Dissertação de Mestrado

Método Variacional de Bogoliubov Aplicado a Modelos de Spins: Ising e Blume-Capel

Rejane Alves de Brito

João Pessoa - UFPB
Março - 2017

Rejane Alves de Brito

MÉTODO VARIACIONAL DE BOGOLIUBOV APLICADO A MODELOS DE SPINS:

Ising e Blume-Capel

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Dr. João Antônio Plascak.

João Pessoa - PB
21 de setembro de 2017

B862m Brito, Rejane Alves de.
Método variacional de Bogoliubov aplicado a modelos de spins: Ising e Blume-Capel. / Rejane Alves de Brito. - João Pessoa, 2017.
52 f. : il. -

Orientador: João Antônio Plascak.
Dissertação (Mestrado) - UFPB/CCEN

1. Física. 2. Modelo de Ising. 3. Blume-Capel. 4. Desigualdade de Bogoliubov. 5. Campo médio. I. Título.

UFPB/BC CDU: 53(043)

Ata da Sessão Pública da Defesa de Dissertação de **Mestrado** da aluna **Rejane alves de Brito**, candidata ao Título de Mestre em Física na Área de Concentração Física da Matéria Condensada.

Aos três dias do mês de março do ano de dois mil e dezessete, às 10h00, na sala de reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para examinar a candidata ao grau de Mestre em Física na área de Física da Matéria Condensada, **Rejane alves de Brito**. A comissão examinadora composta pelos professores doutores: João Antônio Plascak (DF/UFPB), orientador e presidente da banca examinadora, Knut Bakke Filho (DF/UFPB) e Luciano Rodrigues da Silva (UFRN). Dando início aos trabalhos, o Prof. João Antônio Plascak comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a palavra a candidata para que a mesma fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de dissertação intitulado "*Método variacional de Bogoliubov aplicado a modelos de spins: Ising e Blume-Capel*". Concluída a exposição, a candidata foi arguida pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: **"aprovada".** Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o respectivo diploma de Mestre em Física na forma da lei. E para constar, eu, Danilo Wilson Lemos Menezes, lavrei esta ata que vai assinada por mim e pelos membros da Banca Examinadora. João Pessoa, **03 de março de 2017**.

Prof. Dr. João Antônio Plascak
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Knut Bakke Filho
UFPB

Prof. Dr. Luciano Rodrigues da Silva
UFRN

Lic. Danilo Wilson Lemos Menezes
Técnico em Assuntos Educacionais

AGRADECIMENTOS

Ao professor Plascak pelos conhecimentos transmitidos, pela paciência na orientação e pelo exemplo de profissional e de pessoa.

Aos meus pais, que sempre estiveram comigo em todos os momentos, me apoiando e aconselhando, e que lutam constantemente para me ver feliz.

Aos meus amigos, que sempre acreditaram em mim.

Ao CNPQ pelo apoio financeiro.

RESUMO

Os modelos de Ising de spin-1/2 e spin-1, e o de Blume-Capel de spin-1 foram estudados em redes de uma, duas e três dimensões. Foi empregado o método variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov para a energia livre. Os hamiltonianos tentativa utilizados consistem em blocos de spins livres, de pares de spins, e da combinação de spins livres mais pares de spins. Para as três aproximações, foram obtidas as quantidades termodinâmicas de interesse, bem como a temperatura crítica e o comportamento perto da transição, neste último caso para se obter os respectivos expoentes críticos. Os resultados foram comparados entre si, bem como com os resultados exatos, quando disponíveis, ou provenientes de outras aproximações mais elaboradas. Verifica-se que a medida que se incorpora mais interações nos hamiltonianos tentativa, melhores resultados são obtidos para a temperatura de transição, embora os expoentes críticos continuem sempre sendo os mesmo de campo médio usual.

Palavras-Chave: Modelo de Ising,Blume-Capel,desigualdade de Bogoliubov, campo médio.

ABSTRACT

The spin-1/2 and spin-1 Ising models, as well as the spin-1 Blume-Capel model have been studied in one-, two-, and three-dimensional lattices. A variational method based on Bogoliubov inequality for the free-energy has been employed. The trial Hamiltonians consist of clusters of free spins, pairs of spins, and a combination of free spins and pairs of spins. For the three approximations, the thermodynamic quantities of interest have been calculated, together with the critical transition temperature and the behavior close to the transition, in the latter case in order to compute the corresponding critical exponents. The results have been compared to each other as well with exact results, when available, or results coming from more reliable approximate methods. It has been noted that as more interactions are taken into account in the trial Hamiltonian, better results are obtained for the transition temperature, although the critical exponents are always the mean field like ones.
Keywords: Ising Model,Blume-Capel,Bogoliubov inequality, mean field.

Índice

Índice **7**

1 INTRODUÇÃO **1**

2 DESIGUALDADE DE BOGOLIUBOV **11**

2.1 Desigualdade de Bogoliubov no caso Clássico **11**

3 MODELO DE ISING - ESTUDO PELO MÉTODO VARIACIONAL DE BOGOLIUBOV **15**

3.1 Caso $\mathbf{S = 1/2}$ **16**

3.1.1 Aproximação de spins livres 16

3.1.2 Aproximação de pares de spins 20

3.1.3 Aproximação de spins livres mais pares de spins 22

3.1.4 Comparação das diversas aproximações para o caso $\mathbf{S = 1/2}$ 24

3.2 Caso $\mathbf{S = 1}$ **25**

3.2.1 Aproximação de spins livres 25

3.2.2 Aproximação de pares de spins 27

3.2.3 Aproximação de spins livres mais pares de spins 29

3.2.4 Comparação das diversas aproximações para o caso $\mathbf{S = 1}$ 33

4 MODELO DE BLUME-CAPEL - ESTUDO PELO MÉTODO VARIACIONAL DE BOGOLIUBOV **35**

4.1 Aproximação de spins livres **35**

4.2 Aproximação de pares de spins **37**

4.3 Aproximação de spins livres mais pares de spins **39**

4.4 Comparação das diversas aproximações para o modelo de Blume-Capel **43**

5 CONCLUSÕES **49**

6 REFERÊNCIAS **51**

1 Introdução

Transições de fase são fenômenos físicos que ocorrem em um grande número de sistemas naturais, nos quais a variação de um ou mais paramêtros externos leva a mudanças bastante sensíveis nas características, tanto macroscópicas como microscópicas, do sistema. Como exemplo mais simples podemos citar a passagem de uma substância pura do estado sólido para o estado líquido, do líquido para o gasoso, ou mesmo do sólido para o gasoso. Outros exemplos, que podem ser citados, são: a transição entre duas fases ferromagnéticas distintas; a passagem contínua de uma fase paramagnética para uma fase ferromagnética à temperatura de Curie em alguns metais e ligas metálicas; as transições de fase em estruturas cristalinas, com a passagem de uma estrutura a outra; a ocorrência, no ^{4}**He** líquido, de uma transição entre o chamado estado **I** de fluidez normal e o estado **II**, no qual não há viscosidade e o líquido é considerado superfluido; também podemos citar a passagem do estado de condutividade normal para um estado de supercondutividade em alguns metais, etc. (veja, por exemplo, referências [1-3]).

Do ponto de vista da termodinâmica, cada fase de um sistema pode ser descrita, no equilíbrio, por um potencial termodinâmico adequado, comumente chamado de energia livre, que é função das variáveis termodinâmicas apropriadas e utilizadas para descrever o sistema [2, 3]. Em equilíbrio, um sistema termodinâmico tende para o estado de mínima energia livre. Portanto, de acordo com os valores das variáveis para as quais o sistema possui mínima energia livre, podemos dizer em qual fase ele se encontra. Quando a energia livre de duas ou mais fases são iguais, elas podem coexistir em um ponto, numa linha, área, ou mesmo num hipervolume do diagrama de fases. O diagrama de fases, por sua vez, é construído no espaço termodinâmico, isto é, no espaço n-dimensional gerado pelas n variáveis termodinâmicas do sistema (p.e., num fluido contido num recipiente fechado, temos a pressão, volume e temperatura como variáveis termodinâmicas).

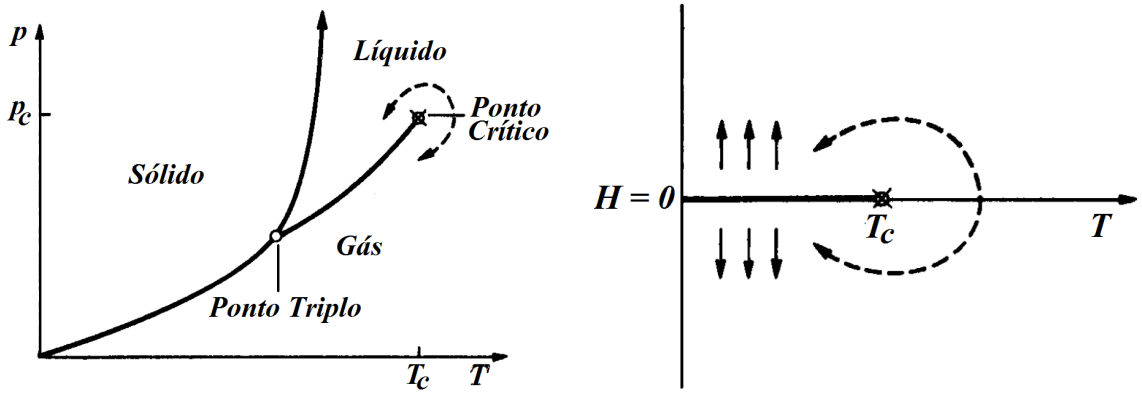
A região de coexistência pode ser expressa pela regra de fase de Gibbs [3,4], que relaciona o número de graus de liberdade com a quantidade de fases e o número de componentes presente no sistema. Por graus de liberdade entende-se as variáveis independentes externamente controláveis, tais como, temperatura, pressão e

composição, campo externo, etc. Então, dadas a quantidade de variáveis externas e a quantidade de componentes, pode-se dizer quantas fases há no sistema e ter-se uma ideia qualitativa do respectivo diagrama de fases (uma discussão detalhada da regra de fases de Gibbs encontra-se nas referências [3,4]).

As mudanças de uma fase para outra não são todas do mesmo tipo. Por exemplo, as passagens entre fases que são acompanhadas pela liberacão ou absorção de uma quantidade de calor, chamado calor latente, e apresentam uma descontinuidade em certas variáveis extensivas, como entropia e volume, são denominadas transicões de fase de primeira ordem. O calor latente está relacionado com mudanças no arranjo atômico ou molecular do sistema que ocorrem quando passamos de uma fase à outra, por exemplo, quando a água se liquefaz há uma liberação de calor latente e há uma mudança no distanciamento médio das moléculas. Por outro lado, existem transições em que não se tem o calor latente e nem descontinuidade nas variáveis extensivas. Nesse caso, essas transições são chamadas de segunda ordem.

De acordo com o que foi descrito acima, as transições podem então ser classificadas em dois tipos distintos: de primeira ordem ou de segunda ordem, que também podem ser chamadas de descontínuas ou contínuas, respectivamente. Em transições de primeira ordem, além da existência do calor latente comentado no parágrafo anterior, há um salto em uma ou mais grandezas extensivas como volume, entropia, magnetização, etc. Por exemplo, no caso da ebulição de um fluido, temos uma descontinuidade no volume, e por conseguinte, uma descontinuidade na densidade. Outros tipos de transições não envolvem a absorção ou liberação de calor latente, mas são descritas por meio de mudanças contínuas nas grandezas extensivas do sistema. No diagrama de fases de um fluido, no plano pressão versus temperatura, isto se dá no fim da curva de coexistência líquido-vapor, onde a diferença de densidades vai continuamente a zero, e se anula no ponto chamado de ponto crítico, que é onde ocorre a transição de segunda-ordem. Fenômeno similar acontece no caso de um sistema magnético, no plano campo externo versus temperatura. A Figura 1 ilustra, esquematicamente, os respectivos diagramas de fases de uma substância pura e de um ferromagneto simples nos planos campos versus temperatura. No caso do fluido, além do ponto crítico na linha da coexistência ente as fases líquida e gasosa, temos um ponto triplo, onde as três fases, gasosa, líquida e sólida, coexistem. Não se tem um ponto crítico na linha de coexistência das fases líquida e sólida, provavelmente por

impedimentos de simetria entre as mesmas. Notamos, ainda, uma grande similaridade nas transições de fases entre o líquido e o gás, e nas transições entre as duas fases ordenadas ferromagneticamente. No caso magnético, para campo nulo, as duas fases com orientações de spins opostas coexistem para temperaturas T menores que a temperatura crítica T_c.



(a) (b)

Figura 1 – *D*iagrama de fases (a) no plano pT para um fluido simples, e (b) no plano HT para um ferromagneto. T_c é a temperatura crítica. No caso do fluido, temos um ponto triplo. No caso magnético, as setas indicam as orientaçoes de spins ao longo do campo externo. As curvas pontilhadas mostram que se pode ir de uma fase a outra sem nenhuma anomalia na energia livre. Figura retirada de [1].

