a energia de formação do sistema (energia interna) e a entropia. O estado de equilíbrio de um sistema termodinâmico em contato com um reservatório térmico é dado pelo mínimo da energia livre de Helmholtz, $F = U - TS$. Na região de baixas temperaturas, visto que a entropia é uma função monotonicamente crescente da temperatura, a energia interna prevalece. Na região de altas temperaturas é o segundo termo que tem maior contribuição. A transição deve ocorrer para alguma temperatura intermediária que separa esses dois limites. Apesar de parecer uma ideia intuitiva, existem sistemas para os quais essa temperatura é o próprio zero Kelvin, e para tais sistemas pode-se dizer que não há transição de fases. Além das transições térmicas, que são conhecidas como transições clássicas, existem também as transições quânticas, que ocorrem à zero Kelvin. O causador dessas transições é um outro parâmetro externo, como campo magnético, concentração de partículas, etc. Neste trabalho será estudado apenas as térmicas.

As transições de fases podem ser divididas em dois tipos: de primeira ordem (ou descontínua) e segunda ordem (ou contínua). Segundo Fisher ([STANLEY, 1987](#)), as transições de primeira ordem são caracterizadas por uma descontinuidade na primeira derivada da energia livre, enquanto as de segunda ordem possuem uma descontinuidade ou divergência na segunda derivada da energia livre. Uma outra definição equivalente seria dizer que nas transições de primeira ordem existe um calor latente associado, consequentemente a entropia do sistema sofre uma descontinuidade no momento da transição. Já nas de segunda ordem não há essa quantidade extra de calor, e o sistema transita continuamente entre as fases. Durante as transições de primeira ordem é observado uma coexistência das

fases, podendo ser possível distingui-las em certos casos, como no de um fluido; para as transições contínuas, as fases se tornam idênticas, sendo impossível distingui-las (quando tratarmos de um sistema fluido ficará mais claro). A transição sólido-líquido da água é de primeira ordem, e a transição do hélio-4 para a fase superfluida é de segunda ordem.

Para descrever uma transição de fases definimos uma quantidade chamada parâmetro de ordem, ψ . Essa quantidade é uma variável termodinâmica que permite saber o momento exato da transição, pois

$$\psi = \begin{cases} 0, & \text{se } T \geq T^* \\ \psi(T), & \text{se } T < T^* \end{cases}$$

onde T^* é a temperatura de transição. Em um contexto mais geral da teoria, esse parâmetro está associado as simetrias do sistema. A fase mais simétrica é aquela onde $\psi = 0$ e a fase menos simétrica possui um ψ diferente de zero, portanto, a transição representa uma quebra de simetria. Por exemplo, nas transições magnéticas a fase paramagnética não possui ordenamento magnético devido à grande energia térmica, isso faz com que a amostra seja invariante por rotação dos momentos de dipolo magnéticos, ao contrário da fase ferromagnética, que essa rotação ocasionaria uma mudança na orientação magnética. Assim, a fase mais simétrica é a paramagnética e a menos simétrica é a ferromagnética. Como será visto para um magneto o parâmetro de ordem mais adequado é a magnetização espontânea do sistema.

As transições de segunda ordem exibem ainda os chamados Fenômenos Críticos. Nas proximidades da temperatura de transição, que para esse tipo de transição será chamada de temperatura crítica, T_c , as quantidades termodinâmicas assumem um comportamento característico dado por leis de potência. Os expoentes dessas potências são conhecidos como expoentes críticos: α , β e γ . Usando que $t = T/T_c - 1$, para temperaturas próximas à crítica o calor específico, magnetização e a susceptibilidade magnética (ou compressibilidade para um fluido) são descritos por

$$c \propto |t|^{-\alpha},$$

$$m \propto |t|^\beta,$$

$$\chi \propto |t|^{-\gamma},$$

respectivamente. Um fato de grande importância descoberto da investigação de sistemas que apresentam comportamento crítico é que independentemente da dinâmica microscópica (do modelo), esses sistemas apresentavam o mesmo conjunto de expoentes. Assim, foi conjecturado que todos os sistemas que apresentassem fenômenos críticos teriam os mesmos expoentes, conduzindo à ideia de Universalidades no ponto crítico. Com o surgimento de dados experimentais e a solução de novos modelos, constatou-se que a ideia mais plausível seria a de *Classes de Universalidade* na região crítica. Os modelos dentro de uma mesma

classe teriam os mesmos expoentes críticos e a classe estaria definida pela dimensão do modelo, dimensão do parâmetro de ordem e o alcance das interações.

Uma outra característica dos fenômenos críticos é a ausência de uma escala de comprimento, como em um fractal. A escala microscópica, dominante fora da região crítica, perde sua influência perto da transição. Assim, próximo à temperatura crítica os sistemas apresentam uma invariância de escala. A observação deste fato conduziu K.G. Wilson a formular a teoria do Grupo de Renormalização, (WILSON, 1971; WILSON, 1974).

Abaixo comento as principais características de dois sistemas canônicos que apresentem transição de fases e fenômenos críticos.

1.1.1 Fluidos

As fases de uma substância pura, como a água, podem ser colocadas no diagrama $p \times T$ abaixo (figura 1-(a)), junto com as linhas de separação e pontos de interesse. A fase sólida é obtida no regime de baixas temperaturas e altas pressões, a fase líquida em temperaturas e pressões intermediárias, e a fase gasosa na região de altas temperaturas. As linhas representam a fronteira entre as fases. Ao cruzar essas linhas o sistema sofre uma transição de fase de primeira ordem, assim, serão chamadas de linhas de coexistência. Existe um ponto, chamado ponto triplo, onde as três fases coexistem em equilíbrio. Para a água esse ponto tem coordenadas ($6.10^{-3} atm$, $0.01^\circ C$). Existe um outro ponto especial neste diagrama, o ponto crítico. É nesse ponto que o sistema sofre uma transição de segunda ordem. Para a água esse ponto tem coordenadas ($218 atm$, $374^\circ C$). Até onde se sabe, não existe um ponto crítico na linha de coexistência sólido-líquido.

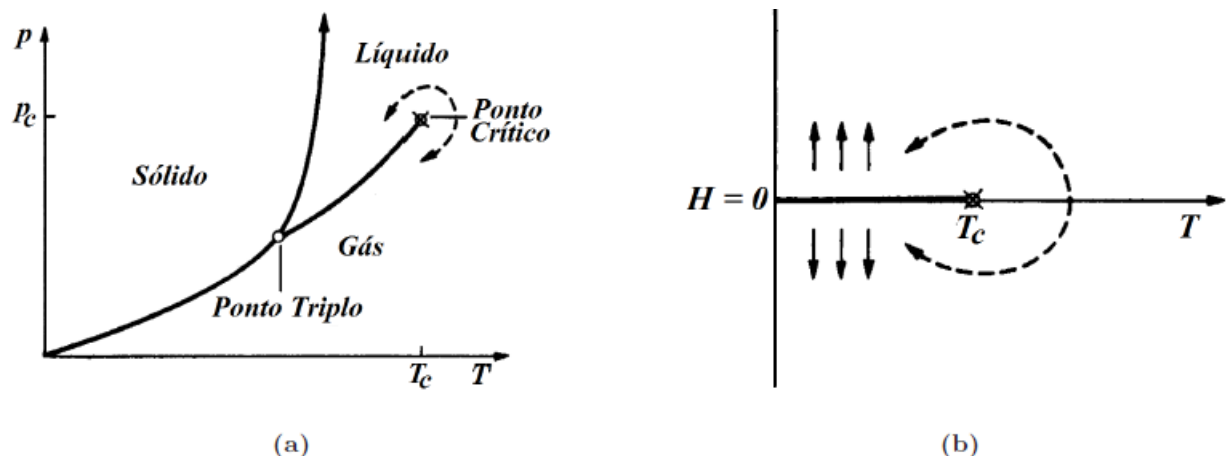


Figura 1 – Diagrama de fases para uma substância pura (a) e um magneto simples (b). Retirada e adaptada da referência (STANLEY, 1987).

Para fluidos, à medida que nos aproximamos do ponto crítico, percorrendo a linha de coexistência, a amostra vai ganhando uma tonalidade branca, até chegarmos em T_c onde as fases líquida e gasosa não podem ser distinguíveis. Esse fenômeno ficou conhecido como

opalescência crítica. Esse tom de cor é explicado devido ao alto espalhamento que a luz sofre ao penetrar a amostra. Sendo assim, na região crítica o sistema deve possuir diversas escalas de comprimento, possibilitando o espalhamento da luz em todos os comprimentos de onda. Essa é uma característica da inexistência de uma escala de comprimento, como mencionado antes.

No gráfico $p \times \rho$, sendo ρ a densidade de moléculas, temos isotermas abaixo e acima da temperatura crítica (figura 2). Para temperaturas muito acima de T_c a pressão varia linearmente com ρ segundo a equação de estado para um gás ideal. Para temperaturas abaixo de T_c a transição é de primeira ordem, logo, as primeiras derivadas da energia livre são descontínuas. Se a energia livre em questão é a de Gibbs, $v = \frac{1}{N} \frac{\partial G}{\partial P}$, então, o volume (e a densidade) é descontínuo ao cruzarmos a linha de transição de primeira ordem. Isso já era esperado uma vez que as moléculas do gás tem mais liberdade para se mover do que no líquido. Além disso, como a pressão é constante durante a transição, temos uma região de pressão constante separando as duas fases. Na figura, a região $(\rho_L - \rho_G)$ representa a região de coexistência entre as duas fases, onde temos tanto o líquido quanto o gás. A medida que a temperatura cresce em direção à T_c , essa diferença diminui, chegando a um valor nulo quando $T = T_c$, por isso é dito que neste ponto as fases se tornam idênticas. Nesta temperatura e com essa densidade, é possível observar um fluido de tonalidade branca e não será possível distinguir se trata-se de um gás ou líquido. O que ocorre de fato são regiões líquidas e gasosas de todos os tamanhos na amostra. Ao dar um zoom em uma região gasosa, percebe-se que esta é formada por outras regiões menores líquidas e gasosas. Ao penetrar nessas regiões menores é possível perceber o mesmo padrão repetido, regiões na fase líquida e regiões na fase gasosa, como em um fractal de fases. Este padrão caracteriza a invariância de escala dos fenômenos críticos. Para este sistema o parâmetro de ordem pode ser identificado como a diferença entre as densidades do fluido.

Analisando o gráfico nota-se que a compressibilidade isotérmica, $\kappa_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial P}$, diverge quando o sistema está na temperatura crítica. Esta divergência é consequência dos fenômenos críticos serem fenômenos altamente correlacionados, que para o sistema fluido equivale a dizer que uma pequena mudança na pressão ocasionará uma grande mudança na densidade do fluido.

A primeira teoria a ter sucesso em descrever as isotermas em torno de T_c foi elaborada por Van der Waals em sua tese de doutorado publicada em 1873, (WAALS, 1873). No trabalho, Waals generaliza a equação de estado de um gás ideal fazendo considerações acerca do volume molecular e das interações entre as moléculas. A seguinte equação de estado para um fluido mais realista foi proposta

$$\left(p + \frac{a}{v^2}\right)(v - b) = RT,$$

onde a e b são constantes fenomenológicas. Esta equação apresenta alguns problemas na região de coexistência entre as fases líquida e gasosa (ela prevê uma região de instabilidade

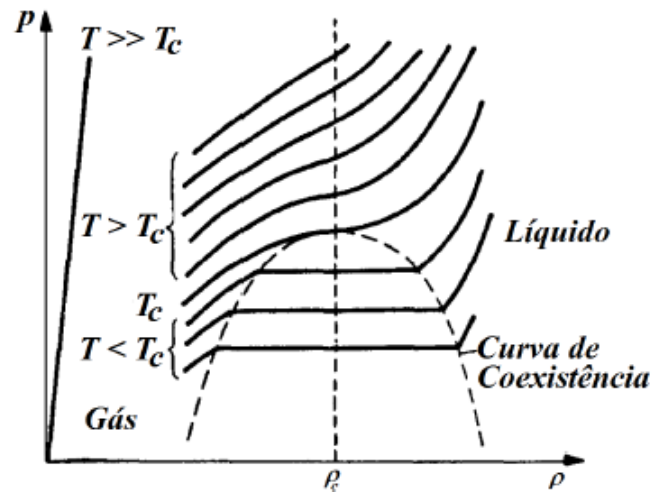


Figura 2 – Isotermas em torno de T_c para um fluido simples. Retirada de (STANLEY, 1987).

termodinâmica, $\kappa_T < 0$), mas este problema foi superado com a ideia de construção de áreas iguais proposta por Maxwell, (CLERK-MAXWELL, 1874), (CLERK-MAXWELL, 1875). A partir dessa equação também é possível obter os seguintes valores para os expoentes críticos: $\gamma = 1$, $\beta = 1/2$ e $\alpha = 0$. Nota-se que o calor específico, caracterizado por α , não exibe uma divergência e sim uma descontinuidade na transição. Apesar desta equação ter representado um grande avanço na descrição do fenômeno, estes expoentes estão em desacordo com os dados experimentais.

1.1.2 Magnetos

Pode-se constatar que à temperatura ambiente dois ímãs conseguem se atrair mutuamente (e a outros metais) graças ao campo magnético próprio apresentado por eles. Dizemos que o material que constitui os ímãs se encontra na fase *ferromagnética*, pois apresenta uma magnetização espontânea. Em oposição, quando aproximamos dois cliques, não observamos nenhuma força entre eles, mas se um dos cliques estiver em contato com o ímã, vemos que surge uma força de atração entre os dois cliques. Portanto, dizemos que o material que forma o clipe está na fase *paramagnética*, pois só consegue produzir um campo quando está sob a influência de outro campo magnético externo. Essas experiências feitas em temperaturas elevadas podem resultar em outros acontecimentos, haja vista a competição entre a entropia e energia de formação do magneto. O modelo de magneto mais simples é aquele que possui ordem magnética apenas em uma direção espacial, ou seja, que a interação magnética é altamente anisotrópica.

À medida que aquecemos uma amostra ferromagnética, sua magnetização vai diminuindo continuamente até se anular em uma dada temperatura crítica (para o ferro

$T_c = 770^\circ C$), isto se justifica pelo fato da agitação térmica destruir o ordenamento magnético em altas temperaturas. Acima desta temperatura o material se encontrará na fase paramagnética. Desta forma, a magnetização é uma boa escolha para ser o parâmetro de ordem da transição ferro-paramagneto. Na figura 1-(b) temos o diagrama de fases para um material desse tipo. Percorrendo a linha $H = 0$ (caso de interesse) passamos por um intervalo de temperaturas onde a magnetização é diferente de zero, até chegarmos em T_c , onde qualquer temperatura maior produzirá uma magnetização nula. Nesta linha, tem-se a coexistência de duas fases, a fase ferro-1 e ferro-2, onde as orientações magnéticas destas fases são opostas devido ao campo externo. Esta linha é análoga à linha de transição líquido-gás, para o fluido simples, que termina em um ponto crítico. No ponto crítico ($H = 0; T = T_c$), vamos ter uma situação análoga à opalescência crítica no fluido, regiões na fase ferro (que possui uma magnetização resultante diferente de zero), ou na fase paramagnética (magnetização resultante nula), de todos os tamanhos, caracterizando uma estrutura de fractal entre as fases.

Da mesma forma que foi feita para fluidos, é possível analisar isotermas em torno da temperatura crítica, como está na figura 3. Para temperaturas muito próximas do zero absoluto, a energia térmica é muito pequena comparada com a energia magnética, assim, é razoável esperar uma magnetização espontânea máxima nesse limite, como observado no gráfico. Para temperaturas maiores, mas ainda menores que a crítica, a energia térmica já produz certa desordem no sistema, de forma que a magnetização é menor que seu máximo, mas $M(H = 0) \neq 0$. Quando atingimos T_c , a magnetização espontânea é nula. É exatamente nesta temperatura que a contribuição entrópica torna-se maior que a energia de formação. Um fato que acontece com o magneto, que também ocorreu no fluido, é que a função resposta, no fluido é a compressibilidade isotérmica e aqui a susceptibilidade magnética isotérmica, $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$, apresenta uma divergência na temperatura crítica, esse comportamento é causado pelas fortes correlações existentes no sistema em T_c . Para temperaturas maiores que a crítica, a magnetização espontânea continua zero.

