



SOLUCION ESTADÍSTICA PARA UNA ANOMALIA EN EL CÁLCULO DE LA ENERGÍA INTERNA DE UN SISTEMA COMPUESTO, EN EL CONTEXTO DE LA MECÁNICA ESTADÍSTICA NO-EXTENSIVA

Felipe Américo Reyes Navarro^{a*}, Jaime Francisco Vento Flores^a

^aFacultad de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Mayor de San Marcos Ap. Postal 14-0149, Lima 14, Perú.

(Recibido Junio 11, 2009; Aceptado Setiembre 19, 2009)

Resumen

En este artículo, en el contexto de la 3ª versión de la mecánica estadística no extensiva, teoría que se presenta como una generalización de la estadística padrón de Boltzmann-Gibbs-Shannon, presentamos una solución a una anomalía encontrada en el cálculo de la energía interna para un sistema compuesto A+B, de 2 spines $\frac{1}{2}$ de Hamiltoniano aditivo $H = H_A + H_B$, específicamente, el cálculo de la energía interna en el espacio de Hilbert completo es diferente al cálculo realizado en los subespacios de Hilbert, en otras palabras, $U \neq U_A + U_B$. Realizamos tanto cálculos analíticos (para 2 spines $\frac{1}{2}$), como simulaciones computacionales (para spines $S_A=2$ y $S_B=\frac{3}{2}$). Los resultados indican, de manera exacta, que el método alternativo de las matrices E_A y E_B es el indicado para los cálculos de la energía interna, por consiguiente, la matriz que contiene la información física del sistema es la matriz ρ^q y no la matriz ρ , como si es el caso de la estadística padrón.

PACS: 78.66.Sq, 05.30.-d, 98.38.Am, 75.10.Dg

Palabras claves: mecánica estadística cuántica, sistema compuesto, propiedades físicas, Hamiltonianos de spin, energía interna y magnetización.

Abstract

Therein, inside of 3rd. version of nonextensive statistical mechanics, a generalization of the standard Boltzmann-Gibbs-Shannon statistics, we display a solution to an anomaly found in the calculation of internal energy for a composite A+B, 2 spins $\frac{1}{2}$ with additive Hamiltonian $H = H_A + H_B$, specifically, by calculating internal energy in full Hilbert space is different to calculating it into the Hilbert subspaces, in other words, $U \neq U_A + U_B$. We make as much analytical calculations (for 2 spins $\frac{1}{2}$), as computational simulations (for spins $S_A=2$ and $S_B=\frac{3}{2}$). The results indicate, of exact way, that the alternative method of matrices E_A and E_B is exact for the calculations with internal energy, therefore, ρ^q is the matrix that contains the physical information of the system but not the matrix ρ , as happen in the standard statistical.

Keywords: quantum statistical mechanics, composites, physical properties, spin Hamiltonian, internal energy and magnetization.

1. Introducción

La motivación para este trabajo son las investigaciones que han sido desarrolladas en los últimos 20 años utilizando la llamada mecánica estadística no-extensiva [1], teoría desarrollada por el investigador brasileño C. Tsallis, que se presenta como una alternativa para la estadística de Boltzmann-Gibbs-Shannon. La cantidad de trabajos científicos a respecto de esta teoría es elevadísima, habiendo hasta la fecha más de 2000 publicaciones [2]. 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 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].

* Corresponding author. e-mail: jventof@unmsm.edu.pe and farnape@gmail.com

2. Marco Teórico

La construcción de la mecánica estadística no-extensiva comienza con el postulado de la entropía de Tsallis S_q [2]:

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

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. Tr simboliza la operación de traza parcial. En el límite cuando q tiende al valor de 1 recuperamos la entropía de Boltzmann-Gibbs.

$$S = k_B \text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}), \quad (2)$$

El siguiente paso es encontrar la distribución de probabilidad que maximice la entropía de la Eq. (1), (debemos resaltar el hecho que se postule la entropía sin conocer *a priori* la matriz densidad). Esto es realizado a través del método de máxima entropía, considerando ciertas ligaduras para el sistema en cuestión. Este método considera a la mecánica estadística como un proceso de inferencia y fue inventado por el estadounidense Edward T. Jaynes en 1957.

