

AGLAË CRISTINA NAVARRO DE MAGALHÃES

FRONTEIRAS E EXPOENTES CRÍTICOS EM PERCOLAÇÃO
E FERROMAGNETOS DE ISING E POTTS: GRUPO DE
RENORMALIZAÇÃO E OUTRAS TÉCNICAS

Tese de

DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro

- 1982 -

À minha mãe

*com quem sempre pude contar nas
horas difíceis*

minha gratidão

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. e amigo Constantino Tsallis com quem muito aprendi, meu comovido agradecimento pelo apoio de todas as horas.

Ao Prof. e amigo Georges Schwachheim, pela valiosa colaboração oferecida nos programas de computação.

Aos amigos Evaldo M.F. Curado, Raimundo Alexandre T. de Lima, Ivan F.L. Dias, Luciano R. da Silva, Sidney F. Machado, Darly Machado H. da Silva, Paulo Hauser, Ananias M. Mariz, Uriel M. de Souza Costa, pelas proveitosas discussões.

À Helena de Souza Ferreira e Suzana Ruzzante, pela dedicação e eficiência na execução do trabalho de datilografia.

À minha mãe pelo enorme apoio, carinho e dedicação de todas as horas.

A todos que direta ou indiretamente colaboraram na feitura desta tese.

Ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, pelas oportunidades oferecidas para a realização deste trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo auxílio financeiro.

RESUMO

Neste trabalho estudamos, através de métodos de grupo de renormalização no espaço real, percolação de ligações em redes hipercúbicas com 2, 3 e 4 dimensões, quadrada isotrópica com primeiros e segundos vizinhos, quadrada anisotrópica e 4-8 'inomogênea'. Obtivemos, através de alguns métodos de extrapolação, pontos e/ou fronteiras críticas (bem como o expoente crítico ν_p nos casos isotrópicos) para estas redes que, ou concordam bem com outros resultados disponíveis, ou são, em nosso conhecimento, inéditos (redes quadrada isotrópica com primeiros e segundos vizinhos e 4-8 'inomogênea').

Formulamos uma conjectura para pontos e, em certas situações, fronteiras críticas aproximadas (eventualmente exatas) de ferromagnetos de Potts com q -estados para redes d -dimensionais ($d > 1$). Esta conjectura é verificada com uma boa precisão para todas as redes cujos pontos e/ou fronteiras críticas são conhecidos, e permite prever um grande número de resultados novos, alguns deles pretendemos que sejam *exatos* (o comportamento assintótico para $d \rightarrow \infty$ do ponto crítico de redes regulares; Potts puro em redes de Bethe anisotrópicas; Potts com ligações randômicas genéricas "quenched" em redes de Bethe isotrópicas).

Calculamos, num contexto de grupo de renormalização no espaço real (doze procedimentos diferentes que envolvem transformações do tipo triângulo-estrela e dualidade), aproximações acuradas para as fronteiras críticas de ferromagnetos de Ising de spins $1/2$ com ligações entre primeiros vizinhos diluídas "quenched" nas redes triangular e "honeycomb". Nossas melhores

propostas numéricas fornecem, em ambos limites de percolação de ligações pura ($p=p_c$) e Ising puro ($p=1$), os pontos críticos e $(dt_0/dp)_{p=p_c}$ *exatos* (onde $t_0 \equiv \tanh J/k_B T$), e 0.15% (0.96%) de erro em $(dt_0/dp)_{p=1}$ para a rede triangular ("honeycomb"); para $p_c < p < 1$, onde as fronteiras críticas são ainda desconhecidas, estimamos uma incerteza máxima em t_0 (para p fixo) de 0.27%(0.14%) para a rede triangular ("honeycomb"). Exibimos, para vários pares de grafos triângulo-estrela com um número de terminais quaisquer e tamanhos distintos, que os pontos críticos *exatos* para $q=1,2,3,4$ dos ferromagnetos de Potts podem *todos* ser obtidos a partir de *um* par *qualquer* de tais grafos.

ABSTRACT

In this work we study, by using real space renormalization group methods, bond percolation on d -dimensional hypercubic ($d = 2, 3, 4$), first- and second - neighbour isotropic square, anisotropic square and 'inhomogeneous' 4-8 lattices. We obtain, through some extrapolation methods, critical points and/or frontiers (as well as the critical exponent ν_p in the isotropic cases) for these lattices that, or agree well with other available results, or are new as far as we know (first- and second -neighbour isotropic square and 'inhomogeneous' 4-8 lattices).

