

PROBABILIDADES DE CONFIGURACIONES EN ALEACIONES
BINARIAS EN LA RED CÚBICA SIMPLE

María E. Montero
José Raig

Dpto. de Física Nuclear
Facultad Física-Matemática
Universidad de La Habana

ABSTRACT

The application of the Ising Model to the short range order in binary alloys is developed, and the second order correlations, using diagrams and Kubo's cumulants for the average of the occupation operators in the perturbed and unperturbed ensembles, are calculated. An operator for generating higher order averages of the lattice point occupations is obtained. The second order correlations for the

distances of the first and the second nearest neighbours of the simple cubic configuration are evaluated, and the obtained results show the trends of complete order or segregation.

RESUMEN

Se presenta la aplicación del Modelo de Ising para el orden cercano en las aleaciones binarias, y se calculan las correlaciones de segundo orden, a través de la utilización de cumulantes de Kubo y grafos para calcular los promedios de los operadores en los ensembles perturbado y no perturbado.

Se obtiene un operador para generar promedios de orden superior en los nodos de la red. Se evalúan las correlaciones de segundo orden para las distancias interatómicas de la primera y segunda esfera de coordinación de una red cúbica simple, respondiendo los resultados a las tendencias de orden o segregación.

INTRODUCCIÓN

El problema de la aplicación de un hamiltoniano apropiado para la descripción del orden cercano en el ferromagnetismo o en aleaciones binarias, puede plantearse a través del modelo de Ising,⁽¹⁾⁽⁴⁾ se utilizan los métodos de la Física Estadística para resolver las probabilidades de configuración, o como es más extendido, las correlaciones de diferentes órdenes entre las posiciones en las diferentes esferas de coordinación en

la red escogida. (5) (6) (7)

Hemos seguido las ideas de Horwitz y Callen⁽²⁾ para la resolución del problema, con la utilización de grafos, cumulantes de Kubo⁽³⁾ y suma de las interacciones correspondientes, obteniéndose funciones autoconsistentes. Además, se obtuvo un operador para generar los promedios de ocupación de orden superior en los nodos de la red, y se aplicó el mismo para calcular los valores de las correlaciones de segundo orden de átomos a la distancia de la primera y segunda esfera de coordinación. Se evaluaron las correlaciones para energías de interacción positivas, respondiendo el modelo adecuadamente a las tendencias de orden o segregación.

Modelo de Ising para la aleación binaria

Los promedios de ocupación en los nodos de la red de un tipo de átomo en una solución sólida binaria A-B se pueden suponer, en caso de desorden, iguales a la concentración del elemento. Nuestro trabajo calcula las diferencias que sufren estas probabilidades de ocupación cuando las energías de interacción a la distancia de diferentes esferas de coordinación se alejan de las del desorden en los pares A-A, A-B y B-B.

Si designamos por $\chi_i = 1$ la ocupación del nodo i ésimo por un átomo A y $\chi_i^* = 1$ para cuando está ocupado por B, y cero en los casos contrarios, la probabilidad de ocupación simultáneamente por átomos del mismo tipo de dos o más nodos de la

red, depende de la energía de interacción entre los átomos a la distancia que se hallen y se relacionan con los promedios de productos de χ_i : $\overline{\delta_\mu \delta_\nu}$, $\overline{\delta_\mu \delta_\nu \delta_\tau}$, etc.

que se pueden calcular por métodos de la Física Estadística, como sigue:

El hamiltoniano de interacción en la forma de Ising será:

$$\mathcal{H}_N = E_0 - \lambda \sum_{i=1}^N \chi_i + \frac{1}{2} \sum_{ij=1}^N V_{ij} \chi_i \chi_j \quad (1)$$

donde E_0 es la energía de interacción de todos los nodos ocupados por átomos B, λ es el potencial químico y V_{ij} es la diferencia de energía de interacción entre los pares idénticos A-A, B-B y los A-B, que se puede expresar como:

$$V_{ij} = \sum_{K=1}^{\infty} a_{ij}^{(K)} w^{(K)} \quad (2)$$

$$w^{(K)} = \epsilon_{AA}^{(K)} + \epsilon_{BB}^{(K)} - 2\epsilon_{AB}^{(K)}$$

$$a_{ij}^{(K)} = \begin{cases} 1 & \text{Si } i \text{ es vecino de } j \text{ en la esfera } K\text{-ésima} \\ 0 & \text{Si no lo es.} \end{cases}$$

