

Universidade Federal de Santa Catarina
Programa de Pós-Graduação em Física

DINÂMICA DO MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO COM SPINS MISTOS $\sigma = 1/2$ E $S = 1$.

Dissertação

Submetida ao Curso de Pós-Graduação em Física

da Universidade Federal de Santa Catarina

para obtenção do grau de

MESTRE EM FÍSICA

Maurício Godoy

Florianópolis, Julho de 1999

DINÂMICA DO MODELO DE ISING FERROMAGNÉTICO COM SPINS MISTOS $\sigma = 1/2$ E $S = 1$.

Maurício Godoy

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de

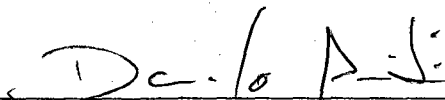
MESTRE EM FÍSICA

especialidade Física Teórica e aprovada em sua forma final pelo programa de

Pós-Graduação.

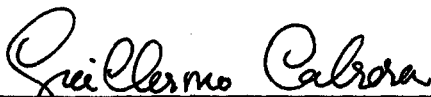


Prof. Dr. Wagner Figueiredo
(Orientador)



Prof. Dr. Danilo de Paiva Almeida
(Coordenador)

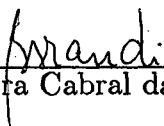
Banca examinadora



Prof. Dr. Guillermo Cabrera Oyarzún



Prof. Dr. Márcio Santos



Prof. Dra. Bartira Cabral da Silveira Grandi

Índice

Resumo	viii
Abstract	ix
1 Introdução	1
1.1 Sistemas fora do equilíbrio	1
1.1.1 Competição entre dois processos estocásticos	3
1.2 Sobre o modelo	4
1.3 Método	6
1.3.1 Equação mestra	6
1.3.2 Aproximação de campo médio	7
1.3.3 Aproximação de pares	8
2 Dinâmica de Glauber para o modelo de Ising com spins mistos ferro-	
magnético	10
2.1 Introdução	10
2.2 Estatística dependente do tempo para o modelo de Ising com spins σ e S	
diferentes.	11
2.2.1 Spin livre ($\sigma = 1/2$)	11
2.2.2 Probabilidade para um sistema de N spins ($\sigma = 1/2$)	13
2.2.3 Spin livre ($S = 1$)	15
2.2.4 Probabilidade para um sistema de N spins ($S = 1$)	19
2.2.5 Par de spins $\sigma = 1/2$ e $S = 1$	22
2.3 O modelo	24
2.3.1 Equação de movimento para a magnetização de sub-rede σ	25

2.3.2	Equação de movimento para a magnetização de sub-rede S	27
2.3.3	Equação de movimento para a função de correlação σS	29
2.4	Aproximação de campo médio	33
2.5	Aproximação de pares	35
2.6	Determinação das equações de movimento	38
3	Dinâmicas competitivas no modelo de Ising misto ferromagnético	46
3.1	Introdução	46
3.2	Equação de movimento para a magnetização de sub-rede σ	47
3.3	Equação de movimento para a magnetização de sub-rede S	50
3.4	Equação de movimento para a função de correlação de spins σ e S	51
3.5	Competição entre os dois processos dinâmicos	54
3.5.1	Estados estacionários: diagrama de fases	55
4	Conclusões	61
A	Expressões para os valores médios da aproximação de pares.	63
	Bibliografia	69

“A verdadeira lógica deste mundo está no cálculo de probabilidades ”

James Clerk Maxwell

“Right at the start we have to make a statement which you are certainly familiar with. But is necessary to repeat it again and again. It is that science does not try to explain, nor searches for interpretation but primarily constructs models. A model is a mathematical construction, which supplemented with some verbal explanation, describes the observed phenomena. Such a mathematical construction is proved if and only if it works, that is it describes precisely a wide range of phenomena. Furthermore it has to satisfy certain aesthetic criteria, i. e. it has to be more or less simple compared to the described phenomena. ”

J. Von Neumann

A meus pais, a minha avó Odette M. Höller
e *in memoriam* do meu avô Walter Höller

Agradecimentos

Agradeço em primeiro lugar a minha mãe Edla Höller Godoy e a minha avó Odette Machado Höller, pela grande contribuição que deram a minha formação tanto durante o período de graduação, sendo que neste me acompanharam de perto, quanto durante o mestrado. A meu pai Geraldo Godoy Filho pelo seu incentivo e ajuda durante estes anos.

Em especial ao prof. Dr. Wagner Figueiredo, por ter me aceito como seu orientando, e por ter me dado o privilégio de trabalhar ao seu lado, onde me beneficiei muito com suas discussões e experiência tanto em física como pessoal, e em outros assuntos que tivemos durante estes anos.

Aos profs. Dr. Alberto S. Arruda e Msc. Gilberto Haas, por terem me convencido a vir para Florianópolis e em especial para trabalhar com o Wagner.

Ao prof. Dr. Ronald Dickman, por muitas discussões que tivemos principalmente na parte final deste trabalho.

Ao Gilberto Hönicke, por sua ajuda e explicações sobre programação em fortran e sobre o uso do latex.

Ao meu primo Kurt R. Höller, por sua hospedagem e acolhimento em sua casa, e a sua esposa Dalila Sumar pelo seu tratamento carinhoso, e também a seu filho Guilherme Sumar meu companheiro de quarto durante um certo tempo e das noitadas.

Aos amigos e colegas de sala Altamiro Q. Schervenski, Carlos R. da Silveira, Fábio L.

Veiga, Márcio A. Fiori, pelo prazer de trabalhar ao lado deles, pelas discussões relacionadas tanto a física quanto à vida, pelo companherismo, pela divisão e ajuda na soluções de problemas particulares e por todo o apoio que me deram ao longo destes anos na difícil realização desta dissertação.

A todos os outros colegas da pós graduação que conviveram comigo durante a realização deste trabalho.

Aos funcionários da secretaria da Pós-Graduação Telma, Sônia, Malvina, por estarem sempre a disposição para me auxiliar e orientar quando necessário.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro dado a este trabalho.

E por último o meu agradecimento a todas as pessoas que direta ou indiretamente tenham contribuído para a realização deste trabalho e que por ato involuntario eu não as tenha citado.

Resumo

Neste trabalho estudamos os estados estacionários de um modelo de Ising cinético ferromagnético com spins mistos $\sigma = 1/2$ e $S = 1$. Para uma melhor compreensão do modelo estudamos inicialmente o problema para um único spin σ ou S em contato com um banho térmico. Em seguida, consideramos o modelo de Ising com spins mistos em duas sub-redes, e determinamos a evolução temporal para a probabilidade dos estados do sistema. Utilizamos duas taxas de transição que competem entre si: uma associada ao processo de Glauber que descreve a relaxação do sistema através da mudança de estado de um único spin em cada instante, e outra, associada à mudança simultânea de estado de um par de spins vizinhos mais próximos, que simula a absorção de energia pelo sistema. Utilizando a aproximação de pares dinâmica, determinamos a evolução temporal das magnetizações de sub-rede e das funções de correlação entre primeiros vizinhos. Encontramos o diagrama de fases para os estados estacionários do modelo, e mostramos que ele exibe duas linhas de transição de fases contínuas: uma separando as fases ferrimagnética e paramagnética, e outra separando as fases paramagnética e antiferrimagnética.

Abstract

In this work we have studied the stationary states of a kinetic Ising model with mixed $\sigma = 1/2$ and $S = 1$ Ising spins with ferromagnetic interactions. For a better understanding of the model we first considered the σ and S single spin problem in a heat bath. Next, we considered the mixed spin Ising model in two sublattices and we found the time evolution for the probability of the states of the system. We employed two transition rates which compete themselves: one associated with the Glauber process, which describes the relaxation of system through a single spin flip in a unit of time, and the other, associated with the simultaneous flipping of a pair of neighbor spins, which simulates the input of energy into the system. Using the dynamical pair approximation, we determined the equations of motion for the sublattice magnetizations and for the correlation functions between first neighbors. We found the phase diagram for the stationary states of the model, and we have shown that it exhibits two continuous transition lines: one line, between the ferrimagnetic and paramagnetic phases, and the other, between the paramagnetic and antiferrimagnetic phases.

Capítulo 1

Introdução

Nesta dissertação estudamos um modelo de Ising numa rede com spins mistos fora do equilíbrio termodinâmico. Derivamos as propriedades termodinâmicas do sistema para os estados estacionários na aproximação de campo médio e na aproximação de pares dinâmica. A evolução dinâmica do sistema é governada pelo processo estocástico de Glauber [1], onde em cada instante de tempo apenas um spin muda sua orientação devido ao contato do sistema com o banho térmico. No capítulo 2 descreveremos esse processo para spins $\sigma = 1/2$ e $S = 1$.

No capítulo 3 estudaremos uma dinâmica que simula a injeção de energia no sistema: assumiremos que o sistema pode absorver energia toda vez que um par de spins vizinhos mais próximos mude de configuração. Se as dinâmicas que envolvem transições de um e dois spins ao mesmo tempo competem entre si, poderemos observar o interessante fenômeno da auto-organização.

1.1 Sistemas fora do equilíbrio

O estudo de sistemas fora do equilíbrio termodinâmico tem-se mostrado de grande interesse em vários ramos das ciências naturais e até mesmo nas ciências sociais tais como:

Física, Química, Biologia, Economia e Sociologia [2, 3, 4]. Existe uma gama de sistemas fora do equilíbrio termodinâmico que vêm sendo estudados recentemente com o objetivo de descrever vários fenômenos de interesse tais como reações químicas, catálises heterogêneas, dinâmica de populações, processos de ordenamento, etc.. Os sistemas fora do equilíbrio ainda se encontram numa fase de poucas certezas, porque ainda não foi possível desenvolver uma teoria que descreva os fenômenos associados a esses sistemas de uma forma unificada, como ocorre para os sistemas em equilíbrio onde se teve um avanço muito grande usando a teoria de Gibbs.

Um problema crucial para descrever um sistema fora do equilíbrio está no fato de não conhecermos *a priori* a distribuição de probabilidades do estado estacionário, ao contrário dos sistemas em equilíbrio, onde esta é dada pela distribuição de Boltzmann. Um fator primordial na evolução dinâmica para sistemas em equilíbrio está relacionado com o fato de que as taxas de transições obedecem ao princípio da reversibilidade microscópica com respeito a um determinado Hamiltoniano.

Esses sistemas fora do equilíbrio termodinâmico apresentam em geral transições de fases muito parecidas com as transições de fases contínuas observadas nos sistemas em equilíbrio; por isso, também exibem algumas particularidades comuns aos sistemas em equilíbrio como a existência de pelo menos um parâmetro de ordem, correlações de longo alcance, e singularidades caracterizadas por um conjunto de expoentes críticos.

Mesmo assim, ainda existem muitas questões em aberto com relação à natureza das transições de fases em temperaturas finitas nesses sistemas, principalmente quanto à classificação desses sistemas numa classe de *universalidade* como aquela que ocorre com os sistemas em equilíbrio termodinâmico.

No estudo das transições de fases em sistemas fora do equilíbrio termodinâmico são

empregados vários métodos aproximativos e computacionais tais como: teoria de campo médio, aproximação de pares, teoria do grupo de renormalização, expansões em séries e simulações de Monte Carlo, sendo que dentre estes o mais poderoso é aquele que emprega simulações computacionais, embora sempre que possível os métodos analíticos se fazem necessários.

Nesta dissertação empregamos um método analítico que é a aproximação de pares dinâmica no estudo da cinética do modelo de Ising misto. Esse sistema está sujeito a duas dinâmicas, que competem entre si: enquanto uma simula o contato do sistema com um banho térmico à temperatura fixa, através da mudança do estado de um único spin em cada instante de tempo, a outra simula um fluxo de energia sobre o sistema, com a mudança simultânea de dois spins, originando assim uma situação de não equilíbrio.

1.1.1 Competição entre dois processos estocásticos

Vamos agora descrever a evolução dos estados de um sistema quando este está sob a influência de duas dinâmicas que competem entre si, provocando transições estocásticas nesse sistema. Estas transições podem ser devidas ao contato do sistema com um banho térmico a uma temperatura fixa, ou quando este recebe um fluxo de energia que privilegia os seus estados de mais alta energia, provocando assim uma competição entre a tendência de relaxar para os estados de equilíbrio termodinâmico e aquela de aumentar a energia.

A combinação desses dois processos referidos anteriormente obriga o sistema a evoluir para um estado estacionário de não equilíbrio que pode diferir de um estado de equilíbrio.

Tomé e de Oliveira [5] investigaram a competição de duas dinâmicas num modelo de Ising ferromagnético, no qual o sistema é governado por dois processos estocásticos sendo um deles o de Glauber (*spin flip*) [1], que ocorre com probabilidade p , em que os estados do

sistema evoluem no tempo devido à inversão de um único spin de cada vez, em consequência do contato do sistema com um banho térmico a uma temperatura fixa. O outro processo é governado pela dinâmica de Kawasaki (*spin exchange*) [6] em que os estados do sistema evoluem devido à troca entre spins vizinhos antiparalelos, o que simularia um fluxo contínuo de energia sobre o sistema, e que ocorre com probabilidade $(1 - p)$. Eles construíram o diagrama de fases do modelo e observaram o surgimento do fenômeno de auto-organização. Este fenômeno é muito observado e estudado em outros sistemas fora do equilíbrio [2, 3].

Eles mostraram que, se aumentarmos o fluxo de energia para dentro do sistema, ele evoluirá continuamente de um estado ferromagnético para um estado paramagnético, e se continuarmos a aumentar ainda mais o fluxo de energia o sistema se auto-organizará em uma fase antiferromagnética. Investigamos neste trabalho a competição entre duas dinâmicas no modelo de Ising misto ferrimagnético: a primeira delas é similar à citada anteriormente, ou seja, é do tipo de Glauber, que ocorre com probabilidade p , e a segunda é semelhante à usada por Tomé e de Oliveira no estudo de sistemas ferromagnéticos, só que aqui ocorre a mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos, com probabilidade $(1 - p)$. A semelhança se dá porque em ambos os modelos favorecemos a absorção de energia pelo sistema sempre que mudamos simultaneamente um par de vizinhos mais próximos; entretanto, em nosso modelo não haverá conservação do parâmetro de ordem.

1.2 Sobre o modelo

Em 1925 Ising [7] propôs um modelo simples para investigar o ferromagnetismo, obtendo sucesso somente para o modelo em uma dimensão, que não apresenta qualquer transição de fases. Apesar de se tratar de um modelo simples, a sua solução em duas dimensões não é trivial. Em 1944 Onsager [8] obteve a solução exata para o modelo de Ising em

duas dimensões (a campo nulo), sendo este caracterizado por uma transição de fases a temperatura finita. O modelo de Ising em três dimensões não possui solução exata, só podendo ser estudado utilizando métodos aproximativos. A sua simplicidade faz com que este modelo seja muito estudado principalmente na investigação de fenômenos cooperativos.

O estudo da dinâmica deste modelo foi feito por Glauber [1] em 1963, que apresentou uma descrição estocástica para a dinâmica do modelo, ou seja, como este é um modelo que não possui uma dinâmica intrínseca, postulou uma dinâmica que satisfaz o princípio da reversibilidade microscópica para a evolução do sistema em direção aos estados de equilíbrio.

No modelo de Ising temos um conjunto de spins que representa um sistema de partículas interagentes e localizadas nos sítios de uma rede, podendo suas variáveis assumir apenas dois valores. Os valores assumidos por essas variáveis estão associados às possíveis orientações do spin: para cima (+1), e para baixo (-1). Assim, o espaço de estados do sistema de spins é representado de uma forma geral pelo conjunto de 2^N estados $\{\sigma\} \equiv \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$, $\sigma_i = \pm 1$, sendo N o número de pontos da rede. Em alguns casos, permitimos que em cada ponto da rede 3 ou mais estados sejam possíveis, como por exemplo as 3 componentes S^z do spin $S = 1$. Neste caso, representamos o conjunto de 3^N estados possíveis por $\{S\} \equiv \{S_1, S_2, \dots, S_N\}$, $S_i = 0, \pm 1$.

O modelo que estudamos nesta dissertação é o modelo de Ising misto, com interações ferromagnéticas numa rede quadrada. A rede quadrada é dividida em duas sub-redes interpenetrantes, uma ocupada com as variáveis de spin que podem assumir dois valores, e a outra com as variáveis de spins que podem assumir três valores. A sub-rede 1 é constituída apenas de spins $\sigma = 1/2$, cujas componentes são dadas por $\sigma = \pm 1$, e a sub-rede 2 por spins $S = 1$, cujas componentes são dadas por $S = 0, \pm 1$. Os estados deste sistema são representados por $\{\sigma, S\} \equiv \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; S_1, S_2, \dots, S_N\}$, ou seja, por um conjunto de 6^N

estados possíveis.

Este sistema é relevante para o entendimento, por exemplo, de certos bimetálicos moleculares ferrimagnéticos que estão sendo atualmente sintetizados por vários grupos experimentais na procura de um material cristalino estável, com um momento magnético espontâneo em baixas temperaturas [9]. As propriedades magnéticas desse modelo de Ising misto têm sido estudadas por vários métodos, tais como: expansões em séries de altas temperaturas [10, 11], grupo de renormalização [12], teoria efetiva de campo médio [13], simulações de Monte Carlo e cálculo de matriz de transferência [14, 15]. Em todas essas situações apenas os estados de equilíbrio termodinâmico têm sido estudados.

Neste trabalho, vamos estudar alguns aspectos dinâmicos desse sistema, procurando pelos estados estacionários do modelo, obtidos a partir da evolução temporal da distribuição de probabilidade dos estados via equação mestra [16].

1.3 Método

Nesta seção descreveremos o método da equação mestra e as aproximações utilizadas para se resolver o problema.

1.3.1 Equação mestra

A equação mestra [16] descreve a evolução temporal da probabilidade dos estados do sistema, e é essencialmente uma equação de ganho e perda. Ela é escrita na forma

$$\frac{d}{dt}p(\alpha, t) = \sum_{\{\alpha'\}} [-w(\alpha \rightarrow \alpha') p(\alpha, t) + w(\alpha' \rightarrow \alpha) p(\alpha', t)], \quad (1.1)$$

onde $p(\alpha, t)$ é a probabilidade de se encontrar o sistema no estado α no instante t , e $\{\alpha\}$ é o conjunto de todos os estados possíveis do sistema. $w(\alpha \rightarrow \alpha')$ representa a taxa de

transição, ou seja, a probabilidade, por unidade de tempo, de se ter um transição do estado α para o estado α' . A unidade de tempo é tomada como sendo igual a 1. Devemos ter sempre $\sum_{\{\alpha\}} p(\alpha, t) = 1$ e

$$\sum_{\{\alpha\}} w(\alpha \rightarrow \alpha') = \sum_{\{\alpha'\}} w(\alpha \rightarrow \alpha') = 1. \quad (1.2)$$

Para os problemas que envolvem os estados de equilíbrio termodinâmico, o estado estacionário de equilíbrio é encontrado quando o $\lim_{t \rightarrow \infty} p(\alpha, t) = p_{eq}(\alpha)$, obtido impondo-se a condição de balanço detalhado, ou seja, para cada termo da soma na eq. (1.1) teremos que

$$\frac{w(\alpha \rightarrow \alpha')}{w(\alpha' \rightarrow \alpha)} = \frac{p_{eq}(\alpha')}{p_{eq}(\alpha)}, \quad (1.3)$$

sendo $p_{eq}(\alpha)$ a distribuição de equilíbrio de Boltzmann, que depende da temperatura do banho térmico. Em geral, com exceção do modelo de Glauber em uma dimensão, devemos usar métodos aproximados para quebrar a hierarquia de equações derivadas da equação mestra. Neste trabalho utilizamos a aproximação de campo médio e a aproximação de pares.

1.3.2 Aproximação de campo médio

A solução analítica do modelo de Ising bidimensional encontrada por Onsager requer um tratamento matemático bastante sofisticado, e por isso é comum mesmo para sistemas em equilíbrio se utilizar métodos aproximativos para a determinação de algumas propriedades críticas de modelos desse tipo.

