

**UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS**

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS**

**E.A.P. DE FÍSICA**

**Energía interna en el contexto de la mecánica  
estadística no-extensiva**

**TESIS**

Para optar el Título Profesional de Licenciado en Física

**AUTOR**

Felipe Américo REYES NAVARRO

**ASESOR**

Jaime Francisco VENTO FLORES

Lima - Perú

2008

# Agradecimientos

A mi asesor, el Prof. Jaime Francisco Vento Flores, por guiar el desarrollo de este trabajo.

A mi familia por todo el apoyo que siempre me brindaron en mis estudios.

A todos los profesores que tuve en mi formación de físico sanmarquino.

# Dedicatoria

A Julia, Américo y Gustavo.

# Resumen

Desde su creación, en 1988 por el investigador brasileño Constantino Tsallis, la mecánica estadística no-extensiva, más conocida como estadística de Tsallis, ha sido intensamente investigada como una alternativa para la mecánica estadística de Boltzmann-Gibbs. Los estudios han abarcado diversas áreas, como teoría cuántica de campo, sistemas complejos, sistemas magnéticos, etc. En esta tesis estudiamos un sistema de dos spins  $\frac{1}{2}$ , así como un sistema compuesto  $A+B$ , con  $S_A = 2$  y  $S_B = \frac{3}{2}$ ; específicamente, analizamos un problema encontrado en el cálculo de la energía interna, en el contexto mecánico-estadístico no-extensivo: las energías internas calculadas en los respectivos subespacios de Hilbert son diferentes a las energías internas calculadas en el espacio de Hilbert completo.

Introducimos dos métodos para el cálculo de la energía interna en los subespacios de Hilbert: (1) el método común de la tercera versión de la mecánica estadística no-extensiva, con las matrices  $\rho_A^q$  y  $\rho_B^q$ , y (2) un método que considera que el ente físico que contiene la información del sistema físico no es la matriz  $\rho$  sino la matriz  $\rho^q$ , por consiguiente es sobre esta última matriz que deben realizarse las trazas parciales para obtener las matrices parciales, las cuales son denominadas  $E_A$  y  $E_B$ , que constituyen la solución adecuada al problema mencionado. El procedimiento de las matrices  $E_A$  y  $E_B$  tuvieron su origen en el artículo *A study on Composed Nonextensive Magnetic System*, *Physica A* **343**, 499 (2004), desde esa fecha hasta la actualidad, el estudio de dicho procedimiento ha sido ampliado, cond-mat/**0701495** (2007). El modelo de Heisenberg en la aproximación de campo medio es utilizado en el cálculo de la energía interna, mostrándose que la aditividad de la energía es satisfecha únicamente con las matrices  $E_A$  y  $E_B$ .

# Abstract

Since its creation for almost two decades now, by Brazilian research professor Constantino Tsallis, the nonextensive statistical mechanics, also known like Tsallis statistics, has been intensely investigated as an alternative for the Boltzmann-Gibbs statistical mechanics. The researches include diverse areas like Quantum Field Theory, complex system, magnetic systems, etc. Therein we study a two spin  $\frac{1}{2}$  system, also a composite  $A+B$  with spins  $S_A = 2$  y  $S_B = \frac{3}{2}$ . Specifically, we analyze a trouble that we get by calculating the subsystems internal energy: the internal energy in full Hilbert space is different to the internal energy in the Hilbert subspaces.

We introduce two methods to the calculation of the internal energy into the Hilbert subspaces: 1) the third version of the Tsallis statistics using the matrices  $\rho_A^q$  y  $\rho_B^q$  and 2) a method that considers that the physical object containing the physical information is not the matrix  $\rho$  but the matrix  $\rho^q$ , therefore the partial trace must be made on this matrix to obtain the partial matrices, denominated  $E_A$  and  $E_B$ , these matrices adequate like solution to the mentioned problem. The method of the matrices  $E_A$  and  $E_B$  begun in the paper *A study on Composed Nonextensive Magnetic System*, *Physica A* 343, 499 (2004), a recent study we find at cond-mat/**0701495** (2007). We utilize the Heisenberg model in mean-field approximation to the calculation of the internal energy, and we show that the energy is additive only using the matrices  $E_A$  y  $E_B$ .

# Epígrafe

God runs electromagnetics by wave theory on Monday, Wednesday, and Friday, and the Devil runs them by quantum theory on Tuesday, Thursday, and Saturday.

Sir William Bragg

The more success the quantum theory has, the sillier it looks.

Albert Einstein

It is often stated that of all the theories proposed in this century, the silliest is quantum theory. In fact, some say that the only thing that quantum theory has going for it is that it is unquestionably correct.

Michio Kaku

# Listado de Figuras

**Figura 4.1** Energía interna total vs.  $T$  para un sistema de spins  $S_A = 2$  y  $S_B = \frac{3}{2}$ .

**Figura 4.2** Magnetización total vs.  $T$  para un sistema de spins  $S_A = 2$  y  $S_B = \frac{3}{2}$ .

**Figura 4.3**  $M_A$  vs.  $T$  para un sistema ferromagnético de spins  $S_A = \frac{1}{2}$  y  $S_B = \frac{1}{2}$ .

**Figura 4.4**  $M_A$  vs.  $T$  y  $M_B$  vs.  $T$  para un sistema antiferromagnético de spins  $S_A = \frac{1}{2}$  y  $S_B = \frac{1}{2}$ .

**Figura A.1** Entorno+Sistema = Universo. La interacción entre el sistema y su medio ambiente.

**Figura A.2** Tipos de sistemas termodinámicos.

**Figura C.1** Diagrama de Flujo para un programa que grafica Magnetización (Energía interna) vs. Temperatura,  $M(U)$  vs.  $T$ , para un sistema magnético simple.

**Figura C.2** Cuadro de fórmulas para la Fig. C.1.

# Tabla de Contenido

Portada.....	i
Agradecimientos.....	ii
Dedicatoria.....	iii
Resumen.....	iv
Abstract.....	v
Epigrafe.....	vi
Listado de Figuras.....	vii
Tabla de Contenido.....	viii
Capítulo 1 Introducción.....	1
Capítulo 2 Mecánica Estadística.....	3
2.1 Conceptos de Entropía.....	3
2.1.1 Entropía Termodinámica.....	3
2.1.2 Entropía en la Teoría de la Información.....	4
2.1.3 Entropía en la Mecánica Estadística.....	4
2.2 Mecánica Estadística de Boltzmann-Gibbs.....	6
2.2.1 El Caso Clásico.....	7
2.2.2 El Caso Cuántico.....	9
2.3 Mecánica Estadística No-extensiva.....	11
2.3.1 Postulado de la Entropía $S_q$ .....	12
2.3.2 Las Tres Versiones de la Mecánica Estadística No-extensiva.....	12
2.3.3 Pseudo-Aditividad.....	16
2.3.4 Distribuciones Escort.....	17
2.3.5 Entropía $S_q$ Normalizada.....	18



2.3.6 Entropía de Rényi .....	18
2.4 Super-estadística .....	19
Capítulo 3 Maximización de la Entropía .....	21
3.1 El Método de Maximización de la Entropía .....	21
3.1.1 El Método de los Multiplicadores de Lagrange .....	22
3.2 Maximización de la Entropía de Boltzmann-Gibbs .....	22
3.3 Maximización de $S_q$ en la Primera Versión .....	24
3.4 Maximización de $S_q$ en la Segunda Versión .....	26
3.5 Maximización de $S_q$ en la Tercera Versión .....	27
Capítulo 4 Cálculo de la Energía Interna en Distintos Espacios de Hilbert, en el Contexto de la	
Tercera Versión .....	32
4.1 Equivalencia de Valores Medios Cuánticos en Diferentes Espacios de Hilbert .....	33
4.2 Cálculo de Valores Medios Cuánticos en un Modelo de Heisenberg con	
Aproximación de Campo Medio .....	34
4.2.1 Cálculo de Energías Internas en el Espacio de Hilbert Completo 4x4 .....	34
4.2.2 Cálculo de las Energías Internas en los Subespacios de Hilbert 2x2,	
Usando las Fórmulas acostumbradas de la Tercera Versión .....	37
4.2.3 Las Matrices $E_A$ y $E_B$ y el Cálculo Adecuado para las Energías Internas, en el	
Subespacio de Hilbert 2x2 .....	38
4.3 Simulaciones Computacionales .....	40
Capítulo 5 Conclusiones .....	44
Apéndice A: Termodinámica .....	46
Apéndice B: Distribuciones de Probabilidad y Funciones Densidad de Probabilidad .....	51
Apéndice C: Programación para la Simulación Computacional de la Energía Interna y Mag. ....	56
Bibliografía .....	63

# Capítulo 1

## Introducción

La principal motivación para este trabajo son las investigaciones que han sido desarrolladas en los últimos 20 años con la llamada mecánica estadística no-extensiva [1], teoría que se presenta como una alternativa a la estadística de Boltzmann-Gibbs. Estos estudios han abarcado las disciplinas más variadas desde teorías de campo hasta la física de la materia condensada; dentro del marco de esa teoría, analizamos un problema encontrado en la energía interna (en ese contexto también llamada  $q$ -energía interna): los cálculos del mencionado potencial termodinámico en diferentes espacios de Hilbert producen resultado distintos. La cantidad de trabajos científicos a respecto de esta teoría es elevadísima, habiendo hasta la fecha más de 2000 publicaciones [2]. La solución para el problema mencionado de la energía interna tuvo su origen en el artículo *A study on Composed Nonextensive Magnetic Systems* [3], una ampliación de ese estudio puede ser visto en [4]. En lo que respecta al contenido de esta tesis, lo hemos dividido de la forma mostrada en los siguientes párrafos.

En el capítulo 2 presentamos la mecánica estadística estándar, ampliamente conocida como estadística de Boltzmann-Gibbs. De igual manera, son delineados los conceptos básicos de la llamada mecánica estadística no-extensiva, o estadística de Tsallis. Mostramos las tres versiones que existen para esta teoría, y damos especial atención a la tercera versión, pues actualmente es considerada la versión más adecuada.

En el capítulo 3 presentamos la forma de realizar el proceso de maximización de la entropía, vemos que el uso de diferentes ligaduras conduce a la formulación de distintas funciones densidad de probabilidad (llamadas distribuciones de probabilidad en la literatura, para una diferenciación rigurosa ver el Apéndice B). Analizamos en detalle cómo

se originan las tres versiones de la mecánica estadística no-extensiva.

En el capítulo 4 mostramos que el uso de las fórmulas comunes de la tercera versión de la estadística de Tsallis, para el cálculo de la energía interna de un sistema compuesto  $A+B$ , produce que la energía interna sea distinta en diferentes espacios de Hilbert. Sin embargo, usando el llamado método de las matrices  $E_A$  y  $E_B$  (procedimiento que considera nuevas matrices de densidad parciales) los cálculos de la energía interna son iguales en diferentes espacios de Hilbert.

En el capítulo 5 tenemos las conclusiones y perspectivas referentes a esta tesis.

También hemos adicionado tres apéndices, en el Apéndice A mostramos los conceptos más relevantes de la Termodinámica, en el Apéndice B presentamos varias distribuciones y funciones densidad de probabilidad; y en el Apéndice C mostramos cómo fueron hechas las gráficas de las simulaciones computacionales.

Ahora bien, para tener una idea de la vigencia de los temas estudiados en esta tesis podemos mencionar el evento científico *School & Conference on Complex Systems and Nonextensive Statistical Mechanics*, el cual fue desarrollado en la ciudad de Trieste, Italia, entre el 31 de Julio y el 8 de agosto de 2006, organizado por la reconocida institución *The Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics* (ICTP). De igual manera podemos mencionar que el investigador brasileño, de origen griego, Constantino Tsallis ha sido el principal difusor de la mecánica estadística no-extensiva. Sus trabajos han sido ampliamente reconocidos, con la publicación de una edición especial [5], a finales de 2005 en la revista internacional *Europhysics News*, auspiciada por la prestigiada *European Physical Society*. Para finalizar debemos mencionar que, entre la amplia cantidad de trabajos científicos con la mecánica estadística no-extensiva, encontramos trabajos de un colega sanmarquino, Rafael Salazar Tío, con su tesis *Métodos de Monte Carlo en Sistemas No-Extensivos y Complejos*, desarrollada en la Universidad de Las Islas Baleares, España. En [6, 7, 8, 9] tenemos listados algunos trabajos de nuestro colega.

# Capítulo 2

## Mecánica Estadística

Este capítulo lo iniciamos conceptualizando el término entropía en áreas del conocimiento científico como termodinámica, teoría de la información y mecánica estadística. Después realizamos una introducción a la Mecánica Estadística de Boltzmann-Gibbs, considerada la teoría estadística estándar, así como también hacemos una introducción a la mecánica estadística no-extensiva, más conocida como estadística de Tsallis. Damos énfasis a la fórmulas para un sistema compuesto  $A+B$ , pues en el capítulo 4 analizaremos un problema de la energía interna para un sistema de dos spins  $\frac{1}{2}$  (spin es un grado de libertad adicional que en el contexto mecánico-cuántico se refiere a las posibles orientaciones que partículas subatómicas, como protones, electrones, neutrones, y de igual manera núcleos o iones, tienen en la presencia de un campo magnético).

### 2.1 Conceptos de Entropía

Entropía es un término que encontramos en varias áreas del conocimiento científico como: termodinámica, mecánica estadística y teoría de la información. A continuación pasaremos a dar el concepto en cada una de estas ramas del saber científico.

#### 2.1.1 Entropía Termodinámica

La palabra entropía procede del griego y significa *transformación*; es un potencial termodinámico que cuantifica la parte de la energía que no puede utilizarse para producir trabajo, excelentes referencias son [10, 11]. En 1865, el físico alemán Rudolf Clausius definió la entropía física a través de la siguiente ecuación:

$$dS = \frac{\delta Q}{T}, \quad (2.1)$$

donde  $dS$  es un diferencial de entropía,  $\delta Q$  es la variación de calor y  $T$  es la temperatura.

La ecuación anterior puede ser expresada, cuando no se produce variación de temperatura

(proceso isotérmico), como:

$$S_2 - S_1 = \frac{Q_{1 \rightarrow 2}}{T}, \quad (2.2)$$

siendo  $S_1 - S_2$  la variación de entropía,  $Q_{1 \rightarrow 2}$  la cantidad de calor intercambiado entre el sistema y el entorno, y  $T$  la temperatura absoluta en kelvins; los subíndices 1 y 2 se refieren a los estados inicial y final del sistema termodinámico.

Finalmente debemos indicar que la entropía es fundamental tanto en las cuatro leyes de la Termodinámica; en el Apéndice A ampliaremos con respecto a estas leyes.

### 2.1.2 Entropía en la Teoría de la Información

El matemático estadounidense Claude Shannon, conocido como el padre de la teoría de la información, publicó en 1948 el célebre artículo *A mathematical theory of communication* [12]; este artículo representa un aprovechamiento de instrumentos matemáticos que eran utilizados en la termodinámica y en la mecánica estadística. La similitud operativa para medir los intercambios energéticos y las transmisiones de mensajes, permitió unificar en un único modelo el estudio del cambio en la naturaleza y en la sociedad. Claude Shannon definió la entropía  $H(p)$  como un funcional de la densidad de probabilidad  $p_i$ :

$$H(p) = -\sum_i p_i \log_2 p_i, \quad (2.3)$$

donde  $\log_2$  es la función logaritmo en base 2, el subíndice  $i$  denota todos los estados accesibles del sistema.

### 2.1.3 Entropía en la Mecánica Estadística

Antes de dar el concepto de entropía debemos señalar que la mecánica estadística es una aplicación de la estadística para el estudio de numerosos sistemas físicos en el campo de la mecánica, en lo que se refiere al movimiento de partículas sometidas a interacciones. La probabilidad reemplaza al determinismo de la física newtoniana, y, a pesar de esto, debido

al enorme número de elementos sobre el que se aplica la probabilidad, los resultados estadísticos que se obtienen son de alta confiabilidad. O sea, la mecánica estadística conecta las propiedades *microscópicas* de los átomos y moléculas con las propiedades *macroscópicas* de los cuerpos. Así la mecánica estadística permite una explicación de la termodinámica clásica a partir de la teoría atómica, pudiéndose determinar los potenciales termodinámicos, así como las propiedades termodinámicas básicas.