We formulate a conjecture concerning approximate (eventually exact) critical points and, in certain situations, critical frontiers of q -state Potts ferromagnets on d -dimensional lattices ($d > 1$). This conjecture is verified within good accuracy for all the lattices whose critical points are known, and it allows the prediction of a great number of new results, some of them we believe to be *exact* (the asymptotic behaviour for $d \rightarrow \infty$ of the critical point on regular lattices; pure Potts model on anisotropic Bethe lattices; the general quenched random-bond Potts ferromagnet on isotropic Bethe lattices).

We calculate, within a real space renormalization group framework (twelve different procedures, all of them using star-triangle and duality-type transformations), accurate approximations for the critical frontiers associated with the quenched bond-diluted first-neighbour spin-1/2 Ising ferromagnet on triangular and honeycomb lattices. Our best numerical proposals lead, in both pure bond percolation ($p = p_c$) and pure Ising ($p=1$)

limits, to the *exact* critical points and $(dt_0/dp)_{p=p_c}$ (where $t_0 \equiv \tanh J/k_B T$), and to a 0.15% (0.96%) error in $(dt_0/dp)_{p=1}$ for the triangular (honeycomb) lattice; for $p_c < p < 1$, where the exact critical frontiers are still unknown, we estimate a maximum uncertainty in t_0 (for fixed p) of 0.27% (0.14%) for the triangular (honeycomb) lattice. We exhibit, for many star-triangle graph pairs with any number of terminals and different sizes, that the *exact* $q = 1, 2, 3, 4$ critical points of Potts ferromagnets can, *all* of them, be obtained from *any one* of such graph pairs.

SUMÁRIO

	<u>Pág.</u>
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Abstract.....	vi
Lista de Figuras	xii
Lista de Tabelas	xiii
<u>CAPÍTULO 1</u> - INTRODUÇÃO	1
<u>CAPÍTULO 2</u> - FENÔMENOS CRÍTICOS EM PERCOLAÇÃO E EM FERROMAGNETOS DE ISING E POTTS	13
2.1 - Percolação	14
2.1.1 - Definição e Exemplos	14
2.1.2 - Tipos de Percolação	16
2.1.3 - Algumas Grandezas Estudadas em Percolação	19
2.1.4 - Percolação: Limite $q \rightarrow 1$ do Modelo de Potts com q Estados	26
2.1.5 - Teoria de Escala e Universalidade	31
2.1.6 - Principais Métodos Utilizados em Percolação	38
2.1.6.1 - Expansões em Séries	38
2.1.6.2 - Simulação Monte Carlo	40
2.1.6.3 - Grupo de Renormalização	41
2.2 - Ferromagnetos de Ising Puros	43
2.2.1 - Introdução	43
2.2.2 - Natureza da Transição, Fronteiras e Expoentes Críticos	45
2.3 - Ferromagnetos de Potts Puros	47
2.3.1 - Introdução: Definição e Importância do Modelo	47
2.3.2 - Natureza da Transição	49
2.3.3 - Fronteiras e Expoentes Críticos	51
2.4 - Sistemas Magnéticos Randômicos	53
2.4.1 - Introdução	53

2.4.2 - Diagrama de Fase de Ferromagnetos de Ising com Ligações Diluídas "Quenched"	54
2.4.3 - Diagrama de Fase de Ferromagnetos de Potts com Ligações Randômicas "Quenched"	59
2.5 - Conclusões	61
<u>CAPÍTULO 3</u> - PERCOLAÇÃO ISOTRÓPICA EM REDES HIPERCÚBICAS (d=2,3,4) ...	63
3.1 - Introdução	63
3.2 - Método de GR Utilizado	64
3.2.1 - Descrição do Método	64
3.2.2 - Cálculo de p_c e y_p	66
3.2.3 - Cálculo de y_h	68
3.3 - Aplicações do Método	70
3.3.1 - Rede Quadrada com Ligações Entre Primeiros Vizinhos.....	70
3.3.1.1 - Cálculo de y_p	70
3.3.1.2 - Cálculo de y_h	74
3.3.2 - Rede Quadrada com Ligações Entre Primeiros e Segundos Vizinhos	76
3.3.3 - Rede Cúbica Simples	78
3.3.4 - Rede Hipercúbica Quadri-Dimensional	79
3.3.5 - Simetria da Célula e Direção de Percolação.....	80
3.4 - Conclusões	82
<u>CAPÍTULO 4</u> - PERCOLAÇÃO EM REDES PLANAS ANISOTRÓPICAS E "INOMOGÊNEAS"	84
4.1 - Introdução	84
4.2 - Rede Quadrada Anisotrópica	85
4.2.1 - GR Canônico (GRC)	87
4.2.2 - GR Paramétrico (GRP)	92
4.3 - Rede 4-8 Inomogênea	95
4.4 - Conclusões	99
<u>CAPÍTULO 5</u> - FRONTEIRAS CRÍTICAS DE FERROMAGNETOS DE POTTS: CONJECTURAS	102
5.1 - Introdução	102
5.2 - Definição e Propriedades da Variável $t_i^{(q)}$	103
5.3 - Redes Planas	104
5.3.1 - Definição e Propriedades da Variável $s_i^{(q)}$	104