A aproximação mais simples utilizada é a aproximação de campo médio. A idéia consiste em isolar um dado spin do sistema e assumir que todos os outros spins atuam como um campo magnético médio que interage com o spin fixado. Esta aproximação exclui os

efeitos de flutuações que se estendem fora do comprimento de escala associado com a célula fixada da rede. O método inclui somente as flutuações que ocorrem na célula fixada, o que na realidade envolve somente uma partícula. O método é bem sucedido em reduzir o problema da mecânica estatística de muitos corpos naquele de um único corpo. Procedimentos deste tipo não são exatos, mas muitas vezes eles podem ser muito úteis. Eles são menos corretos, naturalmente, para sistemas próximos do ponto crítico, onde a cooperatividade nas flutuações se estendem até grandes distâncias. O método é interessante para descrever especialmente propriedades termodinâmicas na região de altas temperaturas, onde se espera que não haja mais correlações entre spins vizinhos mais próximos.

Para melhorar os valores dos acoplamentos críticos existem aproximações de campo médio mais sofisticadas. Estas são feitas quando fixamos mais de um spin, como por exemplo quando fixamos um par de spins vizinhos mais próximos, e consideramos o restante da rede como sendo um campo médio efetivo, que interage com este par. Esta aproximação reduz o problema da mecânica estatística de muitos corpos ao problema de dois corpos, e considera apenas as flutuações locais a nível do par de partículas, mas negligencia as correlações entre spins mais distantes.

No capítulo 2 aplicamos a aproximação de campo médio ao modelo de Ising com spins mistos, e determinamos o comportamento das magnetizações de sub-rede em função da temperatura.

1.3.3 Aproximação de pares

No estudo do modelo de Ising misto cinético utilizamos a aproximação dinâmica de pares, que é uma aproximação melhor que a de campo médio. Na aproximação de campo médio temos que a probabilidade $p(\sigma, t)$ é expressa como um produto das probabilidades de

um único spin $p(\sigma_i, t)$, ou seja, a probabilidade de que o i -ésimo spin assuma o valor σ_i , no instante t , independe dos valores assumidos pelos demais spins da rede. Já na aproximação de pares dinâmica essa probabilidade é expressa em termos das probabilidades de pares de spins vizinhos mais próximos $p(\sigma_i, S_j, t)$, ou seja, a probabilidade de que os spins nos sítios i e j , no instante de tempo t , assumam os valores σ_i e S_j , independentemente dos valores assumidos pelos demais spins da rede. Utilizamos essa aproximação nos capítulos 2 e 3, no cálculo dos valores médios que aparecem nas equações de movimento das magnetizações de sub-redes, e das funções de correlação de pares. Isto nos permitiu determinar o diagrama de fases deste modelo, o qual apresenta duas linhas contínuas de transições fora do equilíbrio: uma entre as fases ferrimagnética e paramagnética, e outra, entre as fases paramagnética e antiferrimagnética.

Capítulo 2

Dinâmica de Glauber para o modelo de Ising com spins mistos ferromagnético

2.1 Introdução

No estudo dinâmico de um sistema, devemos conhecer a forma como ele, partindo de um estado de não equilíbrio, se aproxima do equilíbrio no decorrer do tempo, ao contrário dos sistemas termodinâmicos no equilíbrio. Em geral estes sistemas não possuem uma dinâmica intrínseca, por isso é necessário impô-la de uma forma artificial.

Neste capítulo vamos estudar o comportamento dinâmico de um sistema de Ising misto ferrimagnético. Esse sistema está sujeito a uma dinâmica que simula o contato com um banho térmico a uma dada temperatura, e relaxa através da inversão de um spin por vez. Essa dinâmica é descrita pelo processo estocástico de Glauber, onde o parâmetro de ordem não é conservado.

Para melhor se compreender esse sistema de spins mistos, constituído por spins $\sigma = 1/2$ e $S = 1$, estudamos inicialmente as probabilidades para um único spin $\sigma = 1/2$ e para um

único spin $S = 1$. Em seguida, analisamos o comportamento para o sistema constituído por duas sub-redes interpenetradas de spins σ e S na aproximação de pares dinâmica. Determinamos os estados estacionários do modelo e calculamos a dependência do parâmetro de ordem com a temperatura.

2.2 Estatística dependente do tempo para o modelo de Ising com spins σ e S diferentes.

2.2.1 Spin livre ($\sigma = 1/2$)

Vamos assumir neste modelo a interação de um único spin com um reservatório térmico à temperatura T , na ausência de um campo externo, onde o spin muda aleatoriamente seus valores entre $\sigma = 1$ e $\sigma = -1$, com uma mesma probabilidade de transição por unidade de tempo, de um estado para outro. Como os estados são equiprováveis, devido à ausência de um campo externo, a probabilidade de transição, por unidade de tempo, deve ser a mesma na transição de um estado σ para outro σ' e vice-versa. Vamos chamar esta probabilidade de $\alpha/2$. A probabilidade $p(\sigma, t)$, que é a probabilidade do spin estar no estado σ no instante de tempo t , é obtida utilizando-se a equação mestra [16]:

$$\frac{dp(\sigma, t)}{dt} = -\frac{1}{2}\alpha p(\sigma, t) + \frac{1}{2}\alpha p(-\sigma, t). \quad (2.1)$$

Como $\sigma = \pm 1$ temos um par de equações que descrevem a evolução temporal de cada uma das funções $p(\sigma = \pm 1, t)$, sendo que estas funções devem satisfazer à condição de normalização:

$$p(1, t) + p(-1, t) = 1. \quad (2.2)$$

Por conveniência, vamos escolher a função

$$\begin{aligned} m_1(t) &= p(1, t) - p(-1, t) \\ &= \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma p(\sigma, t), \end{aligned} \quad (2.3)$$

que é o valor esperado do spin em função do tempo, isto é, $\sigma(t)$ é uma função estocástica tendo valores $\sigma = \pm 1$. Assim, temos que

$$m_1(t) = \langle \sigma(t) \rangle. \quad (2.4)$$

Multiplicando-se a eq. (2.1) por σ , e somando-se sobre os valores possíveis de σ , obtemos

$$\frac{dm_1(t)}{dt} = -\alpha m_1(t). \quad (2.5)$$

Esta é uma equação diferencial de primeira ordem de fácil solução. A sua solução é uma exponencial decrescente, com um tempo de relaxação $1/\alpha$, ou seja,

$$m_1(t) = m_1(0) e^{-\alpha t}. \quad (2.6)$$

Das eqs. (2.2) e (2.3) podemos obter as probabilidades individuais $p(\pm 1, t)$:

$$p(1, t) = \frac{1}{2} [1 + m_1(t)], \quad (2.7)$$

$$p(-1, t) = \frac{1}{2} [1 - m_1(t)]. \quad (2.8)$$

Então, podemos escrever de uma forma geral que:

$$p(\sigma, t) = \frac{1}{2} [1 + \sigma m_1(t)]. \quad (2.9)$$

2.2.2 Probabilidade para um sistema de N spins ($\sigma = \pm 1$)

Para um sistema de N spins localizados e interagentes σ_i do tipo Ising ($\sigma = \pm 1$), na ausência de um campo externo, a probabilidade $p(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t)$ de encontrar o sistema de spins no estado $\sigma = \{\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N\}$, no tempo t , pode ser escrita na seguinte forma:

$$p(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t) = \sum_{\{\sigma'\}} \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \dots \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} \dots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} p(\sigma'_1, \dots, \sigma'_i, \dots, \sigma'_N; t), \quad (2.10)$$

onde $\delta_{\sigma_i, \sigma'_i}$ é a função delta de Kronecker que apresenta a seguinte propriedade: é igual a 1 se $\sigma_i = \sigma'_i$ e 0 se $\sigma_i \neq \sigma'_i$. A soma na eq. (2.10) é sobre todos os estados possíveis dos spins $\sigma' = \{\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_N\}$. Os índices nas variáveis de spin denotam posições na rede; assim, i e j indicam os vetores posição \vec{r}_i e \vec{r}_j dos sítios de uma rede cristalina. Introduzindo a representação da função delta de Kronecker $\delta_{\sigma_i, \sigma'_i} = \frac{1}{2}(1 + \sigma_i \sigma'_i)$ na eq. (2.10), obtemos a seguinte identidade:

$$p(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t) = \frac{1}{2^N} \sum_{\{\sigma'\}} (1 + \sigma_1 \sigma'_1) \dots (1 + \sigma_N \sigma'_N) p(\sigma'_1, \dots, \sigma'_i, \dots, \sigma'_N; t). \quad (2.11)$$

Podemos definir algumas funções que representam os valores esperados das variáveis estocásticas $\sigma_i(t)$ em função do tempo. Assim, o valor esperado de $\sigma_i(t)$ é dado por:

$$\begin{aligned} m_i &= \langle \sigma_i(t) \rangle \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i p(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t), \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde a soma é sobre todas as configurações de spins da rede. Também podemos escrever

uma função para o valor esperado do produto dos spins $\sigma_i(t) \sigma_k(t)$:

$$\begin{aligned} r_{ik}(t) &= \langle \sigma_i(t) \sigma_k(t) \rangle \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_k p(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Da mesma forma, podemos definir o valor esperado para os produtos de três, quatro, etc., spins da rede.

A probabilidade, eq. (2.11), pode ser escrita agora como uma expansão geral de seus momentos: das magnetizações e das funções de correlação envolvendo dois até N spins no tempo [1], onde a eq. (2.9) para um único spin é um exemplo trivial da expansão. Logo

$$p(\sigma_1, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N; t) = \frac{1}{2^N} \left\{ 1 + \sum_i \sigma_i m_i(t) + \sum_{i \neq k} \sigma_i \sigma_k r_{ik}(t) + \dots \right\}. \quad (2.14)$$

As probabilidades para um único spin, ou para um dado par de spins, são escritas na seguinte forma:

$$p_i(\sigma_i, t) = \sum_{\{\sigma \neq \sigma_i\}} p(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t), \quad (2.15)$$

$$p_{ik}(\sigma_i, \sigma_k; t) = \sum_{\{\sigma \neq \sigma_i, \sigma_k\}} p(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t), \quad (2.16)$$

onde a soma na eq. (2.15) é feita sobre todas as variáveis de spins exceto para a variável σ_i , e na eq. (2.16) exceto para as variáveis σ_i e σ_k . Se estas somas forem feitas usando-se a eq. (2.14) para $p(\sigma_1, \dots, \sigma_N; t)$ teremos

$$p_i(\sigma_i, t) = \frac{1}{2} [1 + \sigma_i m_i(t)], \quad (2.17)$$

$$p_{ik}(\sigma_i, \sigma_k; t) = \frac{1}{4} [1 + \sigma_i m_i(t) + \sigma_k m_k(t) + \sigma_i \sigma_k r_{ik}(t)]. \quad (2.18)$$

2.2.3 Spin livre ($S = 1$)

Vamos considerar um único spin $S = 1$ na ausência de um campo externo e em contato com um reservatório de calor à temperatura T . Para $S = 1$, as componentes de spin podem assumir os valores 0 e ± 1 . Podem ocorrer as seguintes transições:

$$\left\{ \begin{array}{l} \uparrow \rightleftharpoons \downarrow \\ 0 \rightleftharpoons \uparrow \\ 0 \rightleftharpoons \downarrow \end{array} \right\}.$$

Como não existe um campo externo sendo aplicado, estes três microestados são equiprováveis; então a probabilidade de transição, por unidade de tempo, de um dado estado para outro qualquer deve independe dos estados considerados, e deve ser a mesma para qualquer estado inicial e final. Vamos chamar esta probabilidade de transição de ω .

Devemos achar as equações que determinam a evolução temporal de cada uma das funções $p(S = \pm 1, t)$ e $p(S = 0, t)$, que descrevem a probabilidade de o spin estar no estado S no instante de tempo t . É claro que estas probabilidades devem estar normalizadas, isto é, em qualquer instante de tempo elas devem satisfazer a seguinte relação:

$$p(S = 1, t) + p(S = 0, t) + p(S = -1, t) = 1. \quad (2.19)$$

(i) evolução temporal de $p(S = 1, t)$:

Se o spin estiver inicialmente no estado $S = 1$, então num instante posterior ele pode passar para os estados $S = 0$ ou $S = -1$. Devemos ter uma contribuição de $-2\omega p(S = 1, t)$ para a quantidade $\frac{dp(S=1,t)}{dt}$; mas, inicialmente, o spin pode estar no estado $S = 0$ ou $S = -1$ e sofrer uma transição para o estado $S = 1$ nos dando a contribuição $\omega p(S = 0, t) + \omega p(S = -1, t)$ para a quantidade $\frac{dp(S=1,t)}{dt}$. Obtemos a seguinte equação diferencial, para a

evolução temporal de $p(S = 1, t)$:

$$\frac{dp(S = 1, t)}{dt} = \omega p(S = 0, t) + \omega p(S = -1, t) - 2\omega p(S = 1, t). \quad (2.20)$$

Podemos reescrever esta equação na forma:

$$\begin{aligned} \frac{dp(S = 1, t)}{dt} &= \omega p(S = 0, t) + \omega p(S = -1, t) - 3\omega p(S = 1, t) + \omega p(S = 1, t) \\ &= \omega - 3\omega p(S = 1, t). \end{aligned} \quad (2.21)$$

Observamos que o fator 3 que aparece na eq. (2.21) é justamente $2S+1$, com $S = 1$, que é o número de estados acessíveis. É claro que devemos encontrar $\frac{dp(S=0,t)}{dt} = \omega - 3\omega p(S = 0, t)$ e $\frac{dp(S=-1,t)}{dt} = \omega - 3\omega p(S = -1, t)$.

(ii) evolução temporal de $p(S = 0, t)$:

Da mesma forma, podemos ter o estado inicial sendo $S = 0$, e as transições possíveis são $S = 0 \rightarrow S = \pm 1$ dando uma contribuição da forma $-2\omega p(S = 0, t)$; mas se o estado inicial for um dos $S = \pm 1$ então $\omega p(S = 1, t) + \omega p(S = -1, t)$ contribui para o aumento de $p(S = 0, t)$. Assim:

$$\begin{aligned} \frac{dp(S = 0, t)}{dt} &= \omega p(S = 1, t) + \omega p(S = -1, t) - 2\omega p(S = 0, t) \\ &= \omega [p(S = 1, t) + p(S = 0, t) + p(S = -1, t)] - 3\omega p(S = 0, t), \\ \frac{dp(S = 0, t)}{dt} &= \omega - 3\omega p(S = 0, t), \end{aligned} \quad (2.22)$$

como era de se esperar.

(iii) evolução temporal de $p(S = -1, t)$:

Usando as eqs. (2.19), (2.21) e (2.22), temos:

$$p(S = 1, t) + p(S = 0, t) + p(S = -1, t) = 1,$$

$$\frac{dp(S = -1, t)}{dt} = -\frac{dp(S = 0, t)}{dt} - \frac{dp(S = 1, t)}{dt}, \quad (2.23)$$

logo

$$\frac{dp(S = -1, t)}{dt} = -2\omega + 3\omega [1 - p(S = -1, t)], \quad (2.24)$$

ou

$$\frac{dp(S = -1, t)}{dt} = \omega - 3\omega p(S = -1, t), \quad (2.25)$$

como era esperado.

Então podemos escrever de uma forma geral que

$$\frac{dp(S, t)}{dt} = \omega - 3\omega p(S, t); \quad S = 0, \pm 1, \quad (2.26)$$

ou

$$\frac{dp(S, t)}{dt} + 3\omega p(S, t) = \omega, \quad (2.27)$$

que é uma equação diferencial linear de primeira ordem não-homogênea, fácil de se resolver.

A equação homogênea associada a esta é

$$\frac{dp(S, t)}{dt} + 3\omega p(S, t) = 0, \quad (2.28)$$

cuja solução é

$$p_h(S, t) = p_0(S, t = 0) e^{-3\omega t}. \quad (2.29)$$

Uma solução particular é da forma $p_p(S, t) = cte$,

$$3\omega cte = \omega \Rightarrow cte = \frac{1}{3}.$$

Logo, a solução mais geral é da forma

$$p(S, t) = p_0(S, t=0)e^{-3\omega t} + \frac{1}{3}, \quad (2.30)$$

sendo que $S = 0, \pm 1$.

Se, por exemplo, o spin está inicialmente em $S = 0$, então $p(S = \pm 1, 0) = 0$ e $p(S = 0, 0) = 1$, teremos:

$$0 = p_0(S = 1, 0) + \frac{1}{3} \Rightarrow p_0(S = 1, 0) = -\frac{1}{3}, \quad (2.31)$$

$$0 = p_0(S = -1, 0) + \frac{1}{3} \Rightarrow p_0(S = -1, 0) = -\frac{1}{3}, \quad (2.32)$$

$$1 = p_0(S = 0, 0) + \frac{1}{3} \Rightarrow p_0(S = 0, 0) = \frac{2}{3}, \quad (2.33)$$

e as equações de evolução temporal para as probabilidades são:

$$p(S = 1, t) = -\frac{1}{3}e^{-3\omega t} + \frac{1}{3}, \quad (2.34)$$

$$p(S = 0, t) = \frac{2}{3}e^{-3\omega t} + \frac{1}{3}, \quad (2.35)$$

$$p(S = -1, t) = -\frac{1}{3}e^{-3\omega t} + \frac{1}{3}. \quad (2.36)$$

Podemos ver que

$$\sum_S p(S, t) = 1 + e^{-3\omega t} \left(-\frac{1}{3} - \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \right) = 1, \quad (2.37)$$

como era de se esperar.

Podemos também calcular o valor esperado de S :

$$\begin{aligned}
 \langle S(t) \rangle &= \sum_S S p(S, t) \\
 &= [p(S = 1, 0) + 0p(S = 0, 0) - p(S = -1, 0)] e^{-3\omega t} \\
 &= \langle S(0) \rangle e^{-3\omega t}.
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

2.2.4 Probabilidade para um sistema de N spins ($S = 1$)

Vamos agora considerar um sistema de N spins $S = 1$ localizados e interagentes, cujas componentes são $S = 0, \pm 1$, na ausência de um campo externo. O conjunto de valores $\{S_1, \dots, S_N\}$ designa um possível estado para o sistema, sendo estes estados não são necessariamente equiprováveis, devido às correlações existentes entre os spins.

Consideremos o estado $\{S_1, \dots, S_i, \dots, S_N\}$ que ocorre com probabilidade $p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t)$ no instante de tempo t . Da mesma forma que para os spins $\sigma = \pm 1$, podemos escrever a seguinte equação para a probabilidade:

$$p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t) = \sum_{\{S'\}} \delta_{S_1, S'_1} \dots \delta_{S_i, S'_i} \dots \delta_{S_N, S'_N} p(S'_1, \dots, S'_i, \dots, S'_N; t), \tag{2.39}$$

onde δ_{S_i, S'_i} deve ser igual a um se $S_i = S'_i$ e zero se $S_i \neq S'_i$. Devemos então determinar a função delta de Kronecker para $S = 1$.

Determinação da função δ_{S_i, S'_i}

Para determinarmos esta função devemos expandi-la em séries de potências de S_i e S'_i e calcular os seus respectivos coeficientes. Então, vamos escrevê-la na seguinte forma:

$$\delta_{s_i, s'_i} = \alpha + \beta (S_i + S'_i) + \gamma (S_i^2 + S_i'^2) + \delta (S_i S_i'^2 + S_i' S_i^2)$$

$$+\omega S_i S'_i + \theta (S_i S'_i)^2 + O(S_i^3 + S_i'^3) + O(S_i S'_i)^3 + \dots, \quad (2.40)$$

onde desprezamos na expansão termos de ordem superior ou igual à terceira ordem, porque para qualquer potência ímpar $S_i^{2n+1} = S_i^{2n} S_i = S_i$, e para qualquer potência par $S_i^{2n+2} = S_i^{2n} S_i^2 = S_i^2$.

Portanto, se fizermos $S_i = 0$ e $S'_i = 0, \pm 1$, encontraremos os valores de α, β e γ , ou seja, $\alpha = 1, \beta = 0$ e $\gamma = -1$; assim a função delta fica na forma:

$$\delta_{S_i, S'_i} = 1 - (S_i^2 + S_i'^2) + \delta (S_i S_i'^2 + S_i' S_i^2) + \omega S_i S'_i + \theta (S_i S'_i)^2. \quad (2.41)$$

Considerando-se agora os outros valores de $S_i = \pm 1$ determinamos δ, ω e θ , os quais tomam os seguintes valores: $\delta = 0, \omega = 1/2$ e $\theta = 3/2$, e ficamos finalmente com a expressão:

$$\delta_{S_i, S'_i} = 1 - (S_i^2 + S_i'^2) + \frac{1}{2} S_i S'_i + \frac{3}{2} (S_i S'_i)^2. \quad (2.42)$$

Somando-se sobre todos os valores de S_i e S'_i temos

$$\sum_{S_i, S'_i} \delta_{S_i, S'_i} = 3. \quad (2.43)$$

Então podemos escrever os valores médios das variáveis estocásticas $S_i(t)$ e $S_i^2(t)$ em função do tempo:

$$m_i(t) = \langle S_i(t) \rangle = \sum_{\{S\}} S_i p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t), \quad (2.44)$$

$$q_i(t) = \langle S_i^2(t) \rangle = \sum_{\{S\}} S_i^2 p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t), \quad (2.45)$$

onde as somas são realizadas sobre todas as configurações dos spins.