La suma de gran canónica no perturbada es:

$$\boxed{H}_0(\beta, N) = \sum_{\{\chi_i\} \in \sqrt{N}} e^{-\beta E_0} e^{\beta \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i} \quad (3)$$

donde $\beta = (KT)^{-1}$, con la interpretación acostumbrada, y \sqrt{N} es el ensemble de todas las posibles configuraciones del cristal. En el hamiltoniano hemos introducido λ_i como potencial químico propio de cada nodo, alteración que

no tiene consecuencias termodinámicas. La suma perturbada es:

$$\boxed{H}(\beta, N) = \sum_{\{\chi_i\} \in \sqrt{N}} e^{-\beta E_0} e^{\beta \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i} e^{-\beta V_N} \quad (4)$$

donde $V_N = \frac{1}{2} \sum_{ij=1}^N V_{ij} \chi_i \chi_j$ es la perturbación

El valor medio de un operador \hat{O} en el ensemble no perturbado es:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_{\{\chi_i\} \in \sqrt{N}} e^{-\beta E_0} e^{\beta \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i} \hat{O}}{\boxed{H}_0(\beta, N)} \quad (5)$$

y el promedio perturbado es:

$$\overline{\hat{O}} = \frac{\sum_{\{\chi_i\} \in \sqrt{N}} e^{-\beta E_0} e^{\beta \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i} \hat{O} e^{-\beta V_N}}{\boxed{H}(\beta, N)} \quad (6)$$

de modo que resulta:

$$\boxed{H}(\beta, N) = \boxed{H}_0(\beta, N) \langle e^{-\beta V_N} \rangle \quad (7)$$

$$y \quad \overline{\hat{O}} = \frac{\langle \hat{O} e^{-\beta V_N} \rangle}{\langle e^{-\beta V_N} \rangle} \quad (8)$$

Con estas formulaciones, una de las magnitudes que nos interesa,

$$\bar{\gamma}_\mu = \frac{\sum_{\{\gamma_i\} \in \mathcal{V}^N} \gamma_\mu e^{-\beta E_0} e^{\beta \sum \lambda_i \gamma_i} e^{-\beta V_N}}{[H](\beta, N)} \quad (9)$$

es el promedio perturbado de ocupación del nodo μ por un átomo A, y se puede expresar a través del ensemble no perturbado por:

$$\bar{\gamma}_\mu = \frac{\langle \gamma_\mu e^{-\beta V_N} \rangle}{\langle e^{-\beta V_N} \rangle} \quad (10)$$

Desarrollo perturbacional de $\langle e^{-\beta V_N} \rangle$

Aparece como una expresión importante para nuestros desarrollos el promedio no perturbado de la exponencial de la perturbación, que se puede expresar por:

$$\langle e^{-\beta V_N} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle V_N^n \rangle \quad (11)$$

Horwitz y Callen⁽²⁾ señalan que se puede desarrollar

$$\langle V_N \rangle = \sum_G B(G) \quad \text{donde } G \text{ es un grafo de } n \text{ ramas}$$

$$B(G) = \frac{1}{n(G)} \sum(G) \prod_{i=1}^{r(G)} M_i [r_i(G)] \quad (12)$$

para lo cual:

$n(G)$ = nro. de operaciones de simetría de G

$M_i [r_i(G)]$ = cumulante de orden $r_i(G)$ asociado al vértice i ésimo del grafo, con γ_i como variable aleatoria

$r(G)$ = nro. de ramas incidentes en el nodo i ésimo

$\mathcal{V}(G)$ = nro. de vértices del grafo

$\sum(G)$ = sumatoria no restringida sobre el producto contraído de los n factores V_{ij} asociados a las ramas del grafo.

Se pueden comprobar propiedades de las $B(G)$ respecto de si el grafo es conexo o no conexo, y aplicándolas se puede designar:

$$U(G) = (-\beta)^n B(G)$$

$$\langle e^{-\beta V_N} \rangle = \exp \left[\sum_G U(G) \right] \quad (13)$$

y la suma se hace sobre los grafos conexos solamente.