En 1877 Ludwig Edward Boltzmann, pionero de la mecánica estadística, presentó un método probabilístico para medir la entropía de un determinado número de partículas para un gas ideal, y definió la entropía  $S$  como siendo proporcional al logaritmo natural del número de microestados que el gas puede ocupar; actualmente esta definición se expresa como:

$$S = k_B \text{Ln} \Omega, \quad (2.4)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann ( $k_B = 1.3807 \times 10^{-16} \text{ erg} \cdot \text{K}^{-1} = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ ),  $\Omega$  el número de posibles microestados para el sistema, y  $\text{Ln}$  la función logaritmo natural. Finalizando esta sección, debemos referirnos a la relación entre los conceptos de entropía de la información y entropía termodinámica. Esa relación surgió como explicación a la paradoja del demonio de Maxwell, célebre experimento del pensamiento (este tipo de experimentos también se conoce como *gedankenexperiment*) ideado por el físico escocés James Clerk Maxwell, según la cual habría una disminución de entropía en un sistema aislado. Supongamos que tenemos un recipiente con gran cantidad de moléculas, con diferentes velocidades, desplazándose en todas direcciones. Este recipiente puede ser dividido en dos partes por una compuerta y hay un diablillo, que abre y cierra dicha compuerta, permitiendo pasar las moléculas más rápidas hacia un lado y las más lentas hacia el lado opuesto. Así, se conseguiría aumentar la temperatura de un lado y bajar la del otro sin realizar trabajo, violando de esta manera la segunda ley de la termodinámica (en

un sistema aislado la entropía o se mantiene constante o aumenta, jamás disminuye). La solución a esta paradoja comenzó con los trabajos del físico húngaro Leo Szilard, que en 1929 formuló los aspectos relativos a la información y energía necesaria para la interacción entre el demonio y el sistema, el simple hecho de diferenciar las moléculas rápidas de las lentas requiere de un aporte de energía y de una interacción con el sistema; es decir, la Segunda Ley de la Termodinámica se mantiene vigente si consideramos la energía gastada en la adquisición y utilización de la información. Por ejemplo, en la nascente nanotecnología se estudian mecanismos capaces de disminuir localmente la entropía (semejantes a un demonio de Maxwell) [13, 14, 15, 16, 17, 18],

## **2.2 Mecánica Estadística de Boltzmann-Gibbs**

Históricamente, James Clerk Maxwell fue el primero en usar el nombre de Mecánica Estadística en el año 1879, sin embargo, como ya mencionado, Ludwig Edward Boltzmann es considerado pionero de esta teoría, en ese sentido, una lectura interesante, acerca de las contribuciones de L. E. Boltzmann, es la publicación de D. Flamm, *Ludwig Boltzmann – A Pioneer of Modern Physics* [19]. Otro de los fundadores de la construcción de la mecánica estadística es el matemático y físico estadounidense Josiah Willard Gibbs, en 1901 él dio a conocer un enfoque elegante y sistemático de la mecánica estadística, el cual permitía derivar las relaciones entre variables termodinámicas a partir de las leyes dinámicas fundamentales. Para un estudio detallado de la evolución histórica de la mecánica estadística es recomendable revisar otra publicación del ya citado D. Flamm, *History and outlook of Statistical Physics (Historia y perspectiva de la Física Estadística)* [20]. De igual manera, debemos mencionar la contribución de John von Neumann que extendió el concepto de la entropía clásica a la mecánica cuántica [21], a través del concepto de matriz densidad, este científico introdujo esa idea con el objetivo de desarrollar tanto la mecánica estadística cuántica como la teoría de la medición en la mecánica cuántica. En un marco

de referencia clásico, es necesario calcular la función de partición para evaluar todas las cantidades termodinámicas. En un marco mecánico-cuántico, John von Neumann presentó la matriz densidad en el contexto de vectores de estados y operadores en un espacio de Hilbert (espacio matemático abstracto que generaliza la noción de espacio euclidiano, extendiendo métodos del álgebra vectorial para un espacio de vectores de estados). Por ser habitual en la literatura científica, en esta tesis la entropía de von Neumann será denominada entropía de Boltzmann-Gibbs.

Por otro lado, no obstante la falta de una derivación a partir de primeros principios, la estadística de Boltzmann-Gibbs ha tenido un éxito extraordinario en el tratamiento de sistemas donde dominan las interacciones espacio-temporales de corto alcance, este tipo de interacciones favorecen la ergodicidad (en su significado original, la propiedad que tiene un sistema si recorre todos los estados en la superficie energética del espacio de fases, en el transcurso del tiempo).

### 2.2.1 El Caso Clásico

El formalismo matemático de la mecánica estadística clásica se basa en la propuesta de la siguiente entropía:

$$S = -k_B \int_{\Gamma} d\Gamma P(x, p) \text{Ln}[P(x, p)], \quad (2.5)$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $\Gamma$  representa el espacio de fases formado por las posiciones generalizadas,  $x$ , y sus momentos conjugados correspondientes,  $p$ ; físicamente cada punto del espacio de fases representa un posible estado del sistema mecánico,  $d\Gamma$  es un elemento de volumen de  $\Gamma$ ,  $P(x, p)$  es la distribución de probabilidad definida sobre  $\Gamma$ . La entropía postulada puede ser maximizada a través del método de máxima entropía (explicado en detalle en el capítulo 3), para esto se consideran las siguientes ligaduras:



$$\int_{\Gamma} d\Gamma P(x,p) = 1 \quad \text{y} \quad U = \int_{\Gamma} d\Gamma P(x,p) H(x,p), \quad (2.6)$$

donde  $U$  es la energía interna y  $H(x,p)$  es la función Hamiltoniana,  $U$  es la energía total debido a la contribución de energía cinética de las moléculas (traslacional, rotacional y vibracional) y energía potencial eléctrica de los átomos en el interior de moléculas o cristales. Finalizado el proceso de maximización, encontramos la siguiente distribución de probabilidad, la cual maximiza la entropía  $S$ :

$$P(x,p) = \frac{e^{-\beta \hat{H}(x,p)}}{Z}, \quad (2.7)$$

donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  y  $Z$  es la función partición:

$$Z = \int_{\Gamma} d\Gamma e^{-\beta \hat{H}(x,p)}. \quad (2.8)$$

Para un sistema simple, el valor medio de un parámetro  $O$  se define como:

$$\langle O \rangle = \int_{\Gamma} d\Gamma P(x,p) O(x,p), \quad (2.9)$$

en tanto que para los sistemas  $A$  y  $B$  de un sistema compuesto  $A+B$ , los valores medios de los parámetros  $O_A$  y  $O_B$  se definen de la siguiente manera:

$$\langle O_A \rangle = \int_{\Gamma} d\Gamma P(x,p) O_A(x,p) \quad \text{y} \quad \langle O_B \rangle = \int_{\Gamma} d\Gamma P(x,p) O_B(x,p), \quad (2.10)$$

o, alternativamente:

$$\langle O_A \rangle = \int_{\Gamma_A} d\Gamma_A P_A O_A \quad \text{y} \quad \langle O_B \rangle = \int_{\Gamma_B} d\Gamma_B P_B O_B, \quad (2.11)$$

con

$$P_A = \int_{\Gamma_B} d\Gamma_B P(x,p) \quad \text{y} \quad P_B = \int_{\Gamma_A} d\Gamma_A P(x,p), \quad (2.12)$$

donde  $\Gamma_A$  y  $\Gamma_B$  son espacios de fases formados por las coordenadas de posiciones y momentos de cada respectivo subsistema.

## 2.2.2 El Caso Cuántico

La construcción teórica de la mecánica estadística cuántica comienza con el postulado de la entropía de Boltzmann-Gibbs (o entropía de von Neumann):

$$S = -k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \text{Ln} \hat{\rho}), \quad (2.13)$$

donde  $\text{Tr}$  simboliza la operación de traza, la cual consiste en realizar la suma sobre todos los estados posibles del sistema, el símbolo  $\hat{\rho}$  denota un operador, así  $\hat{\rho}$  denota el operador matriz densidad. En el procedimiento de maximización de la entropía<sup>1</sup> se considera las ligaduras de norma unitaria y energía interna, respectivamente:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad \text{y} \quad U = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H}), \quad (2.14)$$

donde  $\rho$  es el operador matriz densidad,  $U$  la energía interna y  $\hat{H}$  es el operador Hamiltoniano; al finalizar ese proceso obtenemos la densidad de probabilidad, la cual puede ser expresada en forma de operadores de la siguiente forma:

$$\hat{\rho} = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z}, \quad (2.15)$$

donde  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  y  $Z$  es la función partición:

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}). \quad (2.16)$$

Para un sistema compuesto de dos componentes  $A+B$ , tenemos que la entropía del sistema

completo es análoga al caso simple, Eq. (2.13):

$$S_{A+B} = -k_B \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}_{A+B} \text{Ln}[\hat{\rho}_{A+B}]), \quad (2.17)$$

donde  $\text{Tr}_{(A,B)}$  significa la traza sobre los estados  $A$  y  $B$ ; y para las entropías de los subsistemas tenemos:

---

<sup>1</sup> En el capítulo 3 mostraremos específicamente este procedimiento, utilizando los multiplicadores de Lagrange.

$$S_A = -k_B \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \text{Ln} \hat{\rho}_A) \text{ y } S_B = -k_B \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B \text{Ln} \hat{\rho}_B). \quad (2.18)$$

donde  $\text{Tr}_A$  ( $\text{Tr}_B$ ) representa la traza sobre los estados de  $A$  ( $B$ ). Si los subsistemas  $A$  y  $B$  son estadísticamente independientes, o sea,

$$\hat{\rho}_{A+B} = \hat{\rho}_A \otimes \hat{\rho}_B, \quad (2.19)$$

encontramos que la entropía es aditiva:

$$S_{A+B} = S_A + S_B, \quad (2.20)$$

en el caso que tengamos  $N$  subsistemas independientes idénticos, tendremos  $S_{(N)} = NS_{(1)}$ , o sea, la entropía del sistema completo es proporcional al número de subsistemas multiplicado por la entropía de un subsistema, por tanto la entropía es llamada extensiva. En otras palabras, si las correlaciones son bastante débiles, la entropía de Boltzmann-Gibbs es extensiva si el siguiente límite es finito:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S_{(N)}}{N}. \quad (2.21)$$

Por otro lado, en la estadística de Boltzmann-Gibbs, los valores medios cuánticos, en el espacio de Hilbert completo, son definidos como:

$$\langle \hat{O}_A \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}_{A+B} \hat{O}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{O}_B \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}_{A+B} \hat{O}_B), \quad (2.22)$$

donde  $\hat{O}_A$  y  $\hat{O}_B$  representan observables de los subsistemas  $A$  y  $B$  en el espacio de Hilbert completo  $A+B$ . Las fórmulas equivalentes en los respectivos subespacios de Hilbert son:

$$\langle \hat{o}_A \rangle = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \hat{o}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{o}_B \rangle = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B \hat{o}_B), \quad (2.23)$$

en otra palabras, en esta mecánica estadística tenemos la siguiente equivalencia:

$$\langle \hat{O}_A \rangle_{A+B} \equiv \langle \hat{o}_A \rangle_A \quad \text{y} \quad \langle \hat{O}_B \rangle_{A+B} \equiv \langle \hat{o}_B \rangle_B. \quad (2.24)$$

Como veremos en la próxima sección, esta equivalencia no se verifica en todas las versiones de la mecánica estadística no-extensiva (apenas se confirma en la primera versión).

## 2.3 Mecánica Estadística No-extensiva

De la gran cantidad de propuestas que existen para una estadística generalizada, la mecánica estadística no-extensiva es la más estudiada como lo demuestran más de 2000 publicaciones con respecto a esta teoría [2]. Esta teoría también es conocida como Termoestadística No-Extensiva o Estadística de Tsallis [1], existiendo hasta la fecha tres versiones, las cuales son el producto de considerar diferentes ligaduras en el procedimiento de maximización de la entropía de Tsallis,  $S_q$ . Especial atención damos a los sistemas compuestos, pues existen importantes sistemas con esta característica, por ejemplo, los óxidos de manganeso [22, 23, 24] que son primordialmente sistemas compuestos, debido a la valencia mixta que presenta el manganeso,  $Mn^{3+}$  y  $Mn^{4+}$ . En este sentido, interesantes son los trabajos del grupo del brasileño M. S. Reis *et al.* [25, 26, 27, 28], abordando los mencionando óxidos utilizando como herramienta la mecánica estadística no-extensiva.

El principal sustento para la búsqueda de una teoría generalizada para la mecánica estadística es que existen una serie de fenómenos llamados anómalos, en los cuales la aplicación de la estadística de Boltzmann-Gibbs no produce buenos resultados, por ejemplo: sistemas donde la ergodicidad no es verificada, estados metaestables en sistemas hamiltonianos con interacción de largo alcance, estados de metaequilibrio en sistemas pequeños (sistemas con el número de partículas mucho menor que el número de Avogadro), sistemas con condiciones de contorno fractales, inhomogeneidad, y/o disipación; no obstante esto, científicos como M. Nauenberg [29] consideran que la estadística estándar aún puede ser de gran utilidad.

Antes de mostrar el postulado de la entropía  $S_q$ , debemos mencionar que en mecánica estadística se conoce como sistemas no-extensivos a aquellos sistemas en los cuales no existe una dependencia lineal de parámetros termodinámicos, como la entropía,

con el tamaño del sistema en cuestión. Como nuestro tema de estudio serán sistemas cuánticos presentaremos directamente la mecánica estadística no-extensiva cuántica (las fórmulas para el caso clásico son análogas).

### 2.3.1 Postulado de la Entropía $S_q$

La construcción de la teoría comienza con el postulado de la entropía de Tsallis  $S_q$  [1]:

$$S_q = k_B \frac{1 - \text{Tr}(\hat{\rho}^q)}{q - 1}, \quad (2.25)$$

donde  $\hat{\rho}^q$  es el operador matriz densidad  $\hat{\rho}$  elevado a la  $q$  potencia, siendo  $q$  el índice entrópico y  $k_B$  la constante de Boltzmann. Si  $q = 1$  recuperamos la entropía de Boltzmann-Gibbs, Eq (2.13).

Para un sistema compuesto, tenemos la entropía del sistema completo:

$$S_{A+B} = k_B \frac{1 - \text{Tr}_{(A,B)}[\hat{\rho}^q]}{q - 1}, \quad (2.26)$$

en tanto que para los subsistemas  $A$  y  $B$ , tenemos:

$$S_A = k_B \frac{1 - \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q)}{q - 1} \quad \text{y} \quad S_B = k_B \frac{1 - \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q)}{q - 1}, \quad (2.27)$$

estas entropías para los subsistemas también son postuladas.

### 2.3.2 Las Tres Versiones de la Mecánica Estadística No-Extensiva

En la actualidad existen tres versiones para la estadística de Tsallis, las cuales tienen idéntica entropía  $S_q$ ; cada una de esas versiones se origina al considerar diferentes ligaduras en el proceso de maximización de la entropía que produce distintas densidades de probabilidad.

## a) Primera Versión

Este modelo fue propuesto por C. Tsallis en 1988 [30], en el proceso de maximización de la entropía  $S_q$ , similarmente a lo visto en la sección 2.2.2, se consideran, respectivamente, las ligaduras de norma unitaria y energía interna:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad \text{y} \quad U_q = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}), \quad (2.28)$$

obteniéndose la siguiente densidad de probabilidad:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z_q} \left\{ \hat{1} + \frac{1-q}{qX_q} \beta(\hat{H} - \hat{1}U_q^{(1)}) \right\}^{\frac{1}{q-1}}, \quad (2.29)$$

$\alpha$  y  $\beta$  son los multiplicadores de Lagrange, que se consideran para la maximización de  $S_q$ ,  $\hat{1}$  simboliza el operador identidad (por razones prácticas, de aquí en adelante, para este operador omitiremos el símbolo  $\hat{\phantom{x}}$ ) y  $Z_q$  es la siguiente función de partición:

$$Z_q = \text{Tr} \left[ 1 + \frac{1-q}{qX_q} \beta(\hat{H} - U_q^{(1)}) \right]. \quad (2.30)$$

Debemos resaltar que la densidad de probabilidad es del tipo *ley de potencia*, este hecho contrasta con la distribución de Boltzmann-Gibbs que es del tipo exponencial.

Para los observables de un sistema compuesto  $A+B$ , los valores medios cuánticos, en esta versión, pueden ser definidos en el espacio de Hilbert completo o en los respectivos subespacios de Hilbert, o sea:

$$\langle \hat{O}_A \rangle_{A+B} \equiv \langle \hat{o}_A \rangle_A \quad \text{y} \quad \langle \hat{O}_B \rangle_{A+B} \equiv \langle \hat{o}_B \rangle_B, \quad (2.31)$$

donde  $\hat{O}_A$  y  $\hat{O}_B$  representan observables de los subsistemas  $A$  y  $B$  en el espacio de Hilbert completo  $A+B$ ;  $\hat{o}_A$  y  $\hat{o}_B$  representan los mismos observables, pero ahora en los respectivos subespacios de Hilbert (esta notación será válida para las otras versiones que serán mostradas posteriormente). Así, en el espacio de Hilbert completo tenemos:

$$\langle \hat{O}_A \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}_{A+B} \hat{O}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{O}_B \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}_{A+B} \hat{O}_B). \quad (2.32)$$

Estos mismos valores medios en los respectivos subespacios de Hilbert se definen como:

$$\langle \hat{\rho}_A \rangle = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A \hat{\rho}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{\rho}_B \rangle = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B \hat{\rho}_B), \quad (2.33)$$

donde  $\hat{\rho}_A$  y  $\hat{\rho}_B$  son las matrices parciales, obtenidas por la operación de traza parcial:

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}) \quad \text{y} \quad \hat{\rho}_B = \text{Tr}_A(\hat{\rho}). \quad (2.34)$$

Este modelo, la primera versión, es consistente con respecto a los valores medios cuánticos, pero problemas con la Ley Cero de la Termodinámica [29] provocaron la creación de la segunda versión.