Da mesma forma podemos calcular as funções de correlação,

$$z_{ik}(t) = \langle S_i(t) S_k(t) \rangle = \sum_{\{S\}} S_i S_k p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t), \quad (2.46)$$

$$q_{ik}(t) = \langle S_i^2(t) S_k^2(t) \rangle = \sum_{\{S\}} S_i^2 S_k^2 p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t). \quad (2.47)$$

Assim, a probabilidade $p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t)$ pode ser escrita como uma expansão em termos das funções de correlação de um, dois, três, etc. spins, ou seja,

$$\begin{aligned} p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t) &= \sum_{\{S'\}} \left\{ \left[1 - S_1^2 - S_1'^2 + \frac{1}{2} S_1 S_1' + \frac{3}{2} S_1^2 S_1'^2 \right] \times \dots \right. \\ &\quad \left. \dots \times \left[1 - S_N^2 - S_N'^2 + \frac{1}{2} S_N S_N' + \frac{3}{2} S_N^2 S_N'^2 \right] \right\} \\ &\quad \times p(S_1', \dots, S_i', \dots, S_N'; t). \end{aligned} \quad (2.48)$$

Expandindo a expressão anterior:

$$\begin{aligned} p(S_1, \dots, S_i, \dots, S_N; t) &= \left\{ 1 - \sum_i S_i^2 + \sum_{i \neq k} S_i^2 S_k^2 - \sum_i q_i(t) + \sum_{i \neq k} q_{ik}(t) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left[\sum_i S_i m_i(t) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} S_i S_k z_{ik}(t) \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} \left[\sum_i S_i^2 q_i(t) + \frac{3}{2} \sum_{i \neq k} S_i^2 S_k^2 q_{ik}(t) \right] + \dots \right\}, \end{aligned} \quad (2.49)$$

onde apenas alguns termos da expansão são exibidos.

Vamos considerar o caso de um único spin, ou seja, $p_i(S_i, t)$. Podemos escrever que

$$p_i(S_i, t) = \sum_{\{S \neq S_i\}} p(S_1, \dots, S_N; t), \quad (2.50)$$

ou ainda,

$$p_i(S_i, t) = \sum_{S_i'} \delta_{S_i, S_i'} p(S_i', t), \quad (2.51)$$

e substituindo a eq. (2.42) na equação acima temos:

$$p_i(S_i, t) = \sum_{S'_i} \left[1 - (S_i^2 + S_i'^2) + \frac{1}{2} S_i S'_i + \frac{3}{2} (S_i S'_i)^2 \right] p(S'_i, t). \quad (2.52)$$

Definindo-se alguns valores esperados, como nas eqs. (2.44) e (2.45), só que agora para um único spin S_i , teremos:

$$m_i(t) = \langle S_i(t) \rangle = \sum_{S_i} S_i p_i(S_i, t), \quad (2.53)$$

e

$$q_i(t) = \langle S_i^2(t) \rangle = \sum_{S_i} S_i^2 p(S_i, t). \quad (2.54)$$

Logo, a eq.(2.52), toma a seguinte forma:

$$p_i(S_i, t) = 1 - S_i^2 + \frac{1}{2} S_i m_i(t) - \left(1 - \frac{3}{2} S_i^2 \right) q_i(t). \quad (2.55)$$

Note que $p_i(S_i, t)$ está normalizada,

$$\sum_{S_i} p_i(S_i, t) = 1. \quad (2.56)$$

2.2.5 Par de spins $\sigma = 1/2$ e $S = 1$

Vamos considerar apenas um par de spins vizinhos $\sigma = 1/2$, com estados $\sigma = \pm 1$, e $S = 1$, com estados $S = 0, \pm 1$. A probabilidade de encontrarmos este par de spins num estado qualquer no instante de tempo t é dada pela seguinte equação:

$$p(\sigma, S; t) = \sum_{\sigma', S'} \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{S, S'} p(\sigma', S'; t), \quad (2.57)$$

onde

$$\delta_{\sigma,\sigma'} = \frac{1}{2} (1 + \sigma\sigma'), \quad (2.58)$$

e

$$\delta_{S,S'} = 1 - (S^2 + S'^2) + \frac{1}{2}SS' + \frac{3}{2}(SS')^2. \quad (2.59)$$

Efetuada-se os produtos que aparecem na eq. (2.57), ficamos com a seguinte expressão para a probabilidade do par (σ, S) no instante t :

$$\begin{aligned} p(\sigma, S; t) = & \frac{1}{2} \left[1 + \sigma \langle \sigma(t) \rangle + \frac{1}{2}S \langle S(t) \rangle - S^2 - \langle S^2(t) \rangle \right. \\ & + \frac{3}{2}S^2 \langle S^2(t) \rangle + \frac{1}{2}\sigma S \langle \sigma(t) S(t) \rangle - \sigma S^2 \langle \sigma(t) \rangle \\ & \left. - \sigma \langle \sigma(t) S^2(t) \rangle + \frac{3}{2}\sigma S^2 \langle \sigma(t) S^2(t) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Esta probabilidade também está normalizada, ou seja, se somarmos sobre todos os estados do sistema, em qualquer instante de tempo, ela satisfaz a seguinte relação:

$$\sum_{\sigma, S} p(\sigma, S; t) = 1. \quad (2.61)$$

Os valores esperados que aparecem na eq. (2.60) têm a seguinte forma:

$$m_1(t) = \langle \sigma(t) \rangle = \sum_{\{\sigma, S\}} \sigma p(\sigma, S; t), \quad (2.62)$$

$$m_2(t) = \langle S(t) \rangle = \sum_{\{\sigma, S\}} S p(\sigma, S; t), \quad (2.63)$$

$$q(t) = \langle S^2(t) \rangle = \sum_{\{\sigma, S\}} S^2 p(\sigma, S; t), \quad (2.64)$$

$$R(t) = \langle \sigma(t) S(t) \rangle = \sum_{\{\sigma, S\}} \sigma S p(\sigma, S; t), \quad (2.65)$$

$$q_1(t) = \langle \sigma(t) S^2(t) \rangle = \sum_{\{\sigma, S\}} \sigma S^2 p(\sigma, S; t). \quad (2.66)$$

Assim, a eq. (2.60) pode ser escrita da seguinte forma:

$$p(\sigma, S; t) = \frac{1}{2} \left[1 + \sigma m_1(t) + \frac{1}{2} S m_2(t) - S^2 - \left(1 - \frac{3}{2} S^2 \right) q(t) + \frac{1}{2} \sigma S R(t) - \sigma S^2 m_1(t) - \sigma \left(1 - \frac{3}{2} S^2 \right) q_1(t) \right]. \quad (2.67)$$

2.3 O modelo

Consideremos um modelo de Ising ferromagnético em uma rede quadrada na ausência de campos externos e descrito pela Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i \sigma_j, \quad (2.68)$$

onde a soma é feita sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos, sendo que S_i pode assumir os valores $(0, \pm 1)$ e σ_j os valores (± 1) . Cada spin S tem somente spins do tipo σ como primeiros vizinhos e vice-versa. O spin S e σ pertencem a duas sub-redes interpenetrantes. J é a constante de troca: se $J > 0$ a interação entre os spins é ferromagnética, e se $J < 0$ a interação entre os spins é do tipo antiferromagnética.

O contato com o banho térmico à temperatura T é simulado pela dinâmica estocástica de Glauber onde ou o spin σ_j ou S_i podem mudar de estado na unidade de tempo.

Para uma dada configuração dos spins $\{\sigma_j\}$, $p(\sigma, t)$ é a probabilidade de se encontrar, no instante de tempo t , os spins $\sigma = \{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ em uma dada configuração. Assim, $W_G(\sigma \rightarrow \sigma')$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de ocorrer uma transição do estado σ para o estado σ' , onde um dos spins σ_i pode mudar o seu estado de σ_i para $-\sigma_i$. Da mesma forma, definimos $W_G(S \rightarrow S')$ como sendo a probabilidade por unidade de tempo de que um dado spin S_i possa mudar o seu estado para outro estado S'_i . Finalmente, vamos supor que $W_G(\sigma \rightarrow \sigma', S \rightarrow S')$ represente a probabilidade por unidade de tempo para um

dado par de spins primeiros vizinhos onde um ou outro spin pode mudar de estado.

2.3.1 Equação de movimento para a magnetização de sub-rede σ

A evolução temporal de $p(\sigma, t)$ é dada pela seguinte equação mestra:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}p(\sigma, t) = & - \sum_{\sigma'} W_G(\sigma \rightarrow \sigma') p(\sigma, t) \\ & + \sum_{\sigma'} W_G(\sigma' \rightarrow \sigma) p(\sigma', t), \end{aligned} \quad (2.69)$$

onde $W_G(\sigma \rightarrow \sigma')$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de ocorrer uma transição do estado σ para o estado σ' no instante t , sendo que todos os spins $\{S_i\}$ da sub-rede S não mudam de valor nesse instante.

Para o processo de Glauber que estamos considerando:

$$W_G(\sigma' \rightarrow \sigma) = \sum_{j=1}^N \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \dots \delta_{\sigma_j, -\sigma'_j} \dots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \omega_j(\sigma'), \quad (2.70)$$

onde $\omega_j(\sigma')$ é a probabilidade por unidade de tempo de se inverter o spin do sítio j , e para a qual adotamos a prescrição de Metropolis [21]

$$\omega_j(\sigma) = \min[1, \exp(-\beta \Delta E_j)], \quad (2.71)$$

sendo ΔE_j a variação na energia do sistema após invertermos o j -ésimo spin, e $\beta = 1/k_B T$.

Utilizando a condição de normalização:

$$\sum_{\sigma'} W_G(\sigma \rightarrow \sigma') = \sum_{\sigma'} W_G(\sigma' \rightarrow \sigma) = 1, \quad (2.72)$$

a eq. (2.69) toma a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}p(\sigma, t) = -p(\sigma, t) + \sum_{\sigma'} \sum_{j=1}^N \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \cdots \delta_{\sigma_j, -\sigma'_j} \cdots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \omega_j(\sigma') p(\sigma', t). \quad (2.73)$$

Fazendo-se a soma sobre σ' no segundo termo da equação acima obtemos

$$\frac{d}{dt}p(\sigma, t) = -p(\sigma, t) + \sum_{j=1}^N \omega_j(\tilde{\sigma}) p(\tilde{\sigma}, t), \quad (2.74)$$

onde $\tilde{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_j, \dots, \sigma_N)$ denota uma configuração de spins igual à configuração σ , com exceção do j -ésimo spin o qual assume o valor $-\sigma_j$ na configuração $\tilde{\sigma}$.

Definimos o valor esperado de uma função qualquer dos spins $A(\sigma)$ como:

$$\langle A(\sigma) \rangle = \sum_{\sigma} A(\sigma) p(\sigma, t). \quad (2.75)$$

Utilizando as eqs. (2.74) e (2.75), podemos determinar a expressão para a evolução temporal de $\langle A(\sigma) \rangle$:

$$\frac{d}{dt} \langle A(\sigma) \rangle = -\langle A(\sigma) \rangle + \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^N A(\sigma) \omega_j(\tilde{\sigma}) p(\tilde{\sigma}, t). \quad (2.76)$$

Podemos reescrever a equação acima mudando a soma no segundo termo da equação de uma soma em σ para uma soma na configuração na qual o j -ésimo spin assume o valor $-\sigma_j$, então:

$$\frac{d}{dt} \langle A(\sigma) \rangle = -\langle A(\sigma) \rangle + \sum_{j=1}^N \langle A(\tilde{\sigma}) \omega_j(\sigma) \rangle. \quad (2.77)$$

Agora vamos escolher $A(\sigma) = \sigma_k$, cujo valor esperado é $\langle A(\sigma) \rangle = \langle \sigma_k \rangle$ e,

$$A(\tilde{\sigma}) \equiv \begin{cases} \sigma_k & \text{se } j \neq k \\ -\sigma_k & \text{se } j = k \end{cases} .$$

Podemos escrever a relação acima de uma forma mais compacta:

$$A(\tilde{\sigma}) = \sigma_k - 2\sigma_k \delta_{jk}. \quad (2.78)$$

Substituindo a eq. (2.78) na eq. (2.77), obtemos

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = - \langle \sigma_k \rangle + \sum_{j=1}^N \langle \sigma_k \omega_j(\sigma) \rangle - 2 \sum_{j=1}^N \langle \sigma_k \delta_{jk} \omega_j(\sigma) \rangle. \quad (2.79)$$

Como $\sum_{j=1}^N \omega_j(\sigma) = 1$, podemos finalmente escrever que

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = -2 \langle \sigma_k \omega_k(\sigma) \rangle. \quad (2.80)$$

2.3.2 Equação de movimento para a magnetização de sub-rede S

A evolução temporal para a distribuição de probabilidade dos spins da sub-rede S deve ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p(S, t) &= - \sum_{S'} W_G(S \rightarrow S') p(S, t) \\ &\quad + \sum_{S'} W_G(S' \rightarrow S) p(S', t), \end{aligned} \quad (2.81)$$

onde $W_G(S \rightarrow S')$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de ocorrer uma transição do estado S para o estado S' , se todos os spins da sub-rede σ permanecerem fixos, no instante de tempo t . Se apenas um dado spin da sub-rede S muda em cada instante, temos a seguinte dinâmica de Glauber:

$$W_G(S' \rightarrow S) = \sum_{j=1}^N \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \cdots \delta_{S_j, \tilde{S}_j} \cdots \delta_{S_N, S'_N} \omega_j(S'), \quad (2.82)$$

onde $\omega_j(S')$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de se mudar o estado do spin do sítio j . Vamos assumir a mesma prescrição de Metropolis definida anteriormente. Aqui também temos que

$$\sum_{S'} W_G(S \rightarrow S') = \sum_S W_G(S' \rightarrow S) = 1. \quad (2.83)$$

Temos, portanto, que

$$\frac{d}{dt} p(S, t) = -p(S, t) + \sum_{S'} \sum_{j=1}^N \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \dots \delta_{S_j, \tilde{S}_j} \dots \delta_{S_N, S'_N} \omega_j(S') p(S', t). \quad (2.84)$$

Finalmente, somando sobre todos os estados S' temos

$$\frac{d}{dt} p(S, t) = -p(S, t) + \sum_{j=1}^N \omega_j(S') p(S', t), \quad (2.85)$$

onde $S' = (S_1, S_2, \dots, \tilde{S}_j, \dots, S_N)$ indica uma configuração de spins igual à configuração S , com exceção do j -ésimo spin o qual assume o valor \tilde{S}_j na configuração S' .

O valor esperado de uma função $A(S)$ é dado por:

$$\langle A(S) \rangle = \sum_S A(S) p(S, t), \quad (2.86)$$

logo

$$\frac{d}{dt} \langle A(S) \rangle = -\langle A(S) \rangle + \sum_S \sum_{j=1}^N A(S) \omega_j(S') p(S', t). \quad (2.87)$$

Podemos reescrever a equação acima mudando-se a soma no segundo termo da equação anterior de uma soma em S para uma soma na configuração S' , obtida de S quando o spin S_j muda para \tilde{S}_j :

$$\frac{d}{dt} \langle A(S) \rangle = -\langle A(S) \rangle + \sum_{j=1}^N \langle A(S') \omega_j(S) \rangle. \quad (2.88)$$

Fazendo-se $A(S) = S_k$, onde o valor esperado $\langle A(S) \rangle = \langle S_k \rangle$, temos:

$$A(S') \equiv \begin{cases} S_k & \text{se } j \neq k \\ \tilde{S}_k & \text{se } j = k \end{cases},$$

que pode ser escrita em geral na seguinte forma:

$$A(S') = S_k + (\tilde{S}_k - S_k) \delta_{jk}. \quad (2.89)$$

Desta forma temos que

$$\frac{d}{dt} \langle S_k \rangle = - \langle S_k \rangle + \sum_{j=1}^N \langle S_k \omega_j(S) \rangle + \sum_{j=1}^N \langle (\tilde{S}_k - S_k) \delta_{jk} \omega_j(S) \rangle. \quad (2.90)$$

Lembrando que $\sum_{j=1}^N \omega_j(S) = 1$, finalmente podemos escrever que

$$\frac{d}{dt} \langle S_k \rangle = \langle (\tilde{S}_k - S_k) \omega_k(S) \rangle. \quad (2.91)$$

Analogamente, se $A(S) = S_k^2$, a equação de movimento toma a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} \langle S_k^2 \rangle = \langle (\tilde{S}_k^2 - S_k^2) \omega_k(S) \rangle. \quad (2.92)$$

2.3.3 Equação de movimento para a função de correlação σS

Vamos agora considerar um par de spins vizinhos mais próximos σ_l e S_m onde, ou o spin σ_l , ou o spin S_m possam mudar no instante t . A equação de movimento para a probabilidade $p(\sigma, S; t)$ de se encontrar o sistema no estado $(\sigma, S) \equiv (\sigma_1, \dots, \sigma_l, \dots, \sigma_N; S_1, \dots, S_m, \dots, S_N)$ no instante t é dada por:

$$\frac{d}{dt} p(\sigma, S; t) = - \sum_{\sigma', S'} W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') p(\sigma, S; t)$$

$$+ \sum_{\sigma', S'} W_G(\sigma', S' \rightarrow \sigma, S) p(\sigma', S'; t), \quad (2.93)$$

onde $W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S')$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de ocorrer uma transição do estado σ para o estado σ' , ou do estado S para o estado S' . Esta probabilidade pode ser escrita como uma soma de duas probabilidades: uma referente a transição em σ e a outra associada a uma transição em S . Então podemos escrever que:

$$W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S) + W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma, S'), \quad (2.94)$$

onde

$$\begin{aligned} W_G(\sigma', S' \rightarrow \sigma, S) = & \sum_{j,k=1}^N \left[\delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \dots \delta_{\sigma_j, -\sigma'_j} \dots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \right. \\ & \times \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \dots \delta_{S_k, S'_k} \dots \delta_{S_N, S'_N} \omega_j(\sigma') \\ & + \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \dots \delta_{\sigma_j, \sigma'_j} \dots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \\ & \left. \times \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \dots \delta_{S_k, S'_k} \dots \delta_{S_N, S'_N} \omega_k(S') \right], \quad (2.95) \end{aligned}$$

sendo que $\omega_j(\sigma)$ e $\omega_k(S)$ são as probabilidades por unidade de tempo definidas nas seções anteriores e que são dadas pela prescrição de Metropolis.