Para cada sistema, pode-se definir um paramêtro apropriado para descrever as diferentes fases. Por exemplo, nas transiçoẽs da fase ferromagnética para a fase paramagnética, o paramêtro apropriado é a magnetização média do sistema; no caso da transição líquido-vapor, que ocorre ao longo da curva de coexistência líquido-vapor do diagrama de fases, o parâmetro apropriado é a diferença entre as respectivas densidades. Estas grandezas são chamadas parâmetros de ordem e podem dar uma descrição melhor do tipo de transição de fase: quando há um salto no parâmetro de ordem, há uma transição de primeira ordem; quando há uma mudança contínua no paramêtro de ordem, há uma transição de segunda ordem. Em cada caso, a fase desordenada é caracterizada por um parâmetro de ordem nulo, e a fase ordenada por um parâmetro de ordem diferente de zero.

As transições de segunda ordem são interessantes de serem estudadas por apresentarem comportamentos bem peculiares na região crítica. Para fluidos,

observa-se nesta região que as flutuações da densidade geram aglomerados de todos os tamanhos, inclusive dos tamanhos da faixa que corresponde ao visível. Tais aglomerados provocam forte espalhamento da luz, caracterizando o fenômeno da opalescência crítica. Esse fenômeno foi primeiramente relatado por Thomas Andrews em experimentos com dióxido de carbono. Similarmente, nos materiais magnéticos, os domínios com orientações opostas de spin, que coexistem ao longo da linha de transição de fase, formam aglomerados de todos os tamanhos na região crítica, e que podem ser observados através de experiências de espalhamento de neutrons.

Para tentar explicar as transições contínuas em fluidos, van der Waals desenvolveu uma equação fenomenológica, a partir da equação de Boyle para os gases ideais, levando em conta o volume ocupado pelas moléculas e a força de atração entre as mesmas [1,2,4]. Ele conseguiu obter os valores críticos de pressão, temperatura e volume em função de paramêtros fenomenológicos. Similarmente, Weiss desenvolveu uma teoria para materiais que apresentam transições de fase magnéticas, na qual considera-se um campo médio provocado por todas as partículas atuando sobre cada sítio [1,2,4]. Estas teorias fornecem uma explicação qualitativa dos fenomênos críticos, mas não dão uma descrição quantitativa dos mesmos. Esses resultados são conhecidos como clássicos, ou de campo médio.

Uma característica marcante nas transições contínuas reside no fato dos respectivos paramêtros de ordem de fluidos simples e ferromagnetos apresentarem comportamentos críticos muito similares. Em outras palavras, as funções que os descrevem possuem o mesmo comportamento assintótico perto da temperatura de transição. Tal comportamento pode ser expresso por uma lei de potência com um expoente, em geral, não inteiro.

No caso do parâmetro de ordem, que designaremos por m, pois iremos tratar basicamente de sistemas magnéticos, tal comportamento próximo à transição pode ser descrito por

$$m = B(-\epsilon)^{\beta}, \tag{1.1}$$

sendo B uma constante não universal e $\epsilon = (T - T_c)/T_c$. β é o chamado expoente crítico correspondente ao parâmetro de ordem. Naturalmente, outras grandezas, como calor específico, susceptibilidade, compressibilidade, funções de correlação, etc. possuem seus respectivos comportamentos assintóticos. Portanto, o conjunto desses expoentes críticos determinam o comportamento termodinâmico do sistema perto da criticalidade.

Como iremos obter alguns expoentes críticos usando um tipo de aproximação de campo médio, vamos definir abaixo os expoentes da susceptibilidade magnética a campo nulo e do calor específico a campo externo constante. As definições dos restantes dos expoentes podem ser vistos nas referências [1] e [2]. No caso da susceptibilidade magnética χ, a campo nulo, temos o seguinte comportamento assimptótico perto da transição

$$\chi \sim \begin{cases} (-\epsilon)^{-\gamma'} & [T < T_c\,, \quad H = 0] \\ \epsilon^{-\gamma} & [T > T_c\,, \quad H = 0]\,, \end{cases} \tag{1.2}$$

onde os correspondentes expoentes críticos γ e γ', abaixo e acima de T_c, respectivamente, são iguais.

O comportamento assimptótico do calor específico, a campo magnético constante, é dado por

$$C_H \sim \begin{cases} (-\epsilon)^{-\alpha'} & [T < T_c\,, \quad H = 0] \\ \epsilon^{-\alpha} & [T > T_c\,, \quad H = 0]\,, \end{cases} \tag{1.3}$$

onde os expoentes críticos do calor específico α e α' são também iguais.

Ocorre então de diferentes sistemas, do ponto de vista microscópico, possuirem o mesmo conjunto de expoentes críticos. Quando isso ocorre, diz-se que eles pertecem a mesma classe de universalidade. Na verdade, o que determina a qual classe de

universalidade pertence um determinado sistema são a dimensão espacial em que ele se encontra, o número de componentes do paramêtro de ordem e o alcance das interações entre as partículas [2]. Por exemplo, no modelo de Ising tridimensional, usado para descrever um material ferromagnético simples, o paramêtro de ordem é a magnetização média por spin, com somente uma componente, e as interações são entre primeiros vizinhos, ou seja, de curto alcance; no caso de um fluido simples, ele também se encontra distribuído tridimensionalmente, o seu paramêtro de ordem é a diferença de densidades, representada por um escalar, e as interações são de curto alcance. Sendo assim, estes dois sistemas referidos pertencem à mesma classe de universalidade. Vários trabalhos teóricos, bem como experimentais, confirmam esse resultado. Outro exemplo de classe de universalidade é o modelo XY, no qual se encaixam materias magnéticos com magnetização planar e transições de fluidos normais para superfluidos [2].

Outro aspecto importante, a respeito da criticalidade, são as relações que existem entre os expoentes críticos. Por exemplo, existem alguns conjuntos de inequações relacionando expoentes críticos de um mesmo sistema, e que são, em maioria, derivadas simplesmente de argumentos termodinâmicos [1]. É possível mostrar, a partir da chamada hipótese de escala, que foi proposta por Widom, que estas inequações tornam-se na verdade equações, e que o número de equações realmente independentes é bem menor que o número total de relações obtidas entre os expoentes críticos. Em tal hipótese assume-se que a energia livre seja uma função homogênea generalizada das variáveis das quais ela depende. Existe um número muito abrangente de resultados de modelos, bem como evidências experimentais, que corroboram a hipótese de escala de Widom.

Em paralelo com os resultados experimentais e teorias fenomenológicas, modelos teóricos foram também propostos para a descrição das transições contínuas. No caso magnético, um modelo que descreve simplificadamente um ferromagneto é o conhecido modelo de Ising, proposto por Lenz em 1925 como problema de tese de doutorado para seu aluno, Ernest Ising [5]. Neste modelo, cada partícula, possuindo um spin σ, ocupa um sítio da rede e interage unicamente com os vizinhos mais próximos, sendo que o hamiltoniano pode ser escrito como

$$\mathcal{H}_I = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \tag{1.4}$$

onde J é a energia de troca entre os spins primeiros vizinhos, a primeira soma se estende sobre os vizinhos mais próximos $\langle i, j \rangle$, N é o número de sítios da rede, σ_i representa o spin que pode ter valores $\sigma_i = -S, -S+1, ..., S-1, S$, e H é o campo magntico externo.

A solução encontrada por Ising no caso unidimensional para spin-1/2, isto é $S = 1/2$, não apresenta transição de fase, o que o levou a pensar também não haver transição em dimensões maiores. Entretanto, em 1944 Onsager apresentou a solução do modelo de Ising bidimensional de spin-1/2 na ausência de campo externo, a qual apresenta transição de fase, contrariando a conclusão original de Ising. A solução exata bidimensional colocou o modelo de Ising como um dos mais importantes da Mecânica Estatística de equilíbrio. Por outro lado, para o modelo tridimensional, bem como o bidimensional para $S \geq 1$ ou campo externo não nulo, ainda não foram encontradas soluções exata e a temperatura crítica só pode ser obtida por meio de aproximações, tanto analíticas como computacionais. Nos casos em que o modelo apresenta transição, tem-se um estado ordenado para temperaturas menores que a temperatura crítica e um estado desordenado para temperaturas maiores que a crítica.

Uma generalização do modelo de Ising é o conhecido modelo de Blume-Capel [6, 7], que também tem sido muito estudado na literatura. Trata-se de um modelo similar ao modelo de Ising, modificado com a adição de um termo de anisotropia cristalina, e cujo hamiltoniano pode ser escrito como

$$\mathcal{H}_{BC} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i + \Delta \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2, \tag{1.5}$$

onde a última somatória representa a energia do campo cristalino Δ e os demais termos remetem ao hamiltoniano do modelo de Ising. O caso $\sigma = \pm 1/2$ retoma o hamiltoniano de Ising acrescido de uma constante, o que não muda em nada a física do modelo. Para o caso em que os estados de spin são $\sigma_i = 0, \pm 1$, este hamiltoniano foi proposto inicialmente por Blume e Capel [6, 7] para tratar, não somente de forma mais realística sistemas magnéticos, como também tem sido usado para modelar misturas de $He^3 - He^4$ em baixas temperaturas. Tal como no modelo de Ising, não

há transição de fase no modelo de Blume-Capel no caso unidimensional, mas há transição tanto no caso bidimensional quanto no tridimensional. Nesses casos, o modelo apresenta uma linha de transição de fase de segunda ordem (nos respectivos diagramas de fases T versus Δ/J) para Δ/J pequeno, mas que se torna de primeira ordem para Δ/J perto do valor d, sendo d é a dimensão espacial da rede. O ponto de encontro destas linhas de primeira e segunda ordem chama-se ponto trícritico, pois neste ponto do diagrama, as duas fases ordenadas e a fase desordenada se tornam indistinguíveis (veja, por exemplo, referência [8]). Pontos trícriticos são observados em vários experimentos físicos, para citar alguns: misturas de $He^3 - He^4$, cristais líquidos, materiais ferroelétricos, na liquefação do grafite, entre outros [9].

Como soluções exatas de modelos em Mecânica Estatística são muito raras, várias técnicas aproximadas foram desenvolvidas para se obter o comportamento termodinâmico dos mesmos, ainda que de forma qualitativa. Uma dessas técnicas é a chamada aproximação de campo médio, que já foi brevemente discutida acima. Ela, em resumo, trata um sítio da rede como estando na presença de um campo efetivo, campo esse provocado pelos seus sítios vizinhos. Isso significa que as flutuações são totalmente desprezadas, justamente as flutuações que se tornam muito importantes perto da região crítica.

Embora existam vários procedimentos para se tratar uma aproximação tipo campo médio, ela pode ser obtida, de forma bem elegante, e sem riscos de erros analíticos, utilizando-se um método variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov. Com esse aparato, pode-se inclusive melhorar os resultados obtidos, bastando simplesmente incluir mais interações no chamado hamiltoniano tentativa e, de certa forma, incluir algumas flutuações nos estados de spin.

O objetivo dessa dissertação é justamente estudar os modelos de Ising e de Blume-Capel, descritos acima, segundo uma técnica aproximada de campo médio, adotando o esquema da desigualdade de Bogoliubov. Consideraremos hamiltonianos tentativa de spins simples, pares de spins, e uma mistura de pares e spins livres. Os resultados serão comparados com os exatos, quando diponíveis (isto é, com os obtidos em redes de baixa dimensionalidade), ou com outros resultados provenientes de métodos mais sofisticados.

O esquema da presente dissertação será da seguinte maneira. No próximo capítulo, o procedimento da desigualdade de Bogoliubov será apresentado no caso clássico. No

capítulo 3 discutiremos os resultados para o modelo de Ising de spin-1/2 e spin-1, enquanto que no capítulo 4, apresentamos os resultados para o modelo de Blume-Capel de spin-1. A ênfase é dada na obtenção da temperatura de transição, sendo que alguns dos expoentes críticos serão obtidos somente para a aproximação de um spin no modelo de Ising de spin-1/2. Algumas conclusões serão discutidas no último capítulo.

2 Desigualdade de Bogoliubov

Como visto no capítulo anterior, as teorias fenomenológicas de campo médio, que foram desenvolvidas inicialmente para descrever as transições de fase de segunda ordem, são limitadas, pois consideram que as interações entre as partículas são sempre as mesmas para qualquer parte do sistema. Dito de outro modo, isso equivale a considerar interações possuindo alcance infinito. Tais teorias levam a resultados cujos valores dos expoentes críticos independem da dimensionalidade da rede e do número de componentes do respectivo parâmetro de ordem, obviamente em desacordo com o que se espera do ponto vista teórico, bem como em desacordo com os dados experimentais. Além do mais, resultados exatos em modelos estatísticos são muito poucos. Por essa razão, várias técnicas aproximativas foram propostas com o intuito de se estudar sistemas onde cálculos exatos ainda não são possíveis. Dentre os métodos propostos, o esquema variacional baseado na desigualdade de Bogoluibov constitui uma das ferramentas para se encontrar soluções aproximadas [10]. Esta desigualdade fornece um limite superior para a energia livre do sistema, como será mostrado a seguir.