En nuestros cálculos, se halló una aproximación de la suma $\sum_G U(G)$ consistente en la suma parcial de los árboles, y se obtuvo la función $A(\alpha)$ con la utilización de la función autoconsistente,

$$\Lambda_i(1) = \frac{\langle \gamma_i \exp \alpha \sum_j \gamma_j \rangle}{\langle \exp \alpha \sum_j \gamma_j \rangle} \quad (14)$$

$$\gamma_i = \sum_{j=1}^N V_{ij} \Lambda_j(1), \quad \alpha = -\beta$$

obteniéndose:

$$\sum_G U(G) \cong A(\alpha) = \sum_{i=1}^N \ln \langle \exp \alpha \sum_j \gamma_j \rangle - \frac{\alpha}{2} \sum_{i,j=1}^N V_{ij} \Lambda_i(1) \Lambda_j(1) \quad (15)$$

Recordando la forma de generar cumulantes:

$$\ln \langle e^{x_i \delta_i} \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x_i^n}{n!} M_i(n) \quad (16)$$

$$M_i(n) = \frac{\partial^n}{\partial x_i^n} \ln \langle e^{x_i \delta_i} \rangle \Big|_{x_i=0}$$

$$M_i(1) = \frac{\langle \delta_i e^{x_i \delta_i} \rangle}{\langle e^{x_i \delta_i} \rangle} \Big|_{x_i=0} = \langle \delta_i \rangle$$

$$M_i(2) = \langle \delta_i^2 \rangle - \langle \delta_i \rangle^2, \text{ etc.}$$

se puede probar que $A(\alpha)$ cumple la aproximación descrita, de modo que:

$$\langle e^{-\beta V_N} \rangle \cong \exp A(\alpha) \quad (17)$$

Promedios de los productos de δ con la exponencial de la perturbación.

Investigando la forma de obtener los promedios

δ_μ y $\delta_\mu \delta_\nu$ se llega a expresar una forma general de $B(G)$ que incluye la posibilidad de asignar una "marca" cuando en el vértice del grafo se promedia el operador

δ_μ, δ_ν , etc, de modo que sobre el vértice marcado no se suma, pero si se cuenta la incidencia. Así

$$\langle \delta_\mu e^{-\beta V_N} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \langle \delta_\mu V_N^n \rangle$$

$$\langle \delta_\mu \rangle = M_\mu(1) = B(\overset{\mu}{\leftarrow}) \quad (18)$$

$$\langle \delta_\mu V_N \rangle = \sum_{j=1}^N V_{\mu j} M_j(1) M_\mu(2) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V_{ij} M_i(1) M_j(1) M_\mu(1)$$

$$\text{etc.} = B(\overset{\mu}{\leftarrow}) + B(\overset{\mu}{\leftarrow})$$

Cuando se suma y se factoriza según (18) se prueba que

$$\langle \delta_\mu e^{-\beta V_N} \rangle = \left[B(\overset{\mu}{\leftarrow}) + \alpha B(\overset{\mu}{\leftarrow}) + \alpha^2 B(\overset{\mu}{\leftarrow}) + \dots \right] \exp \sum_G U(G) \quad (19)$$

y por lo tanto de (10) que $\bar{\gamma}_\mu = B(\overset{\mu}{\leftarrow}) + \alpha B(\overset{\mu}{\leftarrow}) + \alpha^2 B(\overset{\mu}{\leftarrow}) + \dots$

Además se puede probar por desarrollos en serie de potencias de α que esta serie es igual a $\bar{\gamma}_\mu = \Lambda_\mu(1)$ (20)

en la aproximación de los árboles.

Por otra parte,

$$\langle \delta_\mu \delta_\nu e^{-\beta V_N} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} \langle \delta_\mu \delta_\nu V_N^n \rangle$$

$$\langle \delta_\mu \delta_\nu \rangle = M_\mu(1) M_\nu(1) = B(\overset{\mu}{\leftarrow}) \overset{\nu}{\leftarrow}$$

$$\langle \delta_\mu \delta_\nu V_N \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V_{ij} M_i(1) M_j(1) M_\mu(1) M_\nu(1) +$$

$$+ \sum_{j=1}^N V_{\mu j} M_j(1) M_\mu(2) M_\nu(1) + \quad (21)$$

$$+ \sum_{j=1}^N V_{\nu j} M_j(1) M_\nu(2) M_\mu(1) + V_{\mu\nu} M_\mu(2) M_\nu(2)$$

$$= B(\overset{\mu}{\leftarrow}) \overset{\nu}{\leftarrow} + B(\overset{\nu}{\leftarrow}) \overset{\mu}{\leftarrow} + B(\overset{\mu\nu}{\leftarrow}) + B(\overset{\mu\nu}{\leftarrow})$$

y si se suma se obtiene un resultado igual a (19), llegán-

dose a la conclusión final de que

$$\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} = \overline{\gamma_\nu \gamma_\mu} + \alpha B(\overline{\gamma_\nu \gamma_\mu}) + \alpha^2 B(\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu}) + \dots \quad (22)$$