A primeira teoria a obter um razoável sucesso na descrição dessas fases foi construída por Pierre Weiss, (WEISS, 1907), de maneira fenomenológica. Até o momento a fase paramagnética tinha sido explicada por Brillouin, mas a fase ferromagnética permanecia sem um modelo teórico. Brillouin obteve a seguinte equação de estado para a fase paramagnética de um sistema com spin $1/2$,

$$m = \tanh(\beta H),$$

onde H é o campo externo. Esta equação é análoga a lei de Boyle para um gás perfeito. Para $H = 0$, a magnetização se anula para temperaturas diferente de zero, caracterizando uma fase paramagnética, como esperado. Afim de produzir o comportamento da fase ferromagnética, Weiss introduz o conceito de campo efetivo (ou campo médio) assumindo que $H \rightarrow H_{ef} = H + \lambda m$, onde λ representa o fato de existir alguma interação magnética

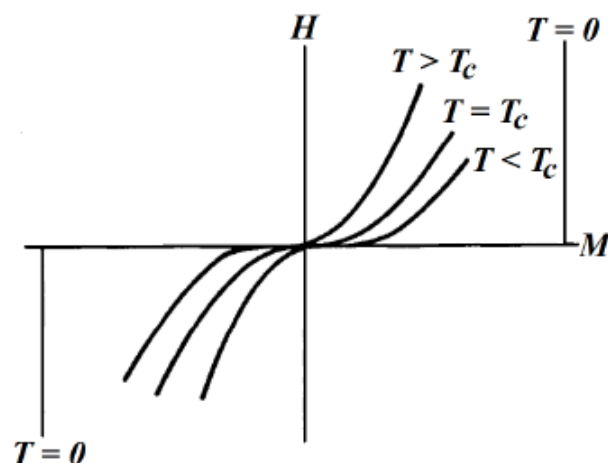


Figura 3 – Isotermas em torno de T_c para um magneto simples. Retirada de (STANLEY, 1987).

interna ao sistema. A equação de estado para um magneto simples é portanto

$$m = \tanh(\beta H + \beta \lambda m),$$

que é conhecida como equação de Curie-Weiss. Um fato curioso sobre esta equação é que os expoentes críticos α , β e γ previstos por ela são idênticos ao de um fluido descrito pela equação de Van der Waals. Essa coincidência (até então) colaborava com as ideias de universalidade na região crítica, mas, como já mencionado, outros resultados restringiram esse fato à classes.

1.1.3 Modelos Magnéticos

A elaboração de modelos que tem como objetivo descrever algum fenômeno físico é bastante comum em Mecânica Estatística. Como a teoria é construída em termos da energia do sistema, a partir desta quantidade é possível (em princípio) obter toda termodinâmica. Modela-se tal quantidade baseado em experimentos ou ideias acerca do sistema que estamos interessados.

Quando se pensa em um material que apresenta propriedades magnéticas, de início seria razoável explicar essas propriedades em termos dos dipolos magnéticos dos átomos (ou moléculas), mas como foi constatado, a interação dipolo-dipolo não seria capaz de produzir um estado com magnetização espontânea mesmo para temperaturas pouco acima do zero Kelvin. Assim, uma nova interação seria a responsável por tal ordenamento. Werner Heisenberg propôs ((SALINAS, 1997)) que esta nova interação fosse de natureza quântica: uma interação de troca. Ao considerarmos dois elétrons interagindo coulombianamente, a superposição de suas funções de onda faz com que exista uma diferença na energia do estado singlete (onde o sistema elétron-elétron tem spin total nulo) e tripleto (onde o

sistema tem spin total igual a 1). Quando os elétrons estão no estado singleto, do ponto de vista do princípio da exclusão de Pauli eles podem se aproximar mais um do outro, pois apesar de estarem convergindo para o mesmo auto-estado de posição (claro, devido a interação coulombiana eles nunca se tocam) estão em estados contrários de spin, não violando o princípio. Para o estado tripleto a situação é oposta, devido a eles estarem no mesmo estado de spin o princípio se torna mais “forte” em uma distância maior. Abaixo segue uma figura, 4, da probabilidade de encontrar os dois elétrons em função da distância entre eles $|\vec{r} - \vec{r}'|$.

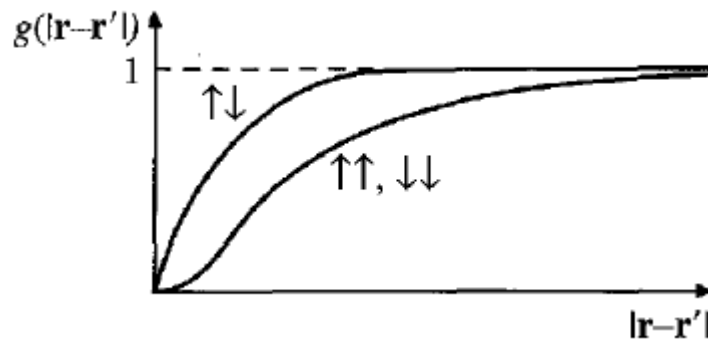


Figura 4 – Probabilidade de encontrar dois elétrons em função da distância entre eles. Retirada de (ANNETT, 2004).

Como a energia eletrostática depende da distância entre os elétrons, a configuração singleto tem uma energia diferente (maior) da configuração tripleto. Assume-se que a energia quando os elétrons estão orientados em uma mesma direção (tripleto) é $-J$ e $+J$ caso os elétrons estejam desorientados ($J > 0$), de forma que a diferença de energia entre os dois estados $2J$, com J medindo a intensidade da interação de troca. Apesar da dificuldade em obter valores para J essa quantidade não é uma variável fenomenológica, podendo ser obtida de primeiros vizinhos a partir da integral de troca, (SALINAS, 1997). Assim, diz-se que a energia devido a interação de troca entre duas moléculas com spins $\vec{s}_{1,2}$ é $E = -J\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$. Podemos generalizar essa ideia para um cristal de moléculas com spin arbitrário, de forma que a energia (operador hamiltoniano agora) seja escrita da forma

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - g\mu_B \sum_i \vec{B} \cdot \vec{s}_i,$$

onde o segundo termo foi introduzido para levar em consideração uma possível interação com um campo magnético externo. A soma na expressão acima é feita sobre todas as moléculas do cristal, mas só considera termos em que i e j sejam primeiros vizinhos devido a interação de troca ser de curto alcance. Para o caso de um estado fundamental ferromagneto consideraremos $J > 0$ e o caso antiferromagneto, onde uma configuração desemparelhada dos spins é energeticamente favorecida, será $J < 0$. A solução deste modelo na forma que se encontra é bastante complexa, havendo solução apenas para

o caso unidimensional, então se faz necessário fazer algumas simplificações. Uma das simplificações é o chamado modelo de Ising. Este modelo foi dado em 1920 por Wilhelm Lenz a seu estudante de doutorado Ernst Ising, que conseguiu resolver exatamente para uma cadeia em uma dimensão, mas o resultado não apresentou um estado ordenado em temperaturas diferente de zero (sabe-se hoje que modelos clássicos em uma dimensão não apresentam transições de fase), ([ISING, 1925](#)). O modelo consiste em tomar a orientação magnética apenas na direção z e o campo magnético externo também apontando nesta direção,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^z s_j^z - h \sum_i s_i^z,$$

onde coloca-se todas as constantes do segundo termo em h . Quando tomarmos o traço do operador $e^{-\beta H}$, afim de calcular a função de partição, podemos tomar esse traço na base gerada pelo operador de spin total, $\vec{S}^z = \vec{s}_1^z + \vec{s}_2^z + \dots + \vec{s}_N^z$, pois dada a expressão de H , nesta base ele é diagonal. Assim, nesta base o operador $e^{-\beta H}$ é diagonal com auto-energias

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i,$$

onde cada σ_i pode assumir os valores ± 1 (o fator $\hbar/2$ podemos englobar nas constantes J e h) para o caso de moléculas com spin $1/2$. A expressão acima foi a que Ising trabalhou em seu doutorado.

Apesar da constatação de Ising que o modelo não representava a realidade física de um cristal ferromagneto em uma dimensão, em 1944 Lars Onsager ([ONSAGER, 1944](#)) conseguiu com um grande esforço matemático resolver esse modelo, à campo nulo, para uma rede quadrada e mostrou que a solução apresentava um estado ordenado para temperaturas diferente de zero e que a transição para a fase paramagnética era de segunda ordem na temperatura $T_c = 2.2691\dots$ A solução de Onsager representou um grande triunfo na análise dos fenômenos críticos, pois foi a primeira vez que um modelo estatístico microscópico conseguiu reproduzir as divergências observadas no ponto crítico através de um cálculo exato. A solução exata para a rede cúbica fica sendo um mistério até os dias atuais, os únicos resultados conhecidos são obtidos por meio de métodos aproximativos.

No modelo de Ising é fácil perceber que as quantidades termodinâmicas obtidas se tornam invariantes pela inversão de todos os spins. Esta invariância é proveniente da simetria de inversão dos spins apresentada pelo termo de troca. Com o objetivo de quebrar essa simetria, surge o modelo de Baxter-Wu, ([WOOD; GRIFFITHS, 1972](#)), definido pela energia

$$E = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k.$$

O modelo leva esse nome em homenagem a R.J. Baxter e F.Y. Wu que conseguiram resolvê-lo exatamente em 1974, ([BAXTER, 2016](#)), ([WU et al., 2009](#)). O modelo definido

pela energia acima pertence a mesma classe de universalidade do modelo de Potts 4-estados (POTTS, 1952), assim, apesar deles serem distintos do ponto de vista da dinâmica microscópica, conduzem aos mesmos expoentes críticos. Medidas desses expoentes para sistemas reais podem ser encontradas em (ROELOFS et al., 1981), (PIERCY; PFNÜR, 1987) e (SCHWENGER et al., 1994), junto com uma comparação com os resultados teóricos. O modelo é definido na rede triangular com cada vértice dos triângulos representando um sítio da rede. Um fato curioso é que a temperatura crítica obtida foi a mesma obtida por Onsager para o modelo de Ising na rede quadrada.

Apesar da expressão da energia do modelo dar a entender que i , j e k são quaisquer primeiros vizinhos, isto não é verdade. O modelo é definido para i , j e k primeiros vizinhos e vértices de um triângulo da rede, figura 5. Notamos ainda que o estado fundamental desse modelo possui 4 configurações diferentes: uma com todos os spins $+1$, e outras três configurações com dois spins -1 e o spin restante $+1$. O primeiro arranjo representa a fase ferromagnética e os outros três a fase “ferrimagnética” (não se trata exatamente da fase ferrimagnética pois os momentos de dipolo magnético possuem o mesmo valor. Mas na literatura de Transições de Fases e Fenômenos Críticos é comum essa nomenclatura quando temos uma configuração de spins desta forma). Aqui nesta dissertação nos preocuparemos apenas com a fase ferromagnética, mas salientamos que o tratamento para as outras três fases pode ser feito de uma maneira muito similar a feita aqui.

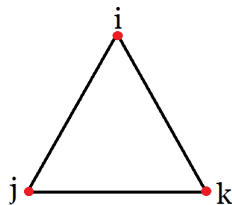


Figura 5 – Triângulo arbitrário da rede.

O objetivo desta dissertação é o estudo do modelo de Baxter-Wu para uma, duas e três dimensões. Em uma dimensão o problema será abordado por meio de um cálculo exato. Nas outras dimensões far-se-á uso de uma teoria de campo médio (TCM) baseada na desigualdade de Bogoliubov. Como foi dito, a solução do modelo em duas dimensões é conhecida, e em uma dimensão resultados mais gerais garantem que modelos “clássicos” (quando se trabalha com as auto-energias) não apresentam transição de fases, assim, o resultado novo que este trabalho traz é a solução do modelo de B-W na rede tridimensional por meio da TCM.

2 Modelo de Baxter-Wu em uma dimensão

A descrição do modelo em duas e três dimensões será feita no quarto capítulo desta dissertação por meio de uma Teoria de Campo Médio. Uma das aproximações feitas será considerar o hamiltoniano de uma tira de triângulos, que pode ser vista como uma rede unidimensional, figura 6. Assim, neste capítulo nos preocuparemos em estudar essa rede. O modelo em uma dimensão é definido pelo hamiltoniano (na ausência de campo externo):

$$H = -J \sum_{i=1}^{2L} \sigma_i \sigma_{i+1} \sigma_{i+2}, \quad (2.1)$$

onde $2L = N$ é o número de sítios da rede, J representa a intensidade da interação de troca, $\sigma_i = \pm 1$ e utilizaremos condições periódicas de contorno,

$$\begin{cases} \sigma_{2L+1} \equiv \sigma_1 \\ \sigma_{2L+2} \equiv \sigma_2. \end{cases}$$

A fim de visualizar melhor a técnica da matriz de transferência, as interações na cadeia

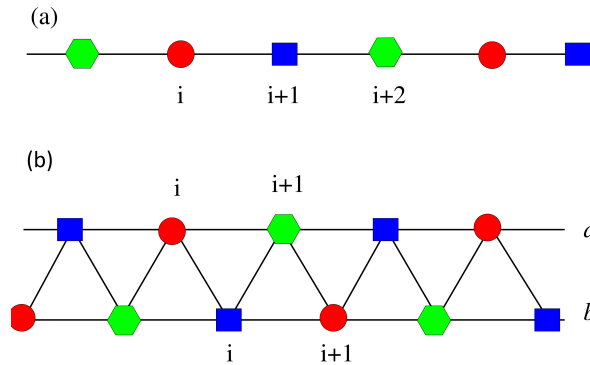


Figura 6 – Cadeia unidimensional (a). Representação da cadeia unidimensional como uma tira (b).

unidimensional serão vistas como interações em uma tira com $(2L - 2) \approx 2L$ triângulos. Os L sítios superiores da tira serão indexados pela letra a , enquanto os L inferiores pela letra b (figura 6-b), de forma que o hamiltoniano (2.1) fica escrito da seguinte forma:

$$H = -J \sum_{i=1}^L \left\{ \sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \sigma_i^b + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b \sigma_i^a \right\}. \quad (2.2)$$

Para calcularmos todas as quantidades termodinâmicas associadas ao sistema precisaremos da função de partição do mesmo, que no ensemble canônico é dada por

$$Z = \sum_{\text{estados}} e^{-\beta H},$$

onde neste caso

$$\sum_{\text{estados}} \equiv \sum_{\sigma_1^a} \sum_{\sigma_1^b} \dots \sum_{\sigma_L^a} \sum_{\sigma_L^b}.$$

Substituindo o hamiltoniano na expressão acima e tomando convenientes definições, a função de partição para o sistema fica

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\text{estados}} e^{K \sum_{i=1}^L [\sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \sigma_i^b + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b \sigma_{i+1}^a]} \\ &\equiv \sum_{\text{estados}} \prod_{i=1}^L T_{\sigma_i^a \sigma_i^b; \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b} \end{aligned} \quad (2.3)$$

com $K = J\beta$ e o elemento da matriz de transferência

$$T_{\sigma_i^a \sigma_i^b; \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b} = e^{K(\sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \sigma_i^b + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b \sigma_{i+1}^a)}. \quad (2.4)$$

Aqui, como cada sítio pode assumir dois valores para a projeção de spin, $\sigma_i = \pm 1$, o produto $\sigma_i^a \sigma_i^b$ assume quatro configurações possíveis. Sendo assim, construiremos uma matriz 4×4 que contempla todos esses estados,

$$T = \begin{pmatrix} T_{++,++} & T_{++,+-} & T_{++, -+} & T_{++, --} \\ T_{+-,++} & T_{+-,+-} & T_{+-, -+} & T_{+-, --} \\ T_{-+,++} & T_{-+,+-} & T_{-+, -+} & T_{-+, --} \\ T_{--,++} & T_{--,+-} & T_{--, -+} & T_{--, --} \end{pmatrix}.$$

Efetuando o cálculo dos elementos usando a equação (2.4) temos a seguinte matriz de transferência

$$T = \begin{pmatrix} e^{2K} & 1 & e^{-2K} & 1 \\ e^{-2K} & 1 & e^{2K} & 1 \\ 1 & e^{-2K} & 1 & e^{2K} \\ 1 & e^{2K} & 1 & e^{-2K} \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

De imediato, percebe-se que a matriz supracitada não é hermitiana, isto é uma característica de modelos tipo B-W, pois modelos tipo Ising (com interações entre dois spins) possuem uma matriz de transferência hermitiana. Antes de prosseguir com a discussão sobre a simetria da matriz T, veremos, explicitamente, a utilidade em definir tal matriz. A função de partição em termos dos elementos de T fica

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\text{estados}} \prod_{i=1}^L T_{\sigma_i^a \sigma_i^b; \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b} \\ &= \sum_{\sigma_1^a} \sum_{\sigma_1^b} \dots \sum_{\sigma_L^a} \sum_{\sigma_L^b} T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_3^a \sigma_3^b} \dots T_{\sigma_{L-1}^a \sigma_{L-1}^b; \sigma_L^a \sigma_L^b} T_{\sigma_L^a \sigma_L^b; \sigma_{L+1}^a \sigma_{L+1}^b} \\ &= \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b} \sum_{\sigma_2^a \sigma_2^b} \dots \sum_{\sigma_L^a \sigma_L^b} T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_3^a \sigma_3^b} \dots T_{\sigma_{L-1}^a \sigma_{L-1}^b; \sigma_L^a \sigma_L^b} T_{\sigma_L^a \sigma_L^b; \sigma_1^a \sigma_1^b}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Agora, lembrando da expressão para o traço da potência de uma matriz quadrada qualquer A ,

$$\begin{aligned}
Tr[A^L] &= \sum_i [A^L]_{i,i} \\
&= \sum_i \sum_j A_{i,j} [A^{L-1}]_{j,i} \\
&= \dots \\
&= \sum_{i,j,\dots} A_{i,j} A_{j,k} A_{k,l} \dots A_{m,n} A_{n,i},
\end{aligned} \tag{2.7}$$

comparando com a equação (2.6) e interpretando mais uma vez o produto $\sigma_i^a \sigma_i^b$ como um índice matricial que assume 4 “valores”, a função de partição fica escrita da forma simples

$$\begin{aligned}
Z &= Tr[T^L], \\
&= \sum_{i=1}^4 \lambda_i^L,
\end{aligned} \tag{2.8}$$

sendo λ os auto-valores de T . A equação (2.8) revela toda utilidade em definir a matriz de transferência, pois agora para determinar toda a termodinâmica do sistema, informação esta contida na função de partição, precisaremos diagonalizar a matriz T .