5.3.2 - Formulação da Conjectura	105
5.3.3 - Verificações da Conjectura	106
5.3.3.1 - Rede Quadrada Anisotrópica	106
5.3.3.2 - Redes Triangular e "Honeycomb" Anisotrópicas	106
5.3.3.3 - Rede 4-8 Inomogênea e Sua Dual ($q=1,2$)	108
5.3.3.4 - Algumas Outras Redes	110
5.3.4 - Predições da Conjectura	111
5.3.4.1 - Rede 4-8 Inomogênea e Sua Dual	111
5.3.4.2 - Algumas Outras Redes	112
5.4 - Generalização Para Redes d -Dimensionais ($d > 1$)	113
5.4.1 - Definição e Propriedades da Variável $s(q,h(d);t^{(q)})$	113
5.4.2 - Formulação da Conjectura	115
5.4.3 - Verificações da Conjectura	116
5.4.3.1 - Redes Planas	116
5.4.3.2 - Redes Tridimensionais	117
5.4.3.3 - Redes Regulares ($q=1,2; d \rightarrow \infty$)	117
5.4.3.4 - Rede de Bethe Isotrópica com Ligações Diluídas "Quenched"	118
5.4.4 - Predições da Conjectura Para Pontos Críticos de Ferromagnetos Puros	119
5.4.4.1 - Redes Regulares d -Dimensionais ($d \geq 3$)	119
5.4.4.2 - Redes Regulares no Limite $d \rightarrow \infty$	121
5.4.4.3 - Cactos e Árvores de Husimi	122
5.4.5 - Predições da Conjectura Para Fronteiras Críticas de Ferromagnetos Puros	124
5.4.5.1 - Rede Cúbica Com Ligações Entre Primeiros e Segundos Vizinhos	124
5.4.5.2 - Rede BCC Com Ligações Entre Primeiros e Segundos Vizinhos	125
5.4.5.3 - Rede FCC Com Ligações Entre Primeiros, Segundos e Terceiros Vizinhos	126
5.4.5.4 - Rede de Bethe Anisotrópica	128
5.4.6 - Predições da Conjectura Para Fronteiras Críticas de Ferromagnetos de Potts com Ligações Randômicas Genéricas "Quenched" em Redes de Bethe Isotrópicas	129
5.5 - Conclusões	130

<u>CAPÍTULO 6</u> - FRONTEIRAS CRÍTICAS DE FERROMAGNETOS DE ISING COM LIGAÇÕES DILUÍDAS "QUENCHED" NAS REDES TRIANGULAR E "HONEY-COMB"	132
6.1 - Introdução	132
6.2 - Resultados Exatos dos Modelos Puros Obtidos Por um Procedimento Unificado de Grafos	133
6.2.1 - Revisão do Procedimento Original	133
6.2.2 - Procedimento Unificado de Grafos	135
6.3 - Modelo de Ising Com Ligações Diluídas "Quenched" Na Rede Triangular	137
6.3.1 - Método de Grafos	137
6.3.2 - Grupos de Renormalização Canônicos do Tipo-Dual (GRCD)	139
6.3.3 - Grupos de Renormalização Paramétricos do Tipo-Dual (GRPD)	149
6.3.4 - Comparações	150
6.4 - Modelo de Ising com Ligações Diluídas "Quenched" na Rede "Honeycomb"	151
6.4.1 - Método de Grafos	151
6.4.2 - Grupos de Renormalização Canônicos do Tipo-Dual (GRCD)	152
6.4.3 - Grupos de Renormalização Paramétricos do Tipo-Dual (GRPD)	153
6.4.4 - Comparações	154
6.5 - Conclusões	155
 <u>CAPÍTULO 7</u> - CONCLUSÕES	 158
 <u>APÊNDICE A</u> -	 164
<u>APÊNDICE B</u> -	174
<u>APÊNDICE C</u> -	190
<u>APÊNDICE D</u> -	195
<u>APÊNDICE E</u> -	204
<u>APÊNDICE F</u> -	243
 <u>BIBLIOGRAFIA</u>	 250