Deve-se salientar, entretanto, que apesar dessa técnica produzir bons resultados qualitativos, e permitir uma inclusão progressiva das flutuações de spins, os expoentes críticos serão sempre os mesmos, acarretando somente em uma mudança na temperatura de transição e no comportamento das quantidades termodinâmicas de interesse, fora da região crítica. Em particular, os expoentes apresentados no capítulo anterior na aproximação de campo médio são dados por: $\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, e $\nu = 1$.

2.1 Desigualdade de Bogoliubov no caso Clássico

Considerando um modelo dado por um hamiltoniano $\mathcal{H}$, que possui uma energia livre F que não sabemos sua forma funcional, procura-se primeiro construir um hamiltoniano tentativa $\mathcal{H}_0$, semelhante a $\mathcal{H}$, do qual podemos extrair, de forma exata, a função de partição e a correspondente energia livre F_0. A desigualdade de

Bogoliubov afirma que

$$F \leq F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \tag{2.1}$$

onde a média do lado direito $< ... >_0$ é tomada com respeito à distribuição gerada a partir do hamiltoniano $\mathcal{H}_0$. Fica claro que os resultados assim obtidos aproximam-se mais do valor exato conforme a escolha de um hamiltoniano $\mathcal{H}_0$ cada vez mais próximo do original.

Como a desigualdade acima dá-nos um limite superior para a energia livre F, a ideia é parametrizar o hamiltoniano tentativa $\mathcal{H}_0$ e igualar a energia livre do sistema em estudo ao minimo da função $F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$ com relação aos parâmetros (variacionais) utilizados.

Para provar a desigualdade acima, vamos definir

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \tag{2.2}$$

onde $\mathcal{H}_0$ é função de um paramêtro variacional (ou parâmetros variacionais) γ. Seja Z_0 a função de partição relacionada a $\mathcal{H}_0$, tal que

$$Z_0 = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_0}, \tag{2.3}$$

onde $\{\sigma_i\}$ indica que a soma deve ser feita sobre todos os estados de σ_i e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, sendo que k_B é a constante de Boltzmann. A média de uma grandeza A tomada com relação à função de partição Z_0 é dada por

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma_i\}} A e^{-\beta \mathcal{H}_0}. \tag{2.4}$$

Dessa forma, a média de $e^{-\beta \mathcal{H}_1}$ é dada por

$$\langle e^{-\beta \mathcal{H}_1} \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}_1} e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \frac{1}{Z_0} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \mathcal{H}}. \tag{2.5}$$

Assim, vemos claramente que

$$Z = Z_0 \langle e^{-\beta \mathcal{H}_1} \rangle_0. \tag{2.6}$$

A relação acima é exata. Como a função exponencial pode ser expandida em série de potncias na forma

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \ldots, \tag{2.7}$$

vemos que

$$e^x \geq 1 + x. \tag{2.8}$$

Podemos então escrever

$$e^{-\beta\mathcal{H}_1+\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0} \geq 1 - \beta\mathcal{H}_1 + \beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0, \tag{2.9}$$

e calculando a média nesta última inequação, vê-se que

$$\langle e^{-\beta\mathcal{H}_1}\rangle_0 e^{\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0} \geq 1, \tag{2.10}$$

ou ainda,

$$\langle e^{-\beta\mathcal{H}_1}\rangle_0 \geq e^{-\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0}. \tag{2.11}$$

De acordo com isto, podemos escrever

$$Z \geq Z_0 e^{-\beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0}. \tag{2.12}$$

Tomando o logaritmo desta última inequação

$$\ln Z \geq \ln Z_0 - \beta\langle\mathcal{H}_1\rangle_0, \tag{2.13}$$

e multiplicando-a por $-k_BT$, obtem-se

$$-k_BT \ln Z \leq -k_BT \ln Z_0 + \langle\mathcal{H}_1\rangle_0, \tag{2.14}$$

onde conclui-se que

$$F \leq F_0 + \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0, \tag{2.15}$$

sendo

$$F = -k_BT \ln Z \tag{2.16}$$

a energia livre de Helmholtz do sistema descrito por $\mathcal{H}$ e

$$\Phi(\gamma) \equiv F_0 + \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_1\rangle_0 \tag{2.17}$$

é a função a ser minimizada.

A equação (2.15) é conhecida como desigualdade de Bogoliubov. Notamos então que, a partir da escolha de hamiltonianos cada vez mais parecidos com o original, podemos obter uma descrição termodinâmica aproximada cada vez mais próxima do esperado comportamento exato do modelo. No entanto, trata-se ainda de uma aproximação de campo médio, pois os valores dos expoentes críticos obtidos nestes casos são sempre os clássicos.

3 Modelo de Ising - Estudo pelo Método Variacional de Bogoliubov

O modelo de Ising é definido em uma rede cristalina, onde cada sítio i possui um spin σ_i. Embora ele já tenha sido discutido no capítulo anterior, vamos, por completeza, descrevê-lo novamente nesta seção.

Cada componente z de spin pode ter valores que variam de $-S, -S+1, ..., S-1, S$, onde S é o correspondente valor do spin. Por exemplo, para $S = 1/2$, temos as componentes $\sigma_i = \pm 1/2$, para $S = 1$ temos componentes $\sigma_i = 0, \pm 1$, e assim por diante. No caso de spin-1/2, consideramos, sem perda de generalidade, simplesmente $\sigma_i = \pm 1$, de modo que o fator $1/2$ passa a ser incorporado nas interações de troca. Por sua vez, as interações de troca são as interações mais importantes entre os spins e, usualmente, são tomadas somente entre pares de vizinhos mais próximos, uma vez que vizinhos mais distantes terão interações que se pode desprezar. Pode-se ainda considerar uma interação com um campo externo H. Assim, o hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \tag{3.1}$$

onde J é a energia de troca, H é o campo magntico externo aplicado na rede e N é o número de partículas que compõe a rede. O símbolo $\langle i, j \rangle$ indica que a soma deve ser feita somente sobre os primeiros vizinhos.

Primeiramente, iremos estudar o caso mais simples, em que os possíveis estados de spin são $\sigma_i = \pm 1$ e, em seguida, o caso onde os estados de spin são $\sigma_i = 0, \pm 1$. Utilizaremos, para tal, a aproximação de campo médio baseada na desigualdade de Bogoliubov, descrita no capítulo anterior. Iremos considerar três tipos de hamiltonianos tentativa. O primeiro tipo será constituído spins livres, que gera a aproximação de campo médio usual; o segundo constituído por blocos de pares spins, melhorando a temperatura crítica e, por fim, um hamiltoniano com blocos de um e de dois spins, simultaneamente. Em todos estes três casos a aproximação baseada na desigualdade de Bogoliubov será aplicada.

3.1 Caso $\mathbf{S = 1/2}$

3.1.1 Aproximação de spins livres

Neste caso, o hamiltoniano tentativa será composto apenas por spins não interagentes, da seguinte forma

$$\mathcal{H}_0 = -\gamma \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \tag{3.2}$$

onde γ é um parâmetro variacional, σ_i representa a variável de spin e N é o número total de spins. Todos os sítios da rede são considerados equivalentes, sendo assim, as equações para um spin podem ser generalizadas para os demais. Com este raciocínio, podemos dizer que a função de partição Z_0, associada a este hamiltoniano, deve ser dada pela função de partição de um spin σ_i, elevada a N. Matematicamente

$$Z_0 = (Z_s)^N. \tag{3.3}$$

A função de partição para um spin no interagente é

$$Z_s = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \beta\gamma\sigma_i, \tag{3.4}$$

onde $\{\sigma_i\}$ indica que a soma deve ser feita sobre todas as possíveis configurações do spin (neste caso, $\sigma_i = \pm 1$). Executando a soma sobre os estados, a função de partição para um sítio pode ser escrita então como

$$Z_s = 2\cosh \beta\gamma, \tag{3.5}$$

de modo que a função de partição do hamiltoniano tentativa será

$$Z_0 = (2\cosh \beta\gamma)^N, \tag{3.6}$$

e a energia livre de Helmholtz associada a este hamiltoniano tentativa será dada por

$$F_0 = -Nk_BT \ln Z_0, \tag{3.7}$$

ou ainda,

$$F_0 = -Nk_BT \ln (2\cosh \beta\gamma). \tag{3.8}$$

A correspondente energia livre de Helmholtz por spin $f_0 = F_0/N$ é então

$$f_0 = -k_B T \ln(2\cosh\beta\gamma). \tag{3.9}$$

Sendo a magnetização média correspondente a um spin da rede, no hamiltoniano tentativa, definida por

$$m_s = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i e^{-\beta\mathcal{H}_0}}{\sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}_0}}, \tag{3.10}$$

temos

$$m_s = \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i e^{-\beta\gamma\sum_{i=1}^{N}\sigma_i}}{\sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\gamma\sum_{i=1}^{N}\sigma_i}}, \tag{3.11}$$

$$m_s = \frac{1}{N\beta Z_0}\frac{\partial\left(\sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\gamma\sum_{i=1}^{N}\sigma_i}\right)}{\partial\gamma}, \tag{3.12}$$

que pode ser escrita como

$$m_s = -\frac{\partial f_0}{\partial\gamma}. \tag{3.13}$$

Executando a derivada acima encontramos

$$m_s = \tanh\beta\gamma. \tag{3.14}$$

A quantidade ϕ, que é função do parâmetro variacional γ a ser minimizado, é definida por

$$\phi \equiv f_0 + \frac{\langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0}{N}, \tag{3.15}$$

onde $\langle ...\rangle_0$ indica que a média deverá ser calculada usando a função de partição referente ao hamiltoniano tentativa. O segundo termo do lado direito desta última equação é escrito como

$$\frac{\langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0}{N} = -J\frac{c}{2}\langle\sigma_i\rangle_0^2 - (H - \gamma)\langle\sigma_i\rangle_0, \tag{3.16}$$

onde $\langle\sigma_i\rangle_0 = m_s$, c é o número de coordenação da rede (por exemplo, $c = 2$ na cadeia unidimensional, $c = 4$ na rede quadrada, $c = 6$ na rede cúbica simples, etc.), sendo $Nc/2$ o total de pares de spins no hamiltoniano. Assim teremos para ϕ

$$\phi = f_0 - J\frac{c}{2}m_s^2 - (H - \gamma)m_s, \tag{3.17}$$

e, derivando com relação a γ obtemos

$$\frac{\partial \phi}{\partial \gamma} = -m_s - Jcm_s \frac{\partial m_s}{\partial \gamma} - (H - \gamma)\frac{\partial m_s}{\partial \gamma} + m_s = 0, \tag{3.18}$$

ou ainda,

$$\frac{\partial \phi}{\partial \gamma} = \left[-Jcm_s - (H - \gamma)\right] \frac{\partial m_s}{\partial \gamma} = 0, \tag{3.19}$$

que pode ser simplificada como

$$-Jcm_s - (H - \gamma) = 0, \tag{3.20}$$

resultando, finalmente, na seguinte relação

$$\gamma = Jm_s c + H, \tag{3.21}$$

onde já estamos levando em conta que a magnetização do hamiltoniano em estudo m é dada por m_s, i.e. $m = m_s$, com γ obtido acima. Considerando $H = 0$, encontramos

$$m = \tanh(\beta Jcm) \tag{3.22}$$

que nos dá a magnetização espontânea do modelo em função da temperatura, ou mais explicitamente, em função de $J/k_B T$. Com essa equação, é possível determinar tanto o comportamento da magnetização m em função da temperatura, como também a temperatura crítica de transição. Com relação a esta última quantidade, basta recordar que, próximo da transição, o parâmetro de ordem m é muito pequeno, de forma que, expandindo a equação acima para pequenos valores de m, e tomando, primeiramente, somente o primeiro termo, temos

$$m = \beta Jcm, \tag{3.23}$$

ou

$$\beta_c Jc = 1, \quad T_c = cJ/k_B, \tag{3.24}$$

que nos dá a temperatura de transição como função do número de coordenação c. Considerando, por outro lado, o próximo termo na expansão para m, temos

$$m = \beta Jcm - \frac{1}{3}(\beta Jcm)^3, \tag{3.25}$$

que resulta em

$$m = \left[\frac{3(\beta Jc - 1)}{(\beta Jc)^3}\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{3(T_c - T)}{T_c}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{3.26}$$

Vemos então, de acordo com a eq. (1.1), que o expoente que descreve a magnetização nas proximidades da temperatura crítica é $\beta = \frac{1}{2}$, que é o valor típico de campo médio, como esperado. Esperamos que não haja confusão com as letras β, pois, na literatura, a mesma é usada tanto para designar $1/k_BT$ quanto o expoente crítico da magnetização.