A fim de obter expressões fechadas para as quantidades termodinâmicas, fizemos um esforço para diagonalizar analiticamente a matriz (2.5). Bons trabalhos que já se depararam com esse problema foram consultados, em particular a referência (PAES, 1994), mas todos estavam tratando de modelos tipo Ising e, portanto, de uma matriz T hermitiana. Ainda assim, baseados no trabalho acima citado, nós desenvolvemos uma matriz U que diagonaliza parcialmente a matriz T . No apêndice **A** tratamos de todos os detalhes da construção dessa matriz e mostramos que uma classe de matrizes com certa simetria podem ser parcialmente diagonalizadas com essa matriz. A matriz é a seguinte

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \tag{2.9}$$

onde temos $UU^\dagger = 1$ e $U^2 = 1$. A matriz acima diagonalizando parcialmente T nos diz que

$$U^{-1}TU = \begin{pmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lambda_4 \end{pmatrix},$$

sendo $\lambda_4 = 2(1 + \cosh(2K))$ o quarto auto-valor de T e $\mathbf{M}$ uma matriz 3×3 de fácil manipulação,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & -2(1 - \cosh(2K)) & 0 \\ 0 & 0 & -2 \sinh(2K) \\ -2 \sinh(2K) & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Os outros três auto-valores de T são obitos pela equação característica associada a $\mathbf{M}$, fornecendo

$$\lambda_1 = 2 \left[\sinh^2(2K)(\cosh(2K) - 1) \right]^{1/3}$$

$$\lambda_2 = - \left[\sinh^2(2K)(\cosh(2K) - 1) \right]^{1/3} (1 + i\sqrt{3})$$

$$\lambda_3 = \lambda_2^*.$$

Graças ao limite termodinâmico não precisaremos de todos os auto-valores de T , pois pela equação (2.8)

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{L \rightarrow \infty} [\lambda_1^L + \lambda_2^L + \lambda_3^L + \lambda_4^L] \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \lambda_4^L \left(\frac{\lambda_1^L}{\lambda_4^L} + \frac{\lambda_2^L}{\lambda_4^L} + \frac{\lambda_3^L}{\lambda_4^L} + 1 \right) \\ &= \lambda_4^L, \end{aligned} \tag{2.10}$$

sendo λ_4 o maior auto-valor. Estando determinada a função de partição do sistema, sua energia livre também estará. Tomando a expressão de λ_4 , a energia livre por spin fica

$$f = -\frac{k_B T}{2} \ln [2(1 + \cosh(2K))]. \tag{2.11}$$

Um gráfico da quantidade adimensional f/J está feito na figura 7. Uma análise da energia livre pode revelar se o sistema apresenta transição de fases. Para uma transição de primeira ordem temos uma descontinuidade na entropia (um calor latente associado) assim, a primeira derivada de F seria descontínua. No caso de um fenômeno crítico (transição de fase de segunda ordem), temos uma divergência nas funções respostas como calor específico e suscetibilidade magnética. Portanto, em tais transições é a segunda derivada de F que apresentará um comportamento singular. Olhando apenas para o gráfico da energia livre é possível identificar o comportamento da primeira derivada mas não da segunda. Analisando a energia livre do nosso sistema vemos que sua primeira derivada é sempre contínua, levando-nos a conclusão de que este sistema não apresenta uma transição de fases de primeira ordem. Para saber se possui uma transição de segunda ordem e exibe comportamento crítico, é necessário calcular o calor específico.

A partir das equações de estado para a energia livre podemos obter uma expressão para a entropia sem dimensão,

$$s/k_B = -\frac{\partial(f/J)}{\partial(k_B T/J)},$$

que com a substituição da energia livre torna-se

$$s/k_B = \frac{1}{2} [\ln(2) + \ln(1 + \cosh(2K))] - K \frac{\sinh(2K)}{1 + \cosh(2K)}. \tag{2.12}$$

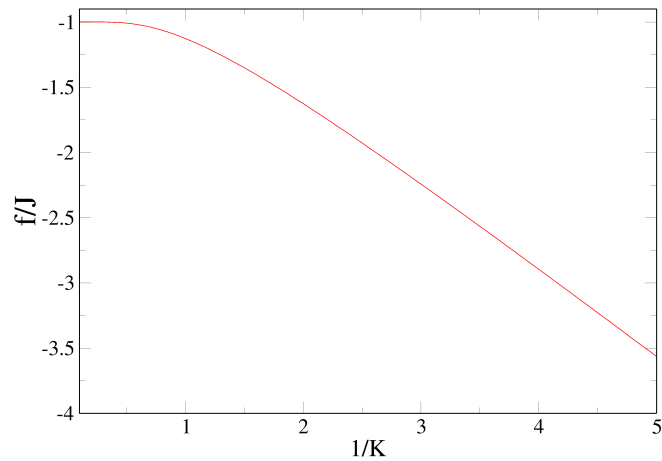


Figura 7 – Energia livre por spin.

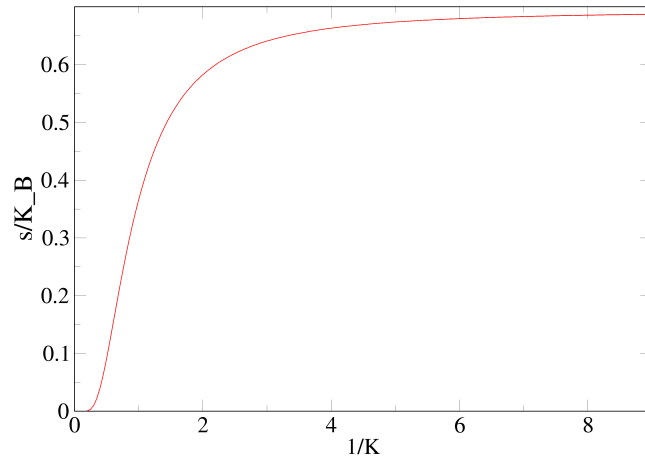


Figura 8 – Entropia por spin.

Como indicado na figura 8, temos um resultado para a entropia coerente com a física do problema. Em temperaturas baixas a entropia vai em direção ao zero Kelvin, como enunciado pela terceira lei da termodinâmica. Na região de altas temperaturas a entropia vai para uma constante igual a $\ln(2)$. Este resultado está de acordo com o postulado fundamental da Mecânica Estatística de Equilíbrio, que afirma que para um sistema físico isolado, com energia fixa, todos os microestados são igualmente prováveis. No limite de temperatura infinita não há mais diferença entre os níveis de energia do sistema (definição matemática de infinito), dessa forma atingimos efetivamente um limite de energia fixa. Como cada constituinte da rede possui dois estados acessíveis, $\sigma_i = \pm 1$, pela formula de Boltzmann (é justificável o uso dessa equação pois a energia fixa nos

permite migrar do ensemble canônico para o microcanônico)

$$\begin{aligned} s/k_B &= \ln(w), \\ &= \ln(2). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Pela equação (2.12) podemos calcular uma expressão para o calor específico do sistema,

$$\begin{aligned} c/k_B &= T \frac{\partial(s/k_B)}{\partial T} \\ &= \frac{2K^2}{1 + \cosh(2K)}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

como indicado na figura 9. O calor específico obtido é tipo Schottky, característico de sistemas com níveis discretos e finitos de energia. Finalmente, olhando para o comportamento de c/k_B percebemos que essa função resposta não tem nenhuma divergência, portanto, o nosso modelo em uma dimensão não possui uma transição de fases (não trivial) e o ordenamento magnético se dá apenas em $T = 0$.

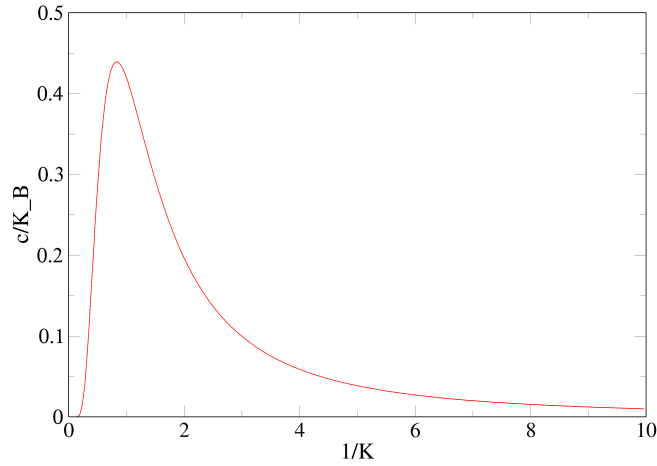


Figura 9 – Calor específico para o modelo de Baxter-Wu em uma dimensão.

Apesar do modelo unidimensional não apresentar um estado ordenado não-trivial, a solução da matriz de transferência da tira será utilizada nos próximos capítulos, onde partiremos para o estudo do modelo de B-W em maiores dimensões via uma Teoria de Campo Médio.

3 Teoria de Campo Médio

A Mecânica Estatística (ME), como o nome sugere, é uma teoria física que tem suas bases nas leis da Mecânica (clássica ou quântica, depende da nossa escala) e usa de conceitos estatísticos para fornecer uma descrição dos sistemas termodinâmicos. Essa descrição probabilística é sustentada pelo grande número de partículas no sistema e, conseqüentemente, ao grande número de estados acessíveis. Devido a isto, a solução exata de modelos em ME não é uma tarefa simples (mesmo os unidimensionais), sendo os poucos solúveis amplamente estudados em diversas direções. Se por um lado sistemas interagentes geram um grande empecilho do ponto de vista técnico, muita das vezes são essas correlações responsáveis pelas transições de fases (o gás ideal de bósons é uma interessante exceção). As Teorias de Campo Médio (TCM) surgem como uma abordagem aproximativa para tirarmos conclusões, na maioria das vezes somente do ponto de vista qualitativo, sobre tais sistemas. Devido a simplicidade nas formulações das TCM elas são sempre usadas como primeira tentativa na análise de diversos modelos. É verdade que não podemos confiar cegamente em resultados provenientes de tais métodos, mas também é verdade que a aplicação das TCM nos proporciona o estudo de situações físicas relevantes. Um exemplo é a equação de estado para um ferromagneto proposta por Weiss, essa equação é obtida por uma TCM.

Em uma abordagem de TCM para um dado modelo, em vez de considerarmos todas as interações entre os constituintes, levamos em conta um efeito médio destas interações. A informação perdida (a princípio) ao ignorar as interações entre as partículas iniciais é parcialmente contornada quando as propriedades das partículas como, por exemplo, sua massa, sofrem uma modificação. Essa técnica é muito utilizada para transformar sistemas de partículas interagentes em um novo sistema de partículas livres, com o preço de modificar propriedades das partículas originais (o método de Hartree-Fock ([BRUUS; FLENSBERG, 2004](#)) exemplifica bem isso). Para problemas definidos em redes, como o abordado nesta dissertação, uma maneira de aplicar uma TCM é considerar somente as interações em blocos do sistema, e o efeito do restante das interações entra como um termo médio. É esperado que no limite $d \rightarrow \infty$, sendo d o comprimento do bloco, cheguemos no resultado exato.

Como já mencionado, as correlações entre as partículas se mostram mais importante no ponto crítico, onde aparecem divergências na compressibilidade e susceptibilidade magnética. Assim, uma descrição que despreza parte destas correlações pode nos levar a uma descrição incompleta dos fenômenos críticos. Desta forma, as TCM tendem a falhar na região crítica.

Um fenômeno de grande interesse físico é a Supercondutividade. Nesta nova fase dos metais os elétrons de condução conseguem se mover quase que livremente, produzindo assim um efeito de resistência elétrica nula para o material. A primeira teoria para explicá-la foi desenvolvida por Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) (BARDEEN et al., 1957), que propuseram um hamiltoniano que descreveria este estado e solucionaram tal modelo por meio de uma TCM.

Na próxima seção desenvolveremos uma TCM baseada na desigualdade de Bogoliubov para as energias livres de dois blocos de spins.

3.1 Desigualdade de Bogoliubov

Devido ao grande número de interações envolvidas nas redes definidas em duas e três dimensões, vamos utilizar uma abordagem aproximativa afim de estudar as possíveis fases. Dentre vários métodos analíticos possíveis o adotado aqui será um que nos fornece a energia livre do problema baseado em uma desigualdade para a mesma.

A desigualdade de Bogoliubov (FALK, 1970) relaciona a energia livre do sistema inicial F (com todas as interações possíveis) com a do aproximado (em que separamos o sistema em blocos não interagentes) F_0 . Sendo H o hamiltoniano original e H_0 o aproximado, a desigualdade nos diz que

$$F \leq F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0. \quad (3.1)$$

A prova dessa desigualdade para o caso clássico segue abaixo.

Demonstração: Seja a função conhecida H_1 ,

$$H_1 = H - H_0.$$

A média de um observável termodinâmico A no ensemble canônico definido por H_0 é calculada da forma

$$\langle A \rangle_0 = \sum_{\text{estados}} A \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0},$$

onde Z_0 é a função de partição neste ensemble. Assim, para a função $e^{-\beta H_1}$ teremos,

$$\begin{aligned} \langle e^{-\beta H_1} \rangle_0 &= \sum_{\text{estados}} e^{-\beta H_1} \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0} \\ &= \sum_{\text{estados}} \frac{e^{-\beta(H_1+H_0)}}{Z_0} \\ &= \frac{Z}{Z_0}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

portanto,

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta H_1} \rangle_0. \quad (3.3)$$

Usando a expansão em série de Taylor para a função exponencial,

$$\begin{aligned} e^x &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \\ &= 1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots, \end{aligned} \quad (3.4)$$

concluimos que

$$e^x \geq 1 + x.$$

Pela expressão acima podemos escrever que

$$e^{-\beta H_1 + \beta \langle H_1 \rangle_0} \geq 1 - \beta H_1 + \beta \langle H_1 \rangle_0. \quad (3.5)$$

Tomando a média da equação (3.5) no ensemble definido por H_0 e usando que

$$\langle e^{\beta \langle H_1 \rangle_0} \rangle_0 = e^{\beta \langle H_1 \rangle_0},$$

chegamos em

$$e^{\beta \langle H_1 \rangle_0} \langle e^{-\beta H_1} \rangle_0 \geq 1,$$

ou ainda,

$$\langle e^{-\beta H_1} \rangle_0 \geq e^{-\beta \langle H_1 \rangle_0}.$$

Mas, dada a equação (3.3) é conclusivo que

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta \langle H_1 \rangle_0}.$$

Tomando o $\ln$ da expressão acima e multiplicando o resultado por $-k_B T$, temos

$$-k_B T \ln(Z) \leq -k_B T \ln(Z_0) + \langle H_1 \rangle_0.$$

Identificando as respectivas energias livres e usando a definição de H_1 chegamos no resultado desejado,

$$F \leq F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0. \quad (3.6)$$

3.2 Método Variacional

O método variacional baseado nesta desigualdade consiste em tomar um hamiltoniano $H_0(\eta)$, sendo η um parâmetro a ser determinado, formado por blocos do sistema inicial. A escolha do bloco deve ser feita de modo que consigamos calcular Z_0 de uma forma mais simples que Z . De posse de Z_0 construímos a função

$$\phi(\eta) \equiv F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0. \quad (3.7)$$

Tendo está função em mãos, cuja maior dificuldade reside em calcular a média, achamos um limite superior para a energia livre original. Se minimizarmos $\phi(\eta)$ acharemos uma aproximação para a energia livre considerando que

$$F = \phi(\eta_{min}). \quad (3.8)$$

A equação (3.7) nos mostra que quanto mais próximo H_0 estiver de H , mais o método será eficiente. No próximo capítulo faremos algumas escolhas para esse hamiltoniano tentativa. A primeira será a mais trivial possível ($J = 0$),

$$H_0 = -\eta \sum_i \sigma_i.$$

O segundo hamiltoniano tentativa será uma soma sobre triângulos desconexos (td) na rede,

$$H_0 = \sum_{td} H_{td},$$

onde

$$H_{td} = -J(\sigma_1\sigma_2\sigma_3) - \eta(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3).$$

A última aproximação considerada será uma soma sobre tiras desconexas,

$$H_0 = \sum_{tiras} H_{tira},$$

sendo H_{tira} o mesmo hamiltoniano que define o modelo unidimensional. Na próxima seção faremos uma simples aplicação do método ao modelo de Ising.

3.3 Aplicação no Modelo de Ising

Como mencionado no capítulo de introdução, o modelo de Ising é um caso particular do modelo de Heisenberg quando os spins vizinhos interagem apenas em uma direção e o campo magnético aponta nesta mesma direção. Este modelo é definido pelo hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i. \quad (3.9)$$

O modelo só possui solução exata conhecida em uma e duas dimensões, em três dimensões a temperatura crítica é obtida por meio de aproximações. Como veremos abaixo, a introdução da dimensão quando se está abordando o problema por meio de uma TCM é simples, uma grande vantagem do método.