LISTA DE FIGURAS

<u>Fig.</u>	<u>Pág.</u>
2.1.1.1 - Simulação Monte Carlo de percolação numa rede quadrada....	14
2.1.3.1 - Número médio de "clusters" finitos por sítio numa rede quadrada	21
2.1.3.2 - Probabilidade de percolação para problema de sítios na rede FCC	22
2.1.3.3 - Tamanho médio de "clusters" finitos na rede FCC	23
2.1.3.4 - Comprimento de correlação na rede FCC	25
2.3.2.1 - Gráfico qualitativo de $q_c(d)$	51
2.4.2.1 - Fronteira crítica (qualitativa) de ferromagnetos de Ising com ligações diluídas "quenched"	56
2.4.3.1 - Fronteira crítica (qualitativa) de ferromagnetos de Potts com ligações diluídas "quenched"	60
2.3.1.1.1 - Células quadradas auto-duais e seus respectivos grafos....	71
3.3.1.1.2 - Gráfico de $\log \lambda_p(b,1)$ versus $\log b$ para a rede quadrada.	73
3.3.1.2.1 - Células quadradas com sítio "fantasma" e seus respectivos grafos	74
3.3.2.1 - Gráficos de $p^*(b,b')$ em função de $(b/b')^{-1/\nu_p}$ para a rede quadrada com primeiros e segundos vizinhos	77
3.3.3.1 - Gráfico de $\log \lambda_p(b,1)$ versus $\log b$ para a rede SC	79
5.3.3.4.1 - Gráficos $s(q)$ para várias redes (conjectura de Tsallis)...	111
5.4.4.3.1 - Algumas pseudo-redes	123
6.3.2.1 - Representação, em escala, de $ \lambda_p^{(i)}(b) $ e $ \lambda_t^{(i)}(b) $ para vários "clusters"	148

LISTA DE TABELAS

<u>Tab.</u>	<u>Pág.</u>
3.3.1.2.1 - Valores de $y_h(b, b')$ para $1 \leq b' < b \leq 4$	75
5.4.3.1 - Erro percentual máximo da variável $s(q, h)$ em relação a $s^{(1)}$	116
F.1 - Valores de $\lambda^{(i)}(q)$ e $G^{(i)}(t_c^{\Delta(q)})$ para vários pares de grafos $\Delta^{(i)} - Y^{(i)}$ (ferromagneto de Potts)	245

*"L'homme n'est qu'un roseau, le plus faible de la nature,
mais c'est un roseau pensant".*

Pascal

*"Vivendo se aprende, mas o que se aprende mais, é sô a fa
zer outras maiores perguntas".*

Guimarães Rosa

"De um que apanhe esse grito que ele o lance a outro".

João Cabral de Melo Neto

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Desde o século passado a área de transições de fase tem sido foco de grande interesse experimental e teórico (vide, por exemplo, o livro de Stanley⁽¹⁾ e a coleção de seis volumes editada por Domb e Green⁽²⁾). Em particular, desde a experiência de Faraday (que foi o primeiro a usar o termo *campo* em magnetismo) ao observar que a substância ferro, quando aquecida a uma temperatura T muito alta, perdia suas propriedades magnéticas tornando-se "fracamente magnética", muito progresso teórico foi realizado no entendimento de transições de fase magnéticas *contínuas*.

Em 1895 Curie⁽³⁾ estudou as propriedades magnéticas de várias substâncias em função da temperatura T com o intuito de verificar se o diamagnetismo, paramagnetismo (chamado, na época, de magnetismo fraco) e ferromagnetismo são fenômenos inteiramente distintos ou se constituíam um único fenômeno mais ou menos deformado. Através de suas medidas de susceptibilidade (independente de T no caso de substâncias diamagnéticas e proporcional a T^{-1} e $(T - T_c)^{-1}$ em substâncias respectivamente paramagnéticas e ferromagnéticas; T_c ficou conhecida como temperatura de Curie) concluiu que as causas do diamagnetismo são de naturezas diferentes das do magnetismo, contrariamente ao que ocorre entre o paramagnetismo e o ferromagnetismo. Observou ele: "um corpo ferromagnético se transforma pro-

gressivamente quando o aquecemos em um corpo fracamente magnético". Mas Curie não se deu conta de que esta transformação era um novo tipo de mudança de fase (chamada posteriormente de *transição de fase de 2ª ordem*) pois as transições estudadas anteriormente eram todas de 1ª ordem (onde havia ao longo de uma linha de transição coexistência de fases, calor latente, descontinuidade, por exemplo, de densidades de fluidos, etc).

Em 1905 Langevin⁽⁴⁾ propôs uma teoria para o diamagnetismo e paramagnetismo que explicava os resultados experimentais de Curie. Esta teoria foi a primeira teoria *microscópica* do magnetismo relacionando uma grandeza macroscópica, determinada pela experiência, com uma grandeza microscópica (o momento magnético do átomo). Quanto ao ferromagnetismo, Langevin conjecturou que somente uma teoria de fenômeno *cooperativo* entre os momentos magnéticos das moléculas seria capaz de explicar, por exemplo, a existência de uma magnetização espontânea M abaixo da temperatura T_c de Curie.