A suscetiblidade magnética pode ser obtida pela seguinte derivada

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H}\right), \tag{3.27}$$

sendo a magnetização dada por

$$m = tanh\beta(Jcm + H). \tag{3.28}$$

Resulta para a suscetibilidade a campo nulo

$$\chi = \frac{1}{\cosh^2(\beta Jcm)}\beta(Jc\chi + 1), \tag{3.29}$$

ou

$$\chi = \frac{\beta \cosh^2(\beta Jcm)}{\cosh^2(\beta Jcm) - \beta Jc}. \tag{3.30}$$

Para $T > T_c$, a magnetização é nula e, de acordo com a expressão acima, a suscetibilidade será dada por

$$\chi = \frac{\beta T}{T - T_c}, \tag{3.31}$$

onde $\beta Jc = \frac{Jc}{k_BT} = \frac{T_c}{T}$. Para $T < T_c$, por outro lado, próximo à T_c teremos

$$\chi = \frac{1}{2}\frac{\beta T}{T - T_c}. \tag{3.32}$$

Verificamos, portanto, de acordo com a eq. (4.41), que o expoente crítico associado à suscetibilidade é $\gamma = 1$ (note que tanto faz estar acima ou abaixo de T_c), ou seja, pertencente ao conjunto dos expoentes de campo médio clássico. Vemos também, com relação aos coeficientes da susceptibilidade, outro comportamento típico de campo médio, pois o coeficiente abaixo de T_c é a metade do coeficiente acima de T_c.

De maneira análoga pode-se obter os demais expoentes para o restante das funções de interesse termodinâmico [1,3].

3.1.2 Aproximação de pares de spins

Neste hamiltoniano tentativa consideraremos pares de spin isoladamente, de modo que ele pode ser escrito como

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{\{pares\}} \sigma_i \sigma_j - \gamma \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \tag{3.33}$$

onde $\{pares\}$ indica que a soma deve ser feita sobre cada par de spins tomado isoladamente.

Considerando que todos estes pares de spins da rede sejam idênticos, a função de partição associada ao hamiltoniano tentativa será dada pela função de partição de cada par de spin, elevada a $\frac{N}{2}$, onde $\frac{N}{2}$ é a quantidade de pares desconexos que há na rede. Isto significa que $Z_0 = (Z_p)^{N/2}$.

A função de partição correspondente a um par de spins é dada por

$$Z_p = \sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} \exp \beta[J\sigma_i\sigma_j + \gamma(\sigma_i + \sigma_j)], \tag{3.34}$$

onde $\{\sigma_i, \sigma_j\}$ indica todas as possíveis configurações do par de spins σ_i e σ_j. Neste caso,

$$Z_p = 2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J} \cosh \beta\gamma, \tag{3.35}$$

sua correspondente energia livre por partícula

$$f_p = \frac{-k_B T}{2} \ln(2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J} \cosh \beta\gamma), \tag{3.36}$$

e a magnetização para um spin do par

$$m_p = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta\gamma}{2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J} \cosh \beta\gamma}. \tag{3.37}$$

Desta maneira, nos resta ainda obter o valor da seguinte média

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \;\; = \;\; & -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 - H \sum_{i=1}^{N} \langle \sigma_i \rangle_0 \\ & + J \sum_{\{pares\}} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 + \gamma \sum_{i=1}^{N} \langle \sigma_i \rangle_0, \end{aligned} \tag{3.38}$$

que pode ser reduzida a

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -J \sum_{p.r.} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_0 - (H - \gamma) \sum_{i=1}^{N} \langle \sigma_i \rangle_0, \tag{3.39}$$

onde a abreviação p.r. no primeiro somatório significa que a soma deverá ser feita sobre os pares restantes.

Como relatado na seção anterior, o número total de pares de spins no hamiltoniano de Ising é $Nc/2$. E, sendo o número total de pares no hamiloniano tentativa é $N/2$, podemos concluir que o número de pares restantes será dado pela relação a seguir,

$$p.r. = N(c-1)/2.$$

Temos então

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{NJ}{2}(c-1)m_p^2 - (H - \gamma)Nm_p. \tag{3.40}$$

Podemos agora escrever a equação para ϕ

$$\phi = \frac{-k_B T}{2} \ln(2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J} \cosh \beta\gamma) - \frac{J}{2}(c-1)m_p^2 - (H - \gamma)m_p. \tag{3.41}$$

Calculando a derivada de ϕ com relação a γ e igualando-a a zero resulta em

$$\gamma = Jm(c-1) + H, \tag{3.42}$$

onde estamos novamente usando o fato de que $m = m_p$, pois a magnetização aproximada do hamiltoniano em estudo é dada por m_p com o valor de γ acima. Substituindo este resultado na equação para a magnetização, e considerando $H = 0$, chegamos a seguinte relação

$$m = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta J m(c-1)}{2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J} \cosh \beta J m(c-1)}, \tag{3.43}$$

que nos dá a magnetização espontânea no caso da aproximação de pares.

Como no caso anterior, pode-se obter a temperatura de transição através da expansão desta última equação para m próximo de zero. Temos, até primeira ordem em m

$$m = \frac{e^{\beta J} \beta J m(c-1)}{2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J}}, \tag{3.44}$$

que pode ser escrita como

$$e^{\beta_c J} \beta_c J(c-1) = 4 \cosh \beta_c J, \tag{3.45}$$

de onde podemos calcular a temperatura de transição. Note que, nesse caso, diferentemente do que ocorreu na aproximação de um spin, o valor da temperatura deve ser obtido numericamente para cada valor de c. A solução numérica da equação acima, bem como de todas as equações transcendentais aqui obtidas, é feita usando-se o método iterativo de Newton-Raphson. Os respectivos valores da temperatura de transição em função de c serão apresentados mais abaixo, quando da comparação com as outras aproximações desenvolvidas nesse trabalho.

3.1.3 Aproximação de spins livres mais pares de spins

O hamiltoniano tentativa neste caso é composto de uma parte proveniente dos spins livres e outra devida a pares de spin, conforme ilustrado na figura 2. O hamiltoniano

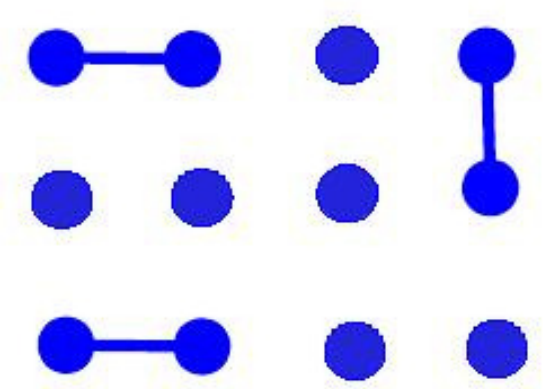


Figura 2 – *P*arte de uma rede bidimensional ilustrando alguns spins livres e alguns pares de spins.

tentativa assume a seguinte forma

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{pares}^{n_p} \sigma_i \sigma_j - \gamma_p \sum_{i=1}^{2n_p} \sigma_i - \gamma_s \sum_{i=1}^{n_s} \sigma_i, \tag{3.46}$$

onde n_p representa o número de pares desconexos, n_s o número de spins livres, γ_p é o parâmetro variacional relacionado aos pares e γ_s o parâmetro variacional relacionado aos spins livres. Note que agora temos dois parâmetros variacionais, devido aos dois

blocos diferentes de spins. A função de partição é então composta pelo produto

$$Z_0 = \left[\sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta J\sigma_i\sigma_j+\beta\gamma_p(\sigma_i+\sigma_j)}\right]^{n_p}\left[\sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta\gamma_s\sigma_i}\right]^{n_s}, \tag{3.47}$$

e a respectiva energia livre (por partícula)

$$f_0 = -\left(\frac{n_p}{2N}\right)k_BT\ln Z_p - \left(\frac{n_s}{N}\right)k_BT\ln Z_s. \tag{3.48}$$

Note que as funções de partição de um spin Z_s e de um par de spins Z_p são as mesmas calculadas anteriormente (eqs. (3.5) e (3.35), respectivamente), bem como as magnetizações m_s e m_p (eqs. (3.14) e (3.37), respectivamente). Sendo assim, temos

$$\langle\mathcal{H}-\mathcal{H}_0\rangle_0 = -J\left(\frac{Nc}{2}-n_p\right)\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0 - 2n_p(H-\gamma_p)\langle\sigma_i\rangle_0 - n_s(H-\gamma_s)\langle\sigma_i\rangle_0. \tag{3.49}$$

Vamos agora supor que:

i) as magnetizações de um spin e de um par de spins sejam iguais, de forma a manter a simetria translacional da rede, isto é $m_s = m_p = m$;

*i*i) o número de pares desconexos seja igual a $n_p = Nc/2$ (esta última relação é justificada através de uma expansão da energia livre em altas temperaturas - veja, referência, [11]).

Dessa forma obtemos, para $H = 0$

$$\langle\mathcal{H}-\mathcal{H}_0\rangle_0 = Nc\gamma_p m - (c-1)N\gamma_s m. \tag{3.50}$$

Assim, a equação para ϕ é

$$\phi = -ck_BT\ln Z_p - (1-c)k_BT\ln Z_s + c\gamma_p m - (c-1)\gamma_s m. \tag{3.51}$$

Derivando-se ϕ com relação aos parâmetros variacionais e igualando a zero, chega-se na seguinte relação (na verdade, a relação abaixo é obtida ao se minimizar tanto com relação a γ_s quanto com relação a γ_p)

$$c\gamma_p = (c-1)\gamma_s. \tag{3.52}$$

A magnetização aproximada é portanto obtida através da equação acima, juntamente com a relação

$$m_p = \frac{e^{\beta J}\sinh\beta\gamma_p}{2e^{-\beta J}+2e^{\beta J}\cosh\beta\gamma_p} = m_s = \frac{\sinh\beta\gamma_s}{\cosh\beta\gamma_s} = m. \tag{3.53}$$

A temperatura crítica pode ser obtida, como nos casos anteriores, através de uma expansão em primeira ordem para $m,\ m_s,\ m_p,\ \gamma_s,\ \gamma_p$ pequenos, isto é

$$m_s = \beta\gamma_s \tag{3.54}$$

e

$$m_p = \frac{e^{\beta J}\beta\gamma_p}{2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J}}. \tag{3.55}$$

Usando agora as relação entre γ_s e γ_p e $m_p = m_s$, chegamos a seguinte equação

$$e^{\beta J} = \frac{c}{c-1}(e^{\beta J} + e^{-\beta J}), \tag{3.56}$$

que pode ser simplicada como

$$\frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{c}{c-2}\right). \tag{3.57}$$

Embora neste caso a temperatura crítica esteja mais próxima do valor correto, quando comparada ao valores das seções anteriores (como veremos abaixo), os expoentes críticos serão de campo médio, assim como em qualquer aproximação via princípio variacional de Bogoliubov. Um fato interessante na equação acima é que ela fornece agora o resultado exato para $c = 2$, isto é, o modelo unidimensional não apresenta transição de fase para temperaturas finitas.

3.1.4 Comparação das diversas aproximações para o caso $\mathbf{S = 1/2}$

A tabela abaixo mostra os resultados obtidos usando as três aproximações discutidas acima, para o caso $S = 1/2$. Os resultados são dados na variável adimensional $k_B T_c/J$. Enquanto os expoentes críticos são todos de campo médio, as respectivas temperaturas de transição melhoram ao se considerar blocos de spins cada vez maiores. Como é de se esperar, notamos que os valores de $k_B T_c/J$ aproximam-se dos valores exatos, quando disponíveis, ou de aproximações mais elaboradas, como simulações numéricas de Monte Carlo. Ênfase deve ser dada a aproximação de pares mais spins livres, onde se obtem a temperatura crítica exata para o modelo unidimensional.

Tabela 1 – Valores da temperatura crítica adimensional k_BT_c/J obtidos para $S = 1/2$ e vários valores do número de coordenação c, via aproximação de campo médio, utilizando spins livres, pares de spins, e spins livres mais pares de spins. Os resultados de simulações de Monte Carlo são da referência [12].

coordenação	**aproximação**	k_BT_c/J
2	livres	2
	pares	$1,5643$
	livres +pares	0
	exato	0
4	livres	4
	pares	3,7763
	livres+pares	2,8853
	exato	2,2691
6	livres	6
	pares	5,8469
	livres+pares	4,9326
	simulações	4,512 [12]

3.2 Caso $\mathbf{S = 1}$

3.2.1 Aproximação de spins livres

Nesta seção o hamiltoniano tentativa é dado por

$$\mathcal{H}_0 = -\gamma \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \tag{3.58}$$

que é idêntico ao primeiro caso, mas os possíveis valores de spin são agora $\sigma_i = 0, \pm 1$.