Usando aqui também a condição de normalização:

$$\sum_{\sigma', S'} W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = \sum_{\sigma, S} W_G(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = 1, \quad (2.96)$$

a eq. (2.93) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p(\sigma, S; t) = & -p(\sigma, S; t) + \sum_{j=1}^N \omega_j(\tilde{\sigma}) p(\tilde{\sigma}, S; t) \\ & + \sum_{k=1}^N \omega_k(S) p(\sigma, \tilde{S}; t). \quad (2.97) \end{aligned}$$

Vamos calcular a equação de movimento para o valor esperado de um par de spins vizinhos mais próximos, ou seja, vamos considerar a função $A(\sigma, S) = \sigma_l S_m$, onde apenas um ou outro spin pode mudar na unidade de tempo. Para isso definimos o valor esperado de $A(\sigma, S)$:

$$\langle A(\sigma, S) \rangle = \sum_{\sigma, S} A(\sigma, S) p(\sigma, S; t). \quad (2.98)$$

Assim a eq. (2.97) torna-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A(\sigma, S) \rangle &= -\langle A(\sigma, S) \rangle + \sum_{\sigma, S} \sum_{j=1}^N A(\sigma, S) \omega_j(\tilde{\sigma}) p(\tilde{\sigma}, S; t) \\ &+ \sum_{\sigma, S} \sum_{k=1}^N A(\sigma, S) \omega_k(\tilde{S}) p(\sigma, \tilde{S}; t). \end{aligned} \quad (2.99)$$

Através de uma mudança de variáveis nas duas somas acima podemos escrever que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A(\sigma, S) \rangle &= -\langle A(\sigma, S) \rangle + \sum_{j=1}^N \langle A(\tilde{\sigma}, S) \omega_j(\sigma) \rangle \\ &+ \sum_{k=1}^N \langle A(\sigma, \tilde{S}) \omega_k(S) \rangle. \end{aligned} \quad (2.100)$$

Podemos agora particularizar $A(\sigma, S)$ para $\sigma_l S_m$ para determinar $\langle \sigma_l S_m \rangle$. Antes podemos escrever as seguintes representações para as funções $A(\tilde{\sigma}, S)$ e $A(\sigma, \tilde{S})$ associadas à inversão de um único spin do par por vez:

$$A(\tilde{\sigma}, S) = \begin{cases} \sigma_l S_m & \text{se } j \neq l \\ -\sigma_l S_m & \text{se } j = l \end{cases},$$

e

$$A(\sigma, \tilde{S}) = \begin{cases} \sigma_l S_m & \text{se } k \neq m \\ \sigma_l \tilde{S}_m & \text{se } k = m \end{cases}.$$

Em geral, elas podem ser escritas ainda da seguinte forma:

$$A(\tilde{\sigma}, S) = (\sigma_l - 2\sigma_l\delta_{jl}) S_m, \quad (2.101)$$

e

$$A(\sigma, \tilde{S}) = [S_m + (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{km}] \sigma_l. \quad (2.102)$$

Substituindo essas representações na eq. (2.100) teremos:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle = -2 \sum_{j=1}^N \langle \sigma_l S_m \delta_{jl} \omega_j(\sigma) \rangle + \sum_{k=1}^N \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{km} \omega_k(S) \rangle. \quad (2.103)$$

Portanto, ficamos com a seguinte expressão para a evolução temporal da função de correlação entre spins primeiros vizinhos:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle = -2 \langle \sigma_l S_m \omega_l(\sigma) \rangle + \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_m(S) \rangle. \quad (2.104)$$

Podemos notar que se $A(\sigma, S) = \sigma_l S_m^2$, teremos:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m^2 \rangle = -2 \langle \sigma_l S_m^2 \omega_l(\sigma) \rangle + \langle \sigma_l (\tilde{S}_m^2 - S_m^2) \omega_m(S) \rangle. \quad (2.105)$$

Finalmente, apresentamos as seguintes equações que descrevem a evolução temporal das magnetizações e das funções de correlação entre primeiros vizinhos, para o modelo de Ising com spins mistos, $\sigma = 1/2$ e $S = 1$, quando apenas excitações de um único spin são permitidas em cada instante de tempo:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_k \rangle = A_k, \quad (2.106)$$

$$\frac{d}{dt} \langle S_k \rangle = B_k, \quad (2.107)$$

$$\frac{d}{dt} \langle S_k^2 \rangle = C_k, \quad (2.108)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle = A_{lm}, \quad (2.109)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m^2 \rangle = B_{lm}, \quad (2.110)$$

onde

$$A_k = -2 \langle \sigma_k \omega_k(\sigma) \rangle, \quad (2.111)$$

$$B_k = \langle (\tilde{S}_k - S_k) \omega_k(S) \rangle, \quad (2.112)$$

$$C_k = \langle (\tilde{S}_k^2 - S_k^2) \omega_k(S) \rangle, \quad (2.113)$$

$$A_{lm} = -2 \langle \sigma_l S_m \omega_l(\sigma) \rangle + \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_m(S) \rangle, \quad (2.114)$$

$$B_{lm} = -2 \langle \sigma_l S_m^2 \omega_l(\sigma) \rangle + \langle \sigma_l (\tilde{S}_m^2 - S_m^2) \omega_m(S) \rangle. \quad (2.115)$$

Para encontrarmos as soluções estacionárias deste sistema de equações, primeiramente temos que calcular os valores esperados que aparecem no lado direito do conjunto de equações (2.106)-(2.110). Para isso utilizaremos as probabilidades $p(\sigma, t)$, $p(S, t)$ e $p(\sigma, S; t)$ definidas anteriormente, e métodos aproximados serão empregados para avaliar os valores esperados que aparecem no lado direito dessas equações. Com isso poderemos determinar a dependência do parâmetro de ordem e das funções de correlação em função da temperatura para os estados estacionários ($t \rightarrow \infty$) desse modelo misto de spins com interações ferromagnéticas.

2.4 Aproximação de campo médio

Todas as expressões desenvolvidas anteriormente são exatas, ou seja, se conhecessemos exatamente a probabilidade para os estados do sistema no instante t , $p(\sigma, S; t)$, poderíamos

calcular todos os valores esperados de interesse que aparecem no lado direito das equações (2.111) a (2.115). No entanto, à medida que cresce o número de spins do sistema, a probabilidade torna-se bastante complexa, envolvendo correlações de dois, três, etc., spins. Portanto, empregamos algum tipo de aproximação para calcular os valores esperados.

A mais simples aproximação conhecida é a de campo médio, onde escrevemos $p(\sigma, S; t)$ como um produto das probabilidades de cada spin, ou seja,

$$p(\sigma, S; t) = \left(\prod_{j=1}^N p(\sigma_j, t) \right) \left(\prod_{i=1}^N p(S_i, t) \right), \quad (2.116)$$

onde a probabilidade que um dado spin assuma um dado valor no instante t é independente dos valores assumidos pelos outros spins. Essa aproximação dinâmica de campo médio, quando usada em conexão com a taxa de transição de Metropolis fornece resultados para os estados estacionários que não são os mesmos observados no equilíbrio [17]. Por exemplo, para o modelo de Ising em uma rede quadrada a temperatura crítica obtida por esse procedimento é igual a $k_B T_c / J = 1.58$, enquanto que o valor obtido para o estado de equilíbrio na aproximação de campo médio é $k_B T / J = 4.0$. Na próxima seção consideraremos a aproximação de pares dinâmica, e nesse caso os resultados obtidos coincidem com aqueles obtidos no equilíbrio termodinâmico [17]. Antes de passarmos para a aproximação de pares dinâmica convém determinarmos as magnetizações das duas sub-redes na aproximação de campo médio para a situação de equilíbrio termodinâmico. Nessa aproximação, cada spin σ_i interage com o valor esperado dos spins da outra sub-rede. Desta forma, podemos escrever que:

$$m_1 = \frac{1}{2} \tanh \frac{1}{2} (\beta z J m_2), \quad (2.117)$$

$$m_2 = \frac{2 \sinh(\beta z J m_1)}{2 \cosh(\beta z J m_1) + 1}, \quad (2.118)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e z é o número de coordenação da rede. Nestas equações $m_1 = \langle \sigma \rangle$, onde $\sigma = \pm 1/2$, e $m_2 = \langle S \rangle$ onde $S = 0, \pm 1$.

Na figura 2.1 apresentamos o gráfico das magnetizações das sub-redes m_1 e m_2 em função da temperatura reduzida. A temperatura crítica obtida nessa aproximação de campo médio é igual a $k_B T_c / 2zJ = 0.40825$.

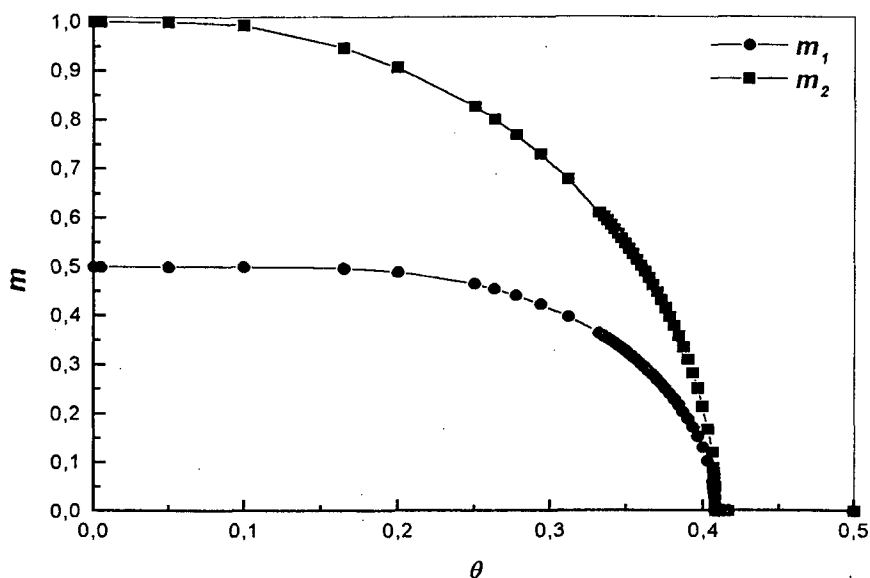


Figura 2-1: Magnetizações m_1 e m_2 em função da temperatura reduzida $\theta = k_B T / 2zJ$ na aproximação de campo médio.

2.5 Aproximação de pares

Nesta seção utilizaremos a aproximação de pares que melhora os resultados obtidos na aproximação de campo médio, já que a correlação entre spins primeiros vizinhos são levadas em consideração. Nesta aproximação a probabilidade $p(\sigma, S; t)$ é expressa em termos das probabilidades de pares de vizinhos mais próximos $p(\sigma_i, S_k; t)$, isto é, da probabilidade de que o par de spins vizinhos mais próximos σ_i e S_k assumam seus valores, independentemente

dos valores assumidos pelos demais spins do sistema. Para efetuar esses cálculos procedemos da seguinte forma:

1 - Consideramos um bloco A formado por um spin central, σ_i , e seus z primeiros vizinhos (figura 2.2), e definimos P_A como sendo a probabilidade do bloco A.

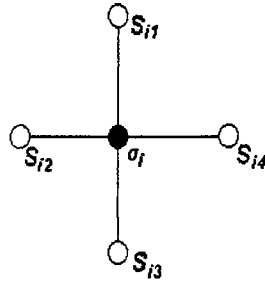


Figura 2-2: Configuração esquemática de um bloco do tipo A, com spin central σ_i e seus primeiros vizinhos, numa rede quadrada.

Essa probabilidade pode ser escrita como o produto entre a probabilidade de que o spin central em i assumo o valor σ_i , isto é, $P(\sigma_i)$ e que $P(\sigma_i | S_{i1}, S_{i2}, \dots, S_{iz})$ seja a probabilidade condicional de que seus z primeiros vizinhos assumam os valores $S_{i1}, S_{i2}, \dots, S_{iz}$.

Podemos então escrever que

$$P_A = P(\sigma_i) P(\sigma_i | S_{i1}, S_{i2}, \dots, S_{iz}). \quad (2.119)$$

As probabilidades condicionais podem ser expressas como um produto de probabilidades dos diferentes pares de spins tendo o spin central o valor σ_i :

$$P(\sigma_i | S_{i1}, S_{i2}, \dots, S_{iz}) = P(\sigma_i | S_{i1}) P(\sigma_i | S_{i2}) \dots P(\sigma_i | S_{iz}), \quad (2.120)$$

sendo que para cada uma das probabilidades condicionais individuais da equação acima

podemos escrever que

$$P(\sigma_i | S_{ik}) = \frac{P(\sigma_i, S_{ik})}{P(\sigma_i)}, \quad k = 1, 2, \dots, z. \quad (2.121)$$

Então P_A pode ser escrita da seguinte forma:

$$P_A = P(\sigma_i) \prod_{(PV \text{ de } i)}^k \frac{P(\sigma_i, S_{ik})}{P(\sigma_i)}, \quad (2.122)$$

onde $(PV \text{ de } i)$ indica os primeiros vizinhos de i .

Da mesma forma se o spin central pertencer à outra sub-rede (figura 2.3), a probabilidade para o cluster assim formado será

$$P_A = P(S_i) \prod_{(PV \text{ de } i)}^k \frac{P(\sigma_{ik}, S_i)}{P(S_i)}. \quad (2.123)$$

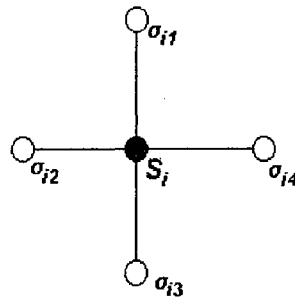


Figura 2-3: Configuração esquemática de um bloco do tipo A, com spin central S_i , e seus primeiros vizinhos, numa rede quadrada.

2 - Agora vamos considerar um bloco B formado por dois spins que são primeiros vizinhos, σ_j pertencente à sub-rede σ , e S_k pertencente à sub-rede S , e seus respectivos $(z - 1)$ primeiros vizinhos (figura 2.4).

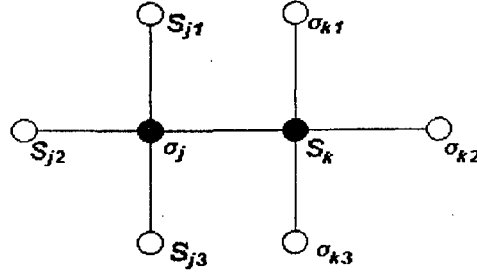


Figura 2-4: Configuração esquemática de um bloco do tipo B.

Desta forma, a probabilidade para esse bloco de spins pode ser escrita como:

$$P_B = P_{jk}(\sigma_j, S_k) P(\sigma_j, S_k | S_{j1}, S_{j2}, \dots, S_{j(z-1)}, \sigma_{k1}, \sigma_{k2}, \dots, \sigma_{k(z-1)}). \quad (2.124)$$

Nesta aproximação, a probabilidade condicional é expressa como um produto de probabilidades condicionais de pares, como foi feito anteriormente para a probabilidade P_A .

Então

$$P(\sigma_j, S_k | S_{j1}, S_{j2}, \dots, S_{j(z-1)}, \sigma_{k1}, \sigma_{k2}, \dots, \sigma_{k(z-1)}) = \\ P(\sigma_j | S_{j1}) P(\sigma_j | S_{j2}) \dots P(\sigma_j | S_{j(z-1)}) P(S_k | \sigma_{k1}) P(S_k | \sigma_{k2}) \dots P(S_k | \sigma_{k(z-1)}). \quad (2.125)$$

Substituindo-se as eqs. (2.119) e (2.120) na equação acima temos

$$P_B = P_{jk}(\sigma_j, S_k) \prod_{\substack{i \neq k \\ (PV \text{ de } j)}} \frac{P_{jk}(\sigma_j, S_i)}{P_j(\sigma_j)} \prod_{\substack{l \neq j \\ (PV \text{ de } k)}} \frac{P_{jk}(\sigma_l, S_k)}{P_k(S_k)}. \quad (2.126)$$

2.6 Determinação das equações de movimento

Agora vamos resolver o sistema de equações acopladas da seção 2.3 utilizando a aproximação de pares na qual a probabilidade pode ser escrita em termos das probabilidade de

pares de spins.

Dividimos a rede em duas sub-redes, e procuramos soluções tais que $m_1 = \langle \sigma_i \rangle$ para qualquer spin pertencente à sub-rede 1, $m_2 = \langle S_i \rangle$, $q = \langle S_i^2 \rangle$ para qualquer spin pertencente à sub-rede 2 e $R = \langle \sigma_i S_i \rangle$, $q_1 = \langle \sigma_i S_i^2 \rangle$ para qualquer par de spins primeiros vizinhos σ_i e S_i . Podemos escrever as probabilidades para um único spin, $P_1(\sigma_1)$ e $P_2(S_2)$, e para um par de spins vizinhos mais próximos como:

$$P_1(\sigma_1) = \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 m_1), \quad (2.127)$$

$$P_2(S_2) = 1 + \frac{1}{2} S_2 m_2 - S_2^2 - \left(1 - \frac{3}{2} S_2^2\right) q, \quad (2.128)$$

$$P_{12}(\sigma_1, S_2) = \frac{1}{2} \left[1 + \sigma_1 m_1 + \frac{1}{2} S_2 m_2 - S_2^2 - \left(1 - \frac{3}{2} S_2^2\right) q + \frac{1}{2} \sigma_1 S_2 R - \sigma_1 S_2^2 m_1 - \sigma_1 \left(1 - \frac{3}{2} S_2^2\right) q_1 \right], \quad (2.129)$$

onde σ_1 e S_2 são spins de um par de spins primeiros vizinhos pertencentes às sub-redes 1 e 2, respectivamente. O primeiro bloco considerado é do tipo A, descrito na seção anterior, e consiste de um spin central σ_1 pertence à sub-rede 1 com spins primeiros vizinhos S_i pertencentes à sub-rede 2; o segundo bloco considerado também é do tipo A, com um spin central S_2 pertencente à sub-rede 2 com spins primeiros vizinhos σ_i pertencentes à sub-rede 1; por fim, o terceiro bloco é do tipo B e consiste de dois spins primeiros vizinhos σ_1 e S_2 e de seus respectivos primeiros vizinhos. As probabilidades para estes blocos são dadas pelas expressões:

$$P_A = P_1(\sigma_1) \prod_{i \text{ (PV de 1)}} \frac{P_{12}(\sigma_1, S_i)}{P_1(\sigma_1)}, \quad (2.130)$$

$$P_A = P_2(S_2) \prod_{i \text{ (PV de 2)}} \frac{P_{12}(\sigma_i, S_2)}{P_2(S_2)}, \quad (2.131)$$

$$P_B = P_{12}(\sigma_1, S_2) \prod_{\substack{i \neq 2 \\ (PV \text{ de } 1)}} \frac{P_{12}(\sigma_1, S_i)}{P_1(\sigma_1)} \prod_{\substack{i \neq 1 \\ (PV \text{ de } 2)}} \frac{P_{12}(\sigma_i, S_2)}{P_2(S_2)}. \quad (2.132)$$

Inserindo essas expressões para as distribuições de probabilidades podemos avaliar os valores esperados encontrados no lado direito das equações (2.111) a (2.115).