Seja o hamiltoniano de blocos de um spin (essa sem dúvida é a aproximação mais grosseira que poderíamos escolher, mas como veremos, ela produz resultados qualitativos interessantes),

$$H_0 = -\eta \sum_i \sigma_i,$$

sendo η um parâmetro de campo médio a ser determinado. O problema definido pelo hamiltoniano acima é de fácil solução, tendo sua função de partição dada por

$$Z_0 = (2 \cosh(\beta\eta))^N, \quad (3.10)$$

e a energia livre

$$F_0 = -k_B T N \ln(2 \cosh(\beta\eta)). \quad (3.11)$$

A magnetização (sem dimensão e por spin) na direção da interação magnética é definida por,

$$\begin{aligned}
m_0 &= \frac{\langle \sum_i \sigma_i \rangle_0}{N}, \\
&= \frac{\sum_{\text{estados}} (\sum_i \sigma_i) e^{\beta \eta \sum_i \sigma_i}}{N Z_0}, \\
&= \frac{\frac{\partial}{\partial \eta} \sum_{\text{estados}} e^{-\beta H_0}}{N \beta Z_0}, \\
&= \frac{\frac{\partial}{\partial \eta} \ln(Z_0)}{N \beta}, \\
&= -\frac{\partial f_0}{\partial \eta}.
\end{aligned} \tag{3.12}$$

A equação acima é uma equação de estado para um sistema magnético. Usando a expressão da energia livre por spin ($f_0 = F_0/N$) chegamos em

$$m_0 = \tanh(\beta \eta). \tag{3.13}$$

Analisando a expressão (3.13) vemos que o hamiltoniano H_0 não descreve um ferromagneto e sim um paramagneto, como era de se esperar visto $J = 0$. Seguindo o método descrito na seção anterior, precisaremos calcular a média $\langle H - H_0 \rangle_0$ para determinar a função $\phi(\eta)$. Essa média é escrita como

$$\begin{aligned}
\langle H - H_0 \rangle_0 &= -J \left\langle \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right\rangle_0 - (h - \eta) \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle_0, \\
&= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 - N(h - \eta)m_0.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

A média entre os spins vizinhos na equação acima é tomada no ensemble definido por H_0 , mas, nesse hamiltoniano não temos o termo de interação entre os spins ($J = 0$), portanto

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 &= \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0, \\
&= m_0^2.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Para chegar ao resultado (3.15) consideramos que o valor médio do spin i é igual ao valor médio do spin j , dado que não existe spin privilegiado na rede. Precisaremos agora contar quantos pares $\langle i, j \rangle$ existem em toda rede. Para uma rede unidimensional é fácil ver que existem $(N - 1) \approx N$ pares. Em duas dimensões para uma rede $L \times L$, sendo $L^2 = N$, existem pares tanto na vertical quanto na horizontal; usando o resultado da rede unidimensional concluímos que há $2N$ pares. Para uma rede cúbica tridimensional $L \times L \times L$, com agora $L^3 = N$, da mesma forma concluímos que existem $3N$ pares. Esses resultados podem ser escritos da forma geral

$$\frac{Nc}{2}$$

sendo c o número de primeiros vizinhos de cada sítio: em uma dimensão $c = 2$, duas dimensões $c = 4$ e em três dimensões $c = 6$. Assim, a média $\langle H - H_0 \rangle_0$ está determinada. A função $\phi(\eta)$ por sua vez torna-se,

$$\frac{\phi(\eta)}{N} = f_0 - Jcm_0^2/2 - (h - \eta)m_0. \quad (3.16)$$

Prosseguindo com o método precisaremos minimizar a expressão acima com respeito a η . Fazendo o cálculo simples da derivada (note que $m_0 = m_0(\eta)$) obteremos que esta função tem seu valor mínimo quando

$$\eta_{min} = Jcm_0 + h. \quad (3.17)$$

Desta forma, a energia livre por spin aproximada para o sistema definido por H é,

$$\begin{aligned} f &= \phi(\eta_{min}), \\ &= -k_B T \ln [2 \cosh(\beta Jcm_0(\eta_{min}) + \beta h)] + \frac{Jcm_0^2(\eta_{min})}{2}, \\ &= -k_B T \ln [2 \cosh(\beta Jcm + \beta h)] + \frac{Jcm^2}{2}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde utilizamos que $m_0(\eta_{min}) \equiv m$. Dada a expressão acima, toda a termodinâmica do sistema está determinada. A magnetização do sistema pode ser obtida diretamente da substituição de η_{min} na equação (3.13) ou pela própria equação de estado

$$\begin{aligned} m &= -\frac{\partial f}{\partial h}, \\ &= \tanh(\beta Jcm + \beta h). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Esta é exatamente a equação obtida por Weiss com sua hipótese de campo efetivo. A equação (3.19) é uma equação transcendental para m e só poderá ser resolvida numericamente. Antes podemos analisá-la próximo à região crítica, onde a magnetização vai continuamente a zero. Usando a expansão da $\tanh(x)$ para x pequeno, a expressão acima torna-se

$$m = (\beta Jcm + \beta h) - \frac{(\beta Jcm + \beta h)^3}{3}.$$

Na ausência de um campo externo esta equação é de fácil solução, fornecendo

$$m = \left[\frac{3(\beta Jc - 1)}{(\beta Jc)^3} \right]^{1/2}. \quad (3.20)$$

A expressão acima fornece o expoente crítico $\beta = 1/2$, pois (3.19) é igual a equação proposta por Weiss de maneira fenomenológica. Como (3.20) é válida apenas próximo à T_c , se impormos $m = 0$ segue uma expressão para a temperatura de transição

$$\frac{k_B T_c}{J} = c. \quad (3.21)$$

A (3.21) nos fornece a temperatura crítica para qualquer dimensão espacial. Apesar de conseguirmos reproduzir o comportamento crítico do sistema qualitativamente bem, a

abordagem claramente falhou em uma dimensão, pois apresentou uma temperatura de transição diferente de zero. Por outro lado, a equação para T_c diz que seu valor aumenta com o aumento da dimensão espacial, o que é razoável, uma vez que quanto maior a dimensão, maior é o número de interações e, conseqüentemente, maior será a energia térmica para destruir o ordenamento dos spins.

Na figura 10 tem-se o gráfico da energia livre para duas temperaturas, uma maior que T_c e outra menor. Para a temperatura menor que a crítica há dois pontos simétricos em que a energia livre é mínima, esses pontos correspondem a $|m| = 1$. Essa simetria é devido a invariância do modelo sobre inversão dos spins. Para a temperatura maior que a crítica, só existe um mínimo, $m = 0$, correspondendo a fase paramagnética. Na figura 11 segue a solução para qualquer temperatura da equação para a magnetização.

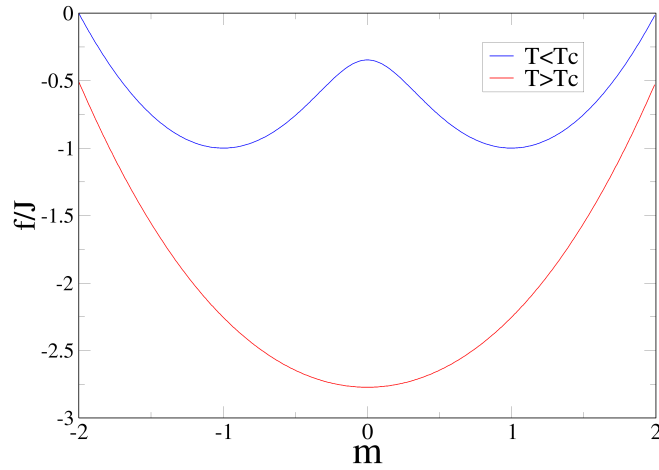


Figura 10 – Energia livre do modelo de Ising via aproximação bloco de um spin em uma dimensão.

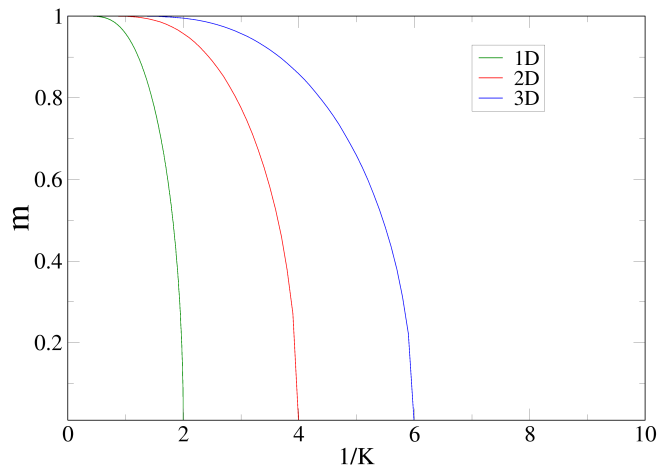


Figura 11 – Magnetização para o modelo de Ising via aproximação bloco de um spin, onde $K = \beta J$.

4 Modelo de Baxter-Wu em duas e três dimensões

Inicialmente o modelo de Baxter-Wu foi proposto para a rede triangular bidimensional (figura 12) e teve sua solução exata obtida em 1973 por Baxter e Wu, (WU et al., 2009) e (BAXTER, 2016), encontrando uma transição contínua na mesma temperatura que o modelo de Ising na rede quadrada. Apesar de conhecido todo o comportamento do modelo nesta dimensão, neste capítulo abordaremos o problema pelo método variacional descrito no capítulo anterior, pois mais à frente generalizaremos o modelo para o caso tridimensional e, como veremos, as equações são bastante similares devido ao fato de estarmos trabalhando com um teoria de campo médio. Aqui estaremos preocupados em descrever a fase ferromagnética, assim, não precisaremos nos preocupar com as outras três fases "ferrimagnéticas". O hamiltoniano do modelo é

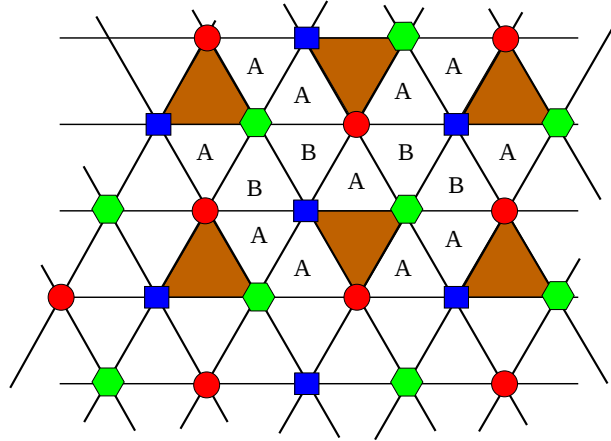


Figura 12 – Rede triangular bidimensional. Os triângulos em marrom estão desconexos, isto é, os seus três vértices só pertencem a eles próprios. Destacamos dois tipos de triângulos: A e B. Os triângulos tipo A possuem dois dos seus vértices no mesmo triângulo desconexo e os do tipo B possuem cada vértice em um triângulo desconexo distinto.

$$H = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - h \sum_i \sigma_i,$$

onde i, j e k são sempre vértices de um triângulo da rede.

4.1 H_0 como uma soma de spins livres

A aproximação mais simples que podemos tentar afim de reproduzir o caráter crítico do modelo é a mesma que foi usada para o modelo de Ising no capítulo anterior,

$$H_0 = -\eta \sum_i \sigma_i.$$

As quantidades termodinâmicas para tal hamiltoniano estão determinadas, portanto, nossa preocupação será o cálculo da média $\langle H - H_0 \rangle_0$. Novamente, devido ao fato de H_0 não possuir um termo de interação entre os spins, temos que

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle_0 &= \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 \langle \sigma_k \rangle_0, \\ &= m_0^3. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Desta forma vamos ter que a função $\phi(\eta)$ torna-se

$$\begin{aligned} \phi(\eta) &= F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0, \\ &= F_0 - J \left\langle \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \right\rangle_0 - (h - \eta) \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle_0, \\ &= F_0 - J [\langle \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \rangle_0 + \langle \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4 \rangle_0 + \dots] - (h - \eta) N m_0, \\ &= F_0 - J q(N) m_0^3 - (h - \eta) N m_0, \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde a função $q(N)$ representa o número de triângulos em toda a rede cristalina, F_0 e m_0 são dados pelas equações (3.11) e (3.13) respectivamente. Para uma rede $L \times L = N$, a contagem se dá da seguinte forma: o número de triângulos em uma tira é duas vezes o número de paralelogramos, que facilmente é visto ser igual a $L - 1$. Assim, no limite termodinâmico, encontramos que existem $2L$ triângulos em uma tira. O número de tiras em uma rede desse tipo é $L - 1$. Portanto, achamos que o número de triângulos em uma rede com N sítios é igual a $2N$. A função de interesse assume a forma

$$\frac{\phi(\eta)}{N} = f_0 - 2Jm_0^3 - (h - \eta)m_0. \quad (4.3)$$

A minimização da equação acima é feita sem dificuldades, nos levando ao resultado

$$\eta_{min} = 6Jm_0^2 + h.$$

Dessa maneira, a energia livre aproximada torna-se

$$\begin{aligned} f &= \phi(\eta_{min}), \\ &= -k_B T \ln [2 \cosh(6\beta J m^2 + \beta h)] + 4Jm^3. \end{aligned} \quad (4.4)$$

A magnetização pode ser obtida diretamente da equação de estado (3.12) e, na ausência de campo externo, torna-se

$$m = \tanh(6\beta J m^2). \quad (4.5)$$

Mais uma vez nos deparamos com uma equação transcendental para $m(T)$ (daqui para frente não teremos sorte, será sempre assim), só que desta vez a equação é mais peculiar. Antes de resolvê-la vamos fazer uma análise próximo a região crítica. Usando a expansão da $\tanh(x)$ quando x é pequeno, encontramos que

$$m = (6\beta J m^2) - \frac{(6\beta J)^3 m^6}{3},$$

eliminando o último termo que é praticamente nulo comparado com o primeiro, obtemos

$$m = \frac{k_B T}{6J}. \quad (4.6)$$

A equação (4.6) deveria nos dizer como a magnetização se comporta próximo à T_c , mas como podemos notar, essa função só irá se anular para o caso trivial $T_c = 0$. Desta forma, já podemos concluir que a nossa primeira aproximação não reproduz o resultado esperado, ou seja, uma transição de segunda ordem. Agora iremos resolver a equação transcendental para $m(T)$. Como foi dito, essa equação possui uma diferença da equação obtida para o modelo de Ising: o argumento da $\tanh$ possui um termo quadrático da magnetização e não linear. Esta mudança produzirá efeitos diferentes na solução. Para vermos a sutileza plotamos as duas funções envolvidas na equação (4.5) quando $k_B T/J = 0.5$.

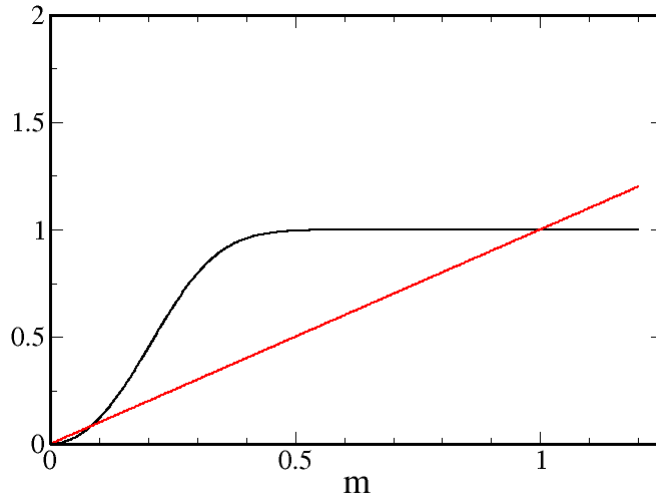


Figura 13 – Soluções da equação transcendental (4.5) quando $\frac{k_B T}{J} = 0.5$.

Como está indicado na figura 13, para essa temperatura existem três soluções possíveis para m : $m = 0$, $m = 0.084$ e $m = 1$. Qual é a solução fisicamente aceitável? Poderíamos já dizer que é a terceira, pois estamos em um regime de baixas temperaturas, mas não temos certeza se nosso hamiltoniano tentativa é capaz de reproduzir um estado ordenado para temperaturas diferente do zero. Para descobrirmos qual é a solução, será necessário calcular o valor da energia livre para cada uma e ver qual é a que tem menor valor, essa será a solução física. A expressão (4.4) para f nos diz que

$$f(0, 0.5)/J = -0.3465,$$

$$f(0.084, 0.5)/J = -0.3459,$$

$$f(1, 0.5)/J = -2.0000.$$

Assim, vemos que a solução aceitável fisicamente é a terceira, isto é, nesta temperatura o sistema está em um estado ferromagneto, $m \neq 0$. Devido a nossa análise para m pequeno, onde concluímos que com esse hamiltoniano tentativa não é possível reproduzir o caráter crítico do modelo, podemos suspeitar que a transição de fase envolvida é de primeira ordem, já que acabamos de mostrar que a fase ferromagnética existe. Repetindo o processo descrito acima para todo o intervalo de temperatura desejável, obteremos o comportamento geral de m , figura 14. Portanto, como esperado, o sistema assume duas fases: uma ferromagnética e uma paramagnética. A transição entre as duas se dá de uma forma descontínua na temperatura

$$\frac{k_B T_t}{J} = 2.9758. \quad (4.7)$$

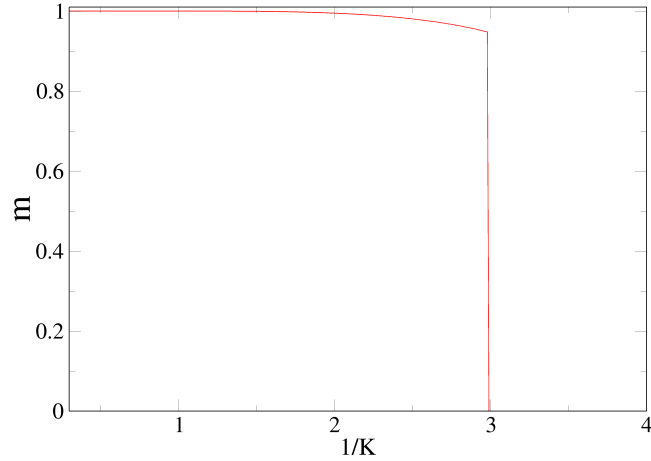


Figura 14 – Magnetização segundo o primeiro hamiltoniano tentativa, onde $K = \beta J$.