$$+ \alpha^2 B(\overline{\gamma_\nu \gamma_\mu}) + \alpha^2 B(\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu}) + \dots$$

y para $\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\zeta} = \overline{\gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\zeta} + (\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} - \overline{\gamma_\nu \gamma_\mu}) \overline{\gamma_\zeta} +$

$$+ (\overline{\gamma_\mu \gamma_\zeta} - \overline{\gamma_\zeta \gamma_\mu}) \overline{\gamma_\nu} + (\overline{\gamma_\nu \gamma_\zeta} - \overline{\gamma_\zeta \gamma_\nu}) \overline{\gamma_\mu} + \dots \quad (23)$$

$$+ \alpha^2 B(\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\zeta}) + \alpha^2 B(\overline{\gamma_\nu \gamma_\zeta \gamma_\mu}) + \alpha^2 B(\overline{\gamma_\zeta \gamma_\mu \gamma_\nu}) + \dots$$

la serie en α no factorizable en (22) y (23) se obtiene derivando parcialmente respecto de $\lambda_\mu, \lambda_\nu, \dots$ la suma gran conónica perturbada. Se obtienen las expresiones

$$\frac{\partial \ln \overline{H}(\beta, N)}{\partial \lambda_\mu} = \beta \overline{\gamma_\mu} = \beta \langle \gamma_\mu \rangle + \frac{\partial}{\partial \lambda_\mu} \sum_G U(G) \quad (24)$$

y por carácter transitivo, si $\theta_i = \beta \lambda_i$ se convierte en

$$\overline{\gamma_\mu} = \langle \gamma_\mu \rangle + \frac{\partial}{\partial \theta_\mu} \sum_G U(G) \quad (25)$$

así como

$$\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} = \overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} + \frac{\partial^2}{\partial \theta_\nu \partial \theta_\mu} \sum_G U(G)$$

$$\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\zeta} = \overline{\gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\zeta} + (\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} - \overline{\gamma_\nu \gamma_\mu}) \overline{\gamma_\zeta} + (\overline{\gamma_\mu \gamma_\zeta} - \overline{\gamma_\zeta \gamma_\mu}) \overline{\gamma_\nu} + (\overline{\gamma_\nu \gamma_\zeta} - \overline{\gamma_\zeta \gamma_\nu}) \overline{\gamma_\mu} + \frac{\partial^3}{\partial \theta_\zeta \partial \theta_\nu \partial \theta_\mu} \sum_G U(G) \quad (26)$$

identificándose la serie en α de (22) y (23) con las derivadas de $\sum_G U(G)$.

Como $\langle \gamma_\mu \rangle$ depende exclusivamente de θ_μ , puede obtenerse de los desarrollos que

$$\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} = (\overline{\gamma_\nu} + \frac{\partial}{\partial \theta_\nu}) \overline{\gamma_\mu} \quad (27)$$

y el operador entre paréntesis tiene la propiedad de generar promedios perturbados de los operadores de ocupación γ_i del orden superior al promedio sobre el que se aplica, resultando por lo tanto que en general,

$$\overline{\prod_{i=1}^n \gamma_i} = \prod_{i=1}^{n-1} (\overline{\gamma_i} + \frac{\partial}{\partial \theta_i}) \overline{\gamma_n} \quad (28)$$

los desarrollos anteriores permiten introducir los conocidos coeficientes de correlación mediante las siguientes relaciones

$$\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} = \overline{\gamma_\mu} \overline{\gamma_\nu} + C_2(\mu, \nu)$$

$$\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu \gamma_\xi} = \overline{\gamma_\mu} \overline{\gamma_\nu} \overline{\gamma_\xi} + \overline{\gamma_\mu} C_2(\nu, \xi) + \overline{\gamma_\nu} C_2(\mu, \xi) + \overline{\gamma_\xi} C_2(\mu, \nu) + C_3(\mu, \nu, \xi) \quad (29)$$

de modo que

$$C_n(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = \frac{\partial^n}{\partial \theta_1 \dots \partial \theta_n} \sum_{\mathcal{G}} U(\mathcal{G}) \quad (30)$$

Aplicación del cálculo de las derivadas de $\langle e^{-\beta V_N} \rangle$ con la aproximación de los árboles de Cayley.