Após algumas manipulações algébricas, podemos mostrar que a evolução temporal das magnetizações de sub-rede, m_1 e m_2 , do parâmetro q , e das funções de correlação entre primeiros vizinhos, R e q_1 , são dadas pelas seguintes equações:

$$\frac{d}{dt} m_1 = A_1(m_1, m_2, R, q, q_1), \quad (2.133)$$

$$\frac{d}{dt} m_2 = B_2(m_1, m_2, R, q, q_1), \quad (2.134)$$

$$\frac{d}{dt} q = C_2(m_1, m_2, R, q, q_1), \quad (2.135)$$

$$\frac{d}{dt} R = A_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1), \quad (2.136)$$

$$\frac{d}{dt} q_1 = B_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1). \quad (2.137)$$

Obtivemos as seguintes expressões explícitas para os fatores que ocorrem no lado direito das equações (2.133) a (2.137), onde $m_1 = \langle \sigma_1 \rangle$, $m_2 = \langle S_2 \rangle$, $q = \langle S_2^2 \rangle$, $R = \langle \sigma_1 S_2 \rangle$ e $q_1 = \langle \sigma_1 S_2^2 \rangle$. Vamos definir, por conveniência, as quantidades $x_1 = P_1(+)$, $y_1 = P_1(-)$, $x_2 = P_2(+)$, $y_2 = P_2(-)$, $z_2 = P_2(0)$, $z = P_{12}(++)$, $v_1 = P_{12}(+-)$, $v_2 = P_{12}(-+)$, $\omega = P_{12}(--)$, $g_1 = P_{12}(+0)$, e $g_2 = P_{12}(-0)$. Então as eqs. (2.127) - (2.129), ficam

$$x_1 = \frac{1}{2}(1 + m_1), \quad (2.138)$$

$$y_1 = \frac{1}{2}(1 - m_2), \quad (2.139)$$

$$x_2 = \frac{1}{2}(m_2 + q), \quad (2.140)$$

$$y_2 = \frac{1}{2}(-m_2 + q), \quad (2.141)$$

$$z_2 = 1 - q, \quad (2.142)$$

$$z = \frac{1}{4}(m_2 + q + R + q_1), \quad (2.143)$$

$$v_1 = \frac{1}{4}(-m_2 + q - R + q_1), \quad (2.144)$$

$$v_2 = \frac{1}{4}(m_2 + q - R - q_1), \quad (2.145)$$

$$\omega = \frac{1}{4}(-m_2 + q + R - q_1), \quad (2.146)$$

$$g_1 = \frac{1}{2}(1 + m_1 - q - q_1), \quad (2.147)$$

$$g_2 = \frac{1}{2}(1 - m_1 - q + q_1). \quad (2.148)$$

Definindo-se ainda o parâmetro adimensional $\eta = \exp(-4J/k_B T)$, temos na aproximação de pares,

$$\begin{aligned} A_1(m_1, m_2, R, q, q_1) = & -\frac{2}{x_1^3} \left(\eta^4 z^4 + 4\eta^3 z^3 g_1 + 4\eta^2 z^3 v_1 + 6\eta^2 z^2 g_1^2 + 12\eta z^2 g_1 v_1 + 6z^2 v_1^2 \right. \\ & + 4\eta z g_1^3 + 12z g_1^2 v_1 + 12z g_1 v_1^2 + 4z v_1^3 + g_1^4 + 4g_1^3 v_1 + 6g_1^2 v_1^2 \\ & \left. + 4g_1 v_1^3 + v_1^4 \right) \\ & + \frac{2}{y_1^3} \left(\eta^4 \omega^4 + 4\eta^3 \omega^3 g_2 + 4\eta^2 \omega^3 v_2 + 6\eta^2 \omega^2 g_2^2 + 12\eta \omega^2 g_2 v_2 + 6\omega^2 v_2^2 \right. \\ & + 4\eta \omega g_2^3 + 12\omega g_2^2 v_2 + 12\omega g_2 v_2^2 + 4\omega v_2^3 + g_2^4 + 4g_2^3 v_2 + 6g_2^2 v_2^2 \\ & \left. + 4g_2 v_2^3 + v_2^4 \right), \quad (2.149) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_2(m_1, m_2, R, q, q_1) = & -\frac{1}{x_2^3} \left(2\eta^4 z^4 + \eta^2 z^4 + 8\eta^2 z^3 v_2 + 4\eta z^3 v_2 + 18z^2 v_2^2 + 12z v_2^3 + 3v_2^4 \right) \\ & + \frac{1}{y_2^3} \left(2\eta^4 \omega^4 + \eta^2 \omega^4 + 8\eta^2 \omega^3 v_1 + 4\eta \omega^3 v_1 + 18\omega^2 v_1^2 + 12\omega v_1^3 + 3v_1^4 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{z_2^3} \left(\eta^2 g_2^4 - \eta^2 g_1^4 + 4\eta g_1 g_2^3 - 4\eta g_1^3 g_2 + 4g_1^3 g_2 - 4g_1 g_2^3 \right. \\
& \left. + g_1^4 - g_2^4 \right), \tag{2.150}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_2(m_1, m_2, R, q, q_1) &= -\frac{1}{x_2^3} \left(\eta^2 z^4 + 4\eta z^3 v_2 + 6z^2 v_2^2 + 4z v_2^3 + v_2^4 \right) \\
& - \frac{1}{y_2^3} \left(\eta^2 \omega^4 + 4\eta \omega^3 v_1 + 6\omega^2 v_1^2 + 4\omega v_1^3 + v_1^4 \right) \\
& + \frac{1}{z_2^3} \left(\eta^2 g_2^4 + \eta^2 g_1^4 + 4\eta g_1 g_2^3 + 4\eta g_1^3 g_2 + 4g_1^3 g_2 + 4g_1 g_2^3 \right. \\
& \left. + g_1^4 + g_2^4 \right), \tag{2.151}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1) &= \frac{2}{x_1^3} \left(-\eta^4 z^4 - 3\eta^3 z^3 g_1 - 2\eta^2 z^3 v_1 - 3\eta^2 z^2 g_1^2 - 3\eta z^2 g_1 v_1 - \eta z g_1^3 \right. \\
& \left. + 3z g_1 v_1^2 + 2z v_1^3 + g_1^3 v_1 + 3g_1^2 v_1^2 + 3g_1 v_1^3 + v_1^4 \right) \\
& + \frac{2}{y_1^3} \left(-\eta^4 \omega^4 - 3\eta^3 \omega^3 g_2 - 2\eta^2 \omega^3 v_2 - 3\eta^2 \omega^2 g_2^2 - 3\eta \omega^2 g_2 v_2 - \eta \omega g_2^3 \right. \\
& \left. + 3\omega g_2 v_2^2 + 2\omega v_2^3 + g_2^3 v_2 + 3g_2^2 v_2^2 + 3g_2 v_2^3 + v_2^4 \right) \\
& + \frac{1}{x_2^3} \left(-2\eta^4 z^4 - \eta^2 z^4 - 4\eta^2 z^3 v_2 - 2\eta z^3 v_2 + 6z v_2^3 + 3v_2^4 \right) \\
& + \frac{1}{y_2^3} \left(-2\eta^4 \omega^4 - \eta^2 \omega^4 - 4\eta^2 \omega^3 v_1 - 2\eta \omega^3 v_1 + 6\omega v_1^3 + 3v_1^4 \right) \\
& + \frac{1}{z_2^3} \left(-\eta^2 g_2^4 - \eta^2 g_1^4 - 2\eta g_1 g_2^3 - 2\eta g_1^3 g_2 + 2g_1^3 g_2 + 2g_1 g_2^3 \right. \\
& \left. + g_1^4 + g_2^4 \right), \tag{2.152}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1) &= -\frac{2}{x_1^3} \left(\eta^4 z^4 + 3\eta^3 z^3 g_1 + 4\eta^2 z^3 v_1 + 3\eta^2 z^2 g_1^2 + 9\eta z^2 g_1 v_1 + \eta z g_1^3 \right. \\
& \left. + 6z^2 v_1^2 + 6z g_1^2 v_1 + 9z g_1 v_1^2 + 4z v_1^3 + g_1^3 v_1 + 3g_1^2 v_1^2 + 3g_1 v_1^3 + v_1^4 \right) \\
& + \frac{2}{y_1^3} \left(\eta^4 \omega^4 + 3\eta^3 \omega^3 g_2 + 4\eta^2 \omega^3 v_2 + 3\eta^2 \omega^2 g_2^2 + 9\eta \omega^2 g_2 v_2 + \eta \omega g_2^3 \right. \\
& \left. + 6\omega^2 v_2^2 + 6\omega g_2^2 v_2 + 9\omega g_2 v_2^2 + 4\omega v_2^3 + g_2^3 v_2 + 3g_2^2 v_2^2 + 3g_2 v_2^3 + v_2^4 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{x_2^3} \left(-\eta^2 z^4 - 2\eta z^3 v_2 + 2z v_2^3 + v_2^4 \right) \\
& + \frac{1}{y_2^3} \left(-\eta^2 \omega^4 - 2\eta \omega^3 v_1 + 3\omega v_1^3 + v_1^4 \right) \\
& + \frac{1}{z_2^3} \left(-\eta^2 g_2^4 + \eta^2 g_1^4 - 2\eta g_1 g_2^3 + 2\eta g_1^3 g_2 + 2g_1^3 g_2 - 2g_1 g_2^3 \right. \\
& \left. + g_1^4 - g_2^4 \right). \tag{2.153}
\end{aligned}$$

Para cada valor da temperatura determinamos as soluções estacionárias para o sistema de equações acima utilizando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem [18].

Na figura 2.5, exibimos o comportamento das magnetizações de sub-rede m_1 e m_2 em função da temperatura reduzida $\theta = k_B T / 2zJ$. A temperatura crítica que obtemos na aproximação de pares é igual a $\theta_c = 0.3068$. Esse valor é menor que o encontrado na aproximação de campo médio, onde obtivemos o valor $\theta_c = 0.408$. Podemos comparar esses resultados com outros encontrados na literatura: Siqueira e Fittipaldi [19], utilizando uma teoria efetiva de campo médio incluindo correlações obtiveram $\theta_c = 0.198$; Schofield e Bowers [12], através do grupo de renormalização no espaço real obtiveram $\theta_c = 0.182$; Bowers e Yousif [11], através de expansões em séries obtiveram $\theta_c = 0.244$; Verona de Rezende, Sá Barreto e Plascak [20], utilizando o grupo de renormalização de campo médio, com blocos de até 4 spins obtiveram $\theta_c = 0.322$, enquanto que Buendia e Novotny [14] através do método de Monte Carlo e da técnica da matriz de transferência determinaram o valor $\theta_c = 0.25$.

Portanto, a aproximação de pares dinâmica que empregamos, como já era esperado, fornece um resultado para a temperatura crítica que é menor que aquela prevista pela teoria de campo médio, e um pouco acima dos melhores resultados obtidos empregando teorias mais sofisticadas, como por exemplo, expansões em séries de altas temperaturas.

Mostramos ainda nas figuras 2.6 e 2.7 a dependência dos valores esperados q , R e q_1

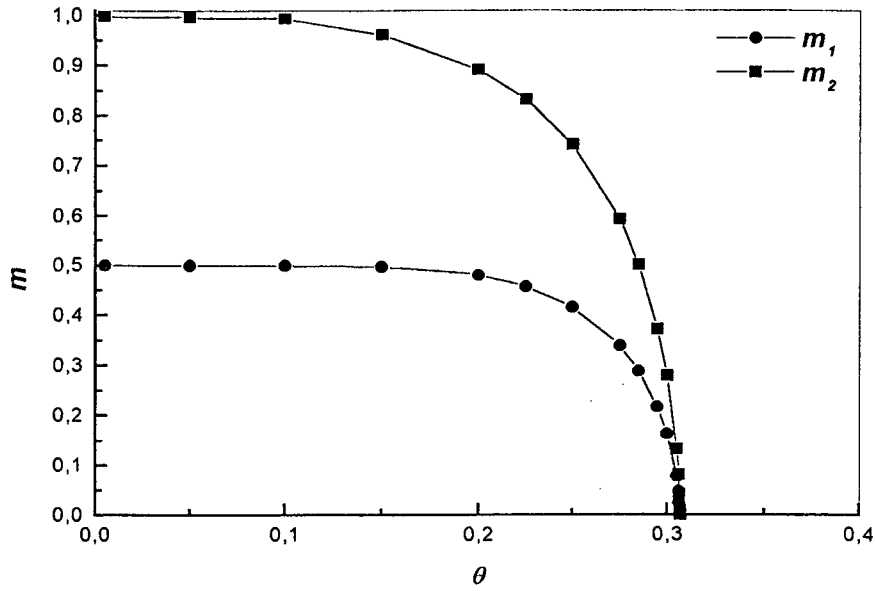


Figura 2-5: Magnetizações m_1 e m_2 em função da temperatura reduzida $\theta = k_B T / 2zJ$ na aproximação dinâmica de pares.

em função da temperatura reduzida. Notamos que $q = \langle S_i^2 \rangle$ decresce com θ , permanecendo aproximadamente independente da temperatura para valores grandes da mesma. Em altas temperaturas, os spins tornam-se independentes, e o spin S_i pode assumir com a mesma probabilidade os seus três valores possíveis, 0 e ± 1 . Logo, como vemos, $\langle S_i^2 \rangle = 2/3$ se $\theta \gg \theta_c$.

Por outro lado, a função de correlação intersub-redes $R = \langle \sigma_i S_i \rangle$ decresce com a temperatura e para $\theta \cong 2\theta_c$ assume um valor que é cerca da metade do valor determinado na temperatura crítica. Finalmente $q_i = \langle \sigma_i S_i^2 \rangle$ tem um comportamento semelhante ao observado para as magnetizações de sub-rede, e se anula exatamente em $\theta = \theta_c$.

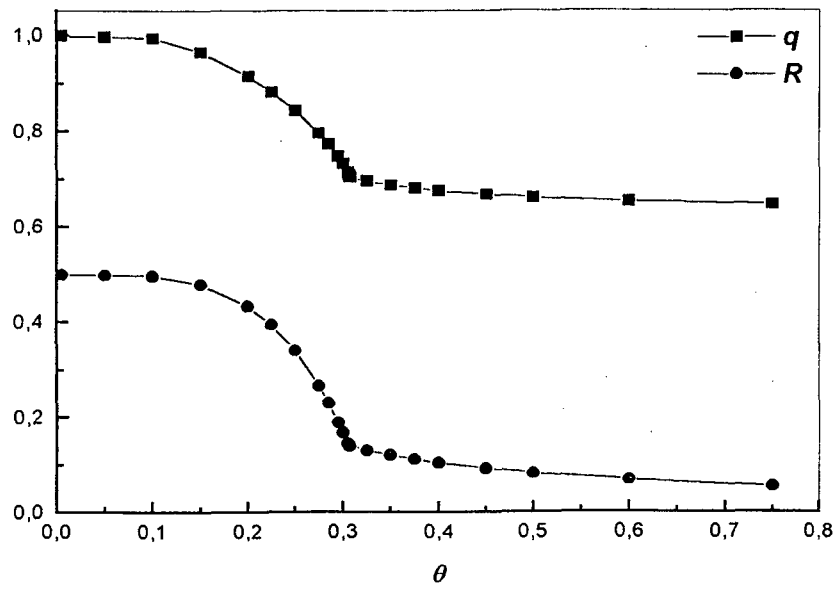


Figura 2-6: Parâmetros $R = \langle \sigma S \rangle$ e $q = \langle S^2 \rangle$ em função da temperatura reduzida $\theta = k_B T / 2zJ$.

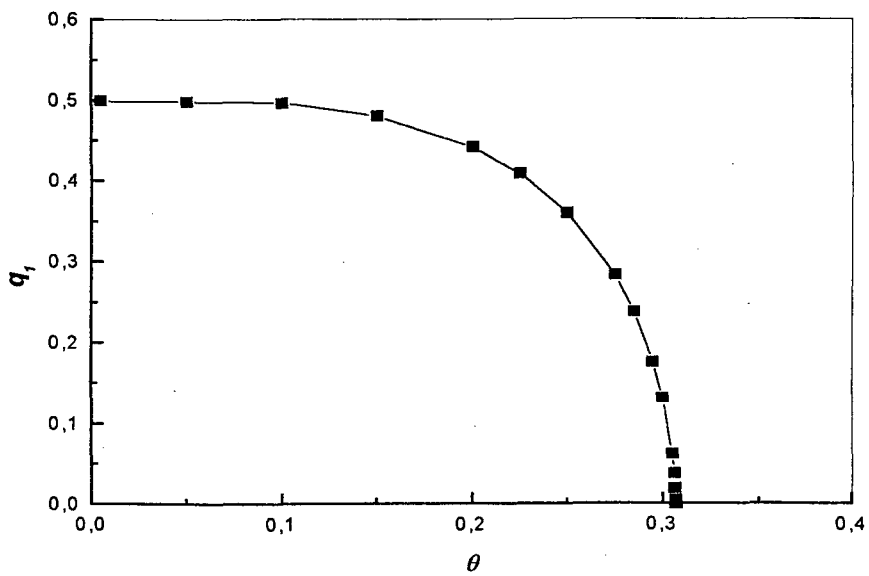


Figura 2-7: Comportamento do parâmetro $q_1 = \langle \sigma S^2 \rangle$ em função da temperatura reduzida $\theta = k_B T / 2zJ$.

Capítulo 3

Dinâmicas competitivas no modelo de Ising misto ferromagnético

3.1 Introdução

Estudaremos agora a resposta do sistema quando este é submetido a dois processos estocásticos dinâmicos competitivos: um dos processos simula o contato com o banho térmico a uma dada temperatura fixa, e o outro processo é devido a transições que independem da temperatura. Neste caso podemos pensar em absorção de energia pelo sistema de spins devido a um fluxo de energia eletromagnética sobre o sistema [22, 23].

A primeira dinâmica é o processo estocástico de Glauber descrito no capítulo anterior. Neste capítulo descreveremos uma dinâmica semelhante a de Glauber, mas onde são invertidos simultaneamente um par de spins vizinhos mais próximos. Este processo estocástico simula um fluxo contínuo de energia sobre o sistema, que privilegia os estados de mais alta energia do mesmo. Quando o sistema está sujeito somente a este processo, o estado estacionário que esperamos é de um estado de máxima energia.

Vamos investigar uma característica interessante associada à competição entre dois processos, que é o aparecimento do fenômeno de auto-organização. No caso do processo in-

dependente da temperatura ser o de Kawasaki (parâmetro de ordem se conserva) Tomé e de Oliveira [5], através da aproximação de pares, e Grandi e Figueiredo [24] através de simulações de Monte Carlo mostraram que, dependendo do fluxo de energia sobre o sistema, ele passa pelas fases ferromagnética, paramagnética, e finalmente se auto-organiza em uma estrutura antiferromagnética. Utilizaremos aqui também o formalismo da equação mestra, e a aproximação de pares dinâmica para a determinação do diagrama de fases para os estados estacionários do sistema, no plano temperatura versus parâmetro de competição entre as duas dinâmicas.

3.2 Equação de movimento para a magnetização de sub-rede σ

Em primeiro lugar vamos calcular a evolução temporal de $p(\sigma, S; t)$, que é determinada aqui da mesma forma como realizado no capítulo anterior. Inicialmente escrevemos a equação mestra:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}p(\sigma, S; t) = & - \sum_{\sigma', S'} W_{GD}(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') p(\sigma, S; t) \\ & + \sum_{\sigma', S'} W_{GD}(\sigma', S' \rightarrow \sigma, S) p(\sigma', S'; t), \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde $W_{GD}(\sigma, S \rightarrow \sigma', S')$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de ocorrer uma transição simultânea de dois spins vizinhos mais próximos, o sistema mudando do estado (σ, S) para o estado (σ', S') . Esta probabilidade está associada a um processo que simula um fluxo contínuo de energia sobre o sistema, e que privilegia os estados de mais alta energia do mesmo. O sistema absorve esta energia através da mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos. Este processo é similar ao processo de Kawasaki (troca entre dois

spins primeiros vizinhos) utilizado por Tomé e de Oliveira [5] em sistemas ferromagnéticos, porém, em nosso caso, não há conservação do parâmetro de ordem. Esta probabilidade pode ser escrita da seguinte forma:

$$W_{GD}(\sigma', S' \rightarrow \sigma, S) = \sum_{j,k=1}^N \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \dots \delta_{\sigma_j, -\sigma'_j} \dots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \times \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \dots \delta_{S_k, \tilde{S}_k} \dots \delta_{S_N, S'_N} \omega_{jk}(\sigma', S'), \quad (3.2)$$

onde $\omega_{jk}(\sigma', S')$ é a probabilidade, por unidade de tempo, de se mudar os spins dos sítios j e k simultaneamente. O fluxo de energia para dentro do sistema é dado pela seguinte prescrição:

$$\omega_{jk}(\sigma, S) = \begin{cases} 0, & \text{se } \Delta E_{jk} \leq 0 \\ 1, & \text{se } \Delta E_{jk} > 0 \end{cases},$$

sendo ΔE_{jk} a variação na energia após mudarmos os spins j e k .

Utilizamos aqui também a condição de normalização

$$\sum_{\sigma', S'} W_{GD}(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = \sum_{\sigma, S} W_{GD}(\sigma, S \rightarrow \sigma', S') = 1. \quad (3.3)$$

Então podemos escrever a eq. (3.1) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p(\sigma, S; t) &= -p(\sigma, S; t) + \sum_{\sigma', S'} \sum_{j,k=1}^N \delta_{\sigma_1, \sigma'_1} \delta_{\sigma_2, \sigma'_2} \dots \delta_{\sigma_j, -\sigma'_j} \dots \delta_{\sigma_N, \sigma'_N} \dots \\ &\times \delta_{S_1, S'_1} \delta_{S_2, S'_2} \dots \delta_{S_k, \tilde{S}_k} \dots \delta_{S_N, S'_N} \omega_{jk}(\sigma', S') p(\sigma', S'; t), \end{aligned} \quad (3.4)$$

que, quando somamos sobre todos os estados σ' e S' , resulta na seguinte equação:

$$\frac{d}{dt} p(\sigma, S; t) = -p(\sigma, S; t) + \sum_{j,k=1}^N \omega_{jk}(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) p(\tilde{\sigma}, \tilde{S}; t), \quad (3.5)$$

onde $\tilde{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_j, \dots, \sigma_N)$ e $\tilde{S} = (S_1, S_2, \dots, \tilde{S}_k, \dots, S_N)$ denotam as configurações

de spins iguais às configurações σ e S , com exceção dos spins j e k , os quais assumem os valores $-\sigma_j$ e \tilde{S}_k nas configurações $\tilde{\sigma}$ e \tilde{S} .