Um ano depois, Weiss⁽⁵⁾ propôs uma teoria (cooperativa) *fenomenológica* do ferromagnetismo (conhecida como teoria de "campo molecular" ou de "campo médio") onde assumia que as interações de momentos magnéticos μ 's com um dado momento magnético podiam ser simuladas por um "campo molecular" H_m atuando sobre este momento particular, campo este suposto ser proporcional à magnetização média M da substância (ou seja, $H_m = \lambda M$ onde λ é um parâmetro fenomenológico conhecido como parâmetro de campo molecular). Weiss obteve então que $T_c = C\lambda$ (onde $C = N\mu^2/3k_B$ é a constante de Curie; N é o número de momentos magnéticos e k_B é a constante de Boltzmann) e que a suscepti-

bilidade isotérmica χ_t , perto de $T = T_c$ e $H = 0$ (H é o campo magnético externo), era da forma $\chi_t = C/(T-T_c)$. Esta é a famosa *lei de Curie-Weiss* que é praticamente obedecida por todos ferromagnetos. Esta concordância com a experiência^(*) fazia pensar que as características globais do magnetismo podiam ser explicadas sem usar nenhum mecanismo particular para as interações microscópicas do sistema. Porém o grande valor medido para λ ($\lambda \approx 10^4$ para Fe, Co e Ni) era suficientemente intrigante naquela época e sugeria a existência de novos fenômenos em escala molecular.

Em 1920^(**), Lenz⁽⁶⁾ sugeriu que os momentos magnéticos μ dos átomos de um cristal paramagnético eram livres para terem movimentos de rotação em torno de uma posição fixa de repouso numa rede. Lenz concluiu, usando a antiga teoria quântica, que na realidade estes momentos apontavam quase exclusivamente para *duas* direções opostas com ângulos $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi$, e que em média apontavam durante o mesmo tempo tanto para $\alpha = 0$ quanto para $\alpha = \pi$. Em presença de um campo magnético externo H aplicado paralelamente a uma destas direções, digamos $\alpha = 0$, desapareceria a equivalência destas direções. Usando então a estatística de Boltzmann e assumindo que os momentos magnéticos são independentes, Lenz reobteve para H pequeno ($\mu H \ll k_B T$) a chamada lei de Curie $\chi_t \sim T^{-1}$. Para corpos ferromagnéticos, Lenz conjecturou que se a energia potencial de um átomo (magne

(*) λ era considerado como uma constante característica de cada substância ferromagnética; seu valor era obtido através de um ajuste numérico entre as curvas teórica e experimental de $M(T)$.

(**) Nesta época, não tinha sido realizada ainda a experiência de Stern-Gerlach (1922) mostrando que átomos de certas substâncias paramagnéticas quando submetidos a um campo magnético externo se orientam em apenas *duas* direções.

to elementar) em relação a seus vizinhos fosse diferente para as direções $\alpha = 0$ e $\alpha = \pi$, então apareceria uma direção preferencial $\alpha = 0$ que poderia originar uma magnetização espontânea. Em 1925^(*), seu orientando de doutorado Ising⁽⁷⁾ calculou *exatamente* a função de partição deste modelo (conhecido como *modelo de Ising*) para uma cadeia linear ($d=1$) com interações entre primeiros vizinhos. Ficou desapontado ao constatar que, para qualquer temperatura não-nula, não havia transição de fase para o estado ferromagnético. Somente onze anos mais tarde, mostrou-se⁽⁸⁾ que sistemas ferromagnéticos com dimensões espaciais $d=2$ ou 3 possuíam magnetizações espontâneas para temperaturas suficientemente baixas.

Finalmente em 1944 Onsager⁽⁹⁾ resolveu *exatamente* o modelo de Ising para a rede quadrada, obtendo em particular uma divergência logarítmica para o calor específico no ponto de transição. Com isto Onsager mostrou claramente que as previsões das teorias "clássicas" (tais como a teoria de Bethe, teoria de Landau) eram desacreditáveis^(**). A solução de Onsager proporcionou um grande estímulo para a exploração do verdadeiro comportamento perto dos pontos críticos, marcando, por assim dizer, o início da teoria moderna de fenômenos críticos^(***). Em 1952, Yang⁽¹⁰⁾ demonstrou que a magnetização se

(*) Neste mesmo ano Uhlenbeck e Goudsmit emitiram a hipótese de que o elétron possui um spin $S=1/2$, e que num campo magnético sua direção é quantizada de tal forma que se orienta ou paralela ou antiparalela ao campo magnético.

(**) De acordo com as teorias "clássicas", o calor específico deveria apresentar uma descontinuidade para $T = T_c$.