## b) Segunda Versión

Fue creada por C. Tsallis y E. M. F. Curado en 1991 [31]; estos físicos estadísticos brasileños propusieron las siguientes ligaduras de norma unitaria y energía interna, respectivamente:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad \text{y} \quad U_q = \text{Tr}(\hat{\rho}^q \hat{H}), \quad (2.35)$$

después de la maximización de  $S_q$ , Eq. (2.25), encontramos la densidad de probabilidad:

$$\hat{\rho} = \frac{[\hat{1} - (1 - q)\beta\hat{H}]^{\frac{1}{1-q}}}{Z_q}, \quad (2.36)$$

donde la función de partición  $Z_q$  se define como:

$$Z_q = \text{Tr}[\hat{1} - (1 - q)\beta\hat{H}]^{\frac{1}{1-q}}. \quad (2.37)$$

En el contexto de esta versión, en el espacio de Hilbert completo, los valores medios cuánticos de un sistema compuesto  $A+B$  se definen como:

$$\langle \hat{\rho}_A \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}_{A+B}^q \hat{\rho}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{\rho}_B \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}_{A+B}^q \hat{\rho}_B), \quad (2.38)$$

en tanto que en los respectivos subespacios de Hilbert, las fórmulas equivalentes para los valores medios cuánticos son:

$$\langle \hat{\rho}_A \rangle = \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q \hat{\rho}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{\rho}_B \rangle = \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q \hat{\rho}_B). \quad (2.39)$$

Esta versión presenta problemas con los valores medios, por ejemplo, el valor medio cuántico térmico del operador identidad no es la unidad.

### c) Tercera Versión

Propuesta en 1998 por los brasileños C. Tsallis y R. S. Mendes, así como por el argentino A. Plastino [32, 33]. Las ligaduras sugeridas por estos científicos, para la aplicación del método de máxima entropía, son, respectivamente, la norma unitaria y la energía interna,

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \quad \text{y} \quad U_q = \frac{\text{Tr}(\hat{\rho}^q \hat{H})}{\text{Tr}(\hat{\rho}^q)}, \quad (2.40)$$

encontrándose, después de la maximización de  $S_q$ , la siguiente densidad de probabilidad:

$$\hat{\rho} = \frac{[\hat{1} - (1 - q)\beta'\hat{H}]^{\frac{1}{1-q}}}{Z_q}, \quad (2.41)$$

teniendo la función de partición  $Z_q$ , en este caso, la siguiente expresión:

$$Z_q = \text{Tr}[\hat{1} - (1 - q)\beta'\hat{H}]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (2.42)$$

donde  $\beta'$  es un parámetro que en esta tesis, siguiendo los trabajos de M. S. Reis *et al.* [25, 26, 27, 28], representará un parámetro energético a través del siguiente *ansatz* (término alemán que denota la asunción de una solución en la descripción de un problema físico o matemático):

$$\beta' = \frac{1}{k_B T}, \quad (2.43)$$

siendo  $T$  la temperatura física del sistema y  $k_B$  la constante de Boltzmann.

Por otro lado, para los observables  $\hat{O}_A$  y  $\hat{O}_B$ , los valores medios cuánticos de un sistema compuesto  $A+B$ , en el espacio de Hilbert completo, se postulan de la siguiente manera:

$$\langle \hat{O}_A \rangle = \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{O}_A)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)} \quad \text{y} \quad \langle \hat{O}_B \rangle = \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{O}_B)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)}, \quad (2.44)$$



debemos resaltar que los factores de normalización aseguran que el valor medio del operador identidad sea la unidad. Paralelamente, en los respectivos subespacios de Hilbert, tenemos las fórmulas que, en principio, serían equivalentes a las anteriores:

$$\langle \hat{\rho}_A \rangle = \frac{\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q \hat{\rho}_A)}{\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q)} \quad \text{y} \quad \langle \hat{\rho}_B \rangle = \frac{\text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q \hat{\rho}_B)}{\text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q)}. \quad (2.45)$$

En el capítulo 4, usando la energía interna, mostraremos explícitamente que estas fórmulas no son equivalentes a las anteriores, o sea en esta versión tenemos que **no se cumple** la siguiente equivalencia:

$$\langle \hat{\rho}_A \rangle_{A+B} \equiv \langle \hat{\rho}_A \rangle_A \quad \text{y} \quad \langle \hat{\rho}_B \rangle_{A+B} \equiv \langle \hat{\rho}_B \rangle_B, \quad (2.46)$$

en ese mismo capítulo también mostraremos la solución a este problema.

### 2.3.3 Pseudo-Aditividad

Esta es una característica exótica de esta teoría [1]; si tenemos un sistema compuesto  $A+B$ , con  $A$  y  $B$  estadísticamente independientes, o sea:

$$\hat{\rho}_{A+B}^q = \hat{\rho}_A^q \otimes \hat{\rho}_B^q, \quad (2.47)$$

encontramos que la entropía no es extensiva (este hecho da origen al nombre de la teoría):

$$S_{A+B} = S_A + S_B + (1 - q)S_A S_B, \quad (2.48)$$

si  $q=1$ , tenemos el caso extensivo, la entropía del sistema completo es *igual* a la suma de las entropías de los subsistemas ( $S_{A+B} = S_A + S_B$ ); si  $q>1$ , tenemos el caso subextensivo, la entropía del sistema completo es *menor* que la suma de las entropías de los subsistemas ( $S_{A+B} < S_A + S_B$ ); y si  $q<1$ , obtenemos el caso super-extensivo, la entropía del sistema completo es mayor que la suma de las entropías de los subsistemas ( $S_{A+B} > S_A + S_B$ ).

Finalmente, podemos manifestar que la propiedad pseudo-aditiva de la entropía, para sistemas estadísticamente independientes, surge del hecho que las distribuciones de

probabilidad, en la estadística de Tsallis, son del tipo ley de potencia, por ejemplo la Eq. (2.29).

### 2.3.4 Distribuciones Escort

Este tipo de distribuciones, propuestas por el físico-estadístico inglés Christian Beck [34], constituyen una formulación alternativa a la tercera versión de la mecánica estadística no-extensiva; el anglicismo *escort* significa acompañante. Así, tenemos que la distribución escora  $P$ , o distribución acompañante, de  $\rho$  con orden  $q$  es definida como:

$$\hat{P} = \frac{\hat{\rho}^q}{\text{Tr}(\hat{\rho}^q)}; \quad (2.49)$$

recíprocamente, tenemos la distribución escort de  $P$ , de orden  $1/q$ :

$$\hat{\rho} = \frac{\hat{P}^{\frac{1}{q}}}{\text{Tr}(\hat{P}^{\frac{1}{q}})}. \quad (2.50)$$

Entonces, podemos definir la llamada entropía escort:

$$S = k_B \frac{1 - [\text{Tr}(\hat{P}^{\frac{1}{q}})]^{-1}}{q - 1}. \quad (2.51)$$

Los valores medios cuánticos para un sistema  $A+B$ , en el espacio de Hilbert completo, son definidos como:

$$\langle \hat{O}_A \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{P} \hat{O}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{O}_B \rangle = \text{Tr}_{(A,B)}(\hat{P} \hat{O}_B). \quad (2.52)$$

Las fórmulas equivalentes en los subespacios de Hilbert son:

$$\langle \hat{o}_A \rangle = \text{Tr}_A(\hat{P}_A \hat{o}_A) \quad \text{y} \quad \langle \hat{o}_B \rangle = \text{Tr}_B(\hat{P}_B \hat{o}_B), \quad (2.53)$$

donde las matrices parciales  $P_A$  y  $P_B$  son definidas a través de la operación de la traza parcial:

$$\hat{P}_A = \text{Tr}_B(\hat{P}) \quad \text{y} \quad \hat{P}_B = \text{Tr}_A(\hat{P}). \quad (2.54)$$

### 2.3.5 Entropía $S_q$ Normalizada: $S_q^N$

Propuesta por el hindú A. K. Rajagopal y el japonés S. Abe en 1999 [35, 36], es la entropía de Tsallis  $S_q$  dividida por la traza de la matriz densidad, para un sistema simple tenemos:

$$S_q^N = k_B \frac{1 - \text{Tr}(\hat{\rho}^q)}{(q-1)\text{Tr}(\hat{\rho}^q)}, \quad (2.55)$$

las entropías para un sistema compuesto  $A+B$  se definen de manera análoga:

$$S_A^N = k_B \frac{1 - \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q)}{(q-1)\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q)} \quad \text{y} \quad S_B^N = k_B \frac{1 - \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q)}{(q-1)\text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q)}, \quad (2.56)$$

estas entropías fueron utilizadas en el trabajo publicado en cond-mat/**0701495** (2007) [4].

### 2.3.6 Entropía de Rényi

La entropía de Rényi se define como:

$$S_q^R = k_B \text{Ln}(\text{Tr} \hat{\rho}), \quad (2.57)$$

visto que esta definición está en función del logaritmo natural, se considera que para sistemas estadísticamente independientes,  $A$  y  $B$ , la entropía sea aditiva:

$$S_{A+B}^R = S_A^R + S_B^R. \quad (2.58).$$

Existe una relación entre esta entropía y la entropía  $S_q$ , en el contexto de la tercera versión, pues si maximizamos las dos entropías, considerando idénticas ligaduras, Eq. (2.40), tendremos igual densidad de probabilidad, Eq. (2.41).

El trabajo de los brasileños E. K. Lenzi, R. S. Mendes y L. R. da Silva [37] *Statistical Mechanics based on Rényi entropy* utiliza la entropía de Rényi como punto de partida para la construcción de una mecánica estadística.

## 2.4 Super-estadística

La teoría super-estadística fue desarrollada por C. Beck y E. G. D. Cohen [38, 39, 40, 41], y fue creada para describir sistemas clásicos fuera del equilibrio, los cuales tienen algún parámetro intensivo variable, como por ejemplo la temperatura en sistemas nanoscópicos, una excelente referencia a este respecto es [42]. Inicialmente todas las discusiones estaban basadas en consideraciones estadísticas clásicas, en las cuales la descripción de Langevin de las fluctuaciones es fundamental.

En la super-estadística, básicamente, la densidad de probabilidad  $f(\beta)$  de sistemas estacionarios fuera del equilibrio, los cuales se alejan de los conocidos factores de Boltzmann  $\exp(-\beta E)$ , se promedia sobre las inversas de las temperaturas fluctuantes,

$$B(E) = \int_0^{\infty} d\beta f(\beta) \exp(-\beta E). \quad (2.59)$$

Debemos hacer hincapié que existen varias formas de distribuciones super-estadísticas, las cuales son fenomenológicamente propuestas de acuerdo al tipo de fluctuaciones consideradas para el problema en cuestión. Por ejemplo,  $f(\beta)$  puede ser la distribución Ji-Cuadrado ( $\chi^2$ ), la cual puede originarse de sistemas nanoscópicos, produciendo distribuciones del tipo ley de potencia [42], en esta referencia, para la super-estadística, el hindú A. K. Rajagopal ha propuesto una descripción mecánico-cuántica, que sería de utilidad en dispositivos nanoscópicos funcionando a temperaturas muy bajas. Dicha teoría hace uso del formalismo matriz densidad del sistema sujeto a fluctuaciones cuánticas debido a un medio ambiente. La solución estacionaria de la ecuación de Fokker-Planck en un marco clásico es sustituida por la solución estacionaria de la matriz densidad del sistema bajo la influencia de las fluctuaciones; en general podemos decir que la ecuación de Fokker-Planck describe la evolución en el tiempo de la función densidad de probabilidad de una partícula, y se aplica a los sistemas que se pueden describir por una

pequeña cantidad de variables denominadas *macrovariables*, es decir, otros parámetros varían tan rápido que son considerados como ruido.

En este capítulo hemos presentado las características básicas de la mecánica estadística estándar (desarrollada esencialmente por L. Boltzmann, J. W. Gibbs y J. von Neuman), de igual manera mostramos las tres versiones de la estadística de Tsallis, así como el rasgo más peculiar de esa teoría, la propiedad pseudo-aditiva para un sistema  $A+B$ . La estadística de Tsallis es la teoría más investigada en la búsqueda de una estadística generalizada que resuelva los llamados fenómenos anómalos, los cuales no son adecuadamente interpretados usando la mecánica estadística de Boltzmann-Gibbs. Por ese motivo, en el próximo capítulo detallaremos cómo se realiza el proceso de maximización de la entropía de Tsallis, y también de la entropía de Boltzmann-Gibbs.

# Capítulo 3

## Maximización de la Entropía

En este capítulo analizamos cómo se utiliza el método de maximización de entropía para obtener densidades de probabilidad a partir de la entropía de Boltzmann-Gibbs, así como de la entropía de Tsallis, para ese objetivo usaremos el método de máxima entropía y el método de multiplicadores de Lagrange. Con respecto a la estadística de Tsallis, mostramos los cálculos que originan las tres versiones más importantes de la mecánica estadística no-extensiva.

### 3.1 El Método de Maximización de la Entropía

Presentado por el estadístico estadounidense Edwin Thompson Jaynes en 1957, al introducir lo que actualmente se conoce como termodinámica de la entropía máxima. Él sugirió que la termodinámica, y la entropía termodinámica, en particular, deben ser vistas como una aplicación particular de una herramienta general de inferencia y teoría de la información. Este método nos permite analizar la información disponible con el objetivo de determinar una única densidad. En otras palabras, a partir de una cierta entropía, junto con la consideración de algunas ligaduras, este método nos permitirá obtener una función densidad de probabilidad específica, la cual maximiza dicha entropía. El método de máxima entropía es similar al método Bayesiano, en el cual se hace uso explícito de información *a priori*. Este procedimiento también se puede considerar como alternativa para los métodos de inferencia de la estadística clásica.

### 3.1.1 El Método de los Multiplicadores de Lagrange

Para maximizar la entropía de Boltzmann-Gibbs, Eq. (2.13), así como la entropía de Tsallis Eq. (2.25), usaremos el método de los multiplicadores de Lagrange, llamados así en honor a Joseph Louis Lagrange, así, podemos mencionar que estos multiplicadores son utilizados en problemas de optimización. Esencialmente es un método para trabajar con funciones de varias variables, las cuales queremos maximizar o minimizar, que están sujetas a ciertas restricciones llamadas ligaduras. Los multiplicadores de Lagrange reducen un problema restringido en  $n$  variables a otro problema sin restricciones de  $n + m$  variables, cuyas ecuaciones pueden ser resueltas. Para cada restricción, este método introduce una variable escalar desconocida denominada multiplicador de Lagrange, y forma una combinación lineal, en la cual los multiplicadores aparecen como coeficientes. El objetivo del método de multiplicadores de Lagrange consiste en encontrar las condiciones para que la derivada de una función, con respecto a las variables independientes, sea igual a cero.

### 3.2 Maximización de la Entropía de Boltzmann-Gibbs

La entropía de Boltzmann-Gibbs está definida en la Eq. (2.13), encontraremos el valor de la densidad de probabilidad  $p_i$  que maximiza dicha entropía. Aplicando la metodología de Jaynes, usaremos el método de multiplicadores de Lagrange para maximizar la siguiente expresión ( $\alpha$  y  $\beta$  son multiplicadores de Lagrange):

$$S - \alpha \sum_j p_j - \beta U, \quad (3.1)$$

donde  $S$  es la entropía,  $U$  la energía interna; la sumatoria de  $p_i$  se realiza sobre todos los estados accesibles al sistema en cuestión. La maximización estará sujeta a las siguientes ligaduras de norma unitaria y energía interna:

$$\sum_j p_j = 1 \quad \text{y} \quad U = \sum_j \varepsilon_j p_j, \quad (3.2)$$

donde  $\varepsilon_j$  son los autovalores de energía. Ahora, derivamos la expresión Eq. (3.1) e igualamos a cero:

$$\frac{\partial}{\partial p_i} (S - \alpha \sum_j p_j - \beta U) = 0, \quad (3.3)$$

obteniendo

$$-\ln(p_i) - 1 - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0, \quad (3.4)$$

luego,

$$\ln(p_i) = -1 - \alpha - \beta \varepsilon_i, \quad (3.5)$$

aplicando la operación exponencial a ambos miembros de la ecuación tenemos:

$$p_i = e^{-1-\alpha-\beta\varepsilon_i}, \quad (3.6)$$

y realizando la sumatoria sobre todos los estados se obtiene:

$$\sum_i p_i = 1 = e^{-1-\alpha} \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}, \quad (3.7)$$

o sea,

$$e^{-1-\alpha} = \frac{1}{\sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}}, \quad (3.8)$$

definiendo la función de partición  $Z$  como:

$$Z = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}, \quad (3.9)$$

podemos expresar la densidad de probabilidad,

$$p_i = \frac{e^{-\beta\varepsilon_i}}{Z}, \quad (3.10)$$



### 3.3 Maximización de $S_q$ en la Primera Versión

Para maximizar la entropía de Tsallis  $S_q$ , Eq. (2.25), usaremos el método de los multiplicadores de Lagrange. Así encontraremos el valor de  $p_i$ , que maximiza la siguiente expresión<sup>2</sup> ( $\alpha$  y  $\beta$  son multiplicadores de Lagrange):

$$S_q - \alpha \sum_j p_j - \beta U_q^{(1)}, \quad (3.11)$$

sujeta a las siguientes ligaduras de norma unitaria y energía interna:

$$\sum_j p_j = 1 \quad \text{y} \quad U_q^{(1)} = \sum_j \varepsilon_j p_j, \quad (3.12)$$

con el objetivo mencionado, aplicamos la derivada parcial con respecto a  $p_i$ :

$$\frac{\partial}{\partial p_i} (S_q - \alpha \sum_j p_j - \beta U_q^{(1)}) = 0, \quad (3.13)$$

obteniendo el siguiente resultado:

$$\frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \beta \varepsilon_i = 0, \quad (3.14)$$

por consiguiente:

$$p_i = \left\{ \frac{1-q}{q} (\alpha + \beta \varepsilon_i) \right\}^{\frac{1}{q-1}}, \quad (3.15)$$

ahora, necesitamos conocer el valor de  $\alpha$  (utilizaremos un procedimiento que será válido para los cálculos de  $\alpha$  en las otras versiones de la mecánica estadística no-extensiva); de la Eq. (3.14) despejamos  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \beta \varepsilon_i, \quad (3.16)$$

multiplicamos por  $p_i$  y realizamos la sumatoria sobre todos los estados,  $\sum_i p_i = 1$ :

$$\alpha = \frac{q}{1-q} \sum_i p_i^q - \beta U_q^{(1)}, \quad (3.17)$$

---

<sup>2</sup> (1) denota la primera versión, de igual manera (2) y (3) denotan la segunda y tercera versión, respectivamente.

llamando  $X_q = \sum_i p_i^q$ , obtenemos:

$$\alpha = \frac{q}{1-q} X_q - \beta U_q^{(1)}; \quad (3.18)$$

entonces, reemplazamos este valor en la Eq.(3.15) y obtenemos la siguiente densidad de probabilidad:

$$p_i = \left\{ X_q + \frac{1-q}{q} \beta(\varepsilon_i - U_q^{(1)}) \right\}^{\frac{1}{q-1}}, \quad (3.19)$$

Para obtener la función partición, factorizamos  $X_q^{\frac{1}{q-1}}$ ,

$$p_i = X_q^{\frac{1}{q-1}} \left\{ 1 + \frac{1-q}{qX_q} \beta(\varepsilon_i - U_q^{(1)}) \right\}^{\frac{1}{q-1}}, \quad (3.20)$$

a continuación realizamos la sumatoria sobre todos los estados, usando  $\sum_i p_i = 1$ :

$$1 = X_q^{\frac{1}{q-1}} \sum_i \left\{ 1 + \frac{1-q}{qX_q} \beta(\varepsilon_i - U_q^{(1)}) \right\}^{\frac{1}{q-1}}, \quad (3.21)$$

entonces definimos la función de partición:

$$Z_q = \frac{1}{X_q^{\frac{1}{q-1}}} = \sum_i \left\{ 1 + \frac{1-q}{qX_q} \beta(\varepsilon_i - U_q^{(1)}) \right\}^{\frac{1}{q-1}}; \quad (3.22)$$

finalmente, tenemos la expresión para la densidad de probabilidad en la primera versión:

$$p_i = \frac{1}{Z_q} \left\{ 1 + \frac{1-q}{qX_q} \beta(\varepsilon_i - U_q^{(1)}) \right\}^{\frac{1}{q-1}}, \quad (3.23)$$

similar a la Eq. (2.29). Como ya adelantamos en el capítulo anterior, esta densidad de probabilidad es del tipo ley de potencia, así, el uso de la estadística no-extensiva trae *per se* una correlación intrínseca adicional a las que pueda existir en el sistema; esto se ve claramente en la propiedad pseudo-aditiva, sección 2.3.3. Estas afirmaciones son válidas para las tres versiones de la mecánica estadística no-extensiva.