A energia livre aproximada em função da magnetização está apresentada na figura 15. Para uma temperatura menor que a de transição notamos que o gráfico não é mais simétrico como em 10, apresentando apenas um mínimo em $m = 1$. Isto ocorre devido a quebra da simetria de inversão dos spins introduzida no modelo de B-W. Para uma temperatura maior que a de transição, não existe mais o mínimo, apenas um ponto de inflexão achatado em $m = 0$, correspondendo a uma configuração estável.

Visto que com o nosso primeiro hamiltoniano tentativa não conseguimos reproduzir o resultado esperado (uma transição de fase de segunda ordem), na seção que segue aumentaremos o tamanho do bloco considerado em H_0 afim de recuperar o resultado exato.

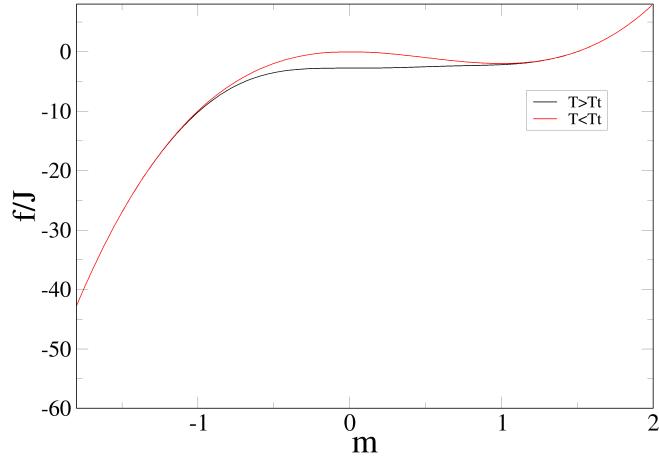


Figura 15 – Energia livre em função da magnetização para o modelo de B-W segundo a aproximação de spins livres.

4.2 H_0 como uma soma de triângulos desconexos

Visto que a aproximação mais simples não funcionou, partiremos agora para um caso onde consideraremos mais interações em H_0 . O próximo bloco mais simples a se considerar será um bloco triangular, isto é

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\text{triângulos}} H_{\text{triângulo}}, \\ &= \sum_{\text{triângulos}} [-J(\sigma_i \sigma_j \sigma_k) - \eta(\sigma_i + \sigma_j + \sigma_k)]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Sabemos da Mecânica Estatística de Equilíbrio que para um sistema não interagente a função de partição se fatora como a multiplicação das funções de partição de cada parte, para o nosso caso são triângulos independentes, portanto

$$Z_0 = z^{s(N)},$$

sendo z a função de partição de cada triângulo,

$$z = \sum_{\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k = \pm 1} e^{-\beta H_{\text{triângulo}}},$$

e $s(N)$ o número de triângulos livres (desconexos) em toda rede. Fazendo a soma sobre todos os 8 estados possíveis para cada triângulo, chegamos em

$$Z_0 = [2 \cosh(\beta J + 3\beta \eta) + 6 \cosh(-\beta J + \beta \eta)]^{s(N)}.$$

Agora precisamos fazer a contagem dos triângulos livres. Examinando a figura 12 notamos que em uma tira, a cada três sítios existem dois triângulos desconexos, um para cima e outro para baixo. Dividindo a tira em conjuntos de três sítios, concluímos que em toda

tira existem $2L/3$ triângulos livres. Além disso, as duas tiras vizinhas dessa não podem conter triângulos livres, caso contrário a definição de desconexo seria violada. Dessa forma, somente $L/2$ tiras vão possuir esse tipo de triângulo. Portanto, para toda rede vamos ter

$$\frac{L}{2} \frac{2L}{3} = \frac{N}{3}$$

triângulos desconexos. Com isso a função de partição para H_0 fica totalmente determinada, junto com a energia livre por spin,

$$f_0 = -\frac{k_B T}{3} \ln [2 \cosh(\beta J + 3\beta\eta) + 6 \cosh(-\beta J + \beta\eta)]. \quad (4.9)$$

Desta vez no cálculo da média $\langle H - H_0 \rangle_0$ surge algo que não apareceu no primeiro hamiltoniano tentativa: na subtração $H - H_0$ sobram triângulos de duas espécies, A e B , que precisam ser analisados separadamente. Como indicado na figura 12, os triângulos tipo A possuem dois dos seus vértices em um triângulo desconexo e o terceiro em outro triângulo desconexo. Já os do tipo B possuem cada um dos seus vértices em um triângulo desconexo distinto. Assim, no cálculo da média devemos ter

$$\begin{aligned} \langle H - H_0 \rangle_0 &= -J \left\langle \sum_{A,B} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \right\rangle_0 - (h - \eta) \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle_0, \\ &= -J n(A) \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 \langle \sigma_k \rangle_0 - J n(B) \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 \langle \sigma_k \rangle_0 - (h - \eta) N \langle \sigma_i \rangle_0, \\ &= -J n(A) r(\eta) m_0 - J n(B) m_0^3 - (h - \eta) N m_0, \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde $n(A)$ e $n(B)$ são os números de triângulos tipo A e B respectivamente e $r(\eta)$ é a função de correlação entre dois spins vizinhos. Do cálculo do número total de triângulos, $2N$, e do número de triângulos desconexos, $N/3$, sabemos que

$$n(A) + n(B) = \frac{5N}{3}. \quad (4.11)$$

Pela figura 12 vemos que na tira que contém triângulos desconexos só existem tipo A e nas tiras sem triângulos desconexos existem tanto tipo A quanto B . Nessas tiras sem triângulos livres podemos observar que abaixo (ou a cima, não importa) de cada triângulo desconexo (existem $2L/3$ triângulos desse tipo numa tira), em marrom, há um triângulo tipo A , e os restantes nessa tira são todos tipo B . Levando em consideração que em uma tira existem $2L$ triângulos quaisquer, se subtrairmos $2L - 2L/3$ concluiremos que nessa tira há $4L/3$ triângulos tipo B . Visto que no outro tipo de tira não existem triângulos tipo B , se multiplicarmos esse resultado por $L/2$, chegamos que

$$n(B) = \frac{2N}{3}.$$

E usando (4.11),

$$n(A) = N.$$

Dessa forma a média (4.10) está determinada. Levando em consideração a energia livre f_0 , a função $\phi(\eta)$ torna-se

$$\frac{\phi(\eta)}{N} = f_0 - \frac{2J}{3}m_0^3 - (h - \eta + Jr(\eta))m_0. \quad (4.12)$$

Agora devemos fazer o cálculo da função de correlação $r(\eta)$. Por definição de média no ensemble canônico, escrevemos

$$\begin{aligned} r(\eta) &= \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0, \\ &= \sum_{\text{estados}} \sigma_i \sigma_j \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0}, \\ &= \sum_{\text{estados}} \sigma_i \sigma_j \frac{e^{-\beta(\dots - J\sigma_i \sigma_j \sigma_k \dots)}}{Z_0}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde destacamos o único termo (pois são triângulos desconexos) em H_0 que contém o produto i, j de spins. Levando em consideração que a função de partição se fatoriza,

$$\begin{aligned} r(\eta) &= \sum_{\text{estados}} \sigma_i \sigma_j \frac{e^{-\beta(\dots - J\sigma_i \sigma_j \sigma_k \dots)}}{\prod_{\mu} z_{\mu}}, \\ &= \sum_{\text{estados}} \sigma_i \sigma_j \frac{e^{-\beta H_{i,j,k}}}{z_{i,j,k}} \frac{e^{-\beta H'}}{\prod_{\mu \neq i,j,k} z_{\mu}}, \\ &= \left(\sum_{\neq i,j,k} \frac{e^{-\beta H'}}{\prod_{\mu \neq i,j,k} z_{\mu}} \right) \left(\sum_{i,j,k} \sigma_i \sigma_j \frac{e^{-\beta H_{i,j,k}}}{z_{i,j,k}} \right), \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde H' contém uma soma sobre todos os triângulos livres exceto o triângulo com vértices i, j e k , e $z_{i,j,k}$ é a função de partição deste triângulo. O primeiro termo entre parênteses da equação (4.14) é a identidade. Assim, concluímos que

$$r(\eta) = \sum_{\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k = \pm 1} \sigma_i \sigma_j \frac{e^{-\beta(-J\sigma_i \sigma_j \sigma_k - \eta(\sigma_i + \sigma_j + \sigma_k))}}{z}. \quad (4.15)$$

Vemos que o cálculo foi muito simplificado devido a média ser tomada no ensemble definido por H_0 . O cálculo acima é de fácil procedimento, nos levando ao seguinte resultado para a função de correlação entre spins vizinhos

$$r(\eta) = \frac{2 \cosh(3\beta\eta + \beta J) - 2 \cosh(\beta\eta - \beta J)}{z}. \quad (4.16)$$

A função $\phi(\eta)$ está agora conhecida, o próximo passo será minimizá-la com relação a η . Lembrando que $\frac{\partial f_0}{\partial \eta} = m_0$, a minimização nos retorna a seguinte equação para campo externo nulo,

$$\left[-2Jm_0^2 - Jr(\eta) + \eta \right] \frac{\partial m_0}{\partial \eta} - Jm_0 \frac{\partial r}{\partial \eta} = 0. \quad (4.17)$$

A equação acima é uma equação transcendental para determinar η_{min} . Diferente dos casos que vimos até agora, a parte numérica chega uma etapa antes. A equação (4.17) é muito

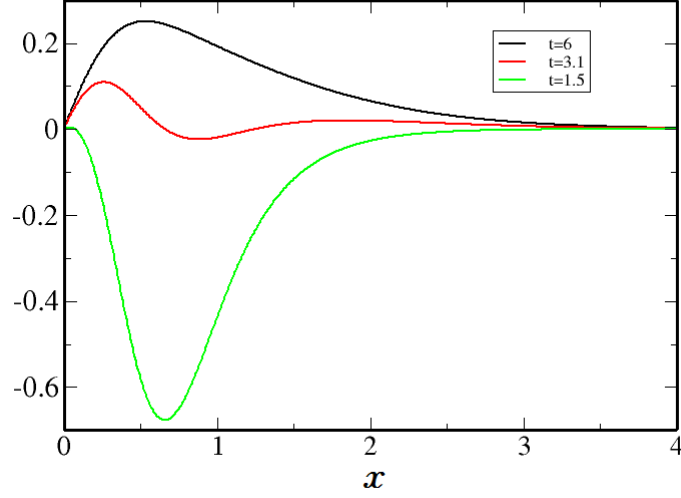


Figura 16 – Gráfico do lado esquerdo da equação transcendental (4.16). Em vermelho temos a curva para $t=3.1$, em preto para $t=6$ e em verde para $t=1.5$.

mais sutil que as outras vistas até então, pois para uma dada faixa de temperaturas pode possuir quatro soluções distintas, como esta indicado na figura 16.

Vamos analisar essa equação em termos das novas variáveis sem dimensão $x = \beta\eta$ e $t = k_B T/J$. Em termos dessas novas variáveis a equação torna-se

$$\left[-2m_0^2/t - r/t + x\right] \frac{\partial m_0}{\partial x} - m_0/t \frac{\partial r}{\partial x} = 0. \quad (4.18)$$

Como neste caso não vamos obter uma expressão para η_{min} e sim uma tabela de valores, substituiremos esses valores, com a respectiva temperatura, na expressão da magnetização, correlação e energia livre. É simples de verificar que a equação transcendental possui $x = 0$ como solução para qualquer temperatura, pois tanto $m(0, t)$ quanto $r(0, t)$ se anulam, como podemos notar no gráfico. Também não é difícil, mas é um pouco mais trabalhoso, verificar que $x \rightarrow \infty$ é solução para toda faixa de temperatura, pois as derivadas de m e r se anulam neste limite. Estes dois limites representam as fases paramagnética e ferromagnética respectivamente, pois

$$m(x = 0) = 0$$

$$m(x \rightarrow \infty) = 1.$$

Logo, é razoável imaginar que no limite de baixas temperaturas $x \rightarrow \infty$ é a solução física para a equação transcendental e no de altas temperaturas $x = 0$ será a solução aceitável. Valores intermediários do parâmetro de ordem serão dados pelas soluções que ficam entre esses dois extremos. Como a energia livre depende da magnetização e essa por sua vez depende da variável x , podemos para uma dada temperatura distinguir as soluções. Por

exemplo, para $t = 3.1$ existem quatro soluções diferentes (figura 16) além das duas acima, elas são

$$x = 0.660,$$

$$x = 1.245.$$

Com esses valores podemos calcular cada valor da magnetização e as energias livres em cada ponto. As respectivas energias livres para as quatro soluções são

$$f(0.300, 1)/J = -2.2016,$$

$$f(x \rightarrow \infty, 3.1)/J = -2.0000,$$

$$f(0.660, 3.1)/J = -2.0666,$$

$$f(1.245, 3.1)/J = -2.0934.$$

Pelos valores listados vemos que para essa temperatura a solução física é $x = 0$, ou seja, nessa temperatura (e acima dela) o sistema já está na fase paramagnética. Nosso trabalho foi analisar o valor da energia livre para cada uma das soluções e dizer qual era a aceitável. No regime de baixas e altas temperaturas não precisamos analisar os valores da energia livre pois já sabíamos qual era a solução. Para temperaturas menores que $t = 1.20$ a solução $x \rightarrow \infty$ é a solução física. Desse valor até valores próximos de $t = 2.89$ a solução física é sempre a terceira contando a partir da solução $x = 0$. Já quando $t \geq 2.90$ a solução passa a ser $x = 0$, e assim continua indefinidamente. Com isso obtemos o seguinte comportamento para a energia livre, figura 17. Dada a forma da energia livre, notamos

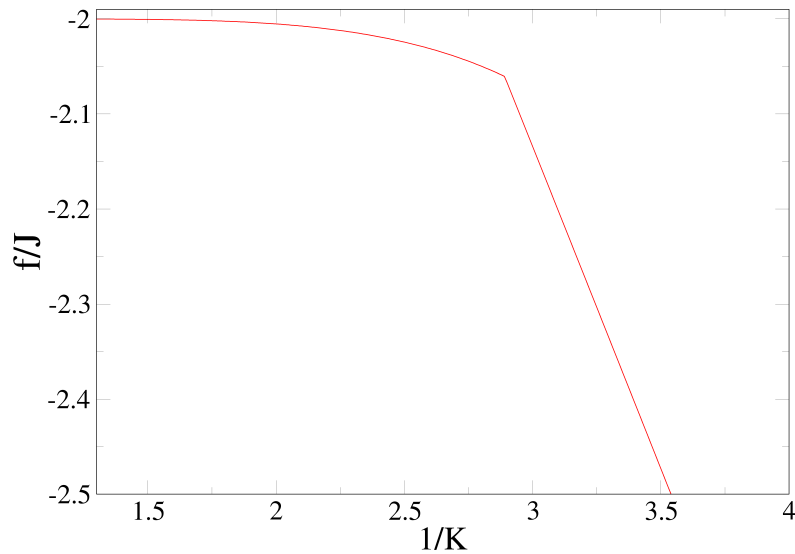


Figura 17 – Energia livre obtida pela aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$. Para $t \rightarrow \infty$ a energia livre se comporta como uma reta de inclinação $-\ln(2)$.

que a sua primeira derivada possui uma descontinuidade em $t = 2.8912$, nos revelando que

nesta temperatura o sistema transita entre as duas fases de uma forma descontínua, ou seja, a transição é de primeira ordem.

Mesmo considerando um modelo um pouco mais realista não conseguimos obter o comportamento (mesmo que de uma forma qualitativa) da solução exata. Mas, comparando esse valor com o obtido pela primeira aproximação de spins livres, equação (4.7), vemos que esse valor é menor, um resultado coerente visto que o cálculo exato, (BAXTER, 2016), diz que o sistema sofre uma transição de fase de segunda ordem na temperatura crítica 2.2691. Então, mesmo não conseguindo reproduzir a realidade do modelo, a aproximação nos permite ter esperança de que se escolhermos um H_0 mais sofisticado, do ponto de vista do número de interações, recuperaremos o comportamento exato. Dada as soluções da equação transcendental também podemos calcular a magnetização. A magnetização para o intervalo de temperatura relevante está indicado na figura 18. Com a energia livre,

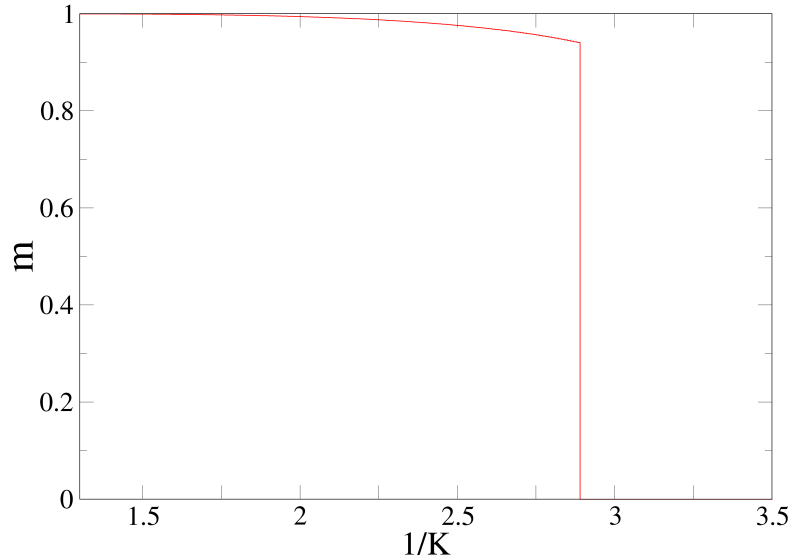


Figura 18 – Magnetização de acordo com a aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$.

a entropia é obtida pela equação de estado,

$$\begin{aligned} s/k_B &= -\frac{\partial f}{\partial(k_B T)}, \\ &= -\frac{\partial(f/J)}{\partial t}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Seu comportamento está na figura 19. Notamos que para baixas temperaturas ela se aproxima do zero, resultado coerente com a terceira lei da termodinâmica. Na temperatura de transição $t = 2,8912$ a entropia tem uma descontinuidade, mais uma vez nos revelando que esta é a temperatura de transição. Essa quantidade extra de entropia, que o sistema absorve, é proveniente de um “desarranjo” na orientação dos spins, abaixo dessa temperatura todos os spins tinham uma direção preferencial para se orientarem, mas acima não

existe direção privilegiada. Quando t é muito grande, o valor da entropia converge para o valor $\ln(2) = 0,6931$, como discutido na solução exata do modelo unidimensional.