(***) Chamamos de fenômenos críticos aqueles que se manifestam na vizinhança imediata de um ponto de transição contínua.

anulava como $M \sim (T_c^{(ex)} - T)^{1/8}$, e em 1959 Fisher⁽¹¹⁾ achou que a susceptibilidade divergia como $\chi_t \sim (T - T_c^{(ex)})^{-7/4}$; $T_c^{(ex)}$ é a temperatura crítica *exata* a qual é 43,3% inferior à temperatura $T_c^{(CM)}$ calculada pela teoria de campo médio. Estes resultados estavam novamente em desacordo com as teorias "clássicas" as quais previam $M \sim (T_c^{(CM)} - T)^{1/2}$ e $\chi_t \sim (T - T_c^{(CM)})^{-1}$.

Desde então, provavelmente motivados por estes resultados, vários pesquisadores dedicaram-se ao estudo de fenômenos críticos. Diversos trabalhos foram feitos generalizando a solução de Onsager para outras redes. Soluções exatas foram encontradas para outras redes com $d=2$, mostrando todas o mesmo comportamento crítico (vale dizer, os mesmos expoentes críticos) perto de seus respectivos pontos de transição. Várias tentativas foram feitas visando às soluções exatas do modelo de Ising bidimensional submetido a um campo magnético externo H qualquer e do modelo de Ising para $d=3$. Mas estes problemas continuam em aberto desafiando aos cientistas até hoje. No entanto, várias soluções aproximadas foram obtidas para estes modelos. Em particular, em 1963 Essam e Fisher⁽¹²⁾ estimaram, no caso $d=3$, os valores dos expoentes críticos associados ao calor específico ($\alpha'_t \approx 1/8$), à magnetização ($\beta_t \approx 5/16$) e à susceptibilidade ($\gamma'_t \approx 5/4$). A partir destes valores conjecturaram então que a relação $\alpha'_t + 2\beta_t + \gamma'_t = 2$ fosse exata, igualdade esta que era válida rigorosamente para o modelo de Ising bidimensional. Esta e outras relações entre expoentes críticos são conhecidas como *leis de escala* e têm sido confirmadas tanto teórica quanto experimentalmente para diferentes modelos e situações físicas. Algumas destas leis (aquelas que envolvem

somente expoentes críticos associados a funções termodinâmicas) foram obtidas em 1965 por Widom⁽¹³⁾ partindo de uma hipótese (conhecida como hipótese de escala estática) equivalente à homogeneidade da parte singular da energia livre perto do ponto de transição.

Com o intuito de justificar a hipótese de Widom, Kadanoff⁽¹⁴⁾ apresentou em 1966 um argumento também heurístico (método de blocos de Kadanoff) que deu um suporte intuitivo tanto a esta hipótese como também à homogeneidade da função de correlação. Com isto possibilitou derivar novas leis de escala contendo expoentes críticos associados à função de correlação entre pares. O método de Kadanoff consistia em: (i) dividir a rede em blocos de spin com dimensões lineares muito maiores que o parâmetro de rede a , porém muito menores que o comprimento de correlação ξ (isto é possível para temperaturas próximas à temperatura crítica T_c onde $\xi \gg a$); (ii) admitir que cada bloco se comportava com um *único* spin. Aí estava lançada a idéia fundamental subjacente a um fenômeno crítico: para $T \sim T_c$ um elemento qualquer do sistema "sente" a presença de elementos também muito distantes deste, mesmo sem haver interação *direta* com estes (assim uma ordem de longo alcance pode emergir de interações de curto alcance). Esta idéia de que ξ é muito grande para temperaturas próximas a T_c chegando a divergir em T_c constitui a base sobre a qual está assentada a teoria de *Grupo de Renormalização* (GR). Foi somente com esta teoria que Wilson⁽¹⁵⁾ em 1972, aproveitando as idéias de redução de graus de liberdade lançada por Kadanoff, mostrou porque sistemas pertencentes à mesma classe de universalidade (vale dizer, com a mesma di-

mensão espacial d e a mesma dimensão n do parâmetro de ordem) possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos. Estabeleceu também um método para o cálculo destes expoentes (expansões em séries de potências em $\epsilon = 4-d$). A teoria de GR^(16,17,18,19) deu um embasamento matemático para as teorias de escala heurísticas anteriores, permitiu uma compreensão profunda dos fenômenos críticos, bem como forneceu um novo método eficaz para o cálculo de grandezas críticas importantes tais como: fronteiras críticas, expoentes críticos, expoentes de mudança de regime ("crossover"), etc.