Seguindo o mesmo raciocínio descrito nas seções anteriores, consideramos a independência de cada spin da rede, sendo assim a função de partição para um sítio é dada por

$$Z_s = 1 + 2\cosh\beta\gamma. \tag{3.59}$$

Segue que a função de partição do hamiltoniano tentativa é escrita como

$$Z_0 = \left(1 + 2\cosh\beta\gamma\right)^N, \tag{3.60}$$

e a respectiva energia livre de Helmholtz associada é

$$F_0 = -Nk_BT\ln\left(1 + 2\cosh\beta\gamma\right), \tag{3.61}$$

bem como a energia livre de Helmoltz por spin

$$f_0 = -k_B T \ln\left(1 + 2\cosh\beta\gamma\right). \tag{3.62}$$

A magnetização média correspondente para um spin é dada por

$$m_s = -\frac{\partial f_0}{\partial \gamma} \tag{3.63}$$

e, neste caso, econtramos

$$m_s = \frac{2\sinh\beta\gamma}{1 + 2\cosh\beta\gamma}. \tag{3.64}$$

Por outro lado, temos

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -JN\frac{c}{2}\langle\sigma_i\rangle_0\langle\sigma_j\rangle_0 - (H - \gamma)N\langle\sigma_i\rangle_0, \tag{3.65}$$

de modo que podemos escrever ϕ como sendo

$$\phi = -k_B T \ln\left(1 + 2\cosh\beta\gamma\right) - \frac{c}{2}Jm_s^2 - (H - \gamma)m_s. \tag{3.66}$$

Derivando esta última equação com relação a γ, e igualando a zero, temos, da mesma forma que anteriormente

$$\gamma = Jmc + H, \tag{3.67}$$

onde a magnetização aproximada é dada por $m = m_s$ com o valor do parâmetro variacional γ acima.
Substituindo este valor encontrado do parâmetro γ na equação para a magnetização média por spin, m_s, obtemos

$$m = \frac{2\sin\beta(Jmc + H)}{1 + 2\cosh\beta(Jmc + H)}, \tag{3.68}$$

que nos fornece a magnetização do modelo em função da temperatura.
Para temperaturas próximas à T_c e $H = 0$, a magnetização é próxima de zero. Podemos então expandir a equação acima para m pequeno, considerando apenas o primeiro termo

$$m \approx \frac{2\beta Jmc}{1 + 2}, \tag{3.69}$$

que pode ser escrita como

$$\frac{Jc}{k_B T_c} = \frac{3}{2}. \tag{3.70}$$

Temos então que

$$\frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{3}c. \tag{3.71}$$

Considerando o próximo termo na expansão de m, temos

$$m \approx \frac{2\beta_c Jmc + \dfrac{(\beta_c Jmc)^3}{3}}{1 + 2\left[1 + \dfrac{(\beta_c Jmc)^2}{2}\right]}. \tag{3.72}$$

Ainda é possível reduzir esta última equação à

$$m \approx \left[\frac{T}{T_c}\right]^{\frac{3}{2}} \sqrt{\left[\frac{3(T_c - T)}{T}\right]}. \tag{3.73}$$

Notamos mais uma vez, neste caso, que o expoente crítico associado à magnetização espontânea é de campo médio.

3.2.2 Aproximação de pares de spins

Nesta seção vamos considerar novamente o caso em que os spins são tomados aos pares, sendo a função de partição do hamiltoniano tentativa dada pela função de partição relativa a um par, elevada ao número de pares

$$Z_0 = (Z_p)^{\frac{N}{2}}, \tag{3.74}$$

recordando que, para um par, a função de partição é dada por

$$Z_p = \sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} \exp \beta[J\sigma_i\sigma_j + \gamma(\sigma_i + \sigma_j)]. \tag{3.75}$$

Explicitamente, para o caso de spin-1, os valores possíveis são: $(0,0)$; $(0,+1)$; $(0,-1)$; $(+1,0)$; $(+1,+1)$; $(+1,-1)$; $(-1,0)$; $(-1,+1)$; $(-1,-1)$, num total de 9 estados. A função de partição pode então ser escrita como

$$\begin{aligned} Z_p &= 1 + e^{\beta\gamma} + e^{-\beta\gamma} + e^{\beta\gamma} + e^{\beta(J+2\gamma)} + e^{-\beta J} + e^{-\beta\gamma} + e^{-\beta J} + \\ &+ e^{\beta(J-2\gamma)}, \end{aligned} \tag{3.76}$$

de modo que resulta-nos

$$Z_p = 1 + 2e^{-\beta J} + 4\cosh(\beta\gamma) + 2e^{\beta J}\cosh(2\beta\gamma). \tag{3.77}$$

A energia livre para o par é então

$$f = -k_B T \ln Z_p, \tag{3.78}$$

e a correspontente magnetização para um spin do par, em função do campo e da temperatura, é

$$m = \frac{2\sinh(\beta\gamma) + 2e^{\beta J}\sinh(2\beta\gamma)}{1 + 2e^{-\beta J} + 4\cosh(\beta\gamma) + 2e^{\beta J}\cosh(2\beta\gamma)}. \tag{3.79}$$

Seguindo o mesmo procedimento feito para spin-1/2 obtemos

$$\phi = -k_B T \ln Z_p - \frac{JN(c-1)m^2}{2} - (H-\gamma)m, \tag{3.80}$$

cuja derivada em relação a γ resulta em

$$\begin{aligned}\frac{\partial\phi}{\partial\gamma} = & \left\{\frac{-k_B T[4\sinh\gamma\beta]\beta + [2\sinh 2\beta\gamma e^{J\beta}]2\beta}{2[1 + 2e^{J\beta} + 4\cosh\gamma\beta + 2e^{J\beta}\cosh 2\beta\gamma]}\right\} \\ & - \left\{\left[\frac{(c-1)Jm}{2}\right]\frac{\partial m}{\partial\gamma} + m + (H-\gamma)\frac{\partial m}{\partial\gamma}\right\},\end{aligned} \tag{3.81}$$

e tomando $H = 0$ nesta última equação sobra

$$\frac{\partial\phi}{\partial\gamma} = m - \left[(c-1)Jm\frac{\partial m}{\partial\gamma} + m + \gamma\frac{\partial m}{\partial\gamma}\right], \tag{3.82}$$

donde concluímos que

$$\left[\frac{(c-1)Jm}{2}\right]\frac{\partial m}{\partial\gamma} - \gamma\frac{\partial m}{\partial\gamma} = 0, \tag{3.83}$$

ou ainda

$$\left[\frac{(c-1)Jm}{2} - \gamma\right]\frac{\partial m}{\partial\gamma} = 0, \tag{3.84}$$

resultando, assim

$$\frac{(c-1)Jm}{2} - \gamma = 0, \tag{3.85}$$

ou

$$\gamma = J(c-1)\frac{m}{2}. \tag{3.86}$$

Como a magnetização média é próxima de zero nas vizinhanças da temperatura de transição, podemos expandir a equação para a magnetização em função de γ e, tomando apenas o primeiro termo

$$m = \frac{2(\beta\gamma) + 2e^{\beta J}(2\beta\gamma)}{1 + 2e^{-\beta J} + 4 + 2e^{\beta J}}, \tag{3.87}$$

e substituindo o resultado obtido para γ nesta seção, notamos que

$$m = \frac{\beta(c-1)Jm + 2e^{\beta J}\beta(c-1)Jm}{5 + 4\cosh\beta J}. \tag{3.88}$$

Podemos ainda escrever esta última equação de maneira diferente

$$5 + 4\cosh\beta_c J = 2\beta_c J(c-1)(2e^{\beta_c J} + 1). \tag{3.89}$$

A relação acima nos fornece a temperatura de transição em função do número de coordenação c. Embora não possa ser resolvida analiticamente, utilizamos novamente o método de Newton-Raphson para encontrar os valores aproximados das temperaturas críticas, como será mostrado posteriormente.

3.2.3 Aproximação de spins livres mais pares de spins

Nesta seção consideraremos, mais uma vez, o caso em que o hamiltoniano tentativa é composto por uma mistura de spins livres e pares de spins, sendo o mesmo escrito como

$$\mathcal{H}_0 = -J\sum_{pares}^{n_p}\sigma_i\sigma_j - \gamma_p\sum_{i=1}^{2n_p}\sigma_i + \gamma_s\sum_{i=1}^{n_s}\sigma_i. \tag{3.90}$$

Da mesma forma que para o caso anterior, podemos considerar a função de partição como sendo o produto da função de partição de um par Z_p, elevada ao número total de pares de spins desconexos n_p, com a função de partição de um spin livre Z_s, elevada ao número total de spins livres n_s, da seguinte forma

$$Z = [1+2e^{-\beta J}+4\cosh\beta(\gamma_p+\gamma_p)+2e^{\beta J}\cosh 2\beta(\gamma_p+\gamma_p)]^{n_p}[1+2\cosh\beta(\gamma_s)]^{n_s}, \tag{3.91}$$

onde Z_s e Z_p são dados pelas eqs. (3.59) e (3.77), respectivamente, e γ_p e γ_s são os respectivos parâmetros variacionais relacionados a pares de spins e spins livres. Então, a energia livre de Helmholtz, por partícula, associada a este hamiltoniano é composta por duas parcelas

$$f_0 = f_s + f_p, \tag{3.92}$$

onde f_s representa a energia livre por spin livre

$$f_s = -\left(\frac{n_s}{N}\right) k_B T \ln[1 + 2\cosh\beta(\gamma_s + \gamma_s)], \tag{3.93}$$

e f_p representa a energia livre por spin pertencente a um par

$$f_p = -\left(\frac{2n_p}{N}\right) k_B T \ln[1+4\cosh\beta(\gamma_s + \gamma_p)+2e^{-\beta J}+2e^{\beta J}\cosh 2\beta(\gamma_s + \gamma_p)]. \tag{3.94}$$

Segue então que as respectivas magnetizações são

$$m_s = \frac{2\sinh\beta(\gamma_s + H)}{1 + 2\cosh\beta(\gamma_s + H)}, \tag{3.95}$$

para um spin livre, e

$$m_p = \frac{4\sinh\beta(\gamma_p + H) + 4e^{\beta J}\sinh 2\beta(\gamma_p + H)}{1 + 4\cosh\beta(\gamma_p + H) + 2e^{-\beta J} + 2e^{\beta J}\cosh 2\beta(\gamma_p + H)}, \tag{3.96}$$

para um par de spins desconexo.

Da mesma forma que nas seções anteriores, agora é preciso calcular a seguinte expressão

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0 = \quad & -J\sum_{\langle i,j\rangle}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0 - H\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i\rangle_0 \\ & +J\sum_{pares}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0 + (\gamma_p + \gamma_s)\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i\rangle_0,\end{aligned} \tag{3.97}$$

que pode então ser escrita de forma mais simplificada como

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0 = -J\sum_{p.r.}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0 - [(H - \gamma_p) + (H - \gamma_s)]\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i\rangle_0. \tag{3.98}$$

Considerando $m_p = m_s = m$, encontramos o seguinte resultado

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0 = -2n_p(H - \gamma_p)m + n_s(H - \gamma_s)m. \tag{3.99}$$

Assim, temos a seguinte relação para ϕ

$$\phi = \left\{-\left(\frac{n_p}{N}\right) k_B T \ln[1+4\cosh\beta(\gamma_p+H)+2e^{-\beta J}+2e^{\beta J}\cosh 2\beta(\gamma_p+H)]\right\} - \left\{\left(\frac{n_s}{N}\right) k_B T \ln[1+2\cosh\beta(\gamma_s+H)] - \left(\frac{2n_p}{N}\right)(H-\gamma_p)m - \left(\frac{n_s}{N}\right)(H-\gamma_s)m\right\}. \quad (3.100)$$

Para minimizar ϕ com relação aos parâmetros externos, vamos executar a seguir o cálculo de $\frac{\partial\phi}{\partial\gamma_s}$

$$\frac{\partial\phi}{\partial\gamma_s} = -\left(\frac{n_s}{N}\right)\frac{2\sinh\beta(\gamma_p+H)}{1+2\cosh\beta(\gamma_p+H)} - \left(\frac{n_s}{N}\right)(H-\gamma_s)\frac{\partial m}{\partial\gamma_s} + \quad (3.101)$$
$$+\left(\frac{n_s}{N}\right)m - \left(\frac{2n_p}{N}\right)(H-\gamma_p)\frac{\partial m}{\partial\gamma_s} = 0,$$

que ainda pode ser escrita como

$$\frac{\partial\phi}{\partial\gamma_s} = \left[-\frac{n_s}{N}(H-\gamma_s) - \frac{2n_p}{N}(H-\gamma_p)\right]\frac{\partial m}{\partial\gamma_s} = 0. \quad (3.102)$$

Considerando que $n_p = \frac{Nc}{2}$ e que $n_s = (N-2n_p)$, ficamos com $n_s = N(1-c)$. Substituindo estas duas últimas relações na equação acima ficamos com

$$\frac{\partial\phi}{\partial\gamma_s} = \left[-\frac{N(1-c)}{N}(h-\gamma_s) - c(H-\gamma_p)\right]\frac{\partial m}{\partial\gamma_s} = 0 \quad (3.103)$$

e, para $H = 0$ temos

$$(1-c)\gamma_s + c\gamma_p = 0, \quad (3.104)$$

o que resulta em

$$\gamma_p = \frac{(c-1)\gamma_s}{c}. \quad (3.105)$$

Como consideramos a magnetização média de um spin pertencente a um par desconexo como sendo igual à magnetização de um spin livre, isto é

$$\frac{2\sinh\beta(\gamma_p+H)+2e^{\beta J}\sinh 2\beta(\gamma_p+H)}{1+4\cosh\beta(\gamma_p+H)+2e^{-\beta J}+2e^{\beta J}\cosh 2\beta(\gamma_p+H)} = \frac{2\sinh\beta(\gamma_s+H)}{1+2\cosh\beta(\gamma_s+H)}, \quad (3.106)$$

podemos aproximar esta última equação para campo nulo ($H = 0$) e, nas condições que $\gamma_p \approx 0$, $\gamma_s \approx 0$, obtemos

$$\frac{2\beta\gamma_p + 2e^{\beta J}2\beta\gamma_p}{1+4+2e^{-\beta J}+2e^{\beta J}} = \frac{2\beta\gamma_s}{1+2}. \quad (3.107)$$

Utilizando agora a relação entre γ_s e γ_p, chegamos a

$$\frac{2\beta\left[\frac{(c-1)\gamma_s}{c}\right]+2e^{\beta J}2\beta\left[\frac{(c-1)\gamma_s}{c}\right]}{1+4+2e^{-\beta J}+2e^{\beta J}}=\frac{2\beta\gamma_s}{1+2}, \tag{3.108}$$

ou ainda

$$3(1+2e^{\beta J})\left(\frac{c-1}{c}\right)=5+4\cosh\beta J, \tag{3.109}$$

de maneira que,

$$\left[6\left(\frac{c-1}{c}\right)-2\right]e^{2\beta J}+\left[3\left(\frac{c-1}{c}\right)-5\right]e^{\beta J}-2=0. \tag{3.110}$$

Esta última equação pode ser escrita da seguinte forma

$$e^{\beta_c J}=\frac{\left\{5-\left[3\left(\frac{c-1}{c}\right)\right]\right\}\pm\sqrt{\left\{5-\left[3\left(\frac{c-1}{c}\right)\right]\right\}^2+8\left\{\left[6\left(\frac{c-1}{c}\right)-2\right]\right\}}}{2\left[6\left(\frac{c-1}{c}\right)-2\right]}. \tag{3.111}$$

A partir da equação acima podemos, para cada valor do número de coordenação, achar os valores aproximados de temperatura crítica. Esses resultados para spin 1 serão discutidos na próxima seção.