Para un sistema compuesto A+B, tenemos la entropía del sistema completo:

$$S_{A+B} = k_B \frac{1 - \text{Tr}_{(A,B)}[\hat{\rho}^q]}{q - 1}, \quad (3)$$

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

$$S_A = k_B \frac{1 - \text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q)}{q - 1} \text{ y } S_B = k_B \frac{1 - \text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q)}{q - 1}, \quad (4)$$

estas entropías para los subsistemas también son postuladas.

Actualmente, existen 3 versiones en el contexto de la mecánica estadística no-extensiva. Todas usan la misma forma entrópica de la Eq. (1). Sin embargo, es la 3ª versión la más aceptada y ampliamente investigada por la comunidad científica. Esta última versión fue ideada por C. Tsallis, A. R. Plastino y R. S. Mendes en 1998 en el artículo *The Role of Constraints within Generalized Nonextensive Statistics* [3]. Las ligaduras a ser consideradas, respectivamente, son las de norma unitaria y una redefinición de la energía interna:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1 \text{ y } U_q = \frac{\text{Tr}(\hat{\rho}^q \hat{H})}{\text{Tr}(\hat{\rho}^q)}, \quad (5)$$

encontrándose, después del proceso de maximización de S_q , la siguiente densidad de probabilidad:

$$\hat{\rho} = \frac{[\hat{1} - (1 - q)\beta' \hat{H}]^{\frac{1}{1-q}}}{Z_q}, \quad (6)$$

Z_q es la función de partición,

$$Z_q = \text{Tr}[\hat{1} - (1 - q)\beta' \hat{H}]^{\frac{1}{1-q}}, \quad (7)$$

donde β' es un parámetro energético, ver los trabajos de M. S. Reis *et al.* [4, 5, 6, 7].

3. Procedimiento

El sistema de estudio es un sistema magnético de 2 spines $\frac{1}{2}$, de Hamiltoniano $H = H_A + H_B$, usamos el modelo de Heisenberg en la aproximación de campo medio. Los observables físicos serán representados por operadores, así el sistema de estudio se expresa:

$$\hat{H}_{A+B} = \hat{H}_A + \hat{H}_B, \quad (8)$$

Siendo

$$\hat{H}_A = g\mu_h B_A \sum_i^N \hat{S}_{A,i}^z \text{ y } \hat{H}_B = g\mu_h B_B \sum_i^N \hat{S}_{B,i}^z, \quad (9)$$

$g=2$ es el factor giromagnético, μ_h es el magnetón de Bohr, por razones didácticas cambiamos el símbolo usual μ_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:

$$B_A = B_0 + \lambda_A M_A + \lambda_{AB} M_B \text{ y } B_B = B_0 + \lambda_B M_B + \lambda_{AB} M_A, \quad (10)$$

donde B_0 es el campo magnético externo aplicado, λ_A y λ_B son parámetros de acoplamiento intrared y

λ_{AB} , es el parámetro de acoplamiento interred. Considerando que los spines son independientes la Eq. (9) se expresa como:

$$\begin{aligned}\hat{H}_A &= g\mu_h B_A N_A \hat{S}_A^z \quad y \\ \hat{H}_B &= g\mu_h B_B N_B \hat{S}_B^z.\end{aligned}\quad (11)$$

En las siguientes subsecciones mostramos los cálculos realizados para encontrar la energía interna.