### 3.4 Maximización de $S_q$ en la Segunda Versión

El procedimiento para maximizar  $S_q$  es similar al aplicado para la primera versión, sin embargo, los cálculos son diferentes. Tenemos que encontrar la densidad de probabilidad  $p_i$  que maximice la siguiente expresión:

$$S_q - \alpha \sum_j p_j - \beta U_q^{(2)}, \quad (3.24)$$

considerando las ligaduras de norma unitaria y energía interna:

$$\sum_j p_j = 1 \quad \text{y} \quad U_q^{(2)} = \sum_j p_j^q \varepsilon_j, \quad (3.25)$$

para esa finalidad, tomamos la derivada parcial con respecto a  $p_i$  e igualamos a cero:

$$\frac{\partial}{\partial p_i} (S_q - \alpha \sum_j p_j - \beta U_q^{(2)}) = 0 \quad (3.26)$$

obteniendo:

$$\frac{q p_i^{q-1}}{1-q} - \alpha - \beta q \varepsilon_i p_i^{q-1} = 0, \quad (3.27)$$

así obtenemos la siguiente densidad de probabilidad:

$$p_i^{q-1} = \frac{\alpha}{\frac{q}{1-q} - \beta q \varepsilon_i}; \quad (3.28)$$

necesitamos conocer  $\alpha$ , de la ecuación anterior obtenemos una expresión para  $\alpha$ ;

multiplicando por  $p_i$  y realizando la sumatoria, usando  $\sum_i p_i = 1$ :

$$\alpha = \sum_i p_i^q \left[ \frac{q}{1-q} - \beta q \varepsilon_i \right] = \frac{q}{1-q} X_q - \beta q U_q^{(2)}, \quad (3.29)$$

donde hemos introducido la notación  $X_q = \sum_i p_i^q$ . A continuación reemplazamos en la

Eq. (3.28):

$$p_i^{q-1} = \frac{\frac{q}{1-q} X_q - \beta q U_q^{(2)}}{\frac{q}{1-q} - \beta q \varepsilon_i} = \frac{X_q - (1-q)\beta U_q^{(2)}}{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i}, \quad (3.30)$$

elevando a la potencia -1:

$$p_i^{1-q} = \frac{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i}{X_q - (1-q)\beta U_q^{(2)}}, \quad (3.31)$$

entonces, tenemos la siguiente densidad de probabilidad:

$$p_i = \left\{ \frac{1 - (q-1)\beta \varepsilon_i}{X_q - (q-1)\beta U_q^{(2)}} \right\}^{\frac{1}{1-q}}. \quad (3.32)$$

Para definir la función partición, realizamos la sumatoria sobre todos los estados:

$$1 = \sum_i \left\{ \frac{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i}{X_q - (1-q)\beta U_q^{(2)}} \right\}^{\frac{1}{1-q}} = \frac{\sum_i \{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}}{\{X_q - (1-q)\beta U_q^{(2)}\}^{\frac{1}{1-q}}}, \quad (3.33)$$

luego,

$$Z_q = \{X_q - (1-q)\beta U_q^{(2)}\}^{\frac{1}{1-q}} = \sum_i \{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.34)$$

finamente, tenemos la conocida expresión para la densidad de probabilidad en la segunda versión de la mecánica estadística no-extensiva:

$$p_i = \frac{\{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_i \{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}} = \frac{1}{Z_q} \{1 - (1-q)\beta \varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.35)$$

este resultado es similar a la Eq. (2.36) y, como se esperaba, es del tipo ley de potencia.

### 3.5 Maximización de $S_q$ en la Tercera Versión

En este caso la expresión a ser maximizada, para obtener la densidad de probabilidad, es:

$$S_q - \alpha \sum_j p_j - \beta U_q^{(3)}, \quad (3.36)$$

en este proceso se consideran las respectivas ligaduras de norma unitaria y energía interna,

$$\sum_j p_j = 1 \quad \text{y} \quad U_q^{(3)} = \frac{\sum_j p_j^q \varepsilon_j}{\sum_j p_j^q}, \quad (3.37)$$

tomando la derivada parcial con respecto a  $p_i$ , e igualando a cero:

$$\frac{\partial}{\partial p_i} (S_q - \alpha \sum_j p_j - \beta U_q^{(3)}) = 0 \quad (3.38)$$

tenemos,

$$\frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \beta \frac{q \varepsilon_i p_i^{q-1} \sum_j p_j^q - q p_i^{q-1} \sum_j p_j^q \varepsilon_j}{\left\{ \sum_j p_j^q \right\}^2} = 0, \quad (3.39)$$

usando la definición de  $U_q^{(3)}$ , Eq. (3.37):

$$\frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \beta \frac{q \varepsilon_i p_i^{q-1} - q p_i^{q-1} U_q^{(3)}}{\sum_i p_i^q} = 0, \quad (3.40)$$

llamando  $X_q = \sum_i p_i^q$ , tenemos:

$$\frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \alpha - \frac{\beta}{X_q} q \varepsilon_i p_i^{q-1} + \frac{\beta}{X_q} q p_i^{q-1} U_q^{(3)} = 0, \quad (3.41)$$

por consiguiente, obtenemos la siguiente densidad de probabilidad:

$$p_i^{q-1} = \frac{\alpha}{\frac{q}{1-q} - \frac{\beta}{X_q} q \varepsilon_i + \frac{\beta}{X_q} q U_q^{(3)}}, \quad (3.42)$$

de la ecuación anterior, despejamos el valor de  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{q}{1-q} p_i^{q-1} - \frac{\beta}{X_q} q \varepsilon_i p_i^{q-1} + \frac{\beta}{X_q} q U_q^{(3)} p_i^{q-1}, \quad (3.43)$$

ahora simplificaremos el valor de  $\alpha$ ; multiplicamos por  $p_i$  y realizamos la sumatoria sobre todos los estados:

$$\alpha = \frac{q}{1-q} X_q, \quad (3.44)$$

luego:

$$p_i^{q-1} = \frac{\frac{q}{1-q} X_q}{\frac{q}{1-q} - \frac{\beta}{X_q} q \varepsilon_i + \frac{\beta}{X_q} q U_q^{(3)}} = \frac{X_q}{1 - \frac{\beta}{X_q} (1-q) \varepsilon_i + \frac{\beta}{X_q} (1-q) U_q^{(3)}}, \quad (3.45)$$

como siguiente paso, elevamos a la potencia -1:

$$p_i^{1-q} = \frac{1 - \frac{\beta}{X_q} (1-q) (\varepsilon_i - U_q^{(3)})}{X_q}, \quad (3.46)$$

por lo tanto, obtenemos la siguiente densidad de probabilidad:

$$p_i = \left\{ \frac{\left[ 1 - \frac{\beta}{X_q} (1-q) (\varepsilon_i - U_q^{(3)}) \right]^{\frac{1}{1-q}}}{X_q} \right\}, \quad (3.47)$$

esta fórmula se puede expresar en función de una función de partición  $Z_q$ , para este fin, en

la ecuación anterior, factorizamos  $X_q^{\frac{1}{1-q}}$  y sumamos sobre todos los estados:

$$p_i = \frac{1}{\{X_q\}^{\frac{1}{1-q}}} \left\{ 1 - \frac{\beta}{X_q} (1-q) (\varepsilon_i - U_q^{(3)}) \right\}^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.48)$$

$$1 = \frac{1}{\{X_q\}^{\frac{1}{1-q}}} \sum_i \left\{ 1 - \frac{\beta}{X_q} (1-q) (\varepsilon_i - U_q^{(3)}) \right\}^{\frac{1}{1-q}}, \quad (3.49)$$

así definimos la función de partición  $Z_q$  de la siguiente forma:

$$Z_q = \{X_q\}^{\frac{1}{1-q}} = \sum_i \left\{ 1 - \frac{\beta}{X_q} (1-q) (\varepsilon_i - U_q^{(3)}) \right\}^{\frac{1}{1-q}}; \quad (3.50)$$

finalmente, la densidad de probabilidad en la tercera versión, la cual es del tipo ley de potencia, Eq. (3.47), se expresa como la ecuación que mostramos a continuación,

$$p_i = \frac{\left\{1 - \frac{\beta}{X_q}(1-q)(\varepsilon_i - U_q)\right\}^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_i \left\{1 - \frac{\beta}{X_q}(1-q)(\varepsilon_i - U_q)\right\}^{\frac{1}{1-q}}} = \frac{1}{Z_q} \left\{1 + \frac{\beta}{X_q}(1-q)(\varepsilon_i - U_q)\right\}^{\frac{1}{1-q}}. \quad (3.51)$$

Por otro lado, existe otra expresión para esta densidad de probabilidad, la cual usa un parámetro energético  $\beta'$ , para encontrarla, de la ecuación anterior, agrupamos términos:

$$p_i = \frac{\left\{1 - \frac{\beta}{X_q}(1-q)(\varepsilon_i - U_q)\right\}^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_i \left\{1 - \frac{\beta}{X_q}(1-q)(\varepsilon_i - U_q)\right\}^{\frac{1}{1-q}}} = \frac{\left\{\left[1 + \frac{\beta}{X_q}(1-q)U_q\right] - \frac{\beta}{X_q}(1-q)\varepsilon_i\right\}^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_i \left\{\left[1 + \frac{\beta}{X_q}(1-q)U_q\right] - \frac{\beta}{X_q}(1-q)\varepsilon_i\right\}^{\frac{1}{1-q}}}, \quad (3.52)$$

ahora factorizamos  $\left[1 + \frac{\beta}{X_q}(1-q)U_q\right]$ :

$$p_i = \frac{\left\{1 - \frac{\beta / X_q}{\left[1 + \frac{\beta}{X_q}(1-q)U_q\right]}(1-q)\varepsilon_i\right\}^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_i \left\{1 - \frac{\beta / X_q}{\left[1 + \frac{\beta}{X_q}(1-q)U_q\right]}(1-q)\varepsilon_i\right\}^{\frac{1}{1-q}}}; \quad (3.53)$$

denominando  $\beta'$  a la siguiente expresión:

$$\beta' = \frac{\frac{\beta}{X_q}}{1 + \frac{\beta}{X_q}(1-q)U_q} = \frac{\beta}{X_q + \beta(1-q)U_q}, \quad (3.54)$$

encontramos la expresión más conocida, para la densidad de probabilidad,

$$p_i = \frac{\{1 - (1-q)\beta'\varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}}{\sum_i \{1 - (1-q)\beta'\varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}} = \frac{1}{Z_q} \{1 - (1-q)\beta'\varepsilon_i\}^{\frac{1}{1-q}}. \quad (3.55)$$

En este capítulo hemos mostrado cómo se realizan los procesos de maximización de entropía, tanto para la estadística de Boltzmann-Gibbs como para las tres versiones de la mecánica estadística no-extensiva. Explícitamente hemos mostrado cómo se obtienen diferentes densidades de probabilidad de acuerdo a cuáles sean las ligaduras empleadas. En tal sentido, debemos mencionar que si usamos otras entropías diferentes a  $S_q$ , con otras ligaduras, encontraremos nuevas densidades de probabilidad; esto es tema de discusiones en la comunidad científica porque, en principio, es posible postular cualquier forma entrópica y obtener su respectiva densidad de probabilidad. Empero, la entropía de Tsallis es la más intensamente investigada, con alrededor de 2000 artículos científicos al respecto de la mecánica estadística que surge de esa entropía. Por tanto, en el próximo capítulo analizamos un problema específico de la energía interna en el contexto de la estadística de Tsallis.



## Capítulo 4

# Cálculo de la Energía Interna en Distintos Espacios de Hilbert, en el Contexto de la Tercera Versión.

En este capítulo analizamos cómo se calculan los valores medios cuánticos para un sistema compuesto  $A+B$ , en el contexto de la tercera versión de la mecánica estadística no-extensiva. De igual manera, introduciremos un procedimiento de cálculo alternativo para los valores medios, en los subespacios de Hilbert, denominado método de las matrices  $E_A$  y  $E_B$ , como solución a un problema de la energía interna: los cálculos de dicho parámetro en el espacio de Hilbert completo son diferentes a los cálculos en los subespacios de Hilbert. Como consecuencia de esto, encontramos que para un sistema compuesto de Hamiltoniano aditivo, las fórmulas usuales causan la quiebra de la aditividad energética (el estudio de sistemas compuestos es importante, pues existen sistemas magnéticos de gran interés científico como los óxidos de manganeso que tienen valencia mixta en el ión de manganeso,  $Mn^{3+}$  y  $Mn^{4+}$ ). De las tres versiones propuestas, hasta la fecha, para la mecánica estadística no-extensiva, la tercera versión es la más analizada). Con este método recuperamos la conocida aditividad para un hamiltoniano aditivo. El método de las matrices  $E_A$  y  $E_B$  tuvo su origen en el artículo [3] *A study on composed nonextensive magnetic systems*, *Physica A* **343**, 499 (2004), una ampliación acerca del tema la encontramos en cond-mat/0701495 (2007). En nuestros cálculos, de vital importancia será la traza parcial, procedimiento que nos permite obtener información de los estados de los subsistemas, reduciendo la dimensión del espacio de Hilbert completo.

## 4.1 Equivalencia de Valores Medios Cuánticos en Diferentes Espacios de Hilbert

En principio, calcular los valores medios de observables físicos, para los subsistemas de un sistema compuesto  $A+B$ , en el espacio de Hilbert completo, debería ser equivalente a calcular dichos parámetros en los respectivos subespacios de los subsistemas  $A$  ó  $B$  [43], o sea:

$$\langle \hat{O}_A \rangle_{\text{espacio completo}} \equiv \langle \hat{o}_A \rangle_{\text{subespacioA}} \quad \text{y} \quad \langle \hat{O}_B \rangle_{\text{espacio completo}} \equiv \langle \hat{o}_B \rangle_{\text{subespacioB}} \quad (4.1)$$

donde  $\hat{O}_A$  y  $\hat{O}_B$  son operadores que representan observables de los respectivos subsistemas, en el espacio de Hilbert completo; de igual manera  $\hat{o}_A$  y  $\hat{o}_B$  representan dichos observables en los respectivos subespacios de Hilbert. Esta equivalencia se cumple en la estadística de Boltzmann-Gibbs.

En la tercera versión, hasta antes de [3], se consideraba que los valores medios cuánticos también serían equivalentes en diferentes espacios de Hilbert. Sin embargo, en este capítulo, mostraremos *explícitamente*, y de manera *exacta*, que dado un sistema con Hamiltoniano *aditivo*  $H_{A+B} = H_A + H_B$ , comprobamos que, al realizar los cálculos en los respectivos subespacios de Hilbert, se quiebra la aditividad de la energía, o sea  $U_{A+B} \neq U_A + U_B$ . Debemos hacer hincapié que si todos los cálculos son hechos en el espacio de Hilbert completo, *verificamos* la aditividad energética  $U_{A+B} = U_A + U_B$ . Como solución para el cálculo en los subespacios de Hilbert, introduciremos nuevas matrices parciales, distintas a aquellas de la tercera versión, y *verificaremos exactamente* que  $U_{A+B} = U_A + U_B$ .