Uma última quantidade que podemos calcular é o calor específico do sistema, ele pode ser obtido diretamente da entropia,

$$\begin{aligned} c/k_B &= T \frac{\partial(s/k_B)}{\partial T}, \\ &= k_B T \frac{\partial(s/k_B)}{\partial k_B T}, \\ &= t \frac{\partial(s/k_B)}{\partial t}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

como está indicado na figura 20. Diferente do comportamento obtido para o modelo unidimensional, neste caso temos um comportamento não analítico, revelando uma transição entre as fases.

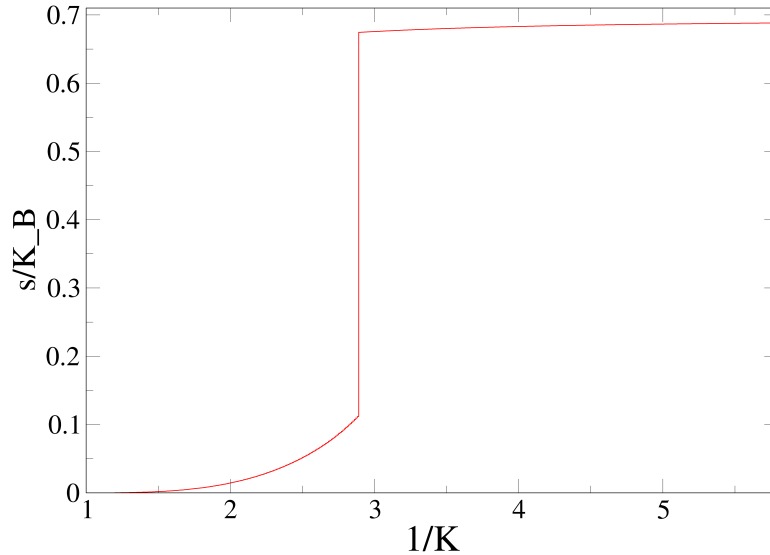


Figura 19 – Entropia de acordo com a aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$.

Nesta seção aumentamos um pouco o tamanho do bloco mas mesmo assim não conseguimos reproduzir o caráter crítico. Na próxima vamos considerar um último tipo de H_0 afim de tentar recuperar o comportamento exato do modelo nesta dimensão.

4.3 H_0 como uma soma de tiras desconexas

Nesta seção tentaremos uma forma para H_0 um pouco mais realista que as duas primeiras, consideraremos uma soma de tiras desconexas na rede, isto é

$$H_0 = \sum_{tiras} H_{tira}. \quad (4.21)$$

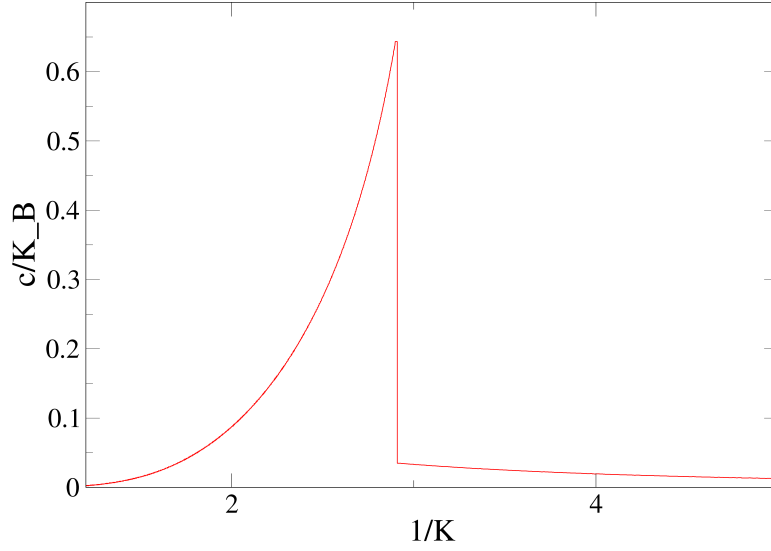


Figura 20 – Calor específico de acordo com a aproximação de triângulos desconexos, onde $K = \beta J$.

Dada a expressão (2.2), podemos escrever o hamiltoniano de uma tira da forma

$$H_{tira} = -J \sum_{i=1}^L \left\{ \sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \sigma_i^b + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b \sigma_{i+1}^a \right\} - \eta \sum_{i=1}^{2L} \sigma_i. \quad (4.22)$$

O termo que faz o papel de campo externo pode ainda ser escrito como segue

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{2L} \sigma_i &= \sum_{i=1}^L (\sigma_i^a + \sigma_i^b), \\ &= 1/2 \sum_{i=1}^L (\sigma_i^a + \sigma_i^b + \sigma_{i+1}^a + \sigma_{i+1}^b), \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde usamos mais uma vez condições periódicas de contorno. Assim, a função de partição de uma tira fica

$$\begin{aligned} Z_{tira} &= \sum_{\text{estados}} e^{-\beta H_{tira}}, \\ &= \sum_{\text{estados}} e^{\sum_{i=1}^L [K(\sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \sigma_i^b + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b \sigma_{i+1}^a) + \gamma/2(\sigma_i^a + \sigma_i^b + \sigma_{i+1}^a + \sigma_{i+1}^b)]}, \\ &= \sum_{\text{estados}} \prod_{i=1}^L e^{K(\sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \sigma_i^b + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b \sigma_{i+1}^a) + \gamma/2(\sigma_i^a + \sigma_i^b + \sigma_{i+1}^a + \sigma_{i+1}^b)}, \\ &\equiv \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b, \sigma_2^a \sigma_2^b \dots} \prod_{i=1}^L T_{\sigma_i^a \sigma_i^b; \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b}, \end{aligned} \quad (4.24)$$

onde $K = \beta J$, $\gamma = \beta \eta$ e definimos o elemento matricial

$$T_{\sigma_i^a \sigma_i^b; \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b} = e^{K(\sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \sigma_i^b + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b \sigma_{i+1}^a) + \gamma/2(\sigma_i^a + \sigma_i^b + \sigma_{i+1}^a + \sigma_{i+1}^b)}. \quad (4.25)$$

Decompondo o produtório da equação (4.24) ficamos com

$$Z_{tira} = \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b, \sigma_2^a \sigma_2^b \dots} T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_3^a \sigma_3^b} \dots T_{\sigma_{L-1}^a \sigma_{L-1}^b; \sigma_L^a \sigma_L^b} T_{\sigma_L^a \sigma_L^b; \sigma_1^a \sigma_1^b}. \quad (4.26)$$

Se interpretarmos, mais uma vez, o produto $\sigma_i^a \sigma_i^b$ como sendo um índice matricial que pode assumir quatro configurações:

++

+-

-+

--,

e adotando a mesma ordem que foi adotada no caso unidimensional para os elementos da matriz T , chegaremos em

$$T = \begin{pmatrix} e^{2(k+\gamma)} & e^\gamma & e^{-2k+\gamma} & 1 \\ e^{-2k+\gamma} & 1 & e^{2k} & e^{-\gamma} \\ e^\gamma & e^{-2k} & 1 & e^{2k-\gamma} \\ 1 & e^{2k-\gamma} & e^{-\gamma} & e^{-2(k+\gamma)} \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

A função de partição torna-se

$$\begin{aligned} Z_{tira} &= \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b, \sigma_2^a \sigma_2^b} T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_1^a \sigma_1^b}^{L-1} \\ &= \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b} T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_1^a \sigma_1^b}^L, \\ &= \text{Tr}[T^L], \end{aligned} \quad (4.28)$$

como de costume. Se fizermos uma transformação de similaridade (que preserva o traço) na matriz T , concluiremos que

$$Z_{tira} = \sum_{i=1}^4 \lambda_i^L, \quad (4.29)$$

onde λ são os auto-valores da matriz de transferência definida em (4.27). Se λ_1 é o maior auto-valor da matriz T , o limite termodinâmico garante que

$$\begin{aligned} Z_{tira} &= \lambda_1^L, \\ &= \lambda_1^{\sqrt{N}}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

A partir deste momento excluiremos o índice 1 do auto-valor λ uma vez que não precisaremos nos preocupar com os outros três auto-valores. Assim como no caso unidimensional, para calcular Z_{tira} precisaremos diagonalizar a matriz T . Lá nós conseguimos com certo esforço achar uma matriz U que bloco diagonalizava T , mas para um caso que não tínhamos o termo de campo externo. Neste caso, achar uma matriz U simples é impossível devido

a pouca simetria apresentada por (4.27). Dessa forma, teremos que recorrer a métodos numéricos de diagonalização.

Levando em consideração o número total de tiras que podemos ter em uma rede $L \times L$,

$$\begin{aligned} Z_0 &= Z_{tira}^{L/2} \\ &= Z_{tira}^{\sqrt{N}/2} \\ &= \lambda^{N/2}. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Portanto, a energia livre para H_0 , por sítio, torna-se

$$\begin{aligned} f_0 &= F_0/N, \\ &= -k_B T \ln(Z_0)/N, \\ &= -k_B T \ln(\lambda)/2, \end{aligned} \quad (4.32)$$

e a magnetização é obtida diretamente da equação de estado (3.12),

$$m_0 = \frac{k_B T}{2\lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial \eta}. \quad (4.33)$$

A média presente na função $\phi(\eta)$ pode ser calculada,

$$\begin{aligned} \langle H - H_0 \rangle_0 &= -J \left\langle \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \right\rangle_0 - (h - \eta) \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle_0, \\ &= -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle_0 - (h - \eta) N m_0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Analisando a figura 12, percebemos que a soma em $\langle i, j, k \rangle_0$ é sobre

$$2N - (L/2)(2L) = N$$

triângulos, uma vez que há $L/2$ tiras e $2L$ triângulos em cada tira. Todos os triângulos na contagem acima possuem algo em comum: dois dos seus vértices estão em uma mesma tira e o vértice que resta está em outra tira. Sendo assim, como a média é no ensemble de H_0 ,

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle_0 &= \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \sigma_k \rangle_0, \\ &= m_0 \langle \sigma_j \sigma_k \rangle_0, \\ &\equiv m_0 r(\eta). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Como veremos abaixo, o cálculo da função $r(\eta)$ neste caso é bem mais complicado devido ao número de interações levadas em conta em H_0 . Antes de calcular essa média vamos resolver um problema similar, com dificuldade bem reduzida, afim de definirmos uma quantidade importante.

4.3.1 4 spins pelo modelo de Ising

Com o objetivo de calcular a função de correlação de dois spins vizinhos no modelo de B-W, vamos resolver esse mesmo problema para um sistema de quatro spins segundo o modelo de Ising, figura 21. Indexaremos os spins como mostrado na figura e assumiremos condições periódicas de contorno. Nosso objetivo é calcular a seguinte função

$$r = \langle \sigma_1^a \sigma_2^a \rangle.$$

Note que os spins acima estão na horizontal, da mesma forma que precisamos para o

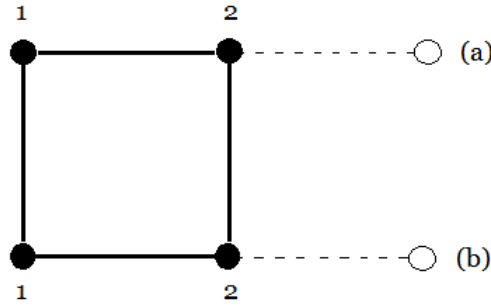


Figura 21 – Placa com 4 spins.

modelo de B-W. Pela definição de média no ensemble canônico,

$$Zr(\eta) = \sum_{\text{estados}} e^{-\beta H} \sigma_1^a \sigma_2^a, \quad (4.36)$$

onde H é a energia do sistema,

$$\begin{aligned} H &= -J(\sigma_1^a \sigma_2^a + \sigma_1^b \sigma_2^b + \sigma_1^a \sigma_1^b + \sigma_2^a \sigma_2^b + \sigma_2^a \sigma_3^a + \sigma_2^b \sigma_3^b + \sigma_3^a \sigma_3^b), \\ &= -J/2 \sum_{i=1}^2 (\sigma_i^a \sigma_{i+1}^a + \sigma_i^b \sigma_{i+1}^b + \sigma_i^b \sigma_i^a + \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b), \end{aligned} \quad (4.37)$$

e Z é a função de partição, que já podemos escrever de uma forma conhecida

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\text{estados}} e^{-\beta H}, \\ &= \sum_{\sigma_1^a} \sum_{\sigma_1^b} \sum_{\sigma_2^a} \sum_{\sigma_2^b} e^{-\beta H}, \\ &= \sum_{\sigma_1^a} \sum_{\sigma_1^b} \sum_{\sigma_2^a} \sum_{\sigma_2^b} \prod_{i=1}^2 T_{\sigma_i^a \sigma_i^b; \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Dessa forma a equação (4.36) pode ser escrita da forma

$$Zr = \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b} \sum_{\sigma_2^a \sigma_2^b} T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_1^a \sigma_1^b} [\sigma_1^a] T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} [\sigma_2^a]. \quad (4.39)$$

O resultado acima possui um caráter universal, no sentido de que independe da forma da matriz T , ou seja, do modelo em questão; usaremos esse fato logo. Explicitamente (4.39) é

$$\begin{aligned} Zr = & \sum_{\sigma_2^a \sigma_2^b} [T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; ++} (+1) T_{++; \sigma_2^a \sigma_2^b} \sigma_2^a + T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; +-} (+1) T_{+-; \sigma_2^a \sigma_2^b} \sigma_2^a + \\ & + T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; -+} (-1) T_{-+; \sigma_2^a \sigma_2^b} \sigma_2^a + T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; --} (-1) T_{--; \sigma_2^a \sigma_2^b} \sigma_2^a]. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Seja a seguinte operação matricial com a matriz T e uma matrix Π desconhecida,

$$\begin{aligned} Tr(T\Pi T\Pi) &= \sum_{i=1}^4 (T\Pi T\Pi)_{i,i}, \\ &= \sum_{i,j} (T\Pi T)_{i,j} \Pi_{j,i}, \\ &= \sum_{i,j,k,l} T_{i,l} \Pi_{l,k} T_{k,j} \Pi_{j,i}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Se a matrix Π for diagonal, ficamos com

$$Tr(T\Pi T\Pi) = \sum_{i,k} T_{i,k} \Pi_{k,k} T_{k,i} \Pi_{i,i}. \quad (4.42)$$

Comparando a expressão acima com a (4.39), prestando bem atenção aos índices matriciais, podemos reescrevê-la da seguinte forma

$$Zr = Tr(T\Pi T\Pi), \quad (4.43)$$

com a matriz Π sendo uma matriz diagonal,

$$\Pi = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d \end{pmatrix}. \quad (4.44)$$

Para determinar os quatro elementos não nulos vamos abrir parte da soma em (4.42):

$$\begin{aligned} Tr(T\Pi T\Pi) &= \sum_i [T_{i,1} \Pi_{1,1} T_{1,i} \Pi_{i,i} + T_{i,2} \Pi_{2,2} T_{2,i} \Pi_{i,i} + T_{i,3} \Pi_{3,3} T_{3,i} \Pi_{i,i} + T_{i,4} \Pi_{4,4} T_{4,i} \Pi_{i,i}] \\ &= \sum_i [T_{i,1}(a) T_{1,i} \Pi_{i,i} + T_{i,2}(b) T_{2,i} \Pi_{i,i} + T_{i,3}(c) T_{3,i} \Pi_{i,i} + T_{i,4}(d) T_{4,i} \Pi_{i,i}] \end{aligned} \quad (4.45)$$

Fazendo uma nova comparação, agora com a (4.40), percebemos que $a = b = 1$ e $c = d = -1$. Portanto,

$$\Pi = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Devido a este sistema ter poucos spins é fácil verificar que (4.43) fornece a resposta correta para a função de correlação entre spins vizinhos.