3.1 Cálculo de las 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. (9), considerando $N_A=N_B=N$ para una simplificación de los cálculos. En el espacio de Hilbert completo, las energías internas tienen las fórmulas generales:

$$\begin{aligned}U_A &= \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{H}_A)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)} \quad y \\ U_B &= \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{H}_B)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)},\end{aligned}\quad (12)$$

así, para nuestro sistema específico de 2 spines $1/2$., en un espacio de Hilbert 4x4, las respectivas energías internas, en un espacio de Hilbert 4x4, adoptan la forma:

$$\begin{aligned}U_A &= Ng\mu_h B_A \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)} \quad y \\ U_B &= Ng\mu_h B_B \frac{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_{(A,B)}(\hat{\rho}^q)}.\end{aligned}\quad (13)$$

Para calcular estos parámetros, necesitaremos la matriz densidad, así como los operadores de spin. Primero, de la Eq. (6) formamos el operador matriz densidad:

$$\hat{\rho} = \left\{ 1 + (1-q) \frac{2N\mu_h}{k_B T} (\hat{S}_A^z B_A + \hat{S}_B^z B_B) \right\}^{\frac{1}{1-q}} \Bigg/ Z_q \quad (14)$$

el cual elevamos a la potencia q :

$$\hat{\rho}^q = \left\{ 1 + (1-q) \frac{2N\mu_h}{k_B T} (S_A^z B_A + S_B^z B_B) \right\}^{\frac{q}{1-q}} \Bigg/ Z_q^q \quad (15)$$

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

$$\begin{aligned}\hat{S}_A^z &= \frac{\left\{ |++\rangle\langle ++| + |+-\rangle\langle +-| + |-+\rangle\langle -+| + |--\rangle\langle --| \right\}}{2} \quad y \\ \hat{S}_B^z &= \frac{\left\{ |++\rangle\langle ++| - |+-\rangle\langle +-| + |-+\rangle\langle -+| - |--\rangle\langle --| \right\}}{2}\end{aligned}\quad (16)$$

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:

$$\begin{aligned}\rho_{++} &= \langle ++|\hat{\rho}|++\rangle = \alpha_1 / Z_q, \\ \rho_{+-} &= \langle +-|\hat{\rho}|+-\rangle = \alpha_2 / Z_q, \\ \rho_{-+} &= \langle -+|\hat{\rho}|-+\rangle = \alpha_3 / Z_q \quad y \\ \rho_{--} &= \langle --|\hat{\rho} |--\rangle = \alpha_4 / Z_q,\end{aligned}\quad (17)$$

donde por razones prácticas, hemos introducido los siguientes parámetros α :

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \left[1 + (1-q) \frac{2N\mu_h (B_A + B_B)}{k_B T} \right]^{\frac{1}{1-q}}, \\ \alpha_2 &= \left[1 + (1-q) \frac{2N\mu_h (B_A - B_B)}{k_B T} \right]^{\frac{1}{1-q}}, \\ \alpha_3 &= \left[1 + (1-q) \frac{2N\mu_h (-B_A + B_B)}{k_B T} \right]^{\frac{1}{1-q}} \quad y \\ \alpha_4 &= \left[1 - (1-q) \frac{2N\mu_h (B_A + B_B)}{k_B T} \right]^{\frac{1}{1-q}}\end{aligned}\quad (18)$$

y para los elementos matriciales de ρ^q tenemos:

$$\begin{aligned}\rho_{++}^q &= \langle ++ | \hat{\rho}^q | ++ \rangle = \frac{\alpha_1^q}{Z_q}, & \rho_{--}^q &= \langle -- | \hat{\rho}^q | -- \rangle = \frac{\alpha_4^q}{Z_q} \\ \rho_{+-}^q &= \langle +- | \hat{\rho}^q | +- \rangle = \frac{\alpha_2^q}{Z_q}, & & \\ \rho_{-+}^q &= \langle -+ | \hat{\rho}^q | -+ \rangle = \frac{\alpha_3^q}{Z_q} \quad y\end{aligned}\tag{19}$$

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

$$\hat{\rho} = \frac{\{\alpha_1 | ++ \rangle \langle ++ | + \alpha_2 | +- \rangle \langle +- | + \alpha_3 | -+ \rangle \langle -+ | + \alpha_4 | -- \rangle \langle -- | \}}{Z_q}\tag{20}$$

y elevado a la potencia q :

$$\hat{\rho}^q = \frac{\{\alpha_1^q | ++ \rangle \langle ++ | + \alpha_2^q | +- \rangle \langle +- | + \alpha_3^q | -+ \rangle \langle -+ | + \alpha_4^q | -- \rangle \langle -- | \}}{Z_q^q}\tag{21}$$

de esta manera, reemplazando las Eqs. (16) y (21) en la Eq.(13), obtenemos las energías internas en el espacio de Hilbert completo 4×4 :