Denotando por $\langle A(\sigma, S) \rangle$ o valor esperado da função de estado $A(\sigma, S)$,

$$\langle A(\sigma, S) \rangle = \sum_{\sigma, S} A(\sigma, S) p(\sigma, S; t), \quad (3.6)$$

e utilizando a eq. (3.5), podemos escrever que:

$$\frac{d}{dt} \langle A(\sigma, S) \rangle = - \langle A(\sigma, S) \rangle + \sum_{\sigma, S} \sum_{j,k=1}^N A(\sigma, S) \omega_{jk}(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) p(\tilde{\sigma}, \tilde{S}; t). \quad (3.7)$$

Se mudarmos a soma no segundo termo da equação acima, de uma soma em σ e S para uma soma nas configurações nas quais os spins j e k assumem os valores $-\sigma_j$ e \tilde{S}_k , teremos

$$\frac{d}{dt} \langle A(\sigma, S) \rangle = - \langle A(\sigma, S) \rangle + \sum_{j,k=1}^N \langle A(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle. \quad (3.8)$$

O que desejamos é calcular a equação de movimento para um único spin, quando esse spin e seu vizinho mais próximo mudam simultaneamente. Vamos então definir $A(\sigma, S) = \sigma_l$, e o seu valor esperado por $\langle A(\sigma, S) \rangle = \langle \sigma_l \rangle$, ou seja,

$$A(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) \equiv \begin{cases} \sigma_l & \text{se } j \neq l \\ -\sigma_l & \text{se } j = l \end{cases}.$$

Podemos então escrever uma relação para $A(\tilde{\sigma}, \tilde{S})$ na forma

$$A(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) = \sigma_l - 2\sigma_l \delta_{jl}. \quad (3.9)$$

Se substituirmos a eq.(3.9) na eq.(3.8), teremos:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l \rangle = - \langle \sigma_l \rangle + \sum_{j,k=1}^N \langle \sigma_l \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle - 2 \sum_{j,k=1}^N \langle \sigma_l \delta_{jl} \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle. \quad (3.10)$$

Como $\sum_{j,k=1}^N \omega_{jk}(\sigma, S) = 1$, a equação acima fica:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l \rangle = -2 \sum_{(PV \text{ de } l)}^k \langle \sigma_l \omega_{lk}(\sigma, S) \rangle. \quad (3.11)$$

onde $(PV \text{ de } l)$ indica que a soma é feita sobre todos os spins que são primeiros vizinhos de l , ou seja, que se encontram na sub-rede S .

3.3 Equação de movimento para a magnetização de sub-rede S

A equação de movimento para o spin S é calculado aqui utilizando a eq. (3.8). Para isso vamos definir $A(\sigma, S) = S_m$, e seu valor esperado $\langle A(\sigma, S) \rangle = \langle S_m \rangle$ e, portanto,

$$A(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) \equiv \begin{cases} S_m & \text{se } k \neq m \\ \tilde{S}_m & \text{se } k = m \end{cases}.$$

A função $A(\tilde{\sigma}, \tilde{S})$ é definida da seguinte forma:

$$A(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) = S_m + (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{km}, \quad (3.12)$$

e substituindo a eq.(3.12) na eq.(3.8), temos que

$$\frac{d}{dt} \langle S_m \rangle = -\langle S_m \rangle + \sum_{j,k=1}^N \langle S_m \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle + \sum_{j,k=1}^N \langle (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{km} \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle. \quad (3.13)$$

Sendo que $\sum_{j,k=1}^N \omega_{jk}(\sigma, S) = 1$, a equação anterior toma a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} \langle S_m \rangle = \sum_{(PV \text{ de } m)}^j \langle (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle. \quad (3.14)$$

Utilizando o mesmo procedimento, podemos também escrever que $A(\sigma, S) = S_m^2$ e a

equação de movimento correspondente fica

$$\frac{d}{dt} \langle S_m^2 \rangle = \sum_{(PV \text{ de } m)}^j \langle (\tilde{S}_m^2 - S_m^2) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle. \quad (3.15)$$

onde $(PV \text{ de } m)$ indica que a soma deve ser feita sobre todos os spins primeiros vizinhos de S_m .

3.4 Equação de movimento para a função de correlação de spins σ e S

Podemos então calcular a equação de movimento para um par de spins primeiros vizinhos. Para isso vamos considerar $A(\sigma, S) = \sigma_l S_m$, e o seu valor esperado $\langle A(\sigma, S) \rangle = \langle \sigma_l S_m \rangle$ e definir uma função para $A(\tilde{\sigma}, \tilde{S})$ que tem a seguinte forma:

$$A(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) \equiv \begin{cases} \sigma_l S_m & \text{se } j \neq l \text{ e } k \neq m \\ -\sigma_l \tilde{S}_m & \text{se } j = l \text{ e } k = m \end{cases},$$

e então esta função fica definida da seguinte maneira:

$$A(\tilde{\sigma}, \tilde{S}) = \sigma_l S_m - 2\sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{jl} \delta_{km} + \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{km} - 2\sigma_l S_m \delta_{jl}, \quad (3.16)$$

e agora podemos substituir a eq. (3.16) na eq. (3.8) e teremos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle &= -2 \sum_{j,k=1}^N \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{jl} \delta_{km} \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle \\ &\quad + \sum_{j,k=1}^N \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \delta_{km} \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle \\ &\quad - 2 \sum_{j,k=1}^N \langle \sigma_l S_m \delta_{jl} \omega_{jk}(\sigma, S) \rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Utilizando a propriedade da função delta na equação anterior, ou seja, os termos não

nulos são aqueles para os quais $j = l$ e $k = m$, então a eq. (3.17) fica da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle &= -2 \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{lm}(\sigma, S) \rangle \\ &+ \sum_{j=1}^N \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle \\ &- 2 \sum_{k=1}^N \langle \sigma_l S_m \omega_{lk}(\sigma, S) \rangle. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Podemos ainda fazer alguma manipulação algébrica no segundo e terceiro termos do lado direito da equação anterior, ou seja, retirando da soma em j o termo quando $j = l$, e na soma em k o termo $k = m$. Teremos, portanto,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle &= -2 \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{lm}(\sigma, S) \rangle \\ &+ \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{lm}(\sigma, S) \rangle + \sum_{j \neq l} \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle \\ &- 2 \langle \sigma_l S_m \omega_{lm}(\sigma, S) \rangle - 2 \sum_{k \neq m} \langle \sigma_l S_m \omega_{lk}(\sigma, S) \rangle. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Portanto, ficamos com a seguinte expressão para a evolução temporal da função de correlação:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle &= - \langle \sigma_l (\tilde{S}_m + S_m) \omega_{lm}(\sigma, S) \rangle \\ &+ \sum_{\substack{j \neq l \\ (PV \text{ de } m)}} \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle \\ &- 2 \sum_{\substack{k \neq m \\ (PV \text{ de } l)}} \langle \sigma_l S_m \omega_{lk}(\sigma, S) \rangle. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Da mesma forma, se $A(\sigma, S) = \sigma_l S_m^2$, teremos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m^2 \rangle &= - \langle \sigma_l (\tilde{S}_m^2 + S_m^2) \omega_{lm}(\sigma, S) \rangle \\ &+ \sum_{\substack{j \neq l \\ (PV \text{ de } m)}} \langle \sigma_l (\tilde{S}_m^2 - S_m^2) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle \end{aligned}$$

$$-2 \sum_{\substack{k \neq m \\ (PV \text{ de } l)}} \langle \sigma_l S_m^2 \omega_{lk}(\sigma, S) \rangle. \quad (3.21)$$

Finalmente, podemos escrever as equações que descrevem a evolução temporal das magnetizações e das funções de correlação entre primeiros vizinhos, para o modelo de Ising com spins mistos, quando ocorrem excitações simultâneas de dois spins vizinhos mais próximos em cada instante de tempo:

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l \rangle = D_l, \quad (3.22)$$

$$\frac{d}{dt} \langle S_m \rangle = E_m, \quad (3.23)$$

$$\frac{d}{dt} \langle S_m^2 \rangle = F_m, \quad (3.24)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m \rangle = D_{lm}, \quad (3.25)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \sigma_l S_m^2 \rangle = E_{lm}, \quad (3.26)$$

onde

$$D_l = -2 \sum_{(PV^k \text{ de } l)} \langle \sigma_l \omega_{lk}(\sigma, S) \rangle, \quad (3.27)$$

$$E_m = \sum_{(PV^j \text{ de } m)} \langle (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle, \quad (3.28)$$

$$F_m = \sum_{(PV^j \text{ de } m)} \langle (\tilde{S}_m^2 - S_m^2) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle, \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} D_{lm} = & - \langle \sigma_l (\tilde{S}_m + S_m) \omega_{lm}(\sigma, S) \rangle \\ & + \sum_{\substack{j \neq l \\ (PV \text{ de } m)}} \langle \sigma_l (\tilde{S}_m - S_m) \omega_{jm}(\sigma, S) \rangle \\ & - 2 \sum_{\substack{k \neq m \\ (PV \text{ de } l)}} \langle \sigma_l S_m \omega_{lk}(\sigma, S) \rangle, \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned}
E_{lm} = & - \left\langle \sigma_l \left(\tilde{S}_m^2 + S_m^2 \right) \omega_{lm} (\sigma, S) \right\rangle \\
& + \sum_{\substack{j \neq l \\ (PV \text{ de } m)}} \left\langle \sigma_l \left(\tilde{S}_m^2 - S_m^2 \right) \omega_{jm} (\sigma, S) \right\rangle \\
& - 2 \sum_{\substack{k \neq m \\ (PV \text{ de } l)}} \left\langle \sigma_l S_m^2 \omega_{lk} (\sigma, S) \right\rangle.
\end{aligned} \tag{3.31}$$

Os valores esperados dados pelas equações (3.27) a (3.31) estão listados no apêndice A, e foram obtidos utilizando-se as equações (2.130) a (2.132) da aproximação de pares.

3.5 Competição entre os dois processos dinâmicos

Nesta seção apresentaremos um estudo da competição entre as duas dinâmicas estocásticas que foram estudadas anteriormente para o modelo de Ising misto ferromagnético. A dinâmica estocástica que é simulada pelo processo de Glauber de inversão de um único spin por vez ocorre com probabilidade p . A outra dinâmica, que simula um fluxo contínuo de energia sobre o sistema, privilegiando os estados de mais alta energia, e que está associada à mudança simultânea de um par de spins vizinhos mais próximos, ocorre com probabilidade $(1 - p)$.

As equações de movimento que descrevem o efeito conjunto desses dois processos podem ser escritas na seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} m_1 = p A_1 (m_1, m_2, R, q, q_1) + (1 - p) D_1 (m_1, m_2, R, q, q_1), \tag{3.32}$$

$$\frac{d}{dt} m_2 = p B_2 (m_1, m_2, R, q, q_1) + (1 - p) E_2 (m_1, m_2, R, q, q_1), \tag{3.33}$$

$$\frac{d}{dt} q = p C_2 (m_1, m_2, R, q, q_1) + (1 - p) F_2 (m_1, m_2, R, q, q_1), \tag{3.34}$$

$$\frac{d}{dt} R = p A_{12} (m_1, m_2, R, q, q_1) + (1 - p) D_{12} (m_1, m_2, R, q, q_1), \tag{3.35}$$

$$\frac{d}{dt}q_1 = pB_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1) + (1 - p)E_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1). \quad (3.36)$$

3.5.1 Estados estacionários: diagrama de fases

As soluções estacionárias das equações (3.32) a (3.36) não podem ser obtidas analiticamente. Para fazermos este estudo utilizamos aqui também o método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem, como feito anteriormente, para resolver as equações de movimento somente para o processo de Glauber.

De imediato, observamos que as soluções estacionárias para esse sistema de equações diferenciais nos levam a três tipos de fases, identificadas pelos valores dos parâmetros de ordem. Definimos estas três fases da seguinte forma:

- 1 - Fase Ferrimagnética (F): $m_1 \neq m_2$, e $m_1, m_2 > 0$;
- 2 - Fase Paramagnética (P): $m_1 = m_2 = 0$;
- 3 - Fase Antiferrimagnética (AF): $m_1 \neq m_2$, $m_1 < 0$ e $m_2 > 0$.

Na figura 3.1 podemos observar duas linhas de transições de fases que separam as fases definidas acima. A transição entre as fases ferrimagnética e paramagnética é contínua, bem como aquela entre as fases paramagnética e antiferrimagnética, ou seja, os parâmetros de ordem vão continuamente a zero ao se passar de uma fase para outra.

Notamos que para $Q = 0$ ($p = 1$), o estado estacionário coincide com o estado de equilíbrio, como visto no capítulo anterior, e a temperatura crítica é $\theta_c = 0,3068$, que é a temperatura crítica de equilíbrio obtida na aproximação de pares.

Observamos que a competição entre os dois processos torna-se efetiva já para valores de p ligeiramente menores que 1. Podemos verificar que:

a) Para $\theta < \theta_c$, e para valores pequenos do parâmetro de competição Q , o processo de Glauber é o dominante, e a fase ferrimagnética é estável abaixo de um certo valor crítico

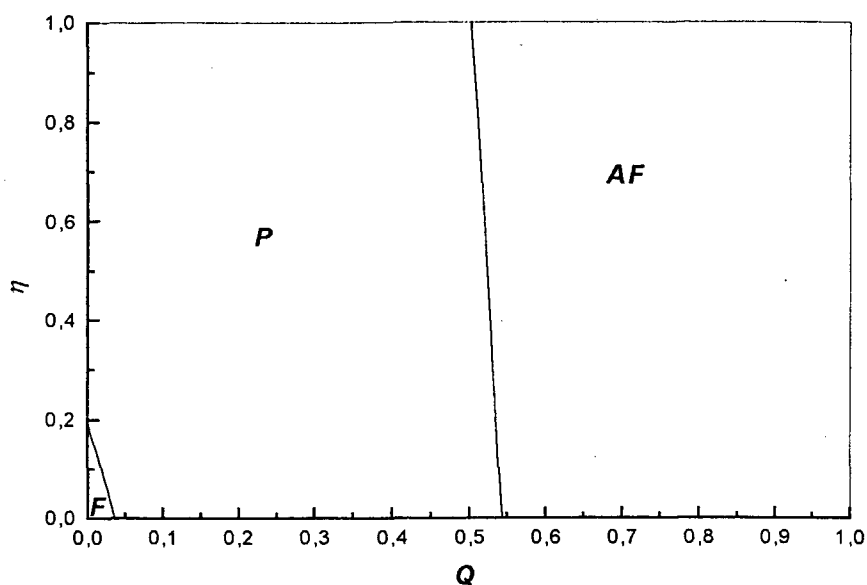


Figura 3-1: Diagrama de fases do sistema de Ising misto ferromagnético, com dinâmicas competitivas, obtido através da aproximação de pares dinâmica. $\eta = \exp(-1/2\theta)$, onde $\theta = k_B T/2zJ$ é a temperatura reduzida do banho térmico, e $Q = (1-p)$ é o parâmetro de competição entre os dois processos. *F*, *P* e *AF* representam as fases ferrimagnética, paramagnética e antiferrimagnética, respectivamente.

do parâmetro de competição. Mesmo para $\theta = 0$, note que a mudança de dois spins simultaneamente destrói facilmente o estado estacionário ferrimagnético. O valor crítico para $\theta = 0$ é $Q_c = 0.04$.

b) Acima deste valor crítico do parâmetro de competição, o fluxo de energia destrói o estado ordenado ferrimagnético, e então passamos para a fase paramagnética correspondente ao estado estacionário completamente desordenado, onde as magnetizações de ambas as sub-redes se anulam.

c) Aumentando-se ainda mais o fluxo de energia, passamos por um outro valor crítico do parâmetro de competição, para o qual a fase paramagnética se torna instável e aparece uma fase do tipo antiferrimagnética. Note que a fronteira de fases entre as fases paramagnética e antiferrimagnética é quase que independente da temperatura, o que evidencia o carácter

dominante do processo de inversão simultânea de dois spins, escolhido para ser independente da temperatura. O valor crítico de Q para a transição para-antiferrimagnética, para $T = 0$, é $Q_c = 0.54$.

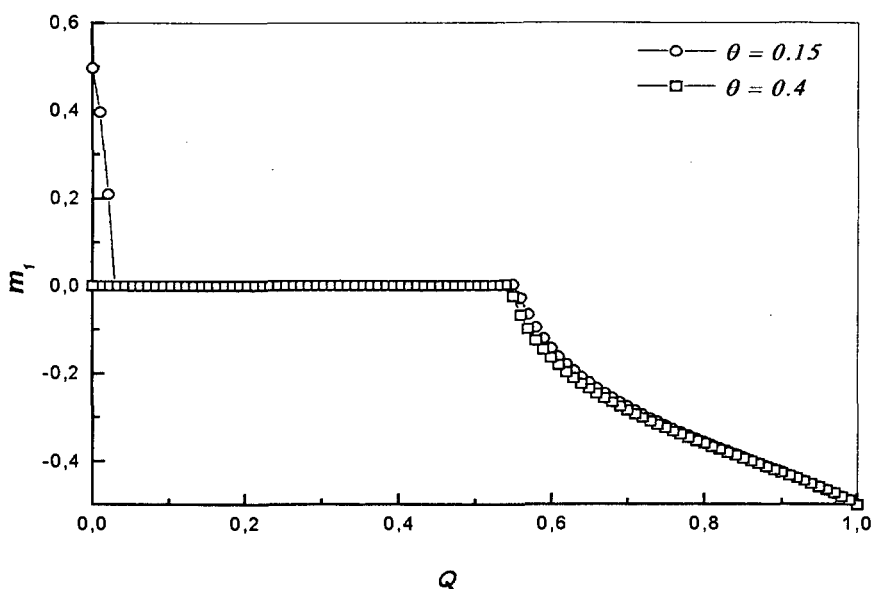


Figura 3-2: Magnetização $m_1 = \langle \sigma \rangle$ em função do parâmetro de competição para dois valores diferentes de temperatura.

Na figura 3.2, observamos o comportamento da magnetização de sub-rede σ , $m_1 = \langle \sigma \rangle$, em função do parâmetro de competição para dois valores diferentes de temperatura, um abaixo e outro acima de θ_c . Se observarmos o comportamento abaixo da temperatura crítica, notamos que a magnetização m_1 parte de um valor igual a $1/2$, para o parâmetro de competição $Q = 0$, e decai continuamente à medida que o parâmetro de competição aumenta, e passa a ser igual a zero acima de um certo valor crítico do parâmetro de competição, caracterizando um estado estacionário desordenado, e depois diminui continuamente até $-1/2$, para valores grandes do parâmetro de competição Q . Já para temperaturas acima da temperatura crítica, a magnetização começa com um valor igual a zero para o parâmetro

de competição igual a $Q = 0$, ou seja, começa num estado desordenado e permanece neste estado até um certo valor crítico do parâmetro de competição, e depois assume valores decrescentes, atingindo finalmente o valor $m_1 = -1/2$ para $Q \rightarrow 1$, ou seja, quando apenas a mudança de dois spins é o processo que permanece.

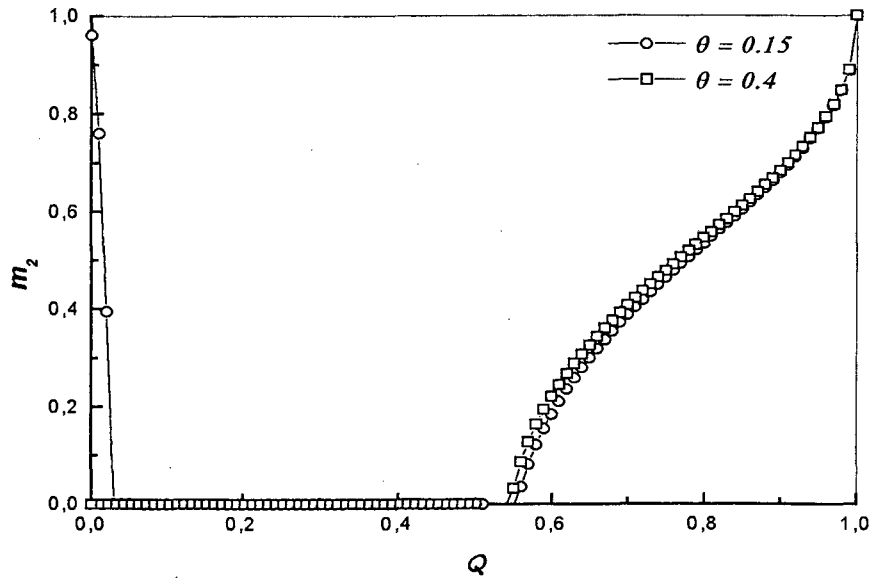


Figura 3-3: Magnetização $m_2 = \langle S \rangle$ em função do parâmetro de competição para dois valores diferentes de temperatura.

Agora, se observarmos a figura 3.3, percebemos que o comportamento de $m_2 = \langle S \rangle$ é semelhante ao de m_1 , diferenciando-se apenas quanto aos valores assumidos quando atravessamos a fronteira entre as fases paramagnética e antiferrimagnética: quando $m_1 < 0$, m_2 passa a ser positivo.