## 4.2 Cálculo de Valores Medios Cuánticos en un Modelo de Heisenberg con Aproximación de Campo Medio

Analizaremos un sistema de dos spines  $\frac{1}{2}$ ,  $S_A = \frac{1}{2}$  y  $S_B = \frac{1}{2}$ , con hamiltoniano aditivo<sup>3</sup>, mas correlacionado magnéticamente, en un modelo de Heisenberg en la aproximación de campo medio:

$$\hat{H}_{A+B} = \hat{H}_A + \hat{H}_B, \quad (4.2)$$

siendo

$$\hat{H}_A = g\mu_h B_A \sum_i^N \hat{S}_{A,i}^z \quad \text{y} \quad \hat{H}_B = g\mu_h B_B \sum_i^N \hat{S}_{B,i}^z, \quad (4.3)$$

$g=2$  es el factor giromagnético,  $\mu_h$  es el magnetón de Bohr, por razones didácticas cambiamos el símbolo usual  $\mu_B$ ;  $N_A$  y  $N_B$  son los respectivos números de iones de las subredes  $A$  y  $B$ ;  $\hat{S}_{A,i}^z$  y  $\hat{S}_{B,i}^z$  son los operadores de spin,  $A(B)$  indica la respectiva subrede y el subíndice  $i$  la  $i$ -ésima partícula;  $B_A$  y  $B_B$  son los llamados campos magnéticos efectivos, definidos como:

$$B_A = B_0 + \lambda_A M_A + \lambda_{AB} M_B \quad \text{y} \quad B_B = B_0 + \lambda_B M_B + \lambda_{AB} M_A, \quad (4.4)$$

considerando que los spines son independientes la Eq. (4.3) se expresa como:

$$\hat{H}_A = g\mu_h B_A N_A \hat{S}_A^z \quad \text{y} \quad \hat{H}_B = g\mu_h B_B N_B \hat{S}_B^z, \quad (4.5)$$

$B_0$  es el campo magnético aplicado,  $\lambda_A$  y  $\lambda_B$  son los parámetros de acoplamiento intrarred y  $\lambda_{AB}$  es el parámetro de acoplamiento interred.

### 4.2.1 Cálculo de Energías Internas en el Espacio de Hilbert Completo 4x4

En esta subsección mostramos cómo se aplica la mecánica estadística no-extensiva, para el sistema magnético representado por la Eq. (4.5), considerando  $N_A=N_B=N$  para una

---

<sup>3</sup> El sistema de 2 spines  $\frac{1}{2}$  es el sistema compuesto más simple y didáctico.

simplificación de los cálculos. Como ejemplo ilustrativo, calcularemos los valores medios cuánticos de los operadores Hamiltoniano  $\hat{H}_A$  y  $\hat{H}_B$ , o sea las energías internas  $U_A$  y  $U_B$ , en el espacio de Hilbert completo, los cuales tienen las fórmulas generales:

$$U_A = \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{H}_A)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)} \quad \text{y} \quad U_B = \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{H}_B)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)}, \quad (4.6)$$

así, para nuestro sistema específico de 2 espines  $\frac{1}{2}$ , en un espacio de Hilbert 4x4, las respectivas energías internas, en un espacio de Hilbert 4x4, adoptan la forma:

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)} \quad \text{y} \quad U_B = Ng\mu_h B_B \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)}. \quad (4.7)$$

Para calcular estos parámetros, necesitaremos la matriz densidad, así como los operadores de spin. Primero, de la Eq. (2.41) formamos el operador matriz densidad:

$$\hat{\rho} = \left\{ 1 + (1-q) \frac{2N\mu_h}{K_B T} (\hat{S}_A^z B_A + \hat{S}_B^z B_B) \right\}^{\frac{1}{1-q}} / Z_q, \quad (4.8)$$

el cual elevamos a la potencia  $q$ :

$$\hat{\rho}^q = \left\{ 1 + (1-q) \frac{2N\mu_h}{k_B T} (S_A^z B_A + S_B^z B_B) \right\}^{\frac{q}{1-q}} / Z_q^q; \quad (4.9)$$

Por otro lado, los operadores adimensionales de spin en el espacio de Hilbert completo 4x4 son ( $\hbar$  está incluido en el magnetón de Bohr):

$$\hat{S}_A^z = \left\{ |++\rangle\langle ++| + |+-\rangle\langle +-| - |--\rangle\langle --| - |-+\rangle\langle -+| \right\} / 2 \quad (4.10)$$

y

$$\hat{S}_B^z = \left\{ |++\rangle\langle ++| - |+-\rangle\langle +-| + |--\rangle\langle --| - |-+\rangle\langle -+| \right\} / 2, \quad (4.11)$$

donde  $|++\rangle\langle ++|$ ,  $|+-\rangle\langle +-|$ ,  $|-\rangle\langle -+|$  y  $|--\rangle\langle --|$  son operadores externos, los cuales son formados por bras y kets, los cuales representan estados cuánticos del sistema completo. Los bras son:  $\langle ++|$ ,  $\langle +-|$ ,  $\langle -+|$  y  $\langle --|$ ; los respectivos kets son:  $|++\rangle$ ,  $|+-\rangle$ ,  $|-\rangle$  y  $|--\rangle$ . Ahora, podemos obtener los elementos matriciales de la matriz densidad (para después expresarla con notación idéntica a las Eq. (4.10) y Eq. (4.11)):

$$\begin{aligned}\rho_{++} &= \langle ++|\hat{\rho}|++\rangle = \alpha_1/Z_q, & \rho_{+-} &= \langle +-|\hat{\rho}|+-\rangle = \alpha_2/Z_q, \\ \rho_{-+} &= \langle -+|\hat{\rho}|-\rangle = \alpha_3/Z_q & \text{y} & \rho_{--} = \langle --|\hat{\rho}|--\rangle = \alpha_4/Z_q,\end{aligned}\quad (4.12)$$

donde por razones prácticas, hemos introducido los siguientes parámetros  $\alpha$ :

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \left[1 + (1-q) \frac{2N\mu_h(B_A + B_B)}{k_B T}\right]^{\frac{1}{1-q}}, & \alpha_2 &= \left[1 + (1-q) \frac{2N\mu_h(B_A - B_B)}{k_B T}\right]^{\frac{1}{1-q}}, \\ \alpha_3 &= \left[1 + (1-q) \frac{2N\mu_h(-B_A + B_B)}{k_B T}\right]^{\frac{1}{1-q}} & \text{y} & \alpha_4 = \left[1 - (1-q) \frac{2N\mu_h(B_A + B_B)}{k_B T}\right]^{\frac{1}{1-q}};\end{aligned}\quad (4.13)$$

y para los elementos matriciales de  $\rho^q$  tenemos:

$$\begin{aligned}\rho_{++}^q &= \langle ++|\hat{\rho}^q|++\rangle = \alpha_1^q/Z_q^q, & \rho_{+-}^q &= \langle +-|\hat{\rho}^q|+-\rangle = \alpha_2^q/Z_q^q, \\ \rho_{-+}^q &= \langle -+|\hat{\rho}^q|-\rangle = \alpha_3^q/Z_q^q & \text{y} & \rho_{--}^q = \langle --|\hat{\rho}^q|--\rangle = \alpha_4^q/Z_q^q,\end{aligned}\quad (4.14)$$

por lo tanto, mediante el uso de operadores externos, el operador matriz densidad puede ser expresado de la siguiente manera:

$$\hat{\rho} = \frac{\left\{ \alpha_1 |++\rangle\langle ++| + \alpha_2 |+-\rangle\langle +-| + \alpha_3 |-\rangle\langle -+| + \alpha_4 |--\rangle\langle --| \right\}}{Z_q}, \quad (4.15)$$

y elevado a la potencia  $q$ :

$$\hat{\rho}^q = \frac{\left\{ \alpha_1^q |++\rangle\langle ++| + \alpha_2^q |+-\rangle\langle +-| + \alpha_3^q |-+\rangle\langle -+| + \alpha_4^q |--\rangle\langle --| \right\}}{Z_q^q}, \quad (4.16)$$

de esta manera, reemplazando las Eqs. (4.10), (4.11) y (4.16) en la Eq.(4.7), obtenemos las energías internas en el espacio de Hilbert completo 4x4:

$$U_A = N\mu_h B_A \frac{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q} \quad \text{y} \quad U_B = N\mu_h B_B \frac{\alpha_1^q + \alpha_3^q - \alpha_2^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q}, \quad (4.17)$$

así, tenemos que la energía interna total es:

$$U_{A+B} = Ng\mu_h \frac{B_A \{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q\} + B_B \{\alpha_1^q + \alpha_3^q - \alpha_2^q - \alpha_4^q\}}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q}. \quad (4.18)$$

En las próximas dos subsecciones, utilizando dos procedimientos, estos resultados serán comparados con los cálculos en los subespacios de Hilbert 2x2.

## 4.2.2 Cálculo de las Energías Internas en los Subespacios de Hilbert 2x2,

### Usando las Fórmulas Acostumbradas de la Tercera Versión

Realizaremos el cálculo de  $U_A$  y  $U_B$  en los subespacios de Hilbert 2x2. En principio los resultados deben ser idénticos a aquellos obtenidos en el espacio de Hilbert 4x4. En los subespacios de Hilbert 2x2 las energías internas para el sistema de la Eq. (4.5) son definidas como:

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q)} \quad \text{y} \quad U_B = Ng\mu_h B_B \frac{\text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q)}, \quad (4.19)$$

para calcular estos parámetros termodinámicos, en la Eq. (4.15) realizamos la traza parcial y obtenemos las respectivas matrices parciales  $\hat{\rho}_A$  y  $\hat{\rho}_B$ :

$$\hat{\rho}_A = \frac{\left\{ (\alpha_1 + \alpha_2) |+\rangle\langle +| + (\alpha_3 + \alpha_4) |-\rangle\langle -| \right\}}{Z_q} \quad (4.20)$$

y

$$\hat{\rho}_B = \frac{\left\{ (\alpha_1 + \alpha_3) |+\rangle\langle+| + (\alpha_2 + \alpha_4) |-\rangle\langle-| \right\}}{Z_q}, \quad (4.21)$$

elevando a la potencia  $q$ , tenemos:

$$\hat{\rho}_A^q = \frac{\left\{ (\alpha_1 + \alpha_2)^q |+\rangle\langle+| + (\alpha_3 + \alpha_4)^q |-\rangle\langle-| \right\}}{Z_q^q} \quad (4.22)$$

y

$$\hat{\rho}_B^q = \frac{\left\{ (\alpha_1 + \alpha_3)^q |+\rangle\langle+| + (\alpha_2 + \alpha_4)^q |-\rangle\langle-| \right\}}{Z_q^q}. \quad (4.23)$$

Para nuestro cálculo, también sabemos que los operadores de spin en los subespacios de Hilbert 2x2 son:

$$\hat{s}_A^z = \frac{\left\{ |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \right\}}{2} \quad y \quad \hat{s}_B^z = \frac{\left\{ |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \right\}}{2}; \quad (4.24)$$

así, reemplazando las Eqs. (4.22), (4.23) y (4.24) en la Eq. (4.19), obtenemos el siguiente resultado en los respectivos espacios de Hilbert 2x2:

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)^q - (\alpha_3 + \alpha_4)^q}{(\alpha_1 + \alpha_2)^q + (\alpha_3 + \alpha_4)^q} \quad y \quad U_B = N\mu_h B_A \frac{(\alpha_1 + \alpha_3)^q - (\alpha_2 + \alpha_4)^q}{(\alpha_1 + \alpha_2)^q + (\alpha_3 + \alpha_4)^q}, \quad (4.25)$$

de manera que la energía interna total es:

$$U_{A+B} = Ng\mu_h \frac{B_A \left\{ (\alpha_1 + \alpha_2)^q - (\alpha_3 + \alpha_4)^q \right\} + B_B \left\{ (\alpha_1 + \alpha_3)^q - (\alpha_2 + \alpha_4)^q \right\}}{(\alpha_1 + \alpha_2)^q + (\alpha_3 + \alpha_4)^q}, \quad (4.26)$$

notamos que estos resultados son diferentes al resultado conseguido en el espacio de Hilbert completo 4x4, Eqs. (4.17) y (4.18). Esto puede interpretarse como un resultado 7anómalo en el contexto de la mecánica estadística no-extensiva.

### 4.2.3 Las Matrices $E_A$ y $E_B$ y el Cálculo Adecuado para las Energías Internas, en el Subespacio de Hilbert 2x2

Para el sistema magnético representado por la Eq. (4.5), en esta subsección introducimos un procedimiento que fue dado a conocer en [3, 4]. Por razones didácticas, aquí llamamos de matrices  $E_A$  y  $E_B$  a las matrices  $\rho_{A,q}$  y  $\rho_{B,q}$  de la referencia [3]. Así, en este contexto, definimos las energías internas como:

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{\text{Tr}_A(\hat{E}_A \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_A(\hat{E}_A)} \quad \text{y} \quad U_B = Ng\mu_h B_B \frac{\text{Tr}_B(\hat{E}_B \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_B(\hat{E}_B)} \quad (4.27)$$

donde las matrices parciales  $E_A$  y  $E_B$  son definidas como:

$$E_A = \text{Tr}_B(\rho^q) \quad \text{y} \quad E_B = \text{Tr}_A(\rho^q), \quad (4.28)$$

entonces, realizamos la traza parcial de la matriz  $\rho^q$  en la Eq. (4.16):

$$\hat{E}_A = \frac{\left\{ (\alpha_1^q + \alpha_2^q) |++\rangle\langle ++| + (\alpha_3^q + \alpha_4^q) |--\rangle\langle --| \right\}}{Z_q^q} \quad (4.29)$$

y

$$\hat{E}_B = \frac{\left\{ (\alpha_1^q + \alpha_3^q) |++\rangle\langle ++| + (\alpha_2^q + \alpha_4^q) |--\rangle\langle --| \right\}}{Z_q^q}, \quad (4.30)$$

debemos resaltar que estas matrices ya no necesitan ser elevadas a la potencia  $q$ . Por lo tanto, reemplazando las Eqs. (4.24), (4.29) y (4.30) en la Eq. (4.27), encontramos que el uso de las matrices  $E_A$  y  $E_B$  produce las siguientes energías, en los subespacios de Hilbert 2x2:

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q} \quad \text{y} \quad U_B = Ng\mu_h B_B \frac{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q}, \quad (4.31)$$

en consecuencia la energía total del sistema  $A+B$  es:

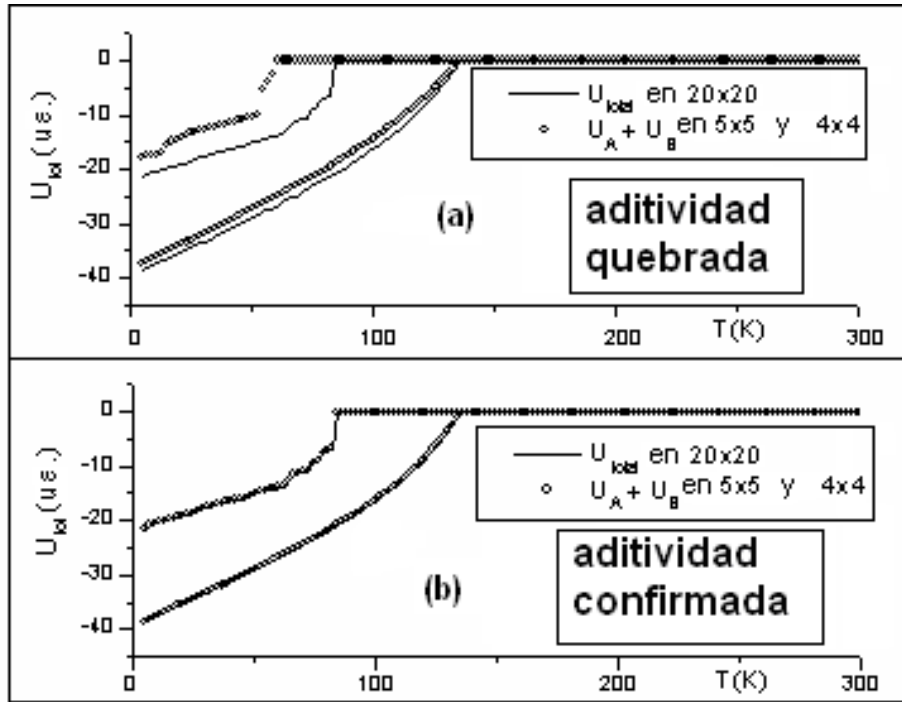
$$U_{A+B} = Ng\mu_h \frac{B_A \{ \alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q \} + B_B \{ \alpha_1^q + \alpha_3^q - \alpha_2^q - \alpha_4^q \}}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q}, \quad (4.32)$$



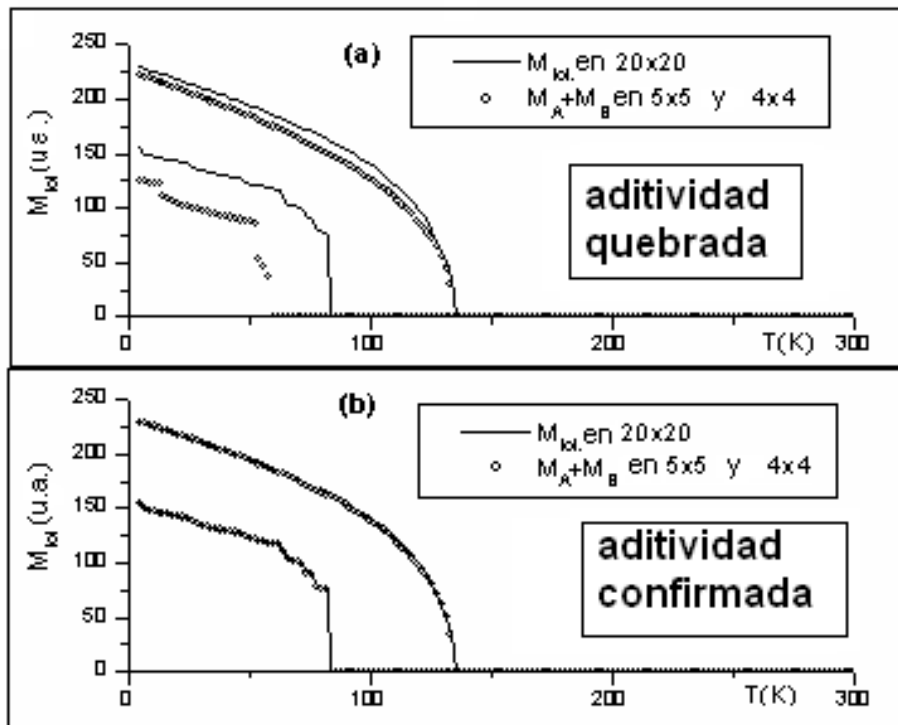
estos resultados concuerdan *exactamente* con las Eqs. (4.17) y (4.18), calculadas en el espacio de Hilbert completo  $4 \times 4$ . Este hecho muestra de manera clara que las matrices parciales  $E_A$  y  $E_B$  son las adecuadas para el cálculo de los valores medios, en el contexto de la tercera versión de la mecánica estadística no-extensiva.