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q} \quad y$$

$$U_B = Ng\mu_h B_B \frac{\alpha_1^q + \alpha_3^q - \alpha_2^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q}\tag{22}$$

así, tenemos que la energía interna total es:

$$U_{A+B} = Ng\mu_h \frac{B_A \{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q\} + B_B \{\alpha_1^q + \alpha_3^q - \alpha_2^q - \alpha_4^q\}}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q}.\tag{23}$$

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

3.2 Cálculo de las Energías Internas en los Subespacios de Hilbert 2×2 , Usando las Fórmulas Acostumbradas de la Tercera Versión

Realizaremos el cálculo de U_A y U_B en los subespacios de Hilbert 2×2 . En principio los resultados deben ser idénticos a aquellos obtenidos en el espacio de Hilbert 4×4 . En los subespacios de Hilbert 2×2 las energías internas para el sistema de la Eq. (9) son definidas como:

$$\begin{aligned}U_A &= Ng\mu_h B_A \frac{\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q \hat{S}_A^z)}{\text{Tr}_A(\hat{\rho}_A^q)} \quad y \\ U_B &= Ng\mu_h B_B \frac{\text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q \hat{S}_B^z)}{\text{Tr}_B(\hat{\rho}_B^q)}\end{aligned}\tag{24}$$

para calcular estos parámetros termodinámicos, en la Eq. (20) realizamos la traza parcial y obtenemos las respectivas matrices parciales $\hat{\rho}_A$ y $\hat{\rho}_B$: {XE "matrices parciales"}

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A &= \frac{\{(\alpha_1 + \alpha_2) | + \rangle \langle + | + (\alpha_3 + \alpha_4) | - \rangle \langle - | \}}{Z_q} \quad y \\ \hat{\rho}_B &= \frac{\{(\alpha_1 + \alpha_3) | + \rangle \langle + | + (\alpha_2 + \alpha_4) | - \rangle \langle - | \}}{Z_q}\end{aligned}\tag{25}$$

elevando a la potencia q , tenemos:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A^q &= \frac{\{(\alpha_1 + \alpha_2)^q | + \rangle \langle + | + (\alpha_3 + \alpha_4)^q | - \rangle \langle - | \}}{Z_q^q} \quad y \\ \hat{\rho}_B^q &= \frac{\{(\alpha_1 + \alpha_3)^q | + \rangle \langle + | + (\alpha_2 + \alpha_4)^q | - \rangle \langle - | \}}{Z_q^q}\end{aligned}\tag{26}$$

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

$$\hat{s}_A^z = \frac{\{|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\}}{2} \quad y$$

$$\hat{s}_B^z = \frac{\{|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|\}}{2} \quad (27)$$

así, reemplazando las Eqs. (26) y (27) en la Eq. (24), obtenemos el siguiente resultado en los respectivos espacios de Hilbert 2×2 :

$$U_{A+B} = Ng\mu_h \frac{B_A \{(\alpha_1 + \alpha_2)^q - (\alpha_3 + \alpha_4)^q\} + B_B \{(\alpha_1 + \alpha_3)^q - (\alpha_2 + \alpha_4)^q\}}{(\alpha_1 + \alpha_2)^q + (\alpha_3 + \alpha_4)^q} \quad (29)$$

notamos que estos resultados son diferentes al resultado conseguido en el espacio de Hilbert completo 4×4 , Eqs. (22) y (23). Esto puede interpretarse como un resultado anómalo en el contexto de la mecánica estadística no-extensiva.