Como mencionado, a equação (4.39) e (4.43), possuem um caráter universal, logo, devemos esperar que para o modelo de B-W tenhamos algo similar com a matriz Π exatamente desta forma e a matriz T igual a (4.27). Para o nosso caso de interesse precisamos calcular a função

$$r(\eta) = \langle \sigma_i^a \sigma_{i+1}^a \rangle_0. \quad (4.47)$$

Mas, devido a simetria translacional da rede, essa função é identicamente a

$$r(\eta) = \langle \sigma_1^a \sigma_2^a \rangle_0. \quad (4.48)$$

Sendo assim, temos que

$$\begin{aligned} r(\eta) &= \sum_{\text{estados}} \sigma_1^a \sigma_2^a \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0}, \\ &= \sum_{\text{estados}} \sigma_1^a \sigma_2^a \frac{\prod_{\text{tiras}} e^{-\beta H_{\text{tira}}}}{\prod_{\text{tiras}} Z_{\text{tira}}}, \\ &= \sum_{\text{tira}1} \sum_{\text{tira}2} \dots \sum_{\text{tira}L/2} \sigma_1^a \sigma_2^a \frac{\prod_{\text{tiras}} e^{-\beta H_{\text{tira}}}}{\prod_{\text{tiras}} Z_{\text{tira}}}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Se definimos a tira 1 como sendo aquela que contém os sítios σ_1^a e σ_2^a , ficamos com

$$r(\eta) = \left(\frac{\sum_{\text{tira}2} \dots \sum_{\text{tira}L/2} \prod_{\text{tiras} \neq 1} e^{-\beta H_{\text{tira}}}}{\prod_{\text{tiras} \neq 1} Z_{\text{tira}}} \right) \frac{\sum_{\text{tira}1} \sigma_1^a \sigma_2^a e^{-\beta H_{\text{tira}1}}}{Z_{\text{tira}1}}. \quad (4.50)$$

A expressão entre parênteses é a identidade. Assim, concluimos que

$$Z_{\text{tira}} r(\eta) = \sum_{\text{estados}} \sigma_1^a \sigma_2^a e^{-\beta H_{\text{tira}}}, \quad (4.51)$$

onde a soma é sobre estados de uma única tira. A partir de agora não colocaremos mais o subscrito *tira* por questões de notação. Similarmente podemos reescrever

$$\begin{aligned} Zr(\eta) &= \sum_{\text{estados}} \sigma_1^a \sigma_2^a \prod_{i=1}^L T_{\sigma_i^a \sigma_i^b; \sigma_{i+1}^a \sigma_{i+1}^b}, \\ &= \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b} \sum_{\sigma_2^a \sigma_2^b} \dots \sum_{\sigma_L^a \sigma_L^b} \sigma_1^a \sigma_2^a T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_3^a \sigma_3^b} \dots T_{\sigma_L^a \sigma_L^b; \sigma_1^a \sigma_1^b}, \\ &= \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b} \sum_{\sigma_2^a \sigma_2^b} \sum_{\sigma_L^a \sigma_L^b} T_{\sigma_L^a \sigma_L^b; \sigma_1^a \sigma_1^b} [\sigma_1^a] T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} [\sigma_2^a] \left[\sum_{\sigma_3^a \sigma_3^b} \dots \sum_{\sigma_{L-1}^a \sigma_{L-1}^b} T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_3^a \sigma_3^b} T_{\sigma_3^a \sigma_3^b; \sigma_4^a \sigma_4^b} \dots \right], \\ &= \sum_{\sigma_1^a \sigma_1^b} \sum_{\sigma_2^a \sigma_2^b} \sum_{\sigma_L^a \sigma_L^b} T_{\sigma_L^a \sigma_L^b; \sigma_1^a \sigma_1^b} [\sigma_1^a] T_{\sigma_1^a \sigma_1^b; \sigma_2^a \sigma_2^b} [\sigma_2^a] T_{\sigma_2^a \sigma_2^b; \sigma_L^a \sigma_L^b}^{L-2}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Assim como identificamos a expressão (4.39) para o caso de quatro spins, a expressão acima pode ser colocada na forma

$$Zr(\eta) = \text{Tr}(T \Pi T \Pi T^{L-2}), \quad (4.53)$$

com Π sendo a matriz construída (4.46). Seja U a matriz que diagonaliza T (obtida de forma numérica), isto é,

$$U^{-1} T U = D,$$

onde D é uma matriz diagonal,

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix}.$$

Devido a T não ser uma matriz hermitiana (facilmente constatado na expressão (4.27)), U é uma matriz não unitária em geral. Faremos um pequeno truque no traço da equação (4.53) afim de introduzir a matriz D :

$$\begin{aligned} \text{Tr}(T\Pi T\Pi T^{L-2}) &= \text{Tr}(UU^{-1}TUU^{-1}\Pi UU^{-1}TUU^{-1}\Pi UU^{-1}T^{L-2}UU^{-1}), \\ &= \text{Tr}(UDU^{-1}\Pi UDU^{-1}\Pi UD^{L-2}U^{-1}), \end{aligned} \quad (4.54)$$

onde usamos que U também diagonaliza uma potência da matriz T :

$$\begin{aligned} U^{-1}T^\alpha U &= U^{-1}TT^{\alpha-1}U, \\ &= U^{-1}UU^{-1}TUU^{-1}T^{\alpha-1}U, \\ &= DU^{-1}T^{\alpha-1}U, \\ &= DU^{-1}UU^{-1}TUU^{-1}T^{\alpha-2}U, \\ &= D^2U^{-1}T^{\alpha-2}U, \\ &= \dots \\ &= D^{\alpha-1}U^{-1}T^{\alpha-(\alpha-1)}U, \\ &= D^\alpha. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Definindo a matriz auxiliar, $M = U^{-1}\Pi U$, temos que

$$\begin{aligned} \text{Tr}(T\Pi T\Pi T^{L-2}) &= \text{Tr}(UDMDMD^{L-2}U^{-1}), \\ &= \text{Tr}(DMDMD^{L-2}), \end{aligned} \quad (4.56)$$

onde usamos a propriedade cíclica do traço de uma matriz. Portanto, podemos escrever que

$$\begin{aligned} Zr(\eta) &= \text{Tr}(DMDMD^{L-2}), \\ &= \sum_i (DMDMD^{L-2})_{i,i}, \\ &= \sum_{i,j,k,l,m} D_{i,j} M_{j,k} D_{k,l} M_{l,m} [D^{L-2}]_{m,i}, \\ &= \sum_{i,k} D_{i,i} M_{i,k} D_{k,k} M_{k,i} [D^{L-2}]_{i,i}, \\ &= \sum_{i,k} \lambda_i^{L-1} M_{i,k} \lambda_k M_{k,i}. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Lembrando da expressão para a função de partição no limite termodinâmico, equação (4.30), escrevemos

$$\begin{aligned} r(\eta) &= \sum_i \frac{\lambda_i^{L-1}}{\lambda_1^L} \left(\sum_k M_{i,k} \lambda_k M_{k,i} \right), \\ &= \sum_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^L \frac{(\sum_k M_{i,k} \lambda_k M_{k,i})}{\lambda_i}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

No limite termodinâmico temos que

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^L = 0, \quad (4.59)$$

para $i \neq 1$. Finalmente concluímos que

$$r(\eta) = \frac{1}{\lambda_1} \sum_k M_{1,k} \lambda_k M_{k,1}. \quad (4.60)$$

Portanto, a função $\phi(\eta)$ a ser minimizada é

$$\begin{aligned} \phi(\eta) &= f_0 + (1/N) \langle H - H_0 \rangle_0, \\ &= -\frac{k_B T}{N} \ln(Z_{tira}^{L/2}) - J m_0 r(\eta) + (\eta - h) m_0, \\ &= -\frac{k_B T}{2} \ln(\lambda_1) - J m_0 r(\eta) + (\eta - h) m_0, \\ &= -\frac{k_B T}{2} \ln(\lambda_1) - J \frac{k_B T}{2\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \eta} \frac{1}{\lambda_1} \sum_k M_{1,k} \lambda_k M_{k,1} + (\eta - h) \frac{k_B T}{2\lambda_1} \frac{\partial \lambda_1}{\partial \eta}. \end{aligned} \quad (4.61)$$

A expressão acima para ser determinada é preciso conhecer apenas a matriz U que diagonaliza (4.27), pois a partir desta os auto-valores de T serão conhecidos e a matriz M também. Dada a forma da matriz T , essa diagonalização só será possível numericamente. A diagonalização de (4.27) será feita assumindo valores para a temperatura e o parâmetro de campo médio. Fixando um valor para a temperatura e variando η , podemos fazer a diagonalização numérica e obter $U(\beta, \eta)$ e, conseqüentemente, $\lambda_i(\beta, \eta)$. Com isso teremos a função $\phi(\eta)$ para o intervalo desejado de η . Assim, podemos procurar o η_{min} que minimiza $\phi(\eta)$ para a temperatura em questão. Repetindo o processo para a faixa de temperatura desejada, encontraremos a energia livre aproximada

$$f = \phi(\eta_{min}(\beta)).$$

De posse da energia livre para toda faixa de temperatura identificamos que ela possui uma descontinuidade na sua primeira derivada na temperatura $\frac{k_B T_t}{J} = 2.6984$, revelando que o sistema descrito apresenta uma transição de primeira ordem nesta temperatura. Notemos que esse valor é menor que o obtido pelo segundo hamiltoniano tentativa ($\frac{k_B T_t}{J} = 2.8912$), consequência do maior número de interações levado em conta por esse ultimo hamiltoniano. Apesar da aproximação de somas de tiras desconexas ser bem mais realista, ela ainda

não reproduz a realidade do modelo B-W nesta dimensão. No capítulo de Conclusão e Perspectivas procuraremos entender a razão pela qual mesmo tomando blocos cada vez maiores de spins nossas aproximações não recuperaram o resultado exato, sendo que para o modelo de Ising uma aproximação de blocos de um spin já reproduz o comportamento exato nesta dimensão.

4.4 Modelo de Baxter-Wu em três dimensões

Como foi dito, o modelo B-W foi inicialmente proposto para uma rede triangular plana onde as interações eram sobre os triângulos, como indicado na figura 12. A generalização para uma cadeia unidimensional foi feita no capítulo 2 e conseguimos resolver exatamente o modelo por meio da técnica da matriz de transferência. Nesta seção, inspirados na referência (JORGE et al., 2018), generalizaremos para uma rede tridimensional triangular $L \times L \times L$. Diferente dos casos em uma e duas dimensões, agora não temos uma solução exata para comparar, o único resultado conhecido está na referência citada acima, onde por meio de simulações foi possível constatar que o modelo apresenta uma transição de fases de primeira ordem (diferente do caso bidimensional) na temperatura $\frac{k_B T_t}{J} = 11.3775$. Outra diferença apresentanda pela rede tridimensional é que o seu estado fundamental não é degenerado, contrariamente aos quatro estados com a mesma energia fundamental para a rede bidimensional. Para essa rede veremos abaixo que o estado fundamental é ferromagnético, pois quando tentamos construir configurações “ferrimagnéticas” surgem frustrações.

Partindo da rede plana, a construção da dimensão que falta é feita sobrepondo planos até o L -ésimo plano. Esses planos na direção $\hat{z}$ serão divididos em conjunto de três planos: plano A, B e C em ordem crescente do eixo z . Para formar a rede, o plano A será transladado na direção $\hat{y}$ até que todos os vértices dos triângulos desse plano estejam no centro dos triângulos do plano B. Já o plano C sofrerá uma translação na direção $-\hat{y}$ de forma que os vértices dos triângulos neste plano estejam também no centro dos triângulos do plano B. A figura 22 mostra o arranjo dos três planos. É possível identificar nesse conjunto de três planos um arranjo geométrico dos sítios que se repete por toda extensão dos planos e preenche todo o espaço, a célula unitária, figura 23. Os sítios em amarelo representam os vértices de um triângulo no plano A, os em vermelho os vértices de triângulos no plano B e os azuis vértices de um triângulo no plano C. Começando a distribuição ferrimagnética pelo hexágono pertencente ao plano B e prosseguindo para os outros fora dos planos, percebemos que já para o terceiro hexágono aparecem frustrações, significando que o estado fundamental para o modelo de B-W nessa rede não possui degenerescência como no caso bidimensional. Pela figura 23 notamos que o número de arranjos a cada três planos é igual ao número de hexágonos no plano B, portanto, há $\frac{L^2}{3}$ figuras nesse conjunto de planos. Também é possível perceber que existem 24 faces

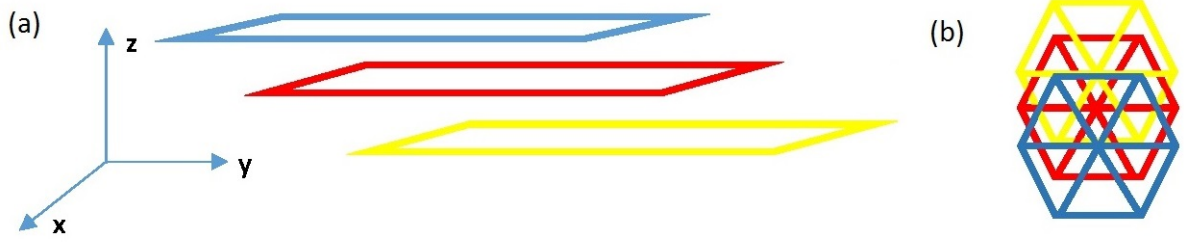


Figura 22 – Esquema da rede 3d. Em (a) temos o conjunto de 3 planos transladados. Em (b) temos a sobreposição de três hexágonos dos planos.

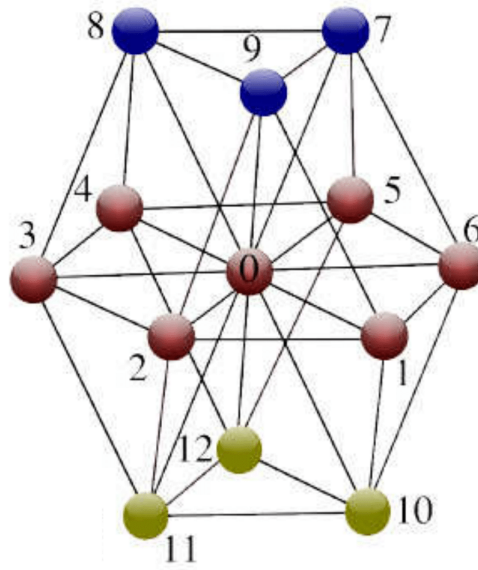


Figura 23 – Rede triangular tridimensional. Notamos a existência de 3 hexágonos fora dos planos: (6,7,8,3,11,10), (5,7,9,2,11,12) e (4,8,9,1,10,12). Além dos triângulos nos hexágonos temos 6 provenientes de faces externas: (4,5,12), (3,4,8), (2,3,11), (1,2,9), (1,6,10) e (5,6,7). Retirada de (JORGE et al., 2018).

triangulares no arranjo, sendo 18 provenientes dos três hexágonos e 6 contabilizados das faces externas. Dado o número de arranjos ao longo dos três planos, concluímos que há $8L^2$ triângulos entre os planos. Para uma rede com L planos distribuídos ao longo do eixo z , há $(L - 2)$ conjunto de três planos e, portanto

$$8L^2(L - 2) = 8N,$$

triângulos entre planos. Somando com o número de triângulos pertencentes a planos, $L \times (2L^2)$, concluímos que para toda rede tridimensional há $10N$ triângulos. Para H_0 sendo uma soma sobre spins livres na rede, essa é a única informação que precisamos saber para determinar a função $\phi(\eta)$,

$$\phi(\eta) = f_0 - 10Jm_0^3 + (\eta - h)m_0, \quad (4.62)$$

onde f_0 está escrita na (3.11). A minimização da função acima resulta numa expressão $\eta = \eta(\beta)$, de forma que chegamos na seguinte equação transcendental para a magnetização

$$m = \tanh(30\beta Jm^2). \quad (4.63)$$

Comparando com a (4.5) vemos que a informação sobre as novas interações está no coeficiente numérico que multiplica o argumento da função hiperbólica. Assim, já podemos afirmar que essa primeira aproximação já recupera o resultado exato obtido por simulação. Usando o mesmo algoritmo usado para resolver a equação (4.5), obtemos que a temperatura onde a transição ocorre é $\frac{k_B T_c}{J} = 14.8790$, um pouco maior que o resultado previsto por Monte Carlo (JORGE et al., 2018), mas de um ponto de vista qualitativo um bom resultado.