Nas figuras 3.4, 3.5 e 3.6, exibimos, por uma questão de completeza, o comportamento das funções $R = \langle \sigma S \rangle$, $q = \langle S^2 \rangle$ e $q_1 = \langle \sigma S^2 \rangle$ em função do parâmetro de competição Q . Desta forma, podemos concluir que esse sistema exhibe claramente o fenômeno de auto-organização: quando não há um fluxo de energia sobre o sistema, observamos uma fase

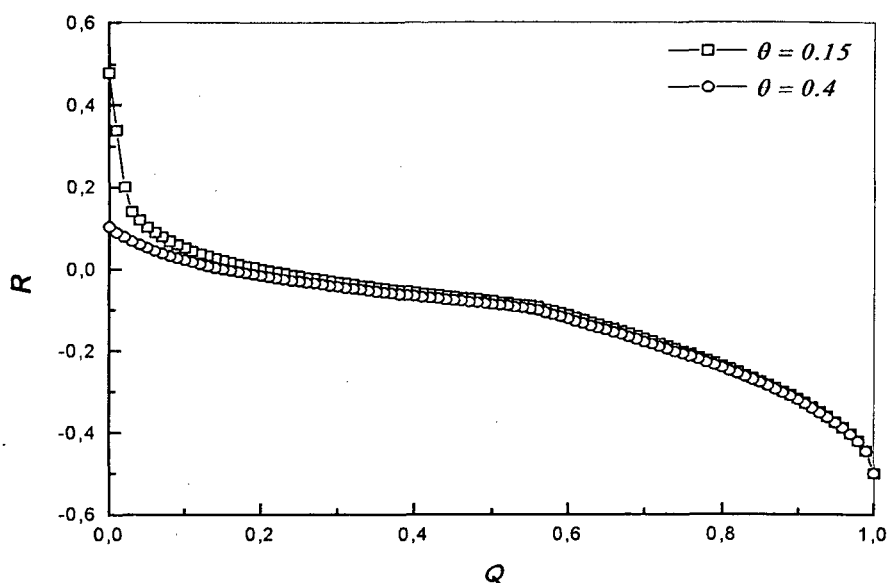


Figura 3-4: Função de correlação $R = \langle \sigma S \rangle$ em função do parâmetro de competição, para dois valores diferentes de temperatura.

ferrimagnética estável para $\theta < \theta_c$. Porém, quando um pequeno fluxo de energia é aplicado, o estado ferrimagnético torna-se instável devido à mudança simultânea de pares de spins vizinhos, e passamos para uma fase paramagnética. Aumentando-se ainda mais o fluxo de energia, a fase paramagnética torna-se instável e, acima de um determinado valor crítico do fluxo, surge uma nova fase ordenada, do tipo antiferrimagnética. Esperamos que simulações de Monte Carlo possam caracterizar melhor essas transições, especialmente a pequena área ocupada pela fase ferrimagnética no diagrama de fases.

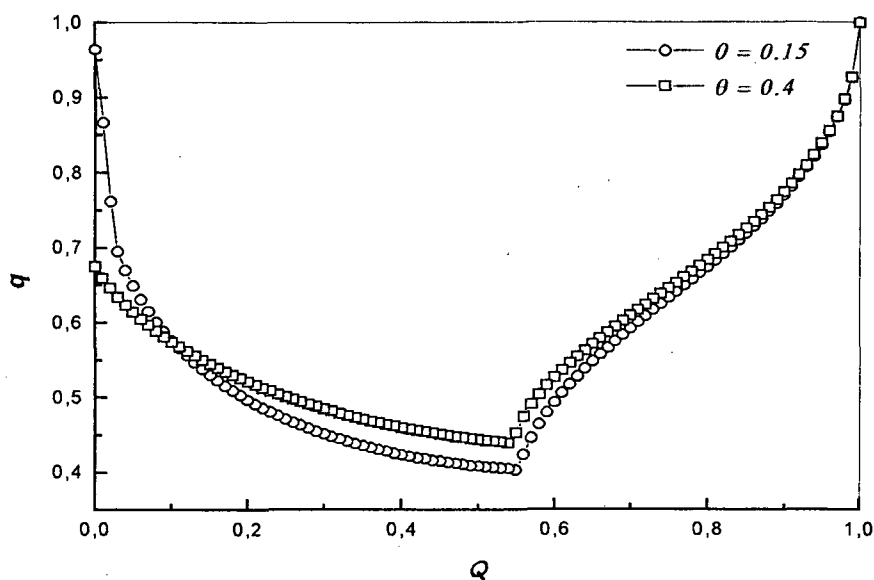


Figura 3-5: Parâmetro $q = \langle S^2 \rangle$ em função do parâmetro de competição, para dois valores diferentes de temperatura.

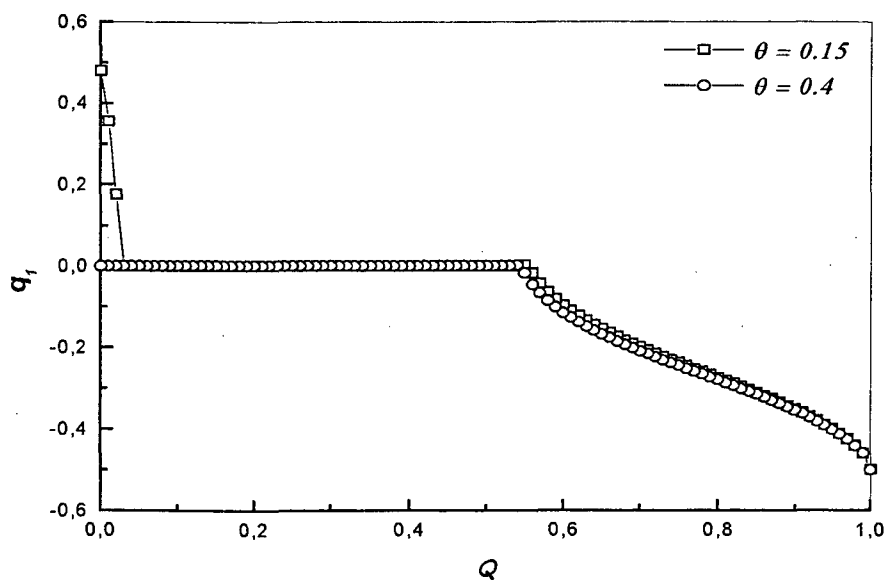


Figura 3-6: Gráfico do parâmetro $q_1 = \langle \sigma S^2 \rangle$ em função do parâmetro de competição, para dois valores diferentes de temperatura.

Capítulo 4

Conclusões

Neste trabalho estudamos os estados estacionários de um modelo de Ising cinético, com spins mistos $\sigma = 1/2$ e $S = 1$. Consideramos o modelo em duas sub-redes interpenetrantes, uma composta pelos spins $\sigma = 1/2$ e a outra pelos spins $S = 1$. As interações são assumidas ferromagnéticas e apenas interações entre primeiros vizinhos foram consideradas. O modelo foi estudado através do formalismo da equação mestra e empregamos a aproximação de pares para desacoplar as equações de movimento. A evolução do sistema em direção aos seus estados estacionários foi obtida através da competição entre dois processos estocásticos: transições que envolvem um ou dois spins vizinhos mais próximos na unidade de tempo. No processo dinâmico envolvendo uma mudança no estado de um spin da sub-rede σ ou da sub-rede S , a transição ocorre de acordo com a dinâmica de Glauber. Se esse fosse o único processo dinâmico presente o estado estacionário seria o estado de equilíbrio. Entretanto, admitimos a presença de uma segunda dinâmica que envolve a mudança simultânea de dois spins vizinhos mais próximos σ e S . Neste caso, essa mudança privilegia os estados com maior energia, independentemente da temperatura do banho térmico. Dependendo do peso de cada um desses processos os estados estacionários do sistema podem ser do tipo ferrimagnético, paramagnético ou antiferrimagnético. A fase ferrimagnética ocupa uma

região muito pequena do diagrama de fases. Ela é estável apenas se a probabilidade de um par de spins vizinhos mais próximos absorver energia de uma fonte externa for muito menor que a probabilidade de um spin relaxar no banho térmico. As transições encontradas são todas contínuas, e o sistema exhibe o fenômeno de auto-organização. Além do diagrama de fases determinamos o comportamento das magnetizações de sub-rede e das funções de correlação em função da temperatura e do parâmetro de competição entre os dois processos estocásticos.

Em trabalhos futuros pretendemos utilizar métodos mais sofisticados como, por exemplo, efetuar simulações de Monte Carlo nesse sistema com objetivo de confirmar ou não a existência do fenômeno de auto-organização. Pretendemos também através dessas simulações encontrar os valores dos expoentes críticos estacionários ν, β e γ e, inclusive, o expoente crítico dinâmico z , e verificar qual é a classe de universalidade desse modelo, já que a dinâmica não é simplesmente do tipo spin para cima, spin para baixo.

Outro problema de interesse é a inclusão da anisotropia de campo cristalino do tipo $D \sum_i S_i^2$. Para os estados de equilíbrio surgem fenômenos interessantes, como o aparecimento de um ponto de compensação, onde a magnetização resultante é nula abaixo da temperatura crítica, e do ponto tricrítico, onde a linha de pontos críticos termina e a transição passa a ser de primeira ordem. Pretendemos investigar o comportamento dinâmico desses pontos.

Apêndice A

Expressões para os valores médios da aproximação de pares.

Neste apêndice apresentamos as expressões explícitas para as funções definidas nas eqs. (3.27) a (3.31), obtidas utilizando a aproximação de pares dinâmica, e as variáveis x_1 , x_2 , z_2 , y_1 , y_2 , v_1 , v_2 , z , ω , g_1 e g_2 , definidas na última seção do capítulo 2. Temos, portanto, que:

$$\begin{aligned} D_1(m_1, m_2, R, q, q_1) = & \\ & -\frac{8}{x_1^3 x_2^3} \left(2z^7 + 6z^6 v_2 + 6z^5 v_2^2 + 6z^6 g_1 + 18z^5 g_1 v_2 + 18z^4 g_1 v_2^2 \right. \\ & + 6z^6 v_1 + 18z^5 v_1 v_2 + 6z^5 g_1^2 + 18z^4 g_1^2 v_2 + 12z^5 g_1 v_1 + 36z^4 g_1 v_1 v_2 \\ & + 6z^5 v_1^2 + 2z^4 g_1^3 + 6z^4 g_1^2 v_1 + 3z^4 g_1 v_1^2 + 6z^3 g_1^3 v_2 + z^4 v_2^3 + 3z^3 g_1 v_2^3 \\ & \left. + 9z^4 v_1 v_2^2 + 9z^3 g_1^2 v_2^2 \right) \\ & -\frac{8}{x_1^3 z_2^3} \left(2z^3 g_1^4 + 6z^3 g_1^3 g_2 + 6z^3 g_1^2 g_2^2 + 2z^3 g_1 g_2^3 + 18z^2 g_1^4 g_2 + 18z^2 g_1^3 g_2^2 \right. \\ & + 6z^2 g_1^2 g_2^3 + 18z^2 v_1 g_1^3 g_2 + 18z^2 v_1 g_1^2 g_2^2 + 18z g_1^5 g_2 + 18z g_1^4 g_2^2 + 3z^2 v_1 g_1 g_2^3 \\ & + 3z g_1^3 g_2^3 + 18z v_1 g_1^3 g_2^2 + 6z v_1 g_1^2 g_2^3 + 3z v_1^2 g_1 g_2^3 + 3g_1^5 g_2^2 + g_1^4 g_2^3 + 3v_1 g_1^3 g_2^3 \\ & \left. + 3z^2 v_1 g_1^4 + 3z g_1^6 + 6z v_1 g_1^5 + 18z v_1 g_1^4 g_2 + 3z v_1^2 g_1^4 + g_1^7 + 3g_1^6 g_2 + 3v_1 g_1^6 \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{8}{x_1^3 y_2^3} \left(6z^3 v_1^3 \omega + 6z^3 v_1^2 \omega^2 + 2z^3 v_1 \omega^3 + 18z^2 v_1^3 g_1 \omega + 18z^2 v_1^2 g_1 \omega^2 \right. \\
& + 6z^2 v_1 g_1 \omega^3 + 18z^2 v_1^3 \omega^2 + 6z^2 v_1^2 \omega^3 + 18z v_1^2 g_1^2 \omega^2 + 6z v_1 g_1^2 \omega^3 \\
& + 36z v_1^3 g_1 \omega^2 + 12z v_1^2 g_1 \omega^3 + 6z v_1^3 \omega^3 + 6v_1^2 g_1^3 \omega^2 + 2v_1 g_1^3 \omega^3 + 6v_1^2 g_1^2 \omega^3 \\
& \left. + 3v_1^3 g_1 \omega^3 + z^3 v_1^4 + 3z^2 v_1^4 g_1 + 9z^2 v_1^4 \omega + 9z v_1^3 g_1^2 \omega \right) \\
& + \frac{8}{y_1^3 y_2^3} \left(2\omega^7 + 6\omega^6 v_1 + 6\omega^5 v_1^2 + 6\omega^6 g_2 + 18\omega^5 g_2 v_1 + 18\omega^4 g_2 v_1^2 + 6\omega^6 v_2 \right. \\
& + 18\omega^5 v_1 v_2 + 6\omega^5 g_2^2 + 18\omega^4 g_2^2 v_1 + 12\omega^5 g_2 v_2 + 36\omega^4 g_2 v_1 v_2 + 6\omega^5 v_2^2 \\
& + 2\omega^4 g_2^3 + 6\omega^4 g_2^2 v_2 + 3\omega^4 g_2 v_2^2 + 6\omega^3 g_2^3 v_1 + \omega^4 v_1^3 + 3\omega^3 g_2 v_1^3 + 9\omega^4 v_2 v_1^2 \\
& \left. + 9\omega^3 g_2^2 v_1^2 \right) \\
& + \frac{8}{y_1^3 z^3} \left(2\omega^3 g_2^4 + 6\omega^3 g_2^3 g_1 + 6\omega^3 g_1^2 g_2^2 + 2\omega^3 g_2 g_1^3 + 18\omega^2 g_2^4 g_1 + 18\omega^2 g_2^3 g_1^2 \right. \\
& + 6\omega^2 g_2^2 g_1^3 + 18\omega^2 v_2 g_2^3 g_1 + 18\omega^2 v_2 g_2^2 g_1^2 + 18\omega g_2^5 g_1 + 18\omega g_2^4 g_1^2 + 3\omega^2 v_2 g_2 g_1^3 \\
& + 3\omega g_2^3 g_1^3 + 18\omega v_2 g_2^3 g_1^2 + 6\omega v_2 g_2^2 g_1^3 + 3\omega v_2^2 g_2 g_1^3 + 3g_2^5 g_1^2 + g_2^4 g_1^3 + 3v_2 g_2^3 g_1^3 \\
& + 3\omega^2 v_2 g_2^4 + 3\omega g_2^6 + 6\omega v_2 g_2^5 + 18\omega v_2 g_2^4 g_1 + 3\omega v_2^2 g_2^4 + g_2^7 + 3g_2^6 g_1 + 3v_2 g_2^6 \left. \right) \\
& + \frac{8}{y_1^3 x_2^3} \left(6\omega^3 v_2^3 z + 6\omega^3 v_2^2 z^2 + 2\omega^3 v_2 z^3 + 18\omega^2 v_2^3 g_2 z + 18\omega^2 v_2^2 g_2 z^2 + 6\omega^2 v_2 g_2 z^3 \right. \\
& + 18\omega^2 v_2^3 z^2 + 6\omega^2 v_2^2 z^3 + 18\omega v_2^2 g_2^2 z^2 + 6\omega v_2 g_2^2 z^3 + 36\omega v_2^3 g_2 z^2 + 12\omega v_2^2 g_2 z^3 \\
& + 6\omega v_2^3 z^3 + 6v_2^2 g_2^3 z^2 + 2v_2 g_2^3 z^3 + 6v_2^2 g_2^2 z^3 + 3v_2^3 g_2 z^3 + \omega^3 v_2^4 + 3\omega^2 v_2^4 g_2 \\
& \left. + 9\omega^2 v_2^4 z + 9\omega v_2^3 g_2^2 z \right), \tag{A.1}
\end{aligned}$$