3.2.4 Comparação das diversas aproximações para o caso $\mathbf{S = 1}$

Na tabela a seguir estão dispostos os valores de temperatura de transição, na verdade $k_B T_c/J$, encontrados via aproximações com blocos de spins livres, blocos de pares de spin e, por fim, com a mistura de spins livres mais pares de spins. Notamos que, conforme consideramos blocos cada vez maiores no hamiltoniano tentativa, os valores de temperatura se aproximam mais dos valores exatos ou de simulações de Monte Carlo.

Convém salientarmos que nesse caso não se obtem o resultado exato em uma dimensão, como ocorreu no caso de spin-1/2. A razão está na utilização de somente um parâmetro variacional nos hamiltonianos de spin simples e de pares de spin. Como veremos no próximo capítulo, ao se utilizar dois parâmetros variacionais em cada hamiltoniano, isto é, um parâmetro extra na componente do spin ao quadrado, encontramos o resultado exato para a temperatura crítica do modelo unidimensional.

Tabela 2 – Valores da temperatura crítica adimensional $k_B T_c/J$ obtidos para $S = 1$ e vários valores do número de coordenação c, via aproximação de campo médio, utilizando spins livres, pares de spins, e spins livres mais pares de spins. Os resultados de séries para o caso bidimensional são da referência [13], enquanto que para o caso tridimensional cúbico são da referência [14].

coordenação	**aproximação**	$k_B T_c/J$
2	livres	$1,3333$
	pares	$1,1053$
	livres +pares	0,7213
	exato	0
4	livres	2,6666
	pares	2,5515
	livres+pares	2,1276
	séries	1,693 [13]
6	livres	4
	pares	3,9217
	livres+pares	3,4760
	séries	3,196 [14]

4 Modelo de Blume-Capel - Estudo pelo Método Variacional de Bogoliubov

O hamiltoniano para o modelo de Blume-Capel já foi discutido anteriormente e, por completeza, está novamente descrito abaixo

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i + \Delta \sum_{i=1}^{N} {\sigma_i}^2, \tag{4.1}$$

onde a primeira somatória representa a interação entre primeiros vizinhos, a segunda representa a ação do campo magnético externo sobre os spins e a última somatória representa o termo de anisotropia. Consideraremos aqui spin $S = 1$, de modo que $\sigma_i = 0, \pm 1$.

Como no modelo de Ising do capítulo anterior, utilizaremos os hamiltonianos constituídos por blocos de um spin, que gera a aproximação de campo médio usual; por blocos de pares spins e, por fim, um hamiltoniano com blocos de um e de dois spins, simultaneamente. Em todos estes três casos, será aplicada a aproximação baseada na desigualdade de Bogoliubov.

4.1 Aproximação de spins livres

Como no capítulo anterior, escolhemos um hamiltoniano $\mathcal{H}_0$ composto de spins livres, que no presente caso pode ser escrito da seguinte maneira

$$\mathcal{H}_0 = -\gamma \sum_{i=1}^{N} \sigma_i + \Delta \sum_{i=1}^{N} {\sigma_i}^2, \tag{4.2}$$

onde estamos agora levando em conta a interação com o campo cristalino no próprio hamiltoniano tentativa.

A função de partição é dada por

$$Z_0 = \left(\sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta\gamma\sigma_i - \beta\Delta{\sigma_i}^2} \right)^N, \tag{4.3}$$

e como $\sigma_i = 0, \pm 1$ temos

$$Z_0 = \left(1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh\beta\gamma\right)^N. \tag{4.4}$$

A função energia livre por spin do hamiltoniano tentativa é dada por

$$f_0 = -kT\ln\left(1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh\beta\gamma\right), \tag{4.5}$$

e a magnetização correspondente por

$$m = \frac{2e^{-\beta\Delta}\sinh\beta\gamma}{1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh\beta\gamma}. \tag{4.6}$$

De maneira similar aos casos descritos nas seções do capítulo anterior, podemos escrever

$$\langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0 = -J\frac{Nc}{2}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0 - (H - \gamma)N\langle\sigma_i\rangle_0, \tag{4.7}$$

ou ainda,

$$\langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_0\rangle_0 = -Jc\frac{N}{2}m^2 - (H - \gamma)Nm. \tag{4.8}$$

Com base nestes resultados, a funcão ϕ é escrita como

$$\phi = -kT\ln\left(1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh\beta\gamma\right) - Jc\frac{1}{2}m^2 - (H - \gamma)m. \tag{4.9}$$

Derivando ϕ com relação a γ encontramos

$$\frac{\partial\phi}{\partial\gamma} = -m - Jcm\frac{\partial m}{\partial\gamma} - (H - \gamma)\frac{\partial m}{\partial\gamma} + m = 0, \tag{4.10}$$

de onde resulta

$$\gamma = Jcm + H. \tag{4.11}$$

A partir deste resultado, a magnetização espontânea pode ser escrita como

$$m = \frac{2e^{-\beta\Delta}\sinh(\beta Jcm)}{1 + 2e^{-\beta\Delta}\cosh(\beta Jcm)}. \tag{4.12}$$

Considerando que próximo à T_c a magnetização é muito próxima de zero, podemos expandir esta última equação da seguinte forma

$$m = \frac{2e^{-\beta\Delta}\beta Jcm}{1 + 2e^{-\beta\Delta}}, \tag{4.13}$$

e obtemos então a expressão para a temperatura crítica

$$1 + 2e^{-\beta_c \Delta} = 2e^{-\beta_c \Delta}\beta_c Jc, \tag{4.14}$$

através da qual se tem a transição dependendo do valor de c e do valor do campo cristalino. Esses valores devem ser obtidos numericamente e serão discutidos mais abaixo quando da comparação com as outras aproximações.

Considerando agora o próximo termo da expansão

$$m = \frac{2e^{-\beta\Delta}\left[\beta Jcm + \frac{1}{6}(\beta Jcm)^3\right]}{1 + 2e^{-\beta\Delta}\left[1 + \frac{1}{2}(\beta Jcm)^2\right]}, \tag{4.15}$$

vemos que ela pode ser escrita como

$$m = \sqrt{\left[\frac{2\beta Jc - (2 + e^{-\beta\Delta})}{\frac{1}{2}(\beta Jc)^2 - \frac{1}{3}(\beta Jc)^3}\right]}, \tag{4.16}$$

resultando, mais uma vez, na obtenção de um expoente crítico de campo médio para a magnetização, isto é, $\beta = 1/2$. O mesmo ocorre para as outras grandezas termodinâmicas.

4.2 Aproximação de pares de spins

Consideraremos, nesta seção, um hamiltoniano tentativa de blocos de pares de spins, cuja expressão é dada por

$$\mathcal{H}_0 = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - \gamma\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \Delta\sum_{i=1}^{N}{\sigma_i}^2, \tag{4.17}$$

e a correspondente função de partição é dada por

$$Z_p = \sum_{\{\sigma_i,\sigma_j\}} e^{\beta J\sigma_i\sigma_j + \beta\gamma(\sigma_i+\sigma_j) + \beta\Delta(\sigma_i^2+\sigma_j^2)}, \tag{4.18}$$

a qual resulta em

$$Z_p = 1 + 2e^{\beta J - 2\beta\Delta}\cosh 2\beta\gamma + 4e^{-\beta\Delta}\cosh\beta\gamma + 2e^{-\beta J - 2\beta\Delta}. \tag{4.19}$$

A partir desta última equação podemos obter a energia livre de Helmholtz por partícula

$$f_0 = -\frac{n_p}{N}\ln[1 + 2e^{\beta J - 2\beta\Delta}\cosh 2\beta\gamma + 4e^{-\beta\Delta}\cosh\beta\gamma + 2e^{-\beta J - 2\beta\Delta}]. \tag{4.20}$$

A fim de obter ϕ iremos calcular a média

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -J(c-1)\frac{N}{2}\langle \sigma_i \sigma_l \rangle_0 - (H-\gamma)N\langle \sigma_i \rangle_0, \tag{4.21}$$

que pode ser escrita como

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -J(c-1)\frac{N}{2}m^2 - (H-\gamma)Nm. \tag{4.22}$$

Assim, ϕ pode ser escrito como

$$\phi = -kT\frac{n_p}{N}\ln Z_0 - (c-1)\frac{J}{2}m^2 - (H-\gamma)m. \tag{4.23}$$

Derivando ϕ com relação a γ e igualando a zero,

$$\frac{\partial \phi}{\partial \gamma} = -m - [J(c-1)m - (H-\gamma)]\frac{\partial m}{\partial \gamma} + m = 0, \tag{4.24}$$

resulta que

$$\gamma = J(c-1)m + H. \tag{4.25}$$

A magnetização espontânea é então

$$m = \frac{2e^{-\beta\Delta}\sinh \beta J(c-1)m + 2e^{-2\beta\Delta+\beta J}\sinh 2\beta J(c-1)m}{1 + 2e^{-\beta J - 2\beta\Delta} + 4e^{-\beta\Delta}\cosh \beta J(c-1)m + 2e^{\beta J - 2\beta\Delta}\cosh 2\beta J(c-1)m}. \tag{4.26}$$

Como feito anteriormente, podemos expandir a equação para a magnetização perto de T_c

$$m \approx \frac{2e^{-\beta\Delta}\beta J(c-1)m + 2e^{-2\beta\Delta+\beta J}2\beta J(c-1)m}{1 + 2e^{-\beta J - 2\beta\Delta} + 4e^{-\beta\Delta} + 2e^{\beta J - 2\beta\Delta}}. \tag{4.27}$$

Esta última equação pode ser rearranjada da seguinte forma

$$1 + 4e^{-2\beta_c\Delta}\cosh \beta_c J + 4e^{-\beta_c\Delta} = 2\beta_c J(c-1)[e^{-\beta_c\Delta} + 2e^{-2\beta_c\Delta+\beta_c J}], \tag{4.28}$$

de onde se obtem a temperatura de transição em função do campo cristalino para vários valores de c. Novamente, os resultados obtidos da equação acima serão comparados com as outras aproximações abaixo.