### 4.3 Simulaciones Computacionales

En la sección anterior demostramos *analíticamente* que para el cálculo de la energía interna, de un sistema de 2 spines  $\frac{1}{2}$ , en los subespacios de Hilbert  $2 \times 2$ , las matrices parciales  $E_A$  y  $E_B$  son las adecuadas, mas no así  $\rho_A^q$  y  $\rho_B^q$ . Este resultado puede ser extendido para otros valores de spin, p. e.,  $S_A=2$  y  $S_B=\frac{3}{2}$ , sin embargo, la dimensión del espacio de Hilbert completo es  $20 \times 20=400$ , pues  $[2(\frac{3}{2})+1][2(2)+1]=20$ , por consiguiente para este caso es más práctico mostrar simulaciones computacionales que cálculos analíticos, estas simulaciones fueron realizadas con el lenguaje de programación Matlab, acrónimo que significa MATrix LABoratory, o sea, este programa ha sido diseñado exclusivamente para el uso con matrices [44, 45]. Los resultados confirman, una vez más, que las matrices parciales  $E_A$  y  $E_B$  son las idóneas, las gráficas aparecen en cond-mat/**0701495** [4]. En la Fig. 4.1, para un sistema con spines  $S_A=2$  y  $S_B=\frac{3}{2}$ , mostramos las gráficas de la energía interna total vs. temperatura,  $U_{\text{tot}}$  vs.  $T$ , **(a)** usando la tercera versión de la mecánica estadística no-extensiva, tanto en el espacio completo como en los respectivos subespacios y **(b)** usando las fórmulas de la tercera versión (*sólo en el espacio de Hilbert completo*), así como las fórmulas con las matrices  $E_A$  y  $E_B$ , en los respectivos subespacios de Hilbert. El modelo utilizado es idéntico al usado para el sistema de 2 spines  $\frac{1}{2}$ . Debemos hacer hincapié que sólo las matrices  $E_A$  y  $E_B$  verifican la aditividad de la energía para un sistema de hamiltoniano aditivo. La Fig. 4. 2, para el mismo sistema de la Fig. 4.1, verifica igual resultado para la magnetización.



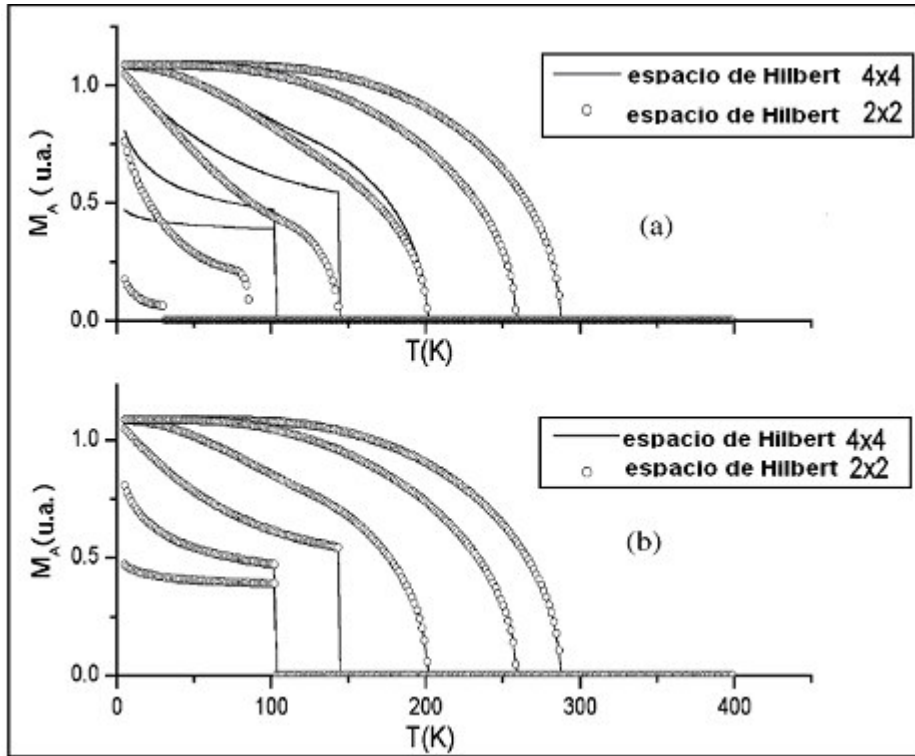
**Fig. 4.1** Energía interna total vs. temperatura,  $U_{tot}$  vs.  $T$ , para un sistema de spins  $S_A = 2$  y  $S_B = \frac{3}{2}$ . (a) usando la 3ª. versión de la mecánica estadística no-extensiva, en el espacio de Hilbert 20x20 y en los respectivos subespacios de Hilbert 5x5 y 4x4, (b) usando las fórmulas de la 3ª. versión únicamente en el espacio de Hilbert 20x20, así como las fórmulas de las matrices  $E_A$  y  $E_B$  en los respectivos subespacios de Hilbert 5x5 y 4x4. Los valores de  $q$  son, del origen para afuera, 0.3 y 0.7.



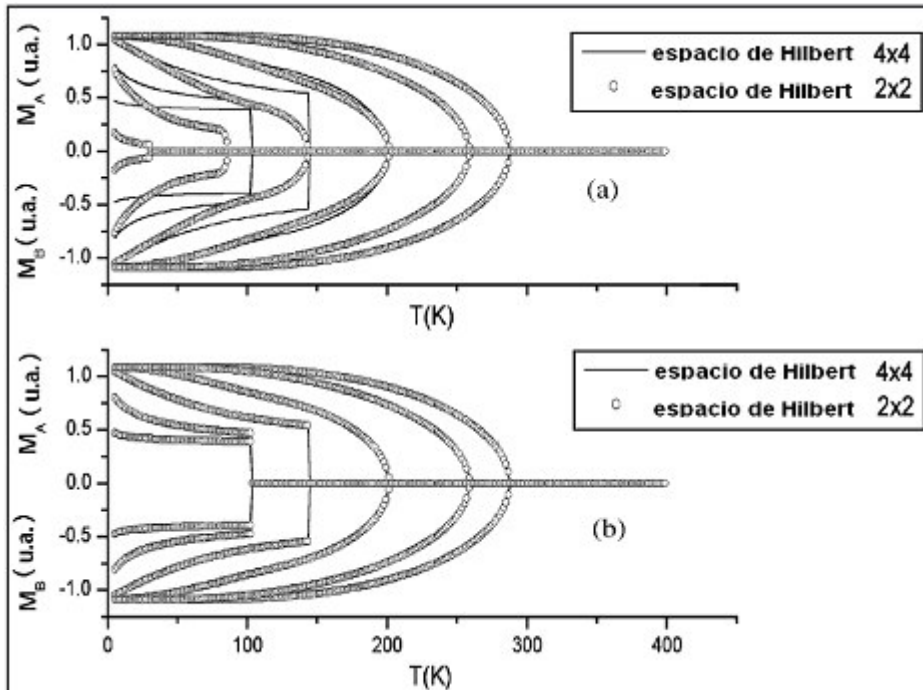
**Fig. 4.2** Magnetización total vs.  $T$ ,  $M_{tot}$  vs.  $T$ , para un sistema de spins  $S_A = 2$  y  $S_B = \frac{3}{2}$ . (a) usando la 3ª. versión de la mecánica estadística no-extensiva, en el espacio de Hilbert 20x20 y en los respectivos subespacios de Hilbert 5x5 y 4x4, (b) usando las fórmulas de la 3ª. versión únicamente en el espacio de Hilbert completo 20x20, así como las fórmulas de las matrices  $E_A$  y  $E_B$  en los respectivos subespacios de Hilbert 5x5 y 4x4. Los valores de  $q$  son, del origen para afuera, 0.3 y 0.7.

En la Fig. 4.3, para un sistema de 2 spines  $\frac{1}{2}$ , mostramos las gráficas de magnetización del subsistema  $A$  vs. temperatura, las cuales fueron publicados en *Physica A* **343**, p. 499 (2004), en esta figura notamos que para valores del índice entrópico  $q=0.7$  en adelante los dos procedimientos coinciden. De igual manera, en la Fig. 4.4, para un sistema antiferromagnético  $A+B$ , mostramos gráficas de la magnetización vs. temperatura..

En este capítulo hemos mostrado explícitamente que ocurre una anomalía en el cálculo de la energía interna de un sistema compuesto  $A+B$ , cuando se usan las fórmulas conocidas de la tercera versión de la mecánica estadística no-extensiva, *en los subespacios de Hilbert*. De igual manera demostramos de manera exacta que la solución a ese problema es la introducción de las matrices  $E_A$  y  $E_B$ , son estas matrices que contienen la información física de los subsistemas. Así, el objeto físico que tiene la información para el cálculo de las energías internas (y sobre el cual se debe realizar la operación de traza parcial) es la matriz  $\rho^q$  y no la matriz  $\rho$ .



**Fig. 4.3**  $M_A$  vs.  $T$  para un sistema ferromagnético de spins,  $S_A = \frac{1}{2}$  y  $S_B = \frac{1}{2}$ . (a) usando la 3ª. versión de la mecánica estadística no-extensiva, en el espacio de Hilbert completo 4x4 y en el respectivo subsespacio de Hilbert 2x2, (b) usando las fórmulas de la 3ª. versión únicamente en el espacio de Hilbert completo 4x4, así como la fórmula de las matrices  $E_A$ , en el respectivo subsespacio de Hilbert 2x2. Los valores de  $q$  son, del origen para afuera, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 y 1.0.



**Fig. 4.4**  $M_A$  vs.  $T$  y  $M_B$  vs.  $T$  para un sistema antiferromagnético de spins,  $S_A = \frac{1}{2}$  y  $S_B = \frac{1}{2}$ . (a) usando la 3ª. Versión de en el espacio completo 4x4, así como en los respectivos subespacios 2x2 y 2x2, (b) usando las fórmulas de la 3ª. versión únicamente en el espacio de Hilbert completo 4x4, así como las matrices  $E_A$  y  $E_B$ , en los respectivos subespacios 2x2 y 2x2. Los valores de  $q$  son, del origen para afuera, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 y 1.0.

# Capítulo 5

## Conclusiones

En esta tesis hemos analizado un problema de conservación de la energía interna, en el contexto de la tercera versión de la mecánica estadística no-extensiva; utilizando las fórmulas de esta versión, para un sistema compuesto  $A+B$ , encontramos que los cálculos de la energía interna en el espacio de Hilbert completo son diferentes a *los cálculos en los subespacios de Hilbert*, específicamente, para un sistema de Hamiltoniano aditivo encontramos que la energía interna no es aditiva. Como solución a ese problema, hemos presentado el método de las matrices parciales  $E_A$  y  $E_B$ , válido en los subespacios de Hilbert, un procedimiento adecuado para el cálculo de la energía interna para un sistema compuesto, este procedimiento produce fórmulas equivalentes, tanto en el espacio de Hilbert completo como en los subespacios de Hilbert, y en consecuencia se preserva la aditividad energética para un sistema de Hamiltoniano aditivo. El método de cálculo con las matrices  $E_A$  y  $E_B$  es consistente con el concepto de la traza parcial, una idea usada y aceptada hace varias décadas por la comunidad científica. El mencionado procedimiento confirma la aditividad de la energía interna para un sistema compuesto, en general, este tipo de sistema ha sido, de cierta manera, un tema poco analizado en el contexto de la mecánica estadística no-extensiva, sin embargo, este tópico debe ser necesariamente considerado, pues importantes sistemas físicos son sistemas compuestos.

La aditividad energética quebrada al usar  $\rho_A^q$  y  $\rho_B^q$  como matrices parciales en los cálculos de la energía interna, muestran claramente que éstas no son las matrices parciales adecuadas. Este hecho fue demostrado de forma analítica y también a través de

simulaciones computacionales. Estas matrices deben ser reemplazadas, necesariamente, por las matrices parciales  $E_A$  y  $E_B$ .

En lo referente a las perspectivas de la mecánica estadística no-extensiva, debemos referenciar el trabajo del brasileño Ernesto Pinheiro Borges, de la Universidad Federal da Bahia [46], como bien expresa este investigador: la mecánica estadística no-extensiva es una teoría aún en construcción (este trabajo intenta contribuir en esa ardua tarea), así podemos decir que las discusiones en torno a esta teoría y sus aplicaciones continúan [47, 48, 49, 50].

# Apéndice A

## Termodinámica

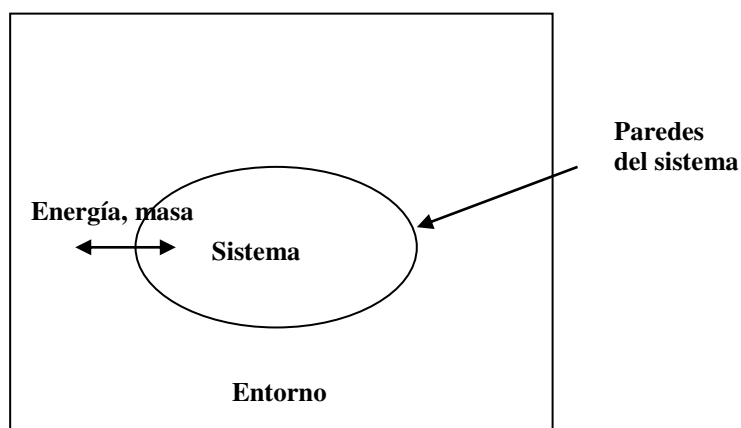
### A.1 Conceptos

#### A.1.1 Termodinámica

Es la rama de la física que estudia el intercambio de energía entre un sistema y el entorno que lo rodea; para ese estudio se definen medidas de la energía de un sistema y se estudian los distintos procesos que transfieren energía de un lugar a otro. Esta parte de la física descansa en la formulación de leyes generales; en [10, 11] tenemos dos referencias clásicas para la termodinámica.

#### A.1.2 Sistemas Termodinámicos

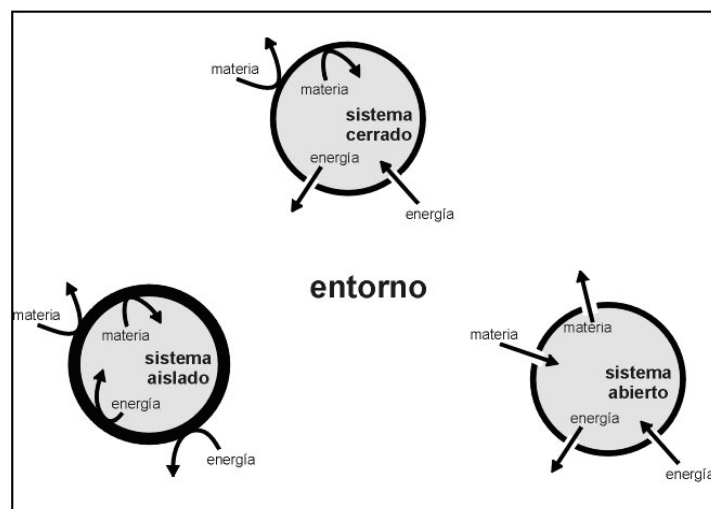
En el contexto de la termodinámica, entendemos por sistema a aquella porción del universo que deseamos estudiar, el resto del universo se llama entorno.



**Fig. A.1** Entorno+Sistema = Universo. La interacción entre el sistema y su medio ambiente se da a través de las paredes del sistema.

El sistema se separa del entorno a través de paredes, las características de las paredes definen el tipo de interacción entre el sistema y su entorno (la Fig. A.1 es ilustrativa a este respecto). Por ejemplo, las paredes diatérmicas permiten el paso de calor, mientras que las adiabáticas aíslan térmicamente el sistema. También, decimos que las paredes son permeables, cuando permiten el intercambio de materia, e impermeables cuando no permiten dicho intercambio. En ese sentido llamamos sistema aislado a aquel que está separado de su entorno por paredes fijas, adiabáticas e impermeables; sistema cerrado es aquel que sólo puede intercambiar energía con su entorno, pero no materia; sistema abierto es el sistema que puede intercambiar materia y energía con su entorno.