$$E_2(m_1, m_2, R, q, q_1) =$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{4}{x_1^3 x_2^3} \left(3z^7 + 9z^6 v_2 + 9z^5 v_2^2 + z^4 v_2^3 + 9z^6 g_1 + 27z^5 g_1 v_2 + 27z^4 g_1 v_2^2 \right. \\
& \left. + 6z^6 v_1 + 3z^3 g_1 v_1^3 + 9z^6 v_1 + 27z^5 v_1 v_2 + 9z^4 v_1 v_2^2 + 9z^5 g_1^2 + 27z^4 g_1^2 v_2 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +9z^3g_1^2v_2^2 + 18z^5g_1v_1 + 54z^4g_1v_1v_2 + 9z^5v_1^2 + 3z^4g_1^3 + 9z^3g_1^3v_2 \\
& +9z^4g_1^2v_1 + 6z^4g_1v_1^2) \\
& + \frac{4}{x_1^3z_2^3} (3z^2v_1g_1g_2^3 + 3zg_1^3g_2^3 + 18zv_1g_1^3g_2^2 + 6zv_1g_1^2g_2^3 + 3zv_1^2g_1g_2^3 \\
& +3g_1^5g_2^2 + g_1^4g_2^3 + 3v_1g_1^3g_2^3 - 3z^2v_1g_1^4 - 3zg_1^6 - 6zv_1g_1^5 - 18zv_1g_1^4g_2 \\
& -3zv_1^2g_1^4 - g_1^7 - 3g_1^6g_2 - 3v_1g_1^6) \\
& + \frac{4}{x_1^3y_2^3} (9z^3v_1^3\omega + 9z^3v_1^2\omega^2 + 3z^3v_1\omega^3 + 27z^2v_1^3g_1\omega + 27z^2v_1^2g_1\omega^2 \\
& +9z^2v_1g_1\omega^3 + 27z^2v_1^3\omega^2 + 9z^2v_1^2\omega^3 + 27zv_1^2g_1^2\omega^2 + 9zv_1g_1^2\omega^3 \\
& +54zv_1^3g_1\omega^2 + 18zv_1^2g_1\omega^3 + 9zv_1^3\omega^3 + 9v_1^2g_1^3\omega^2 + 3v_1g_1^3\omega^3 + 9v_1^2g_1^2\omega^3 \\
& +6v_1^3g_1\omega^3 + z^3v_1^4 + 3z^2v_1^4g_1 + 9z^2v_1^4\omega + 9zv_1^3g_1^2\omega) \\
& + \frac{4}{y_1^3y_2^3} (3\omega^7 + 9\omega^6v_1 + 9\omega^5v_1^2 + \omega^4v_1^3 + 9\omega^6g_2 + 27\omega^5g_2v_1 + 27\omega^4g_2v_1^2 \\
& +6\omega^6v_2 + 3\omega^3g_2v_1^3 + 9\omega^6v_2 + 27\omega^5v_1v_2 + 9\omega^4v_2v_1^2 + 9\omega^5g_2^2 + 27\omega^4g_2^2v_1 \\
& +9\omega^3g_2^2v_1^2 + 18\omega^5g_2v_2 + 54\omega^4g_2v_1v_2 + 9\omega^5v_2^2 + 3\omega^4g_2^3 + 9\omega^3g_2^3v_1 \\
& +9\omega^4g_2^2v_2 + 6\omega^4g_2v_2^2) \\
& + \frac{4}{y_1^3z_2^3} (3\omega^2v_2g_2g_1^3 + 3\omega g_1^3g_2^3 + 18\omega v_2g_2^3g_1^2 + 6\omega v_2g_2^2g_1^3 + 3\omega v_2^2g_2g_1^3 \\
& +3g_2^5g_1^2 + g_2^4g_1^3 + 3v_2g_1^3g_2^3 - 3\omega^2v_2g_2^4 - 3\omega g_1^6 - 6\omega v_2g_2^5 - 18\omega v_2g_2^4g_1 \\
& -3\omega v_2^2g_2^4 - g_2^7 - 3g_2^6g_1 - 3v_2g_2^6) \\
& - \frac{4}{y_1^3x_2^3} (9\omega^3v_2^3z + 9\omega^3v_2^2z^2 + 3\omega^3v_2z^3 + 27\omega^2v_2^3g_2z + 27\omega^2v_2^2g_2z^2 \\
& +9\omega^2v_2g_2z^3 + 27\omega^2v_2^3z^2 + 9\omega^2v_2^2z^3 + 27\omega v_2^2g_2^2z^2 + 9\omega v_2g_2^2z^3 \\
& +54\omega v_2^3g_2z^2 + 18\omega v_2^2g_2z^3 + 9\omega v_2^3z^3 + 9v_2^2g_2^3z^2 + 3v_2g_2^3z^3 + 9v_2^2g_2^2z^3 \\
& +6v_2^3g_2z^3 + \omega^3v_2^4 + 3\omega^2v_2^4g_2 + 9\omega^2v_2^4z + 9\omega v_2^3g_2^2z), \tag{A.2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& F_2(m_1, m_2, R, q, q_1) = \\
& -\frac{4}{x_1^3 x_2^3} \left(z^7 + 3z^6 v_2 + 3z^5 v_2^2 + z^4 v_2^3 + 3z^6 g_1 + 9z^5 g_1 v_2 + 9z^4 g_1 v_2^2 \right. \\
& + 3z^6 v_1 + 3z^3 g_1 v_2^3 + 9z^6 v_1 + 9z^5 v_1 v_2 + 9z^4 v_1 v_2^2 + 3z^5 g_1^2 + 9z^4 g_1^2 v_2 \\
& + 9z^3 g_1^2 v_2^2 + 6z^5 g_1 v_1 + 18z^4 g_1 v_1 v_2 + 3z^5 v_1^2 + z^4 g_1^3 + 3z^3 g_1^3 v_2 \\
& \left. + 3z^4 g_1^2 v_1 \right) \\
& + \frac{4}{x_1^3 z^3} \left(3z^2 v_1 g_1 g_2^3 + 3z g_1^3 g_2^3 + 18z v_1 g_1^3 g_2^2 + 6z v_1 g_1^2 g_2^3 + 3z v_1^2 g_1 g_2^3 \right. \\
& + 3g_1^5 g_2^2 + g_1^4 g_2^3 + 3v_1 g_1^3 g_2^3 - 3z^2 v_1 g_1^4 - 3z g_1^6 - 6z v_1 g_1^6 - 18z v_1 g_1^4 g_2 \\
& \left. - 3z v_1^2 g_1^4 - g_1^7 - 3g_1^6 g_2 - 3v_1 g_1^6 \right) \\
& - \frac{4}{x_1^3 y_2^3} \left(z^3 v_1^3 \omega + 3z^3 v_1^2 \omega^2 + 3z^3 v_1^3 \omega + z^3 v_1^4 + 3z^2 v_1^4 g_1 + 9z^2 v_1^3 g_1 \omega \right. \\
& + 9z^2 v_1^2 g_1 \omega^2 + 3z^2 v_1 g_1 \omega^3 + 9z^2 v_1^4 \omega + 9z^2 v_1^3 \omega^2 + 3z^2 v_1^2 \omega^3 + 9z g_1^2 v_1^3 \omega \\
& + 9z v_1^2 g_1^2 \omega^2 + 3z v_1 g_1^2 \omega^3 + 18z v_1^3 g_1 \omega^2 + 6z v_1^2 g_1 \omega^3 + 3z v_1^3 \omega^3 \\
& \left. + 3v_1^2 g_1^3 \omega^2 + v_1 g_1^3 \omega^3 + v_1^2 g_1^2 \omega^3 \right) \\
& - \frac{4}{y_1^3 y_2^3} \left(\omega^7 + 3\omega^6 v_1 + 3\omega^5 v_1^2 + \omega^4 v_1^3 + 3\omega^6 g_2 + 9\omega^5 g_2 v_1 + 9\omega^4 g_2 v_1^2 \right. \\
& + 3\omega^6 v_2 + 3\omega^3 g_2 v_1^3 + 9\omega^6 v_2 + 9\omega^5 v_1 v_2 + 9\omega^4 v_2 v_1^2 + 3\omega^5 g_2^2 + 9\omega^4 g_2^2 v_1 \\
& + 9\omega^3 g_2^2 v_1^2 + 6\omega^5 g_2 v_2 + 18\omega^4 g_2 v_1 v_2 + 3\omega^5 v_2^2 + \omega^4 g_2^3 + 3\omega^3 g_2^3 v_1 \\
& \left. + 3\omega^4 g_2^2 v_2 \right) \\
& + \frac{4}{y_1^3 z_2^3} \left(3\omega^2 v_2 g_2 g_1^3 + 3\omega g_1^3 g_2^3 + 18\omega v_2 g_2^3 g_1^2 + 6\omega v_2 g_2^2 g_1^3 + 3\omega v_2^2 g_2 g_1^3 \right. \\
& + 3g_2^5 g_1^2 + g_2^4 g_1^3 + 3v_2 g_1^3 g_2^3 - 3\omega^2 v_2 g_2^4 - 3\omega g_2^6 - 6\omega v_2 g_2^5 - 18\omega v_2 g_2^4 g_1 \\
& \left. + 3\omega^2 v_2 g_2^4 - 3\omega g_2^6 - 6\omega v_2 g_2^5 - 18\omega v_2 g_2^4 g_1 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -3\omega v_2^2 g_2^4 - g_2^7 - 3g_2^6 g_1 - 3v_2 g_2^6) \\
& - \frac{4}{y_1^3 x_2^3} (\omega^3 v_2^3 z + 3\omega^3 v_2^2 z^2 + 3\omega^3 v_2^3 z + \omega^3 v_2^4 + 3\omega^2 v_2^4 g_2 + 9\omega^2 v_2^3 g_2 z \\
& + 9\omega^2 v_2^2 g_2 z^2 + 3\omega^2 v_2 g_2 z^3 + 9\omega^2 v_2^4 z + 9\omega^2 v_2^3 z^2 + 3\omega^2 v_2^2 z^3 + 9\omega g_2^2 v_2^3 z \\
& + 9\omega v_2^2 g_2^2 z^2 + 3\omega v_2 g_2^2 z^3 + 18\omega v_2^3 g_2 z^2 + 6\omega v_2^2 g_2 z^3 + 3\omega v_2^3 z^3 \\
& + 3v_2^2 g_2^3 z^2 + v_2 g_2^3 z^3 + v_2^2 g_2^2 z^3), \tag{A.3}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1) = & \\
& \frac{1}{x_1^3 x_2^3} (-24z^7 - 54z^6 v_2 - 36z^5 v_2^2 - 6z^4 v_2^3 - 60z^6 g_1 - 126z^5 g_1 v_2 \\
& - 72z^4 g_1 v_2^2 - 12z^3 g_1 v_2^3 - 48z^6 v_1 - 90z^5 v_1 v_2 - 36z^4 v_1 v_2^2 - 48z^5 g_1^2 \\
& - 90z^4 g_1^2 v_2 - 36z^3 g_1^2 v_2^2 - 72z^5 g_1 v_1 - 108z^4 g_1 v_1 v_2 - 24z^5 v_1^2 \\
& - 12z^4 g_1^3 - 18z^3 g_1^3 v_2 - 24z^4 g_1^2 v_1) \\
& + \frac{1}{x_1^3 z_2^3} (-6z^2 v_1 g_1^4 - 6z g_1^6 + 36z v_1 g_1^4 g_2 + 3z v_1^2 g_1^4 + 6g_1^6 g_2 + 6v_1 g_1^6 \\
& - 24z^2 v_1 g_1 g_2^3 - 24z g_1^3 g_2^3 - 72z v_1 g_1^3 g_2^2 - 36z v_1 g_1^2 g_2^3 - 12z v_1^2 g_1 g_2^3 \\
& - 12g_1^5 g_2^3 - 9g_1^4 g_2^3 - 12v_1 g_1^3 g_2^3 - 12z^3 g_1^4 - 36z^3 g_1^3 g_2 - 36z^3 g_1^2 g_2^2 \\
& - 12z^3 g_1 g_2^3 - 36z^2 v_1 g_1^3 g_2 - 36z^2 v_1 g_1^2 g_2^2 - 24z^2 g_1^5 - 72z^2 g_1^4 g_2 \\
& - 72z^2 g_1^3 g_2^2 - 24z^2 g_1^2 g_2^3 - 36z g_1^5 g_2 - 36z g_1^4 g_2^2 - 6z v_1^2 g_1^4) \\
& + \frac{1}{x_1^3 y_2^3} (-18z^3 v_1^3 \omega - 36z^3 v_1^2 \omega^2 - 18z^3 v_1 \omega^3 - 36z^2 v_1^3 \omega^2 - 30z^2 v_1^2 \omega^3 \\
& - 18z^2 v_1^3 g_1 \omega - 72z^2 v_1^2 g_1 \omega^2 - 42z^2 v_1 g_1 \omega^3 - 6z v_1^3 \omega^3 - 36z v_1^2 g_1^2 \omega^2 \\
& - 30z v_1 g_1^2 \omega^3 - 6v_1^3 g_1 \omega^3 - 6v_1^2 g_1^2 \omega^3 + 18z^2 v_1^4 \omega + 6z^2 v_1^4 g_1 + 18z g_1^2 v_1^3 \omega \\
& - 36z v_1^2 g_1 \omega^3 - 6v_1 g_1^3 \omega^3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{y_1^3 y_2^3} \left(-24\omega^7 - 54\omega^6 v_1 - 36\omega^5 v_1^2 - 6\omega^4 v_1^3 - 60\omega^6 g_2 - 126\omega^5 g_2 v_1 \right. \\
& - 72\omega^4 g_2 v_1^2 - 12\omega^3 g_2 v_1^3 - 48\omega^6 v_2 - 90\omega^5 v_1 v_2 - 36\omega^4 v_2 v_1^2 - 48\omega^5 g_2^2 \\
& - 90\omega^4 g_2^2 v_1 - 36\omega^3 g_2^2 v_1^2 - 72\omega^5 g_2 v_2 - 108\omega^4 g_2 v_1 v_2 - 24\omega^5 v_2^2 \\
& \left. - 12\omega^4 g_2^3 - 18\omega^3 g_2^3 v_1 - 24\omega^4 g_2^2 v_2 \right) \\
& + \frac{1}{y_1^3 z_2^3} \left(-6\omega^2 v_2 g_2^4 - 6\omega g_2^6 + 36\omega v_2 g_2^4 g_1 + 3\omega v_2^2 g_2^4 + 6g_2^6 g_1 + 6v_2 g_2^6 \right. \\
& - 24\omega^2 v_2 g_2 g_1^3 - 24\omega g_1^3 g_2^3 - 72\omega v_2 g_2^3 g_1^2 - 36\omega v_2 g_2^2 g_1^3 - 12\omega v_2^2 g_2 g_1^3 \\
& - 12g_2^5 g_1^2 - 9g_2^4 g_1^3 - 12v_2 g_1^3 g_2^3 - 12\omega^3 g_2^4 - 36\omega^3 g_2^3 g_1 - 36\omega^3 g_1^2 g_2^2 \\
& - 12\omega^3 g_2 g_1^3 - 36\omega^2 v_2 g_2^3 g_1 - 36\omega^2 v_2 g_1^2 g_2^2 - 24\omega^2 g_2^5 \\
& \left. - 72\omega^2 g_2^4 g_1 - 72\omega^2 g_2^3 g_1^2 - 24\omega^2 g_2^2 g_1^3 - 36\omega g_2^6 g_1 - 36\omega g_2^4 g_1^2 - 6\omega v_2^2 g_2^4 \right) \\
& + \frac{1}{y_1^3 x_2^3} \left(-18\omega^3 v_2^3 z - 36\omega^3 v_2^2 z^2 - 18\omega^3 v_2 z^3 - 36\omega^2 v_2^3 z^2 - 30\omega^2 v_2^2 z^3 - 18\omega^2 v_2^3 g_2 z \right. \\
& - 72\omega^2 v_2^2 g_2 z^2 - 42\omega^2 v_2 g_2 z^3 - 6\omega v_2^3 z^3 - 36\omega v_2^2 g_2 z^2 - 30\omega v_2 g_2 z^3 - 6v_2^3 g_2 z^3 \\
& \left. - 6v_2^2 g_2 z^3 + 18\omega^2 v_2^4 z + 6\omega^2 v_2^4 g_2 + 18\omega g_2^2 v_2^3 z - 36\omega v_2^2 g_2 z^3 - 6v_2 g_2^3 z^3 \right), \tag{A.4}
\end{aligned}$$

$$E_{12}(m_1, m_2, R, q, q_1) =$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{x_1^3 x_2^3} \left(-18z^7 - 48z^6 v_2 - 42z^5 v_2^2 - 4z^4 v_2^3 - 42z^6 g_1 - 108z^5 g_1 v_2 \right. \\
& - 90z^4 g_1 v_2^2 - 6z^3 g_1 v_2^3 - 54z^6 v_1 - 144z^5 v_1 v_2 - 54z^4 v_1 v_2^2 - 30z^5 g_1^2 \\
& - 72z^4 g_1^2 v_2 - 18z^3 g_1^2 v_2^2 - 84z^5 g_1 v_1 - 216z^4 g_1 v_1 v_2 - 54z^5 v_1^2 - 6z^4 g_1^3 \\
& \left. - 12z^3 g_1^3 v_2 - 30z^4 g_1^2 v_1 - 18z^4 g_1 v_1^2 \right) \\
& + \frac{1}{x_1^3 z_2^3} \left(-8z^3 g_1^4 - 36z^3 g_1^3 g_2 - 48z^3 g_1^2 g_2^2 - 12z^2 g_1^5 - 72z^2 g_1^4 g_2 \right. \\
& - 108z^2 g_1^3 g_2^2 - 144z^2 v_1 g_1^2 g_2^2 - 36z g_1^5 g_2 - 72z g_1^4 g_2^2 - 108z v_1 g_1^3 g_2^2 \\
& \left. - 6g_1^5 g_2^2 - 20z^3 g_1 g_2^3 - 48z^2 g_1^2 g_2^3 - 30z^2 v_1 g_1 g_2^3 - 18z g_1^3 g_2^3 - 48z v_1 g_1^2 g_2^3 \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -30zv_1^2g_1g_2^3 - 4g_1^4g_2^3 - 18v_1g_1^3g_2^3 - 12z^2v_1g_1^4 - 12zg_1^5v_1 - 72zv_1g_1^4g_2 \\
& + 2g_1^7 - 108z^2v_1g_1^3g_2 - 12zv_1^2g_2^4) \\
& + \frac{1}{x_1^3y_2^3} (-10z^3v_1^4 - 48z^3v_1^3\omega - 42z^3v_1^2\omega^2 - 24z^2v_1^4g_1 - 108z^2v_1^3g_1\omega \\
& - 90z^2v_1^2g_1\omega^2 - 72z^2v_1^4\omega - 126z^2v_1^3\omega^2 - 36zg_1^2v_1^3\omega - 180zv_1^3\omega^2g_1 \\
& - 6g_1^3v_1^2\omega^2 - 12z^3v_1\omega^3 - 24z^2g_1v_1\omega^3 - 36z^2v_1^2\omega^3 - 12zv_1g_1^2\omega^3 \\
& - 48zv_1^2g_1\omega^3 - 36zv_1^3\omega^3 - 12v_1^2g_1^2\omega^3 - 54zv_1^2g_1^2\omega^2) \\
& + \frac{1}{x_1^3x_2^3} (-18\omega^7 - 48\omega^6v_1 - 42\omega^5v_1^2 - 4\omega^4v_1^3 - 42\omega^6g_2 - 108\omega^5g_2v_1 \\
& - 90\omega^4g_2v_1^2 - 6\omega^3g_2v_1^3 - 54\omega^6v_2 - 144\omega^5v_1v_2 - 54\omega^4v_2v_1^2 - 30\omega^5g_2^2 \\
& - 72\omega^4g_2^2v_1 - 18\omega^3g_1^2v_2^2 - 84\omega^5g_2v_2 - 216\omega^4g_2v_1v_2 - 54\omega^5v_2^2 - 6\omega^4g_2^3 \\
& - 12\omega^3g_2^3v_1 - 30\omega^4g_2^2v_2 - 18\omega^4g_2v_2^2) \\
& + \frac{1}{x_1^3z_2^3} (-8\omega^3g_2^4 - 36\omega^3g_2^3g_1 - 48\omega^3g_1^2g_2^2 - 12\omega^2g_2^5 - 72\omega^2g_2^4g_1 - 108\omega^2g_2^3g_1^2 \\
& - 144\omega^2v_2g_2^2g_1^2 - 36\omega g_2^5g_1 - 72\omega g_2^4g_1^2 - 108\omega v_2g_2^3g_1^2 - 6g_2^5g_1^2 - 20z^3g_1g_2^3 \\
& - 48z^2g_1^2g_2^3 - 30z^2v_1g_1g_2^3 - 18zg_1^3g_2^3 - 48zv_1g_1^2g_2^3 - 30zv_1^2g_1g_2^3 - 4g_2^4g_1^3 \\
& - 18v_2g_1^3g_2^3 - 12\omega^2v_2g_2^4 - 12\omega g_2^5v_2 - 72\omega v_2g_2^4g_1 + 2g_2^7 - 108\omega^2v_2g_2^3g_1 \\
& - 12\omega v_2^2g_1^4) \\
& + \frac{1}{x_1^3y_2^3} (-10\omega^3v_2^4 - 48\omega^3v_2^3z - 42\omega^3v_2^2z^2 - 24\omega^2v_2^4g_2 - 108\omega^2v_2^3g_2z \\
& - 90\omega^2v_2^2g_2z^2 - 72\omega^2v_2^4z - 126\omega^2v_2^3z^2 - 36\omega g_2^2v_2^3z - 180\omega v_2^3z^2g_2 \\
& - 6g_2^3v_2^2z^2 - 12\omega^3v_2z^3 - 24\omega^2g_2v_2z^3 - 36\omega^2v_2^2z^3 - 12\omega v_2g_2^2z^3 \\
& - 48\omega v_2^2g_2z^3 - 36\omega v_2^3z^3 - 12v_2^2g_2^2z^3 - 54\omega v_2^2g_2^2z^2). \tag{A.5}
\end{aligned}$$

Bibliografia

- [1] R. J. Glauber. *J. of Math. Phys.* **4**, 294, 1963.
- [2] G. Nicolis e I. Prigogine. *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*. Wiley-Interscience, New York, 1977.
- [3] H. Haken. *Synergetics*. Springer-Verlag, 1978.
- [4] N. G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1981.
- [5] T. Tomé e M. J. de Oliveira. *Phys. Rev. A* **40**, 6643, 1989.
- [6] K. Kawasaki. volume 2 de *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editores C. Domb e M. S. Green, Academic Press, London, 1972.
- [7] E. Ising. *Z. Physik* **31**, 253, 1925.
- [8] L. Onsager. *Phys. Rev.* **65**, 117, 1944.
- [9] D. Gatteschi, O. Kahn, J. S. Miller e F. Palacio. *Magnetic Molecular Material, NATO ASI Series*, Kluwe Academic, Dordrecht, 1991.
- [10] G. J. A. Hunter, R. C. L. Jenkins e C. J. Tinsley. *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 4547, 1990.

- [11] R. G. Bowers e B. Y. Yousif. *Phys. Lett.* **96A**, 49, 1983.
- [12] S. L. Schofield e R. G. Bowers. *J. Phys. A: Math. Gen.* **13**, 3697, 1980.
- [13] T. Kaneyoshi. *Sol. Stat. Comm.* **70**, 975, 1989.
- [14] G. M. Buendía e M. A. Novotny. *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 5951, 1997.
- [15] G. M. Buendía e J. A. Liendo. *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 5439, 1997.
- [16] D. Chandler. *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. Oxford University Press, New York, 1987.
- [17] G. L. S. Paula e W. Figueiredo. *Mod. Phys. Lett. B* **11**, 565, 1997.
- [18] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, e W. T. Vetterling. *Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge, 2^a edição, 1993.
- [19] A. F. Siqueira e I. P. Fittipaldi. *J. of Magn. and Magn. Mat.* **54-57**, 678, 1986.
- [20] H. F. Verona de Resende, F. C. Sá Barreto e J. A. Plascak. *Physica* **149A**, 606, 1988.
- [21] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, e E. Teller. *J. Chem. Phys.*, **21**, 1087, 1953.
- [22] S. M. Rezende. *Phys. Rev. B* **27**, 3032, 1983.
- [23] P. A. Fleury, S. P. S. Porto, e R. London. *Phys. Rev. Lett.* **18**, 658, 1967.
- [24] B. C. S. Grandi e W. Figueiredo. *Phys. Rev. E* **53**, 5484, 1996.