4.3 Aproximação de spins livres mais pares de spins

Como feito no modelo de Ising, iremos considerar, neste caso, um hamiltoniano tentativa composto por uma parcela que representa os pares e outra que representa os spins livres, da seguinte forma

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{pares} \mathcal{H}_0^p + \sum_{livres} \mathcal{H}_0^s, \tag{4.29}$$

de maneira que

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0(\gamma_s, \gamma_p, \delta_s, \delta_p), \tag{4.30}$$

onde, além dos parâmetros γ_s e γ_p, são introduzidos agora os parâmetros adicionais δ_s, δ_p, como veremos a seguir. A inclusão dos parâmetros extras δ_s e δ_p é necessária para que se obtenha o resultado exato, pelo menos, em uma dimensão [15, 16].
No caso do hamiltoniano para um spin livre temos

$$\mathcal{H}_0^s = -\gamma_s \sigma_i + \Delta \sigma_i^2 + \delta_s \sigma_i^2 \tag{4.31}$$

e para um par de spins

$$\mathcal{H}_0^p = -J\sigma_i\sigma_j - \gamma_p(\sigma_i + \sigma_j) + (\Delta + \gamma_p)(\sigma_i^2 + \sigma_j^2), \tag{4.32}$$

onde os parâmetros adicionais δ_s, δ_p estão acoplados aos campos cristalinos.
A função de partição pode ser escrita como um produto da função de partição para um spin livre elevada ao número de spins livres, n_s, com a função de partição de um par elevada ao número de pares de spin, n_p. Com base nas duas seções anteriores, podemos concluir que a função de partição para um spin livre é

$$Z_0^s = 1 + 2\cosh \beta\gamma_s e^{-\beta(\Delta+\delta_s)}, \tag{4.33}$$

e para um par de spins,

$$Z_0^p = 1 + 2e^{-\beta J - 2\beta(\Delta+\delta_p)} + 4e^{\beta(\Delta+\delta_p)} \cosh \beta\gamma_p + 2e^{\beta[J-2(\Delta+\delta_p)]} \cosh 2\beta\gamma_p. \tag{4.34}$$

As correspondentes magnetizações são

$$m_s = \frac{2\sinh \beta\gamma_s e^{-\beta(\Delta+\delta_s)}}{1 + 2\cosh \beta\gamma_s e^{-\beta(\Delta+\delta_s)}} \tag{4.35}$$

e

$$m_p = \frac{4e^{\beta(\Delta+\delta_p)}\sinh\beta\gamma_p + 4e^{\beta[J-2(\Delta+\delta_p)]}\sinh 2\beta\gamma_p}{1+2e^{-\beta J-2\beta(\Delta+\delta_p)}+4e^{\beta(\Delta+\delta_p)}\cosh\beta\gamma_p+2e^{\beta[J-2(\Delta+\delta_p)]}\cosh 2\beta\gamma_p}, \quad (4.36)$$

e o valor médio $\langle\mathcal{H}-\mathcal{H}_0\rangle_0$ se torna

$$\langle\mathcal{H}-\mathcal{H}_0\rangle_0 = -J(c-1)\frac{N}{2}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0-(H-\gamma_s)n_s\langle\sigma_i\rangle_0-(H-\gamma_p)n_p\langle\sigma_i\rangle_0-\delta_s n_s\langle\sigma_i^2\rangle_0-\delta_p n_p\langle\sigma_i^2\rangle_0.$$

Por simplificação iremos considera $n_p = \frac{N}{2}c$ e $n_s = N(1-c)$ [11], de modo que,

$$\langle\mathcal{H}-\mathcal{H}_0\rangle_0 = -n_s[(H-\gamma_s)\langle\sigma_i\rangle_0+\delta_s\langle\sigma_i^2\rangle_0]-n_p[(H-\gamma_p)\langle\sigma_i\rangle_0+\delta_p\langle\sigma_i^2\rangle_0]. \quad (4.37)$$

Neste caso, ainda são necessários considerar as seguintes quantidades, $\langle\sigma_i^2\rangle_s = q_s$ e $\langle\sigma_i^2\rangle_p = q_p$, de modo que temos

$$q_s = \frac{2e^{\beta(\delta_s-\Delta)}\cosh\beta\gamma_s}{1+2e^{-\beta(\Delta+\delta_s)}\cosh\beta\gamma_s}, \quad (4.38)$$

e

$$q_p = \frac{2e^{-\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+2e^{\beta(\delta_p+\Delta)}\cosh\beta\gamma_p+2e^{\beta J+2\beta(\delta_p+\Delta)}\cosh 2\beta\gamma_p}{1+2e^{-\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+4e^{\beta(\Delta+\delta_p)}\cosh\beta\gamma_p+2e^{\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}\cosh 2\beta\gamma_p}, \quad (4.39)$$

que nos dão os valores médios do quadrado dos spins. Além disso, devido a simetria translacional, vamos considerar também que $q_s = q_p = q$. Com base nisto, e nas duas últimas equações, podemos escrever

$$\langle\mathcal{H}-\mathcal{H}_0\rangle_0 = -N(1-c)[(H-\gamma_s)m+\delta_s q]-Nc[(H-\gamma_p)m+\delta_p q]. \quad (4.40)$$

Podemos então construir a função $\phi(\gamma_s,\gamma_p,\delta_s,\delta_p)$ e realizar a sua minimização com relação aos parâmetros variacionais. Notamos, entretanto, que as minimizações com relação aos parâmetros γ_s e δ_s conduzem aos mesmos resultados da minimização com relação aos parâmetros γ_p e δ_p. Além do mais, os resultados finais são idênticos aos obtidos para o caso do modelo de Ising usual no que se refere aos parâmetros γ_s e γ_p, inclusive para os novos parâmetros δ_s e δ_p, a saber

$$c\gamma_p = (c-1)\gamma_s \quad (4.41)$$

e

$$c\delta_p = (c-1)\delta_s. \quad (4.42)$$

Como em todos os casos anteriores, próximo à T_c, as equações para m_s, q_s,m_p e q_p podem ser expandidas. Desta maneira temos

$$m_s = \frac{2\beta\gamma_s e^{-\beta(\Delta+\delta_s)}}{1+2\cosh\beta\gamma_s e^{-\beta(\Delta+\delta_s)}}, \tag{4.43}$$

$$q_s = \frac{2e^{\beta(\delta_s-\Delta)}}{1+2e^{-\beta(\Delta+\delta_s)}\cosh\beta\gamma_s}, \tag{4.44}$$

$$m_p = \frac{4e^{\beta(\Delta+\delta_p)}\beta\gamma_p + 4e^{\beta[J-2(\Delta+\delta_p)]}2\beta\gamma_p}{1+2e^{-\beta J-2\beta(\Delta+\delta_p)}+4e^{\beta(\Delta+\delta_p)}\cosh\beta\gamma_p+2e^{\beta[J-2(\Delta+\delta_p)]}\cosh 2\beta\gamma_p} \tag{4.45}$$

e, por fim

$$q_p = \frac{2e^{-\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+2e^{\beta(\delta_p+\Delta)}+2e^{\beta J+2\beta(\delta_p+\Delta)}}{1+2e^{-\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+4e^{\beta(\Delta+\delta_p)}\cosh\beta\gamma_p+2e^{\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}\cosh 2\beta\gamma_p}. \tag{4.46}$$

Usando agora que $m_s = m_p$ e $q_s = q_p$, juntamente com as relações de minimização (4.41) e (4.42), chegamos a

$$c\left[\frac{e^{\beta(\delta_s-\Delta)}}{1+2e^{\beta(\delta_s-\Delta)}}\right] = (c-1)\left[\frac{e^{\beta(\delta_p-\Delta)}+2e^{\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}}{1+2e^{-\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+2e^{\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+4e^{\beta(\delta_p-\Delta)}}\right], \tag{4.47}$$

e

$$\frac{e^{\beta(\delta_s-\Delta)}}{1+2e^{\beta(\delta_s-\Delta)}} = \frac{e^{-\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+e^{\beta(\delta_p-\Delta)}+e^{\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}}{1+2e^{-\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+2e^{\beta J+2\beta(\delta_p-\Delta)}+4e^{\beta(\delta_p-\Delta)}}. \tag{4.48}$$

A temperatura de transição é então obtida através da solução das duas equações acima, mais a relação (4.42), para cada valor escolhido de c e do campo cristalino Δ. No entanto, estas duas últimas equações acopladas podem ser manipuladas de maneira a se obter uma única equação envolvendo somente um dos parâmetros

$$c = (c-1)\left[\frac{1+2e^{\beta J+\beta(\delta_p-\Delta)}}{1+e^{\beta J+\beta(\delta_p-\Delta)}+e^{-\beta J+\beta(\delta_p-\Delta)}}\right]. \tag{4.49}$$

Definindo-se agora $e^{\beta(\delta_p-\Delta)} = a$, temos

$$c = (c-1)\left[\frac{1+2e^{\beta J}a}{1+a(e^{\beta J}+e^{-\beta J})}\right] \tag{4.50}$$

e, com um pouco de cálculo, é possível mostrar que

$$a = \frac{1}{(c-2)e^{\beta J}-ce^{-\beta J}}. \tag{4.51}$$

Introduzindo agora o valor acima na eq. (4.47) ou eq. (4.48), e usando a relação entre os parâmetros variacionais (4.41) e (4.42) obtemos uma equação única de onde se tem a temperatura de transição. Por exemplo, utilizando-se a eq. (4.48), que não contém explicitamente c, obtemos

$$\frac{(ae^{\beta_c\Delta})^{\frac{c}{c-1}}e^{-\beta_c\Delta}}{1+2(ae^{\beta_c\Delta})^{\frac{c}{c-1}}e^{-\beta_c\Delta}} = \frac{e^{-\beta_c J}a^2+a+e^{\beta_c J}a^2}{1+2e^{-\beta_c J}a^2+2e^{\beta_c J}a^2+4a}, \tag{4.52}$$

a qual nos dá a temperatura de transição em função do número de coordenação c e do campo cristalino Δ.

Notamos, em particular, que $a = e^{\beta(\delta_p-\Delta)} > 0$. Portanto, podemos concluir que no caso do modelo unidimensional, $c = 2$, não temos uma transição de fase a temperaturas finitas pois, de acordo com a eq. (4.51), a é negativo. Uma comparação dos resultados obtidos da equação acima com as aproximações de spins livres e pares de spins é apresentada na próxima seção para os casos da rede bidimensional quadrada ($c = 4$) e, em três dimensões, para a rede cúbica simples ($c = 6$).

4.4 Comparação das diversas aproximações para o modelo de Blume-Capel

A Tabela 3.1 ilustra os valores obtidos para o presente modelo quando o campo cristalino tende a $-\infty$. Os resultados para diferentes valores de Δ são apresentados nos gráficos das figuras a seguir.

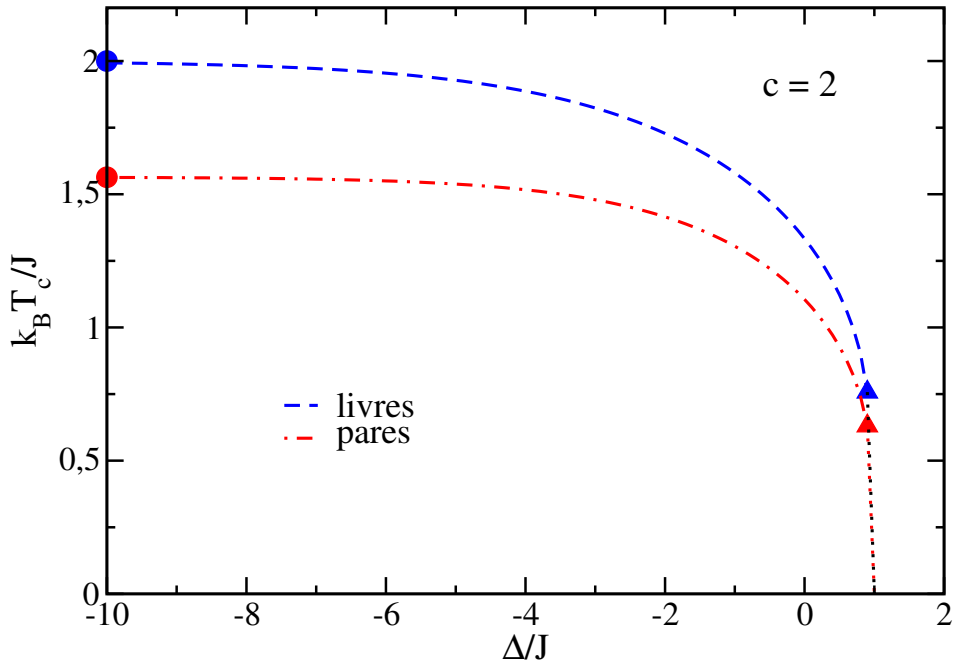


Figura 3 – Temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J$ em função do campo cristalino reduzido Δ/J do modelo de Blume-Capel unidimensional ($c = 2$) de acordo com a aproximação de spins livres (linha tracejada) e pares de spins (linha traço-ponto). Os pontos para $\Delta = -10$ correspondem ao valor da temperatura crítica reduzida do modelo de Ising de spin-1/2 retirados da tabela 3.1, enquanto que os triângulos são os correspondentes pontos tricríticos de acordo com cada aproximação. As linhas pontilhadas representam as transições de primeira ordem que seguem do ponto tricrítico e terminam no ponto $\Delta/J = 1$ para $T_c = 0$.

A Figura 3 mostra a temperatura crítica reduzida, isto é, $k_B T_c/J$, em função do campo cristalino reduzido Δ/J, para o modelo em uma dimensão ($c = 2$), de acordo com as aproximações de spins livres e pares de spins, eqs. (4.14) e (4.28), respectivamente. Essa figura é simplesmente ilustrativa, pois o resultado exato não apresenta transição de fases a temperaturas finitas para qualquer que seja o valor do

campo cristalino. A aproximação de spins livres mais pares de spins reproduz esse resultado exato. Entretanto, notamos que a aproximação de pares tem temperatura de transição menor que a de spins livres, indo em direção ao resultado exato. Notamos, também, que no limite de campo cristalino indo a $-\infty$, recuperamos o resultado correspondente do modelo de Ising de spin-1/2, como esperado.