Para calcular los coeficientes de correlación de segundo orden, utilizamos la aproximación de los árboles de Cayley para el cálculo del promedio de la exponencial de la perturbación, y utilizando las propiedades de Λ respecto de la derivación con Θ_i se obtiene

$$\overline{\gamma_\mu \gamma_\nu} = (\Lambda_\nu(1) + \frac{\partial}{\partial \theta_\nu}) \Lambda_\mu(1)$$

$$= \Lambda_\mu(1) \Lambda_\nu(1) + \Lambda_\mu(2) U_{\mu\nu} \Lambda_\nu(2) \quad (31)$$

$$U_{\mu\nu} = \langle V_{\mu\nu} + \alpha^2 \sum_i^N V_{\mu i} \Lambda_i(2) V_{i\nu} + \alpha^3 \sum_{ij}^N V_{\mu i} \Lambda_i(2) \Lambda_j(2) V_{ij} V_{j\nu} + \dots \rangle \quad (32)$$

y entonces la segunda derivada de $\sum_{\mathcal{G}} U(\mathcal{G})$ de (26) se corres

ponde con el segundo término de (32).

En este momento se suprime la diferenciación establecida para las λ_i , es decir, se hace $\lambda_i = \lambda_j \forall i$ y entonces

$$C_2(\nu, \mu) = U_{\mu\nu} \Lambda^2(2) \quad (33)$$

En el cálculo de $U_{\mu\nu}$ se utiliza la transformada de Fourier del potencial V_{ij} , obteniéndose finalmente

$$C_2(\nu, \mu) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_\mu - \vec{r}_\nu)} \frac{\Lambda^2(2) V(\vec{q})}{1 - \alpha \Lambda(2) V(\vec{q})} \quad (34)$$

donde $V(\vec{q})$ es la transformada y \vec{q} son los vectores de la red recíproca del cristal en cuestión.

Resultados para las correlaciones $C_2(\mu, \nu)$

Con estos elementos se evaluaron las correlaciones para átomos A (soluto) a la distancia de la primera o segunda esfera de coordinación. La comprobación se hizo con una calculadora digital programable Texas Instrument SR-56. Se evaluó en una red cúbica simple de 10.10.10 átomos. El método de cálculo se facilita para obtener los valores de

$$b_i = \frac{C_2^{(i)}(\mu, \nu)}{\Lambda(2)} \quad (35)$$

$$f_i = \alpha \Lambda(2) w^{(i)} = \frac{\Lambda(2) w^{(i)}}{kT}$$

donde el índice i en ambos indica a que distancia de coordinación están los átomos μ y ν , y kT es el conocido expo-

nente de Boltzman.

La interpretación de las correlaciones $C_2(\mu, \nu)$ conduce a que sus valores negativos indiquen la tendencia a ordenarse de A y B (es decir, B se rodea preferiblemente de A a la distancia de esa esfera) y los positivos la tendencia a la segregación de A con A y B con B.

La variable f_i indica la fortaleza de la energía de interacción $w(i)$ conjuntamente con la concentración derivada del valor $\Lambda(2)$, pues se considera en nuestra aproximación $\bar{y}_\mu = \Lambda(1) = C_A$. Fue necesario establecer que $|6f_1 + 12f_2| \leq 1$ para obtener correlaciones menores que 1. De ese modo la evaluación, que se refleja en los gráficos, implica las variaciones posibles de $\Lambda(2)$ de 0,16 ($\Rightarrow \Lambda(1) = 0,20$) a $\Lambda(2) = 0,04$ para $\langle W^{(L)} \rangle = -1$, o disminución de la energía de interacción, desde ser equivalente a la agitación térmica hasta cero, (indiferencia entre la colocación de un átomo A o B a esa distancia, respecto a la energía de interacción) para concentración constante.

Los gráficos 1 y 2 son equivalentes para b_1 , reflejando f_1 ó f_2 como parámetros, e indican que la tendencia al orden aumenta sensiblemente a la distancia de la primera esfera para el aumento de f_1 y disminuye ligeramente para el crecimiento de f_2 .

Los gráficos 3 y 4 lo son para b_2 , e indican que el ordenamiento a la distancia de la segunda esfera es más sensi-

ble a f_2 que a f_1 , pero de modo menos drástico que la primera esfera; es señalable que si la interacción f_2 es muy pequeña, llega a invertirse el efecto, es decir, del ordenamiento se pasa a la segregación, a medida que es más intensa la interacción en la primera esfera. Esto indica mayor ordenamiento general, pues así cuando A se rodea de B a la primera esfera, tiende a rodearse de A en la segunda, secuencia que de continuarse implicaría orden lejano.