Para usar o segundo hamiltoniano tentativa, uma soma sobre triângulos desconexos, é preciso contar o número de triângulos desconexos e o número de triângulos tipo A e B em toda a rede. Visto que todo sítio de um dado plano pertence a um triângulo desconexo (12), entre os planos não teremos triângulos desconexos. Assim, o número de triângulos desconexos é igual ao número de triângulos desconexos em um plano multiplicado por L : $L(L^2/3) = N/3$. Portanto, a energia livre para esse hamiltoniano tentativa será a mesma que no caso bidimensional, equação (4.9). A soma na média $\langle H - H_0 \rangle_0$ será feita sobre

$$10N - \frac{N}{3} = \frac{29N}{3}$$

triângulos. Entre esses triângulos temos triângulos tipo A e tipo B. Pela figura 23 é possível perceber que nos três hexágonos existem 8 triângulos tipo A: (0,8,9), (0,4,8), (0,4,12), (0,7,9), (0,5,12) e (0,5,7). E para tipo B temos os outros 10 restantes: (0,10,12), (0,1,10), (0,1,9), (0,2,9), (0,2,11), (0,11,12), (0,3,8), (0,3,11), (0,6,10) e (0,6,7). Levando em consideração os triângulos provenientes das faces externas, chegamos que para cada célula unitária, 23, há 10 tipo A e 14 tipo B. É importante mencionar que essa contagem foi feita considerando que o único triângulo desconexo no hexágono pertencente ao plano B (sítios em vermelhos) é aquele formado pelos sítios (0,4,5). Se esses são os números de triângulos tipo A e B em cada célula, como há $N/3$ figuras em toda rede, concluímos que o número total de triângulos tipo A é $10N/3$ e tipo B $14N/3$. Somando esses valores com o número de triângulos tipo A e B pertencentes aos L planos, chegamos em

$$n(A) = \frac{13N}{3}$$

$$n(B) = \frac{16N}{3}.$$

Somando os resultados acima chegamos no valor $29N/3$ esperado. Com esses resultados somos levados a escrever a função $\phi(\eta)$ como sendo

$$\phi(\eta) = f_0 - \frac{16}{3}Jm_0^3 + (\eta - h - \frac{13}{3}Jr(\eta))m_0, \quad (4.64)$$

onde novamente $r(\eta)$ é a correlação entre dois spins vizinhos. O cálculo dessa função é idêntico ao feito no caso bidimensional, dado pela equação (4.15). A minimização da função acima nos leva a uma equação transcendental para η_{min} . Usando o mesmo algoritmo usado no caso bidimensional e analisando as soluções para saber qual representa a solução física, concluímos mais uma vez que o sistema apresenta uma transição de fases de primeira ordem, na temperatura $\frac{k_B T_t}{J} = 14.8654$. Apesar de muito próximo do valor obtido pelo primeiro hamiltoniano tentativa, esse valor é menor, chegando mais próximo do resultado exato e refletindo o fato de que o segundo hamiltoniano tentativa leva em consideração mais interações.

Para aplicar a aproximação final de tiras livres devemos notar que nos planos os triângulos que sobram da diferença $(H - H_0)$ são todos tipo A, $\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle_0 = m_0 r(\eta)$, como no caso bidimensional. Uma análise rápida nos revela que existem nos planos da rede N triângulos desse tipo. Já entre planos, em cada figura 23 são 16 tipo A: (0,5,7), (0,7,9), (0,5,12), (0,8,9), (0,4,8), (0,4,12), (0,6,7), (0,7,8), (0,3,8), (0,3,11), (0,10,11), (0,6,10), (5,6,7), (3,4,8), (1,2,9) e (4,5,12). E 8 tipo B: (0,2,9), (0,2,11), (0,11,12), (0,10,12), (0,1,10), (0,1,9), (2,3,11) e (1,6,10). Se levarmos em conta o número de figuras 23 na rede, concluiremos que entre planos temos $16N/3$ tipo A e $8N/3$ tipo B. Portanto, para toda a rede temos

$$n(A) = \frac{19N}{3}$$

$$n(B) = \frac{8N}{3}.$$

Dado que a única mudança da rede tridimensional para a rede bidimensional é o número maior de interações, a função $\phi(\eta)$ tem uma forma similar, só que agora com a introdução do termo proporcional a m_0^3 devido aos triângulos tipo B. Assim, chegamos em

$$\phi(\eta) = f_0 - \frac{8}{3} J m_0^3 + (\eta - h - \frac{19}{3} J r(\eta)) m_0. \quad (4.65)$$

Usando o mesmo método que foi utilizado no caso bidimensional, concluímos que o sistema sofre uma transição de fases de primeira ordem, desta vez na temperatura $\frac{k_B T_t}{J} = 14.8352$. Novamente um valor mais próximo do exato devido ao aumento de interações levado em conta com esse tipo de hamiltoniano tentativa.

5 Conclusões e Perspectivas

Na tabela abaixo temos todos os resultados para as temperaturas de transição, obtidos pelas três aproximações, junto com os valores exatos ou por Monte Carlo. Em uma dimensão foi feito as mesmas três aproximações, mas para não ocupar mais espaço, já que para duas e três dimensões foi feito em detalhes, preferimos colocar no texto apenas o cálculo exato. Os valores obtidos estão em concordância com o que se espera a medida que o tamanho dos blocos aumenta. Em uma e duas dimensões, as aproximações não produziram o resultado esperado (em uma dimensão a tira é um cálculo exato), sempre fornecendo uma transição descontínua entre as fases. Visto que em três dimensões o resultado por Monte Carlo revela que a transição de fato é de primeira ordem (JORGE et al., 2018), o método descreve qualitativamente bem o sistema nesta dimensão.

Temperaturas de transição para o modelo de B-W			
Blocos	1d	2d	3d
1 spin	1.4879	2.9758	14.8790
triângulo	1.3362	2.8912	14.8654
tira	Zero	2.6984	14.8352
Exato/MC	Zero	2.2692	11.3776

Tabela 1 – Resultados

Destacamos ainda alguns pontos principais:

1. Em uma dimensão, mesmo já sabendo que o sistema não apresentaria uma fase ferromagnética para temperaturas diferente de zero, o estudo dessa rede nos permitiu a construção da matriz U , que bloco diagonaliza uma série de matrizes com a mesma simetria apresentada pela T . Esperamos que tal matriz possa servir na solução de outros problemas.
2. Percebemos que em duas dimensões o aumento do tamanho dos blocos de spins não surtiu o efeito desejado de mudar a ordem da transição. Para entendermos a razão disto é necessário olhar para a média $\langle H - H_0 \rangle_0$. Dado os resultados e uma análise dos modelos, essa média, independente do bloco, terá sempre as formas:

$$\langle H - H_0 \rangle_{B-W} = \begin{cases} a_0 + a_1 m + a_3 m^3 \\ a_0 + a_1 m \end{cases}$$

$$\langle H - H_0 \rangle_{Ising} = a_0 + a_1 m + a_2 m^2$$

Para o modelo de B-W, o polinômio de grau três foi obtido pelas aproximações de spin livre e triângulos desconexos, e o de grau um foi obtido para a aproximação de

tiras desconexas em duas dimensões. Já para o modelo de Ising, o resultado será sempre esse, pois o modelo só contém termos de interação entre dois spins. Como vimos, o método procura o menor valor da função $\phi(\eta)$, que equivale a derivar esses polinômios. A derivada para o caso do modelo de B-W será sempre uma função *par* e para o modelo de Ising, uma função *ímpar*. Essa diferença fez com que o argumento da $\tanh$ em (3.19) fosse uma função ímpar e em (4.5) uma função par. Esta mudança ocasionou a existência de uma temperatura crítica para o modelo de Ising e a inexistência para o modelo de B-W. Assim, independente do tamanho do bloco considerado, a TCM baseada na desigualdade de Bogoliubov, jamais reproduzirá o comportamento crítico do modelo de B-W em duas dimensões.

Com este trabalho e o artigo publicado ((CAVALCANTE; PLASCAK, 2019)) baseado nele, esperamos contribuir para um melhor entendimento das Transições de Fases e Fenômenos Críticos em modelos magnéticos como o Baxter-Wu, e na aplicação de Teorias de Campo Médio em modelos de rede.

Além das teorias e dos métodos expostos aqui, também houve uma investigação sobre outros temas como Grupo de Renormalização e o estudo de Sistemas Quânticos. A ideia no momento é seguir com o estudo desses e outros temas, na busca de descrever novos modelos de rede e também abordar novas transições de fases, como a Supercondutora.

Referências

- ANNETT, J. *Superconductivity, Superfluids and Condensates*. OUP Oxford, 2004. (Oxford Master Series in Physics). ISBN 9780198507567. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=WZcXmBrZlc8C>. Citado 2 vezes nas páginas 7 e 19.
- BALIBAR, S. The discovery of superfluidity. *Journal of Low Temperature Physics*, Springer Science and Business Media LLC, v. 146, n. 5-6, p. 441–470, jan. 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10909-006-9276-7>. Citado na página 12.
- BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Physical Review*, American Physical Society (APS), v. 108, n. 5, p. 1175–1204, dez. 1957. Disponível em: <https://doi.org/10.1103/physrev.108.1175>. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 29.
- BAXTER, R. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Elsevier Science, 2016. ISBN 9781483265940. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=egtcDAAAQBAJ>. Citado 3 vezes nas páginas 20, 35 e 44.
- BRUUS, H.; FLENSBERG, K. *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*. OUP Oxford, 2004. (Oxford Graduate Texts). ISBN 9780191057472. Disponível em: <https://books.google.com.br/books?id=zeaMBAAAQBAJ>. Citado na página 28.
- CAVALCANTE, M.; PLASCAK, J. Baxter–wu model according to a mean-field approach. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier BV, v. 518, p. 111–118, mar. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.11.063>. Citado na página 59.
- CLERK-MAXWELL, J. On the dynamical evidence of the molecular constitution of bodies. *Nature*, Springer Nature, v. 11, n. 279, p. 357–359, mar. 1875. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/011357a0>. Citado na página 16.
- CLERK-MAXWELL, J. C. The correlation of physical forces. sixth edition. *Nature*, Springer Nature, v. 10, n. 251, p. 302–304, ago. 1874. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/010302a0>. Citado na página 16.
- DAHL, P. F. Kamerlingh onnes and the discovery of superconductivity: The leyden years, 1911-1914. *Historical Studies in the Physical Sciences*, University of California Press, v. 15, n. 1, p. 1–37, jan. 1984. Disponível em: <https://doi.org/10.2307/27757541>. Citado na página 12.
- FALK, H. Inequalities of j. w. gibbs. *American Journal of Physics*, American Association of Physics Teachers (AAPT), v. 38, n. 7, p. 858–869, jul. 1970. Disponível em: <https://doi.org/10.1119/1.1976484>. Citado na página 29.
- ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, Springer Science and Business Media LLC, v. 31, n. 1, p. 253–258, fev. 1925. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/bf02980577>. Citado na página 20.

JORGE, L.; FERREIRA, L.; CAPARICA, A. The three-dimensional baxter-wu model. 08 2018. Citado 5 vezes nas páginas 8, 54, 55, 56 e 58.

OLIVEIRA, M. de. *Termodinâmica*. Livraria da Física, 2005. ISBN 9788588325470. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=sneRJDSuC-QC>>. Citado na página 11.

ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, American Physical Society (APS), v. 65, n. 3-4, p. 117–149, fev. 1944. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrev.65.117>>. Citado na página 20.

PAES, D. de A. *Novo grupo de renormalização de campo médio com cadeias linear e dupla*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciencias Fisicas e Matematicas, 1994. Citado na página 24.

PIERCY, P.; PFNÜR, H. Experimental verification of critical exponents in the two-dimensional four-state potts universality class: Oxygen on ru(0001). *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 59, n. 10, p. 1124–1127, set. 1987. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.59.1124>>. Citado na página 21.

POTTS, R. B. Some generalized order-disorder transformations. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, Cambridge University Press (CUP), v. 48, n. 1, p. 106–109, jan. 1952. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/s0305004100027419>>. Citado na página 21.

ROELOFS, L. D. et al. Critical exponents of a four-state potts chemisorbed overlayer: p(2x2)oxygen on ni(111). *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 46, n. 22, p. 1465–1468, jun. 1981. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.46.1465>>. Citado na página 21.

SALINAS, S. *Introdução à Física Estatística Vol. 09*. EDUSP, 1997. ISBN 9788531403866. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=cAIP3sc0K44C>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 19.

SCHWENGER, L. et al. Effect of random quenched impurities on the critical behavior of a four-state potts system in two dimensions: An experimental study. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 73, n. 2, p. 296–299, jul. 1994. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevlett.73.296>>. Citado na página 21.

STANLEY, H. *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1987. (International Series of Monogr). ISBN 9780195053166. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=C3BzcUxoaNkC>>. Citado 5 vezes nas páginas 7, 12, 14, 16 e 18.

WAALS, J. van der. *Over de continuïteit van den gas- en vloeistoestand*. Sijthoff, 1873. (Over de continuïteit van den gas- en vloeistoestand, v. 1). Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=1A1jAAAaCAAJ>>. Citado na página 15.

WEISS, P. L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *Journal de Physique Théorique et Appliquée*, EDP Sciences, v. 6, n. 1, p. 661–690, 1907. Disponível em: <<https://doi.org/10.1051/jphystap:019070060066100>>. Citado na página 17.

WILSON, K. The renormalization group and the epsilon expansion. *Physics Reports*, Elsevier BV, v. 12, n. 2, p. 75–199, ago. 1974. Disponível em: <[https://doi.org/10.1016/0370-1573\(74\)90023-4](https://doi.org/10.1016/0370-1573(74)90023-4)>. Citado na página 14.

WILSON, K. G. Renormalization group and critical phenomena. i. renormalization group and the kadanoff scaling picture. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 4, n. 9, p. 3174–3183, nov. 1971. Disponível em: <<https://doi.org/10.1103/physrevb.4.3174>>. Citado na página 14.

WOOD, D. W.; GRIFFITHS, H. P. A self dual relation for an ising model with triplet interactions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, IOP Publishing, v. 5, n. 18, p. L253–L255, sep 1972. Disponível em: <<https://doi.org/10.1088%2F0022-3719%2F5%2F18%2F001>>. Citado na página 20.

WU, F.; YANG, C.; MAILLARD, J. *Exactly Solved Models: A Journey in Statistical Mechanics : Selected Papers with Commentaries (1963-2008)*. World Scientific, 2009. ISBN 9789812813886. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=3HtpDQAAQBAJ>>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 35.

Apêndices

APÊNDICE A – Matriz U

A matriz que desejamos bloco diagonalizar é proveniente do modelo B-W em uma dimensão, que na ausência de um termo de campo externo torna-se

$$T = \begin{pmatrix} e^{2K} & 1 & e^{-2K} & 1 \\ e^{-2K} & 1 & e^{2K} & 1 \\ 1 & e^{-2K} & 1 & e^{2K} \\ 1 & e^{2K} & 1 & e^{-2K} \end{pmatrix}.$$

Podemos escrevê-la de uma forma mais geral

$$T = \begin{pmatrix} a & 1 & b & 1 \\ b & 1 & a & 1 \\ 1 & b & 1 & a \\ 1 & a & 1 & b \end{pmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

sendo $a = e^{2k}$ e $b = e^{-2k}$. Nosso objetivo será encontrar uma matriz U que bloco diagonalize a matriz acima, independente das funções a e b .

Olhando a matriz T percebemos que ela não apresenta nenhuma das duas simetrias que mais aparecem na física, não é hermitiana nem unitária. Mas, um olhar com cuidado sobre essa matriz nos revela a seguinte propriedade: a soma dos elementos de uma dada linha tem o mesmo valor para qualquer linha e esse valor também é igual a soma dos elementos de uma coluna qualquer. Assim, somos levados a dizer que um dos auto-vetores dessa matriz, o único que independe das função a e b , é

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Com isso uma candidata para diagonalizar a matriz T tem a forma genérica

$$U = \begin{pmatrix} A & B & C & 1 \\ D & E & F & 1 \\ G & H & I & 1 \\ J & K & L & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

onde $A, B, C, D, E, F, G, H, I, J, K$ e L são os elementos a serem determinados. Para determinar os elementos faltantes, vamos impor algumas simetrias a matriz U . Impondo primeiro que ela seja hermitiana, $U = U^\dagger$, isto nos leva a concluir que

$$J = K = L = 1,$$

$$D = B, C = G, F = H.$$

Portanto, a matriz U assume a forma

$$U = \begin{pmatrix} A & B & C & 1 \\ B & E & F & 1 \\ C & F & I & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Exigiremos uma outra simetria de U , que esta seja unitária: $UU^\dagger = 1$. Mas junto com a primeira propriedade, isto implica que $U^2 = 1$. Efetuando o produto chegamos em

$$\begin{aligned} U^2 &= \begin{pmatrix} A^2 + B^2 + C^2 + 1 & BA + BE + FC + 1 & CA + FB + IC + 1 & A + B + C + 1 \\ BA + BE + FC + 1 & B^2 + E^2 + F^2 + 1 & CB + FE + IF + 1 & B + E + F + 1 \\ CA + FB + IC + 1 & CB + FE + IF + 1 & C^2 + F^2 + I^2 + 1 & C + F + I + 1 \\ A + B + C + 1 & B + E + F + 1 & C + F + I + 1 & 1 + 1 + 1 + 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{A.3}$$

O sistema acima é um sistema não linear com infinitas soluções dado as 9 equações (alguns elementos da matriz U^2 são repetidos) para determinar as 6 variáveis restantes. Para o que desejamos uma solução particular já é suficiente. Depois de algumas tentativas encontramos uma simples:

$$A = B = F = I = -1$$

$$C = E = 1.$$

Para o elemento $U_{4,4}^2$ ser a identidade devemos multiplicar U por $1/2$. Assim, a matriz U assume a forma final

$$U = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{A.4}$$

Afim de verificar se tal matriz bloco diagonaliza uma matriz da forma (A.1), operamos a multiplicação $U^{-1}TU$, cujo o resultado será a matriz

$$U^{-1}TU = \begin{pmatrix} 0 & a + b - 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b - a & 0 \\ b - a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 + a + b \end{pmatrix}, \tag{A.5}$$

onde $(2 + a + b)$ é o auto-valor associado ao auto-vetor v_1 e os outros auto-valores saem da diagonalização da matriz

$$M = \begin{pmatrix} 0 & a + b - 2 & 0 \\ 0 & 0 & b - a \\ b - a & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Assim, concluímos que a matriz (A.4) bloco diagonaliza qualquer matriz da forma (A.1) independente das funções a e b .