Decimos que un sistema aislado está en equilibrio si sus propiedades macroscópicas no varían en el tiempo; cuando un sistema está en equilibrio, todas sus propiedades intensivas y extensivas tienen valores definidos, por ejemplo, la presión, la temperatura, la densidad (estas y otras propiedades, caracterizan el estado de un sistema y se llaman funciones de estado). Se llama energía interna del sistema a la suma de las energías de todas sus partículas; en un gas ideal las moléculas sólo tienen energía cinética, los choques entre las moléculas se suponen perfectamente elásticos, así la energía interna



**Fig. A.2** Tipos de sistemas termodinámicos. La consideración del flujo de materia y energía, entre el sistema y su entorno es importante en esta clasificación.



únicamente depende de la temperatura. En la Fig. A.2 tenemos un gráfico bastante ilustrativo con respecto a los sistemas termodinámicos que hemos mencionado.

### **A.1.3 El Calor**

Se denomina calor a la energía intercambiada entre un sistema y el medio que le rodea, debido a los choques entre las moléculas del sistema y el exterior al mismo, siempre que no pueda expresarse macroscópicamente como producto de fuerza por desplazamiento. Debemos diferenciar entre los conceptos de calor y energía interna de una sustancia. El flujo de calor es una transferencia de energía que se lleva a cabo como consecuencia de las diferencias de temperatura. El calor se considera positivo cuando fluye hacia el sistema, cuando incrementa su energía interna y, negativo cuando fluye desde el sistema, por lo que disminuye su energía interna.

### **A.1.4 Procesos Reversibles y Procesos Irreversibles**

Se llama proceso reversible cuando el sistema pasa de un estado inicial a un estado final, a través de una sucesión de estados de equilibrio. En la naturaleza no existen estos tipos de procesos, sin embargo decimos que un proceso es reversible si dicho proceso real ocurre en forma cuasiestática, o sea, lo suficientemente lento como para que cada estado difiera de modo infinitesimal del estado de equilibrio. A continuación damos algunos ejemplos de procesos idealizados como reversibles: movimiento sin fricción, compresión o expansión restringida, transferencia de energía como calor debido a la diferencia infinitesimal de la temperatura, corriente eléctrica a través de una resistencia cero, reacción química restringida y mezcla de dos muestras de la misma sustancia en el mismo estado.

Por otro lado, un proceso es irreversible si el sistema y sus alrededores no pueden regresar a su estado inicial. Por ejemplo, al estar en contacto dos cuerpos, el calor fluye en forma espontánea desde el más caliente hacia el menos caliente, pero el proceso inverso

sólo se logra por medio de una influencia externa. A continuación, damos algunos ejemplos de procesos irreversibles, movimiento con fricción, expansión libre, transferencia de energía como calor debido la diferencia significativa de temperatura, corriente eléctrica a través de una resistencia diferente a cero, reacción química espontánea, mezcla de materia de diversa composición.

## **A.2 Las Cuatro Leyes de la Termodinámica**

### **A.2.1 La Ley Cero de la Termodinámica**

Esta ley nos dice que cuando un sistema está en equilibrio con otros dos, estos últimos, a su vez, también están en equilibrio. Cuando los sistemas pueden intercambiar calor, la ley cero postula que la temperatura es una variable de estado, y que la condición para que dos sistemas estén en equilibrio térmico es que se hallen a igual temperatura.

### **A.2.2 La Primera Ley de la Termodinámica**

En esencia se trata del principio de la conservación de la energía; si se realiza trabajo sobre un sistema entonces la energía interna variará. La diferencia entre la energía interna del sistema y el trabajo se llama calor, matemáticamente la podemos expresar como:

$$\Delta U = Q - W, \quad (\text{A.1})$$

donde  $\Delta U$  es la variación de energía interna,  $Q$  es el calor absorbido y  $W$  es el trabajo realizado por el sistema.

### **A.2.3 La Segunda Ley de la Termodinámica**

Afirma que la entropía que mide el desorden dentro de un sistema *aislado* es un potencial termodinámico y su valor nunca disminuye. También se puede enunciarla de otras maneras, como por ejemplo: existe un límite para la eficiencia de cualquier máquina térmica y el

calor no puede fluir espontáneamente de un sistema frío a otro caliente. Matemáticamente la podemos enunciar como:

$$\Delta S \geq 0, \quad (\text{A.2})$$

donde  $\Delta S$  es la variación de entropía.

#### **A.2.4 La Tercera Ley de la Termodinámica**

También conocida como el Teorema de Nernst, pues fue desarrollada por el físico alemán Walther Nernst, entre los años 1906 y 1912. Esta ley afirma que no se puede alcanzar el cero absoluto en un número finito de etapas; en otras palabras, nos dice que la entropía de un sistema próximo al cero absoluto tiene un valor constante, dependiendo únicamente de la temperatura y siendo *independiente* de cualesquier otro parámetro. Matemáticamente la podemos expresar como:

$$S \rightarrow S_0 \text{ cuando } T \rightarrow 0, \quad (\text{A.3})$$

donde  $S_0$  es un valor constante.

# Apéndice B

## Distribuciones de Probabilidad y Funciones Densidad de Probabilidad

En este apéndice mostramos algunos conceptos referentes a las distribuciones de probabilidad, así como a sus respectivas funciones densidad de probabilidad. De igual manera presentamos varias de estas funciones, tanto discretas como continuas.

### B.1 Variables Estadísticas

Son símbolos, como por ejemplo  $X$ ,  $Y$  y  $Z$ , los cuales tienen valores de un conjunto determinado, el cual se denomina dominio de la variable.

#### B.1. 1 Tipos de Variables

##### 1. Variables Cuantitativas

Son aquellas que tienen por valores cantidades numéricas con las cuales se pueden realizar operaciones aritméticas, y pueden ser divididas en dos subgrupos:

- a) **Discretas:** sólo pueden tener valores enteros.
- b) **Continuas:** toman cualquier valor real dentro de un intervalo dado.

##### 2. Variables Aleatorias

Están relacionadas a experimentos aleatorios, en general decimos que definimos una variable aleatoria cuando a cada elemento del espacio muestral le asociamos un número.

## B.2 Distribución de Probabilidad

Considerando que  $x$  es una variable aleatoria, decimos que  $F(x)$  es una distribución de probabilidad si  $F(x)$  asigna a un evento definido sobre  $x$  una probabilidad. Entonces la probabilidad  $P(X \leq x)$  es:

$$F(x) = P(X \leq x), \quad (\text{B.1})$$

en ese sentido, una distribución de probabilidad tiene que satisfacer tres condiciones:

1. Los siguientes límites deben ser verificados:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = 1, \quad (\text{B.2})$$

2. Es continua por la derecha, y

3. Es monótona no decreciente.

Por otro lado, la distribución de probabilidad es la acumulada de la función densidad de probabilidad  $f(x)$  (la cual será definida en la siguiente sección), es decir, se calcula a través de una sumatoria o integral según sea el caso:

a) Si  $x$  es una variable aleatoria discreta tenemos:

$$F(x) = \sum_{t=-\infty}^x f(t), \quad (\text{B.3})$$

b) Si  $x$  es una variable aleatoria continua debemos considerar:

$$F(x) = \int_{t=-\infty}^x f(t) dt. \quad (\text{B.4})$$

## B.3 Función Densidad de Probabilidad

La función densidad de probabilidad, ampliamente conocida como FDP, es la *derivada* de la distribución de probabilidad.

### B.3.1 Función Densidad de Probabilidad Discreta

Es aquella que satisface las siguientes propiedades matemáticas:

1. La probabilidad que  $x$  tome un valor específico es  $p(x)$ ,

$$P[X = x] = p(x) = p_x, \quad (\text{B.5})$$

2.  $p(x)$  es positivo para todo  $x$  real, y
3. La sumatoria de  $p(x)$  sobre todos los posibles valores de  $x$  es 1:

$$\sum_j p_j = 1, \quad (\text{B.6})$$

$j$  representa todos los valores que  $x$  puede tener y  $p_j$  es la probabilidad en  $x_j$ .

### B.3.2 Función Densidad de Probabilidad Continua

Es aquella que satisface las siguientes propiedades matemáticas:

1. La probabilidad de que  $x$  esté entre dos puntos  $a$  y  $b$  es:

$$p[a \leq x \leq b] = \int_a^b f(x)dx, \quad (\text{B.7})$$

2. La probabilidad es positiva para todo  $x$  real, y
3. La integral de la función densidad de probabilidad es 1, o sea,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1. \quad (\text{B.8})$$

Hay que hacer notar que estas propiedades se enuncian suponiendo que conocemos el valor de la probabilidad, pero en la realidad ésto no ocurre, es decir que no sabemos la probabilidad y lo que se hace es trabajar con estimaciones. Por este motivo se construyen modelos teóricos que aproximan los resultados.

### B.4 Tipos de Distribuciones de Probabilidad de Variables Discretas

a) **Distribución Uniforme.** Considera que todos los eventos elementales tienen igual probabilidad.

b) **Distribución Binomial.** Es la que maneja la distribución de la probabilidad de obtener cierta cantidad de éxitos al realizar una cantidad de experimentos con probabilidad de éxito constante y con ensayos independientes.

$$P(x) = C_x^n p^x (1-p)^{n-x}, \quad (\text{B.9})$$

donde  $C_x^n$  representa una combinación,  $n$  es el número de ensayos,  $x$  simboliza el número de éxitos y  $p$  representa la probabilidad de cada ensayo.

**c) Distribución de Poisson.** Es la distribución de la probabilidad de que ocurra un evento raro en un periodo de tiempo, un espacio o un lugar. Se le conoce también como ley de los eventos improbables.

$$P(x) = \frac{\mu^x e^{-\mu}}{x!}, \quad (\text{B.10})$$

donde  $\mu$  es el número promedio de éxitos durante un intervalo específico,  $e$  es la constante 2.71828, base del sistema de logaritmos naturales y  $x$  es el número de éxitos.

## **B.5 Tipos de Distribución de Probabilidad de Variables Continuas y sus Respectivas Densidades de Probabilidad**

Al igual que en el caso de las distribuciones de probabilidad de variables discretas, en el caso de las distribuciones de probabilidad de variables continuas se tienen varios modelos teóricos que en seguida presentamos (adicionalmente debemos citar las referencias [51, 52] que muestra generalizaciones no-extensivas para algunas de estas distribuciones):

**a) Distribución Uniforme.** Decimos que una variable aleatoria continua  $X$  tiene una distribución uniforme en el intervalo  $[\theta_1, \theta_2]$  si la función densidad de probabilidad  $f(x)$  es:

$$f(x) = \frac{1}{\theta_2 - \theta_1}, \quad \theta_1 \leq x \leq \theta_2, \quad (\text{B.11})$$

**b) Distribución Exponencial.** Muy utilizada al estudiar el tiempo que hay 2 sucesos, su respectiva función densidad de probabilidad es:

$$f(x) = \frac{1}{\beta} e^{-\frac{x}{\beta}}, \quad 0 \leq x < \infty, \quad (\text{B.12})$$

donde  $\beta$  es un parámetro.

**c) Distribución Gamma.** Se utiliza para estudiar variables cuya distribución puede ser asimétrica, la respectiva función densidad de probabilidad es:

$$f(x) = \left[ \frac{1}{\Gamma(\alpha)\beta^\alpha} \right] x^{\alpha-1} e^{-\frac{x}{\beta}}, \quad 0 < x < \infty, \quad (\text{B.14})$$

$\alpha$  y  $\beta$  son parámetros y  $\Gamma$  es la función gamma.

**d) Distribución Ji-Cuadrado ( $\chi^2$ ).** También llamada ji-cuadrado de Pearson. Es una distribución asociada a la variable  $\chi^2$ , y se usa para comparar los valores observados con los valores esperados. En este caso la función densidad de probabilidad es:

$$f(\chi^2) = \frac{(\chi^2)^{\frac{\nu}{2}-1} e^{-\frac{\chi^2}{2}}}{2^{\frac{\nu}{2}} \Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)}, \quad \chi^2 > 0, \quad (\text{B.15})$$

$\Gamma$  es la función Gamma y  $\nu$  es un parámetro que representa los grados de libertad de la variable aleatoria.

**e) Distribución Normal o Gaussiana.** Es una distribución de suma importancia, ampliamente usada en estadística. La función densidad de probabilidad es simétrica, con una forma de campana, y además, es el límite de otras distribuciones, por ejemplo la distribución  $\chi^2$ . La función densidad de probabilidad tiene la forma:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad x \in \mathfrak{R}, \quad (\text{B.16})$$

donde  $\mu$  y  $\sigma$  corresponden a la media y a la desviación estándar respectivamente.

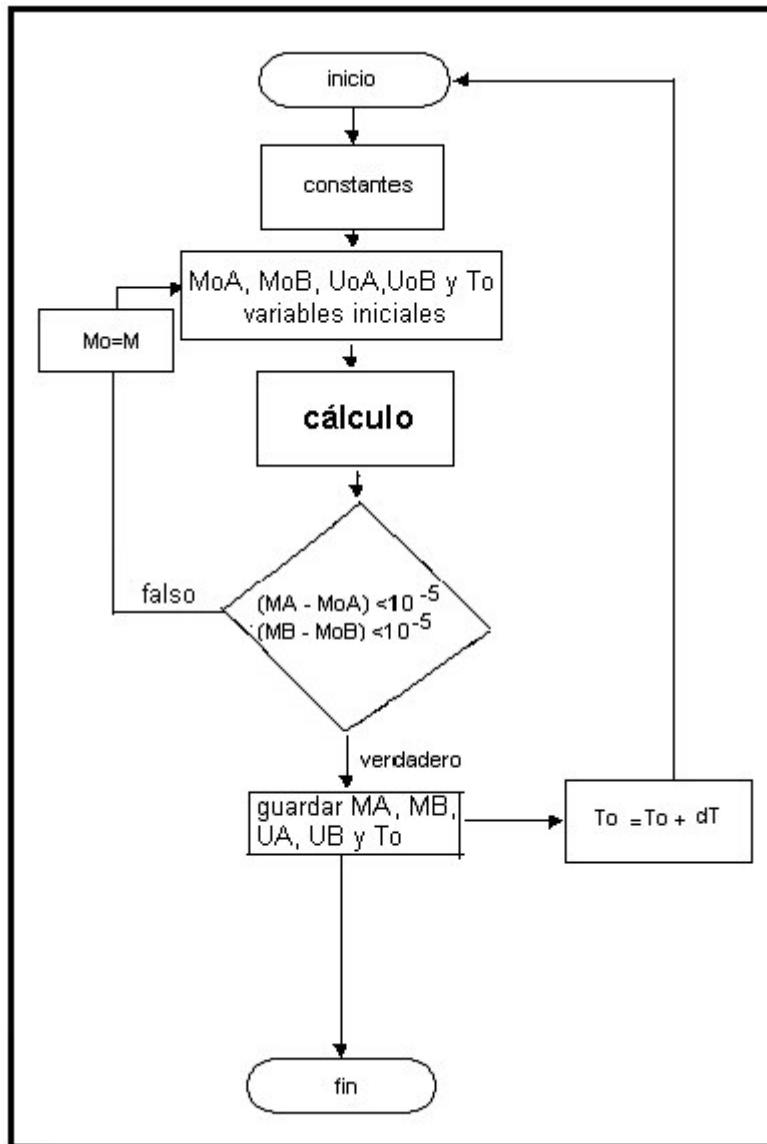


# Apéndice C

## Programación para la Simulación Computacional de la Energía Interna y la Magnetización

En este apéndice mostramos cómo son hechas las gráficas de simulación computacional para la energía interna y magnetización en el contexto de la 3<sup>a</sup>. versión de la mecánica estadística no-extensiva. Hemos utilizado el lenguaje de programación Matlab, pues es muy práctico para el trabajo con matrices. En la Fig. C.1, comenzamos presentando un diagrama de flujo para los programas que simulan gráficas de Magnetización (Energía Interna) vs. Temperatura. MoA, MoB, UoA, UoB y To son variables iniciales de magnetización, energía interna y temperatura; MA, MB, UA, UB y To son los respectivos valores correctos, obtenidos por iteración (las fórmulas del cuadro **cálculo** son mostradas en la Fig. C. 2 y son fórmulas que usamos en los capítulos 2, 3 y 4). Después de hallar todos estos valores, el proceso íntegro se repite para una temperatura diferente.

Finalmente, mostramos el texto de los programas en Matlab que graficaron las simulaciones del capítulo 4, consta básicamente de un programa principal que simula los parámetros de magnetización y energía interna en la mecánica estadística no-extensiva, este programa a su vez llama a otro subprograma que simula los parámetros en la mecánica estadística de Boltzmann-Gibbs. También debemos nuevamente citar las referencias para aprender a programar usando Matlab [44, 45], y de igual manera mencionar que comentarios acerca de comandos del programa están precedidos del símbolo %.