CONCLUSIONES

- Mediante los desarrollos de los promedios $\langle e^{-\beta V_N} \rangle$, $\langle y_\mu e^{-\beta V_N} \rangle$, $\langle y_\mu y_\nu e^{-\beta V_N} \rangle$, etc, a través de productos de cumulantes y V_{ij} apropiados, se obtiene la función autoconsistente $\Lambda(n)$, y $A(\infty)$ para la aproximación en que se suman los árboles de Cayley conexos.
- Paralelamente se obtiene un operador diferencial que al actuar sobre el promedio perturbado \bar{y}_μ genera promedios de orden superior en los operadores de ocupación.
- Aplicando el operador sobre los resultados de la aproximación de los árboles, se obtiene un método de cálculo que necesita de la transformada de Fourier de la interacción, en el espacio recíproco de la red que nos interesa.
- Se calculan las correlaciones de segundo orden y se evalúan para determinadas zonas de concentración e intensidad de interacción, obteniéndose resultados satisfactorios

para la descripción del orden cercano en la aleación binaria.

BIBLIOGRAFÍA

1. E. Ising, Z. Physik 31, 253 (1925)
2. G. Horwitz and H. B. Callen, Phys. Rev. 124, 1757 (1961)
3. R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 17, 1100, (1962)
4. J. J. Roig, Tesis de Candidato en Ciencias Físico-Matemáticas, Moscú, (1974)
5. Referencias generales: L. D. Landau y E. M. Lifschitz, Statistical Physics, Vol. 5 Course of Theoretical Physics, Pergamon Press, Oxford, 1969, pp. 424-454. T. L. Hill, Statistical Mechanics, Mc Graw Hill Book Company, New York, 1956, pp. 286-353.
6. L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944) B. Kaufman, Phys. Rev. 76, 1236 (1949) M. Kac, J. C. Ward, Phys. Rev. 88, 1332 (1952). N. V. Vdovichenko, Soviet Physics JETP 21, 350 (1965).
7. W. L. Bragg, E. J. Williams, Proc. Roy. Soc. (London) A145, 699 (1934); A151, 540 (1935)

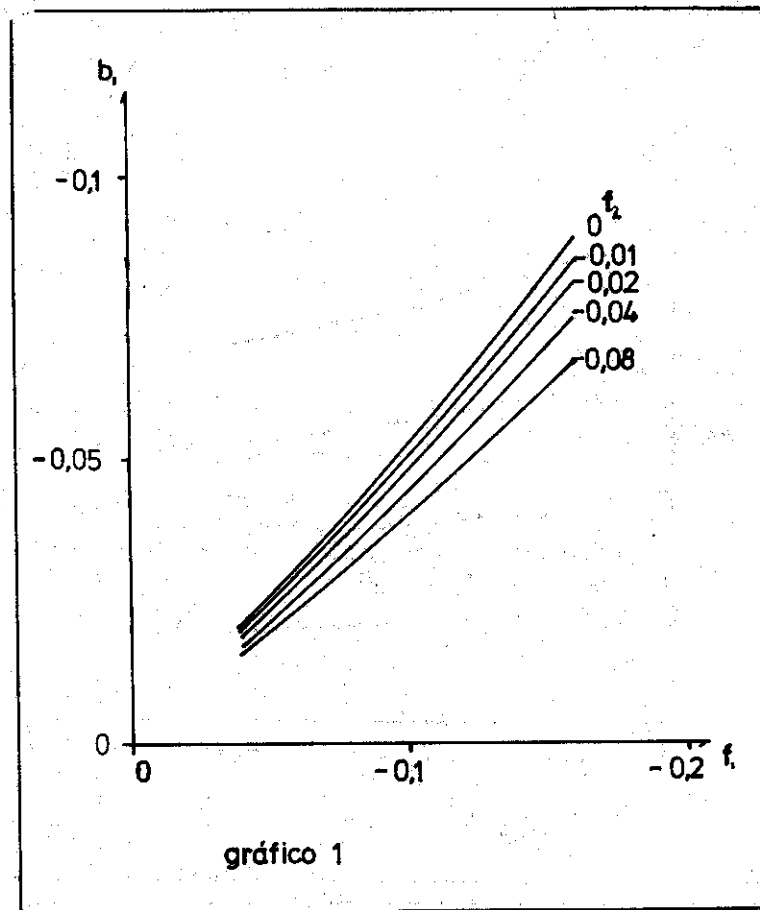


gráfico 1