Retornando ao modelo de Ising, vimos como este modelo simples teve uma importância fundamental^(20,21) na construção da teoria de transições de fase contínuas. Um outro aspecto importante é que este modelo, introduzido inicialmente para magnetos, pode ser aplicado a outros sistemas físicos. Para isto devemos considerar o modelo de Ising como sendo um sistema de rede no qual um estado é especificado associando-se, a cada sítio i da rede, uma variável escalar randômica σ_i que pode assumir *dois* valores possíveis ($\sigma_i = \pm 1$). Conforme a natureza física de σ_i , o modelo de Ising submetido a um campo magnético externo pode representar um magneto (σ_i é a componente z do spin localizado no sítio i), uma *solução regular*⁽²⁰⁾ (isto é, uma mistura de duas substâncias constituídas respectivamente de moléculas do tipo A e do tipo B; σ_i indica a presença de A ou de B), uma *rede de gás*⁽²²⁾ (isto é, uma mistura de moléculas e "buracos"; σ_i indica a presença ou ausência de molécula). Além disso Kasteleyn⁽²³⁾, buscando um método mais simples para calcular a função de partição obtida por Onsager, mostrou que exis

te uma conexão entre o problema de *dímeros* e o modelo de Ising.

Queremos ressaltar que a importância do modelo de Ising não se limita apenas à *teoria*; sob o ponto de vista *experimental* descreve com uma boa aproximação vários magnetos uniaxiais⁽²⁴⁾ tais como Rb_2CoF_4 ($d=2$), K_2CoF_4 ($d=2$), DyAlO_3 ($d=3$), $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ($d=3$), bem como sistemas adsorvidos em substratos⁽²⁵⁾ como, por exemplo, átomos de ^4He adsorvidos em Kriptônio "pre-plated" grafite⁽²⁶⁾.

Um outro modelo que tem despertado um enorme interesse teórico e experimental é o modelo de *Potts*⁽²⁷⁾ com q estados cujo comportamento crítico é mais rico e geral do que o do Ising (veja Wu⁽²⁸⁾ para uma revisão extensa recente). Este modelo é uma generalização do modelo de Ising para o caso em que a variável randômica σ_i pode assumir q valores distintos ($\sigma_i = 1, 2, \dots, q$); no caso de ferromagnetos a energia de interação entre elementos vizinhos é mínima quando $\sigma_i = \sigma_j$ e assume um (e apenas um) outro valor para $\sigma_i \neq \sigma_j$.

O modelo de Potts está relacionado com vários problemas da mecânica estatística em redes tais como o modelo $2(N)$ ^(29,30), percolação^(31,32,33), vidros de spin diluídos^(34,35), etc (mais exemplos são citados na Seção 2.3.1). Estas conexões, bem como relações de simetria e dualidade, permitiram a obtenção de alguns resultados *exatos* (até o presente momento não existe, para $q \neq 2$, nenhum cálculo exato da função de partição do modelo de Potts em redes regulares) que têm sido utilizados como importantes testes para diversos métodos e enfoques empregados na teoria de transições de fase.

Do ponto de vista experimental, o modelo de Potts des

creve bem vários sistemas físicos (que pertencem necessariamente à mesma classe de universalidade). Vários autores^(36,37,25) mostraram que as transições ordem-desordem de átomos ou moléculas adsorvidas em substratos pertencem à mesma classe de universalidade que modelos n-vetoriais de spins (Ising: $n = 1$; X-Y: $n=2$; Heisenberg: $n = 3$) e de Potts ($q = 2,3,4$) ambos bidimensionais. Escolhendo-se apropriadamente a rede do substrato e o arranjo dos átomos adsorvidos com uma certa cobertura, podemos obter realizações experimentais para cada um destes modelos correspondentes a um certo valor de n ou de q . Exemplos de experiências deste tipo são: átomos de ^4He adsorvidos em kriptônio "preplated" grafite com cobertura $1/3$ ($q=3$)⁽³⁸⁾, átomos de O_2 adsorvidos em Ni⁽³⁹⁾ ($q=4$). Além da adsorção em substratos, existem várias outras realizações experimentais do modelo de Potts tais como a transição do ferromagneto cúbico DyAl_2 ⁽⁴⁰⁾ submetido a um campo magnético diagonal em relação a seus eixos fáceis ($q=3, d=3$), a transição estrutural em SrTiO_3 submetido à pressão externa⁽⁴¹⁾ ($q=3, d=3$) e diversas outras (vide Subseção 2.3.1).