**Fig. C.1** Diagrama de Flujo para hallar iterativamente los valores de la magnetización (energía interna) vs. temperatura, en una aproximación de campo medio.

cálculo	
$E_A = E_0 + \lambda_A M_A + \lambda_{AB} M_B$	y $E_B = E_0 + \lambda_B M_B + \lambda_{AB} M_A$
$M_A = Ng\mu_k \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^A \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^A)}$	y $M_B = Ng\mu_k \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^B \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^B)}$
$U_A = \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^A \hat{H}_A)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^A)}$	y $U_B = \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^B \hat{H}_B)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\mathcal{O}}^B)}$
$E_A = \text{Tr}_B(\mathcal{O}^A)$	y $E_B = \text{Tr}_A(\mathcal{O}^B)$
$U_A = Ng\mu_k B_A \frac{\text{Tr}_A(\hat{E}_A \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_A(\hat{E}_A)}$	y $U_B = Ng\mu_k B_B \frac{\text{Tr}_B(\hat{E}_B \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_B(\hat{E}_B)}$
$M_A = Ng\mu_k \frac{\text{Tr}_A(\hat{E}_A \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_A(\hat{E}_A)}$	y $M_B = Ng\mu_k \frac{\text{Tr}_B(\hat{E}_B \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_B(\hat{E}_B)}$

**Fig. C.2** Cuadro conteniendo las fórmulas que son usadas en el diagrama de flujo de la Fig. C.1.

Para un sistema magnético  $A+B$ , estas fórmulas son de la aproximación de campo medio para calcular *iterativamente* los valores de la magnetización (energía interna) vs. temperatura.

## Programa Principal (en MatLab)

```

format long e; clear; clc;
P=input('introduzca J1,J2,Bo,lambda_A,lambda_B,lambda_AB: ');
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
global J1 J2 Bo lambda_A lambda_B lambda_AB pt r Id Id1 Id2 porfin q
mass... massB Kb magbohr g Tf MF1 MF2 MAF1 MAF2;
J1=P(1);J2=P(2); Bo=P(3);lambda_A=P(4); lambda_B=P(5); lambda_AB=P(6);
pt=55;r1=(2*J1+1);r2=(2*J2+1);r=r1*r2;Id=eye(r,r); Id1=eye(r1,r1);
Id2=eye(r2,r2); porfin=3000;
b=2.3*(10^-2);
massA=b; massB=b; %2.3*(10^-5); massB=2.3*(10^-5);
% 1 meV=1.60218*(10^-22) J;
magbohr=5.788372966*10^-2; % meV T^-1=9.2740154 * 10^-24JT^-1
Kb=8.61737133*10^-2; %meV K^-1 = 1.380658*10^-23 JK^-1 (Boltzmann)
g=2; Tf=480; a=0.5^-3;
MF1=a; MF2=a; MAF1=a; MAF2=-a;

[Jx,Jx_A,Jx_B] = JX2P(J1,J2); %subprograma que entrega las matrices Jx
[Jy,Jy_A,Jy_B] = JY2P(J1,J2); %subprograma que entrega las matrices Jy
[Jz,Jz_A,Jz_B] = JZ2P(J1,J2); %subprograma que entrega las matrices Jz

if lambda_AB >0 %ferro
    MA(1)=MF1; MB(1)=MF2;
elseif lambda_AB <0 %antiferro
    MA(1)=MAF1; MB(1)=MAF2;
end;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
magAF=[];magBF=[]; UAF=[];UBF=[];TgF=[];
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
L=0;
V=[0.1 0.3 0.5 0.7 0.9];
while L<=4
    L=L+1;
    q=V(L)

T=5; deltaT=Tf-T;magA=[];magB=[]; Tg=[]; UA=[]; UB=[];
for k=1:pt
    for n=2:porfin; %M vs. T ,

        B_A=Bo + lambda_A*MA(n-1) + lambda_AB*MB(n-1);
        B_B=Bo + lambda_B*MB(n-1) + lambda_AB*MA(n-1);

        HA=-g*magbohr*B_A*Jz_A; % em meV;
        HB=-g*magbohr*B_B*Jz_B; % em meV;
        HI=-2*JTr*(g-1)^2*(Jx_A*Jx_B + Jy_A*Jy_B +Jz_A*Jz_B);
        H=HA+HB+HI;
        beta=1/(Kb*T);
        OP=Id - (1-q)*beta*H;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
        %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%cut-off de Tsallis%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
        for m=1:r
            K=OP(m,m);
            if K<0
                OP(m,m)=0;
            else
                end;
            end;
        end;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
        Zq=trace( (OP).^ (1/(1-q+eps)) );
        p=( ( OP ).^(1/(1-q+eps)) )./Zq; Tr=trace(p);
        pq=p.^q; Trq=trace(pq);
    end;
end;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

```

```

if J1==J2
[p_Aq,p_Bq,TrAq,TrBq,Trp_ABq]=densidade_parcial(J1,J2,pq);
%subprograma para hacer la traza parcial de pq
[p_A,p_B,TrA,TrB,Trp_AB]=densidade_parcial(J1,J2,p);
%subprograma para hacer la traza parcial de p
elseif J1~=J2
[p_Aq,p_Bq,TrAq,TrBq,Trp_ABq]=densidade_parcial_mista(J1,J2,pq);
[p_A,p_B,TrA,TrB,Trp_AB]=densidade_parcial_mista(J1,J2,p);
end;

[Jx_a,Jy_a,Jz_a]= J1P(J1);%redefino las matrices para J para MA e MB
[Jx_b,Jy_b,Jz_b]= J1P(J2);

JZA=trace(p_Aq*Jz_a)/TrAq; % valor medio
JZB=trace(p_Bq*Jz_b)/TrBq;
MA(n)=(g*magbohr/massA)*JZA; %meV T^-1*g^-1
MB(n)=(g*magbohr/massB)*JZB;
EA(n)=trace(p*HA); EB(n)=trace(p*HB);

mediaTau=trace(p*(Jx_A*Jx_B + Jy_A*Jy_B +Jz_A*Jz_B));
tau=(1/(J1*J2))*mediaTau;

t1=MA(n)-MA(n-1); t=abs(t1);
t2=MB(n)-MB(n-1); t_=abs(t2);

if (t<(10^-7) & t_<(10^-7))
    magA=[magA;MA(n)]; magB=[magB;MB(n)];
    UA=[UA;EA(n)]; UB=[UB;EB(n)];
    break
else
    end; %del if
end;% del 1 for
Tg=[Tg;T];
T=T +deltaT/pt;
end; %del 2 for
magA=(magA/magbohr); %em magbohr/mol
magB=(magB/magbohr);

figure(1)
hold on;
plot(Tg,magA,'g');
title(['M_A. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)];%p_{A},p_{B}');
xlabel('T (K)');
ylabel('M (\mu_{B} / mol)');

figure(2)
hold on;
plot(Tg,magB,'g');
title(['M_B. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)];%p_{A},p_{B}');
xlabel('T (K)');
ylabel('M (\mu_{B} / mol)');

figure(3)
hold on;
plot(Tg,UA,'g');
title(['U_A. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)];%p_{A},p_{B}');
xlabel('T (K)');
ylabel('U_A (\mu_{B} / mol)');

figure(4)
hold on;
plot(Tg,UB,'g');
title(['U_B. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)];%p_{A},p_{B}');

```

```

xlabel('T (K)');
ylabel('U_B (\mu_B / mol)');

end;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

Mag2S_Boltzmann %llama al subprograma principal.

```

---

## Subprograma Principal (en MatLab)

```

function Mag2S_Boltzmann;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

global J1 J2 Bo lambda_A lambda_B lambda_AB pt r Id Id1 Id2 porfin q
mass... massB Kb magbohr g Tf MF1 MF2 MAF1 MAF2;
J1=P(1);J2=P(2); Bo=P(3);lambda_A=P(4); lambda_B=P(5); lambda_AB=P(6);
pt=55;r1=(2*J1+1);r2=(2*J2+1);r=r1*r2;Id=eye(r,r); Id1=eye(r1,r1);
Id2=eye(r2,r2); porfin=3000;
b=2.3*(10^-2);
massA=b; massB=b; %2.3*(10^-5); massB=2.3*(10^-5);
% 1 meV=1.60218*(10^-22) J;
magbohr=5.788372966*10^-2; % meV T^-1=9.2740154 * 10^-24JT^-1
Kb=8.61737133*10^-2; %meV K^-1 = 1.380658*10^-23 JK^-1 (Boltzmann)
g=2; Tf=480; a=0.5^-3;
MF1=a; MF2=a; MAF1=a; MAF2=-a;

[Jz,Jz_A,Jz_B]=JZ2P(J1,J2); % subprograma para Jz de 2 partículas,

if lambda_AB >0 %ferromagnético
    MA(1)=MF1; MB(1)=MF2;
elseif lambda_AB <0 %antiferromagnético
    MA(1)=MAF1; MB(1)=MAF2;
end;
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

T=5; deltaT=Tf-T; magA=[];magB=[]; Tg=[]; UA=[]; UB=[];
for k=1:pt % pt es el número de datos que obtendremos
    for n=2:porfin; %M vs. T, porfin indica un limite para hallar M

        B_A=Bo + lambda_A*MA(n-1) + lambda_AB*MB(n-1);%campos moleculares
        B_B=Bo + lambda_B*MB(n-1) + lambda_AB*MA(n-1);

        HA=-g*magbohr*B_A*Jz_A; % em meV; operador hamiltoniano
        HB=-g*magbohr*B_B*Jz_B; % em meV;
        H=HA+HB;

        Z=trace(expm(-H/(Kb*T))); %función partición
        p=expm(-H/(Kb*T))/Z;% operador matriz densidad total

        JZA=trace(p*Jz_A); valor medio de Jz
        JZB=trace(p*Jz_B);

        MA(n)=(g*magbohr/massA)*JZA; %meV T^-1*g^-1, magnetización de A
        MB(n)=(g*magbohr/massB)*JZB;

        EA(n)=trace(p*HA); EB(n)=trace(p*HB); %energía interna de A

        t1=MA(n)-MA(n-1); t=abs(t1); %para determinar el error
        t2=MB(n)-MB(n-1); t_=abs(t2);
    end
end

```

```

        if (t<(10^-7) & t_<(10^-7))
            magA=[magA;MA(n)]; magB=[magB;MB(n)];
            UA=[UA;EA(n)]; UB=[UB;EB(n)];
            Break % pues ya encontró el valor correcto
        else
            end; %del if
        end;% del 1 for
    Tg=[Tg;T];
    T=T +deltaT/pt; % Actualiza la Temperatura, en la Fig. C.1 es To=To +dT.
end; %del 2 for

U=UA+UB; %energía interna total

magA=(magA/magbohr); %em magbohr/mol
magB=(magB/magbohr);
mag=magA + magB; %magnetizacion total

figure(1)
hold on; %permite la superposición de gráficas
plot(Tg,magA,'r');
title(['M_A. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)]]; %p_{A},p_{B}');
xlabel('T (K)');
ylabel('M (\mu_{B} / mol)');

figure(2)
hold on;
plot(Tg,magB,'r');
title(['M_B. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)]]; %p_{A},p_{B}');
xlabel('T (K)');
ylabel('M (\mu_{B} / mol)');

figure(3)
hold on;
plot(Tg,UA,'r');
title(['U_A. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)]]; %p_{A},p_{B}');
xlabel('T (K)');
ylabel('U_A (\mu_{B} / mol)');

figure(4)
hold on;
plot(Tg,UB,'r');
title(['U_B. J_{A}=',num2str(J1),', J_{B}=',num2str(J2)]]; %p_{A},p_{B}');
xlabel('T (K)');
ylabel('U_B (\mu_{B} / mol)');

```

# Bibliografía

- [01] C. Tsallis, Phys. D **193**, 3 (2004), cond-mat/**0403012**.
- [02] <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
- [03] F. A. R. Navarro, M. S. Reis, E. K. Lenzi e I. S. Oliveira, Phys. A **343**, 499 (2004).
- [04] F. A. R. Navarro, M. S. Reis, E. K. Lenzi e I. S. Olivera; cond-mat/**0701495** (2007).
- [05] Edición especial de Europhysics News **36**, No. 6, nov.- dic. (2005).
- [06] R. Salazar y R. Toral, Phys. A **290**, 159 (2000), cond-mat/**0005089**.
- [07] R. Salazar, A. R. Plastino y R. Toral, Europ. Phys. Jour. B **17**, 679 (2000),  
cond-mat/**0005379**.
- [08] R. Salazar y R. Toral, Phys. Rev. Lett. **83**, 4233 (1999), cond-mat/**0005467v1**.
- [09] R. Salazar y R. Toral, Phys. A **283**, 59 (2000), cond-mat/**9911063**.
- [10] F. Reif, “*Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*”, McGraw-Hill (1965).
- [11] F. Huang “*Engineering Thermodynamics: Fundamentals and Applications*”  
MacMillan Coll Div (1976).
- [12] C. E. Shannon, “*A Mathematical Theory of Communication*”, University of  
Illinois Press (1949).
- [13] S. Datta, arXiv:**0704.1623v1**[cond-mat.mes-hall].
- [14] S. Lloyd, quant-ph/**9612034** (1996).
- [15] X. Fu y Z. Fu, physics/**0509111** (2005).
- [16] O. J. E. Maroney, quant-ph/**0411172** (2002).
- [17] W. H. Zurek, quant-ph/**9807007** (1998).
- [18] Jos Uffink, *Studies In History and Philosophy of Science Part B: Studies In History  
and Philosophy of Modern Physics* **32**, No. 3, 305 (2001), cond-mat/**0005327v2**.
- [19] D. Flamm, physics/**9710007** (1997).
- [20] D. Flamm, physics/**9803005** (1998).



- [21] D. Petz, artículo en “*John von Neumann and the Foundations of Quantum Physics*”, eds. M. Redei y M. Stoltzner, Kluwer (2001), math-ph/**0102013**.
- [22] Y. Tokura, Rep. Prog. Phys. **69**, 7971 (2006).
- [23] E. Dagotto, T. Hotta, A. Moreo, Physics Reports **344**, 1 (2001), cond-mat/**0212466v1**.
- [24] E. Dagotto, New Journal of Physics **7**, 67 (2005).
- [25] M. S. Reis, J. C. C. Freitas, M. T. D. Orlando, E. K. Lenzi e I. S. Oliveira, Europhys. Lett. **58** (1), 42 (2002), cond-mat/**0109061**.
- [26] M. S. Reis, J. P. Araujo y V. S. Amaral, E. K. Lenzi e I. S. Oliveira, Phys. Rev. B **66**, 134417 (2002), cond-mat/**0207245**.
- [27] M. S. Reis, V. S. Amaral, J. P. Araujo e I. S. Oliveira, Phys. Rev. B **68**, 014404 (2003), cond-mat/**0301239v2**.
- [28] M. S. Reis, V. S. Amaral, R. S. Sarthour e I. S. Oliveira, Phys. Rev. B **73**, 092401 (2006), cond-mat/**0512208**.
- [29] M. Nauenberg, Phys. Rev. E **67**, 036114 (2003), cond-mat/**0210561**.
- [30] C. Tsallis, J. Stat. Phys. **52**, 479 (1988).
- [31] E. M. F. Curado y C. Tsallis, J. Phys. A **24**, L69 (1991), Fe de erratas: J. Phys. A **24**, 3187 (1991) y J. Phys. A **25**, 1019 (1992).
- [32] C. Tsallis, R. S. Mendes y A. R. Plastino, Phys. A **261**, 534 (1998).
- [33] S. Martinez, F. Nicolas, F. Pennini y A. Plastino; Physica A **286**, 489 (2000). physics/**0003098** (2000).
- [34] C. Beck y F. Schlogl, “*Thermodynamics of Chaotic Systems: An Introduction*”, Cambridge University Press (1995).
- [35] S. Abe y A. K. Rajagopal, Phys. Rev. Lett. **83**, 1711 (1999).
- [36] A. K. Rajagopal en “*Nonextensive Statistical Mechanics and its Applications*”, Eds. S. Abe e Y. Okamoto, Lecture Notes in Physics **560**, 99 Springer (2001).
- [37] A E. K. Lenzi, R. S. Mendes y L. R. da Silva, Phys. A **280**, 337 (2000).

- [38] C. Beck y E. G. D. Cohen, *Physica A* **322**, 267 (2003), cond-mat/**0205097**.
- [39] C. Vignat y A. Plastino; arXiv:**0706.0151v1** (2007).
- [40] C. Beck, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 180601 (2001), cond-mat/**0105374v1**.
- [41] C. Beck, cond-mat/**0502306**; aparecerá en “*Complexity, Metastability, and Nonextensivity*”, eds. C. Beck, G. Benedek, A. Rapisarda y C. Tsallis (World Scientific, Singapore (2005).
- [42] A. K. Rajagopal, C. S. Pande y S. Abe, cond-mat/**0403738**; aparecerá en los proceedings del *Workshop* indo-americano “*Nanoscale materials: From Science to Technology*”, Nova Publications, New York (2006).
- [43] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe, “*Quantum Mechanics I*”, Wiley, (1977).
- [44] [www.mathworks.com](http://www.mathworks.com)
- [45] <http://www.solorecursos.com/01Manuales2/Varios/matlab.htm>
- [46] E. P. Borges , *Ciência Hoje* **38**, nº 223 (2006).
- [47] M. Campisi, *Physics Letters A* **366**, No. 4-5, 335 (2007), cond-mat/**0611068**.
- [48] F. Bouchet, T. Dauxois, y S. Ruffo *Europhysics News* **37**, 9-10 (2006),  
cond-mat/**0605445**.
- [49] F. Baldovin y E. Orlandini, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 100601 (2006),  
cond-mat/**0603659**.
- [50] F. Baldovin, E. Orlandini, arXiv:**0705.0968**, replica a cond-mat/**0609399v1**.
- [51] O. Sotolongo-Costa, A. G. Gonzalez y F. Brouers, cond-mat/**0505525**.
- [52] A. Andai, arXiv:**0706.0606** (2007).