3.3 Las Matrices E_A y E_B y el Cálculo Adecuado para las Energías Internas, en el Subespacio de Hilbert 2×2

Para el sistema magnético representado por la Eq. (9), en esta subsección introducimos un procedimiento que fue dado a conocer en [6, 7]. 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 [6]. Así, en este contexto, definimos las energías internas como,

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

$$\hat{E}_B = \frac{\{(\alpha_1^q + \alpha_3^q)|+\rangle\langle+| + (\alpha_2^q + \alpha_4^q)|-\rangle\langle-|\}}{Z_q^q} \quad (32)$$

debemos resaltar que estas matrices ya no necesitan ser elevadas a la potencia q . Por lo tanto, reemplazando las Eqs. (27) y (32) en la Eq. (30), encontramos que el uso de las matrices E_A y E_B produce las siguientes energías, en los subespacios de Hilbert 2×2 :

$$U_{A+B} = Ng\mu_h \frac{B_A \{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q\} + B_B \{\alpha_1^q + \alpha_3^q - \alpha_2^q - \alpha_4^q\}}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q} \quad (34)$$

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

$$U_B = N\mu_h B_B \frac{(\alpha_1 + \alpha_3)^q - (\alpha_2 + \alpha_4)^q}{(\alpha_1 + \alpha_2)^q + (\alpha_3 + \alpha_4)^q}, \quad (28)$$

de manera que la energía interna total es:

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{\text{Tr}_A(\hat{E}_A \hat{s}_A^z)}{\text{Tr}_A(\hat{E}_A)} \quad y$$

$$U_B = Ng\mu_h B_B \frac{\text{Tr}_B(\hat{E}_B \hat{s}_B^z)}{\text{Tr}_B(\hat{E}_B)}, \quad (30)$$

donde las matrices parciales E_A y E_B son definidas como:

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

$$E_B = \text{Tr}_A(\rho^q) \quad (31)$$

entonces, realizamos la traza parcial de la matriz ρ^q en la Eq. (21):

$$U_A = Ng\mu_h B_A \frac{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q} \quad y$$

$$U_B = Ng\mu_h B_B \frac{\alpha_1^q + \alpha_2^q - \alpha_3^q - \alpha_4^q}{\alpha_1^q + \alpha_2^q + \alpha_3^q + \alpha_4^q}, \quad (33)$$

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

estos resultados concuerdan exactamente con las Eqs. (22) y (23), calculadas en el espacio de Hilbert completo 4×4 . Este hecho muestra de manera clara que las matrices parciales E_A y E_B son las adecuadas para el cálculo de la energía interna, en el contexto de la 3ª versión de la mecánica estadística no-extensiva

4. Simulaciones Computacionales

Los resultados analíticos anteriores pueden ser extendidos para otros valores de spin, p. e., $S_A=2$ y $S_B=3/2$, sin embargo, la dimensión del espacio de Hilbert completo es $20 \times 20 = 400$, pues $[2(3/2)+1][2(2)+1]=20$, por consiguiente para este caso es más práctico mostrar simulaciones computacionales que cálculos analíticos, estas simulaciones fueron realizadas con el lenguaje de programación Matlab. Los resultados confirman, una vez más, que las matrices parciales E_A y E_B son las idóneas. En la Fig. 1, para un sistema con spines $S_A=2$ y $S_B=3/2$, mostramos las gráficas de la Energía interna total vs. Temperatura, $U_{tot.}$ vs. T , (a) usando la 3ª versión de la mecánica estadística no-extensiva, en el espacio completo de Hilbert, así como en los respectivos subespacios y (b) usando las fórmulas de 3ª versión (sólo en el espacio de Hilbert completo), así como el método de 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 $1/2$. Adicionalmente, para el sistema de 2 spines $1/2$, para el caso antiferromagnético mostramos que para el cálculo de la magnetización, el método de las matrices E_A y E_B , también se confirma.