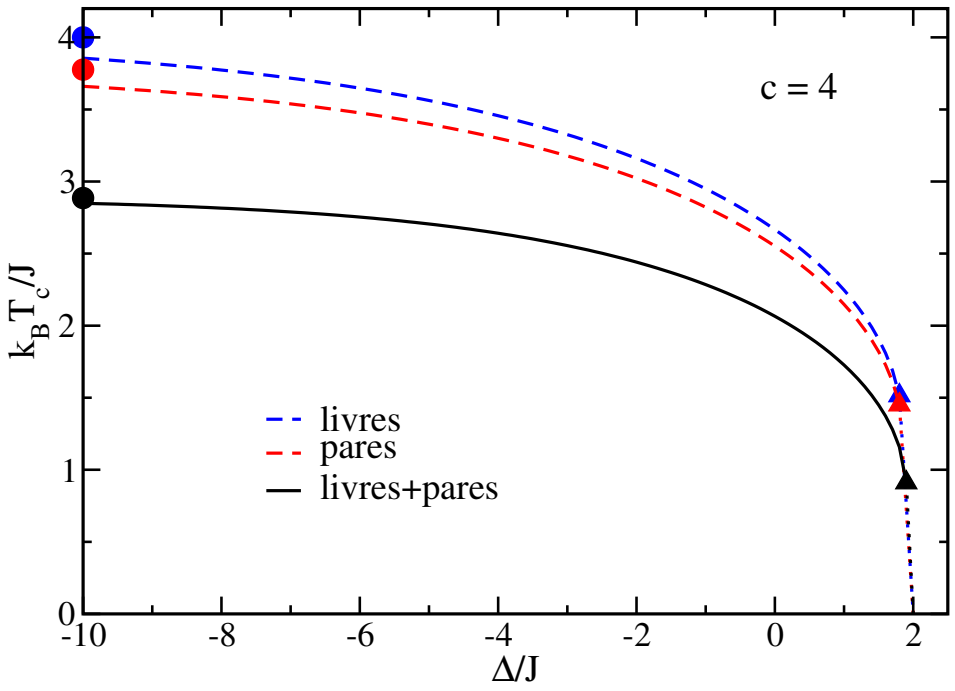


Figura 4 – Temperatura crítica reduzida $k_B T_c/J$ em função do campo cristalino reduzido Δ/J do modelo de Blume-Capel bidimensional ($c = 4$) de acordo com a aproximação de spins livres (linha tracejada), pares de spins (linha traço-ponto), e spins livres mais pares de spins (linha contínua). Os pontos para $\Delta = -10$ correspondem ao valor da temperatura crítica reduzida do modelo de Ising de spin-1/2 retirados da tabela 3.1, enquanto que os triângulos são os correspondentes pontos tricríticos de acordo com cada aproximação. As linhas pontilhadas representam as transições de primeira ordem que seguem do ponto tricrítico e terminam no ponto $\Delta/J = 2$ para $T_c = 0$.

A Figura 4 mostra os resultados da temperatura crítica reduzida em função do campo cristalino reduzido para o modelo em duas dimensões ($c = 4$). Nesse caso, além das aproximações de spins livres e pares de spins, eqs. (4.14) e (4.28), respectivamente, temos também o resultado da equação (4.52), a qual leva em conta spins livres mais pares de spins. Fica claro nessa figura que, a medida que se aumenta

as interações no hamiltoniano tentativa $\mathcal{H}_0$, melhores resultados são obtidos, pois as temperaturas de transição possuem uma diminuição sistemática. Podemos, também, observar que a aproximação de spins livres mais pares de spins, sem um aumento expressivo de esforço analítico, ou mesmo computacional, produz resultados bem melhores que as aproximações de spins livres ou pares de spins, separadas. Todas as três aproximações tendem ao valor correspondente do modelo de Ising de spin-1/2 quando o campo cristalino tende a menos infinito.

Os resultados para o caso tridimensional na rede cúbica simples estão ilustrados na Figura 5. À parte dos valores numéricos das temperaturas de transição e campos cristalinos, os mesmos comentários realizados anteriormente para o caso da rede bidimensional são aqui válidos.

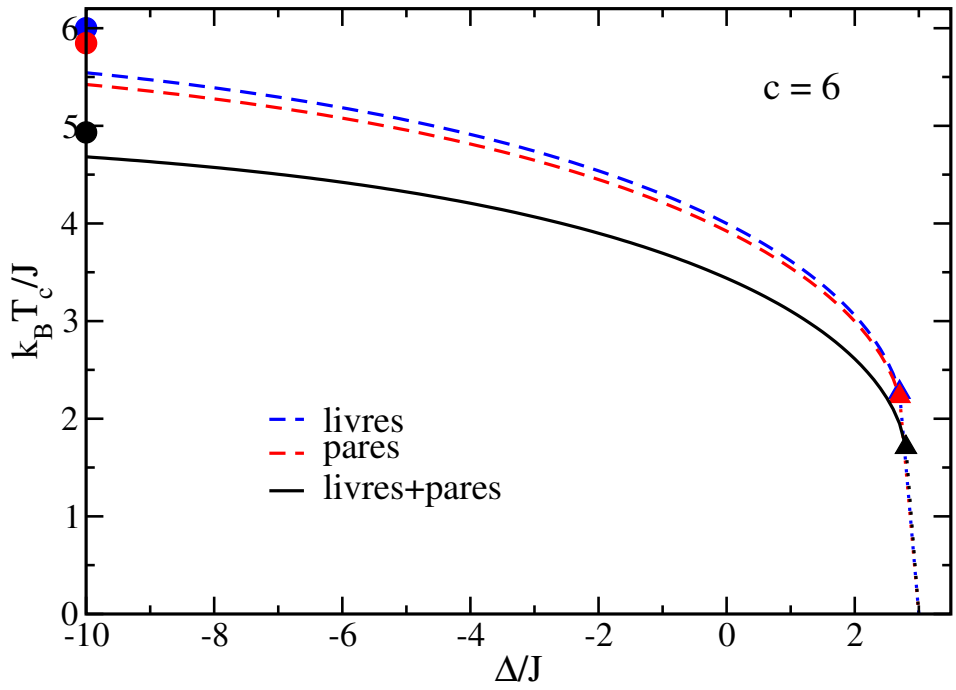


Figura 5 – O mesmo que a Figura 4 para o caso tridimensional na rede cúbica simples ($c = 6$).

A aproximação aqui desenvolvida, com dois parâmetros em cada parte do hamiltoniano tentativa, é na verdade bem melhor do que a aproximação ao se utilizar somente um parâmetro variacional. Isso pode ser constatado ao se analisar a Tabela 4.1, que mostra os resultados para $\Delta = 0$, em comparação com os obtidos no capítulo anterior. Vemos claramente uma temperatura de transição sistematicamente menor

para cada valor de c, incluindo o valor exato no caso unidimensional.

Tabela 3 – Valores da temperatura crítica adimensional k_BT_c/J obtidos para o modelo de Blume-Capel com $S = 1$ e campo cristalino nulo ($\Delta = 0$) para vários valores do número de coordenação c, utilizando spins livres mais pares de spins, considerando um e dois parâmetros variacionais em cada parte do hamiltoniano tentativa. Os resultados de séries para o caso bidimensional são da referência [13], enquanto que para o caso tridimensional cúbico são da referência [14].

coordenação	**livres mais pares**	k_BT_c/J
2	um parâmetro	0,7213
	dois parâmetros	0
	exato	0
4	um parâmetro	2,1276
	dois parâmetros	2,0654
	séries	1,693 [13]
6	um parâmetro	3,4760
	dois parâmetros	3.4391
	séries	3,196 [14]

Antes de encerrar esse capítulo, dois comentários adicionais são necessários. O primeiro se relaciona com o comportamento do modelo em $T = 0$. Nesse caso, os spins podem estar alinhados todos no estado $S_i = +1$, ou todos no estado $S_i = -1$. Em ambos os casos a energia livre por spin é dada por

$$f_{\pm} = -cJ/2 + \Delta. \tag{4.53}$$

Por outro lado, eles podem estar também todos no estado $S_i = 0$, de forma que a energia livre é dada por

$$f_0 = 0. \tag{4.54}$$

Quando as duas energias forem iguais, teremos a coexistência de três fases, e isso ocorre quando

$$f_{\pm} = -cJ/2 + \Delta = 0. \tag{4.55}$$

A equação acima resulta no valor $\Delta = cJ/2$, que é um resultado exato. As figuras 3, 4 e 5 ilustram esse comportamento a temperatura nula.

Finalmente, um comentário quanto as linhas de primeira ordem presentes nos diagramas de fases desse modelo. As linhas pontilhadas nas Figuras 3, 4 e 5 foram traçadas, simplesmente, de modo a conectar o ponto tricrítico ao ponto $T_c = 0$ para $\Delta/J = c/2$, com a finalidade de dar somente uma visualização completa do diagrama de fases. Entretanto, essa linha pode ser determinada numericamente através da obtenção da magnetização e, quando várias soluções são encontradas, a solução estável será aquela que possuir o menor valor da nergia livre de Helmholtz f (veja, por exemplo, referências [8, 15, 16]).

5 Conclusões

Neste trabalho, estudamos os modelos de Ising, nos casos de spin $S = 1/2$ e $S = 1$, e de Blume-Capel, para o caso $S = 1$. Em todas as análises utilizamos como ferramenta de investigação o método aproximativo baseado no princípio variacional de Bogoliubov, aplicado a casos clássicos.

Primeiramente, consideramos o modelo de Ising, para o qual usamos três tipos diferentes de hamiltonianos tentativa que, progressivamente, incluem mais interações entre primeiros vizinhos. São estes os três tipos: spins livres; pares de spins; e uma mistura de spins livres mais pares de spins. Obtivemos a temperatura crítica para todas as aproximações nos modelos em uma, duas e três dimensões. Elas foram comparadas entre si, bem como com os resultados exatos ou com resultados provenientes de outros tipos aproximações mais sofisticadas. Observamos que, conforme melhoramos o hamiltoniano tentativa de modo a levar em conta mais interações, nos aproximamos do valor correto da temperatura de transição, inclusive, obtendo o valor correto para T_c no modelo unidimensional. Por outro lado, devido a própria limitação do método empregado, sempre obtemos expoentes críticos de campo médio.

Em seguida, analisamos o modelo de Blume-Capel, considerando os mesmos hamiltonianos tentativa citados anteriormente. Para cada hamiltoniano tentativa obtivemos a equação para a temperatura crítica, que agora, além da dimensionalidade da rede, depende também do campo cristalino. Assim, temos para cada rede considerada, uma linha de transição de segunda ordem em função do campo cristalino Δ. Essa linha termina num ponto trícrito, e se estende indefinidamente para valores de Δ negativos, sendo que para Δ tendendo a $-\infty$ recaímos no modelo de Ising de spin-1/2. Nesse caso, notamos também que as aproximações melhoram a medida que se aumenta as interações no hamiltoniano tentativa.

Tendo em vista o que foi descrito acima, como objeto de futuras investigações, podemos pensar em considerar hamiltonianos tentativa que levem em conta blocos de spins maiores, por exemplo, triângulos e plaquetas quadradas para os casos das redes bidimensionais triangular e quadrada, respectivamente. Isso faz com que o método possa distinguir a topologia da rede. Certamente, estaremos melhorando os valores da

temperatura de transição. Podemos ainda aplicar o método a outros modelos clássicos, além dos de Ising e Blume-Capel, os quais ainda não possuam soluções analíticas exatas, bem como em modelos quânticos, uma vez que a desigualdade de Bogoliubov é também satisfeita nesse contexto.

6 Referências

1. H. Eugene Stanley, *I*ntroduction to phase transition and critical phenomena, Oxford University Press (Oxford 1971).

2. Sílvio R. A. Salinas, *I*ntrodução à Física Estatística, edusp (São Paulo 2005).

3. Mário José de Oliveira, *T*ermodinâmica, Editora Livraria da Física (São Paulo 2005).

4. David Chandler, *I*ntroduction to modern statistical mechanics, Oxford University Press (New York 1987).

5. D.P. Belanger, *B*raz. J. Phys. **3**0 682 (2000).

6. M. Blume, *P*hys. Rev. **1**41 517 (1966).

7. H.W. Capel, *P*hysica **3**2 966 (1966).

8. J.A. Plascak, J.G. Moreira, and F.C. Sa Barreto, *P*hys. Lett. A **1**73 360 (1993).

9. I.D. Lawrie and S. Sarbach, *T*heory of Tricritical Points , Domb and Lebowitz series of *P*hase transitions and critical phenomena, vol. 9, Academic Press, Nw York (1984).

10. H. Falk, *A*m. J. Phys. **3**8 858 (1970).

11. L. G. Ferreira, S. R. Salinas, and M. J. Oliveira *P*hys. Stat. Sol. (b) **8**3 229 (1977).

12. A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, *P*hys. Rev. B**4**4 5081 (1991).

13. I.G. Enting, A.J. Guttmann and I. Jensen, *J.* Phys. A: Math. Gen.**2**7 6987 (1994).

14. P. Butera and M. Comi, *P*hys. Rev. B**6**5 144431 (2002).

15. D. P. Lara, *E*studo no modelo de Ising de spin $\sigma > 1$. Método, multicriticalidade e aleatoriedade. Tese de Doutorado, UFMG (1996).

16. D. P. Lara e J. A. Plascak, *M*od. Phys. Lett. B**1**0 1067 (1996).