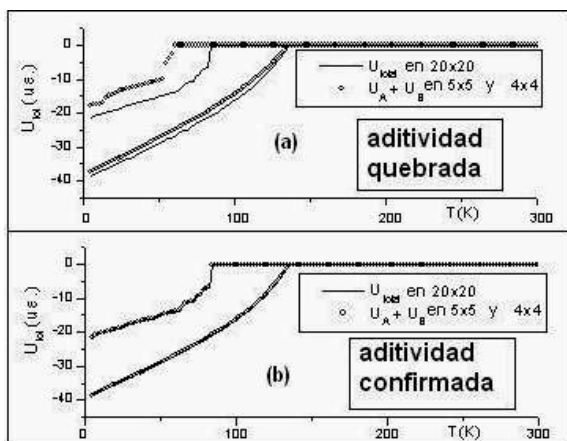


Fig. 1. Energía interna total vs. Temperatura, $U_{tot.}$ vs. T , para un sistema de spines $S_A = 2$ y $S_B = 3/2$. (a) usando la 3ª versión de la mecánica estadística no-extensiva, en el espacio de Hilbert 20×20 y en los respectivos subespacios de Hilbert 5×5 y 4×4 , (b) usando las fórmulas de la 3ª versión únicamente en el espacio de Hilbert 20×20 , así

como las fórmulas de las matrices E_A y E_B en los respectivos subespacios de Hilbert 5×5 y 4×4 . Los valores de q son, de la energía nula para abajo, 0.3 y 0.7.

5. Conclusiones

En este trabajo 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 3ª 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. Por lo tanto la operación de traza parcial se debe realizar sobre la matriz ρ^q y no sobre la matriz ρ . Finalmente, la propuesta del método de las matrices E_A y E_B es confirmada tanto de manera analítica, de forma exacta, así como con simulaciones computacionales.

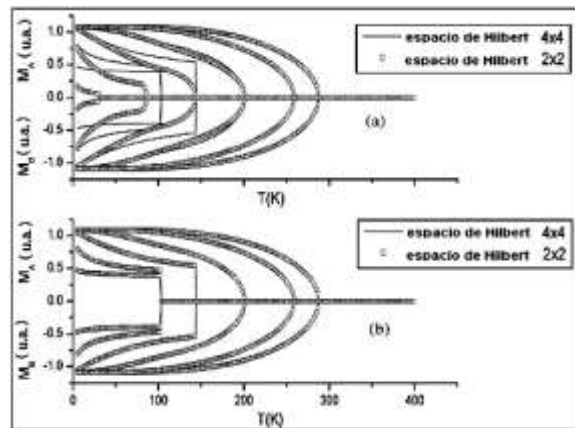


Fig. 2. Magnetización vs. Temperatura, $U_{tot.}$ vs. T , para un sistema antiferromagnético de 2 spines $S_A = 1/2$ y $S_B = 1/2$. (a) usando la 3ª versión de la mecánica estadística no-extensiva, en el espacio de Hilbert 4×4 y en los respectivos subespacios de Hilbert 2×2 y 2×2 , (b) usando las fórmulas de la 3ª versión únicamente en el espacio de Hilbert 4×4 , así como las fórmulas de las matrices E_A y E_B en los respectivos subespacios de Hilbert 2×2 y 2×2 . Los valores de q son, del origen para afuera, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 y 1.

References

- [1]. <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>
- [2]. C. Tsallis, Phys. D 193, 3 (2004), cond-mat/0403012.
- [3]. Tsallis, R.S. Mendes y R. Plastino, *Physica A* 261, 534 (1998).

- [4]. 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.
- [5]. 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.
- [6]. F. A. R. Navarro, M. S. Reis, E. K. Lenzi e I. S. Oliveira, *Phys. A* 343, 499 (2004).
- [7]. F. A. R. Navarro, M. S. Reis, E. K. Lenzi e I. S. Oliveira; cond-mat/0701495 (2007).
- [8]. Robert K. Niven, ArXiv:0908.0990 (2009).
- [9]. E.T. Jaynes, *Phys. Rev.*, 106, 620 (1957).
- [10]. E.T. Jaynes, *Lectures in Theoretical Physics 3: Statistical Physics*, 181. Ed. K.W. Ford, Brandeis University (1963).
- [11]. E.T. Jaynes, *Probability Theory: The Logic of Science*, Cambridge. Ed. G.L. Bretthorst (2003).