Podemos dizer que o estudo de fenômenos críticos em sistemas puros (isto é, sem desordem) em equilíbrio estatístico atingiu num certo sentido uma maturidade. Por um lado, nossa compreensão destes fenômenos cresceu bastante nos últimos anos, e por outro lado existe uma concordância satisfatória, em quase todos os casos, entre a teoria e a experiência. O mesmo não acontece para sistemas *randômicos* onde existem ainda muitas controvérsias e pontos a serem esclarecidos. Nos últimos anos tem havido um crescente interesse em sistemas desordena -

dos e muitos esforços têm sido envidados no estudo de fenômenos críticos nestes sistemas. Em particular, há vários aspectos envolvidos na problemática de magnetos randômicos tais como o tipo de desordem (substitucional ou estrutural), o método de preparação do sistema (recozido ("annealed") ou temperado ("quenched")), o tipo de conexões aleatórias (sítios e/ou ligações), a lei de probabilidade das conexões (diluídas, mistas, genéricas, etc), etc. Várias questões têm sido investigadas como, por exemplo, se a desordem provoca um arredondamento das grandezas perto de um ponto crítico, se os expoentes críticos dos magnetos randômicos são diferentes dos expoentes que caracterizam o comportamento dos sistemas puros, como varia a temperatura crítica T_c com a(s) concentração(ões) do sistema considerado, etc. Diversas técnicas têm sido aplicadas na investigação destas e outras questões; dentre estas verifica-se que a técnica de GR fornece uma linguagem muito apropriada para a discussão de propriedades de sistemas randômicos. Em particular, métodos de GR no espaço real têm contribuído com um sucesso considerável para o entendimento de propriedades críticas de magnetos aleatórios (42, 43, 44, 45) (na ref. (45) é feita uma revisão detalhada).

No estudo de fenômenos críticos em sistemas magnéticos diluídos "quenched" (obtidos esquentando-se o sistema considerado a uma temperatura muito alta e depois resfriando-o subitamente) surge naturalmente (para $T = 0$) o estudo de um problema de *geometria* aleatória, vale dizer, para que valor da concentração p de íons magnéticos aparece um aglomerado ("cluster") infinito - condição esta necessária e eventualmente não

suficiente para que haja magnetização espontânea. No caso de ferromagnetos de Potts diluídos "quenched" esta condição é necessária e *suficiente* e, portanto, a temperatura crítica se anula exatamente para $p = p_c$ (p_c é a probabilidade crítica de percolação). O problema de *percolação*, formulado matematicamente em 1957 por Broadbent e Hammersley⁽⁴⁶⁾, ocorre não só nesta situação como também em muitas outras^(46,47,48) tais como : na coagulação do sangue, num incêndio numa floresta, na transmissão de informação numa rede telefônica, em materiais compostos supercondutor-metal, etc (outros exemplos são citados na subseção 2.1.1). Além da sua conexão com o magnetismo diluído, o problema de percolação (para revisões recentes do tema veja refs. (49,50,51)) está relacionado^(31,32,33) com ferromagnetos de Potts puros no limite de $q \rightarrow 1$. Esta relação possibilitou a aplicação de idéias de escala e universalidade ao fenômeno crítico da percolação, bem como permitiu que as técnicas comuns a transições de fase pudessem ser empregadas no problema de percolação. Em particular o método de GR, tanto no espaço recíproco quanto no espaço real, tem sido muito útil e bastante aplicado (vide, por exemplo, Essam⁽⁵¹⁾ e referências internas) no cálculo de várias grandezas importantes da percolação.

Em resumo, vimos a importância dos modelos de Ising, Potts (puros ou randômicos) e percolação, bem como do método de GR, dentro do contexto da teoria de transições de fase contínuas. Vimos também que estes modelos estão intimamente relacionados: i) o modelo de Ising é um caso particular ($q=2$) do modelo de Potts com q estados; ii) o modelo de percolação em

redes regulares é isomorfo ao modelo de Potts puro no limite $q \rightarrow 1$; iii) em magnetos de Potts diluídos "quenched" à temperatura nula temos um problema de percolação. Ao longo deste trabalho vamos calcular fronteiras críticas em diversas redes (e também certos expoentes críticos no caso de percolação isotrópica) para os modelos de percolação de ligações, Ising com ligações diluídas "quenched" ferromagnéticas, Potts ferromagnético puro e, no caso de rede de Bethe, Potts com ligações ferromagnéticas aleatórias genéricas "quenched". Além disso, exibimos que a transformação triângulo-estrela^(*) calculada nos pontos críticos de ferromagnetos de Ising e de percolação de ligações pode ser formulada dentro de um contexto *unificado* de grafos. Em outras palavras, verificamos que a temperatura crítica exata do ferromagneto de Ising puro e a probabilidade crítica exata do modelo de percolação de ligações podem ser ambas obtidas a partir de *um* (e não dois) par *qualquer* de grafos triângulo-estrela. Mais genericamente mostramos, para vários pares de grafos triângulo-estrela, que os pontos críticos *exatos* para *todos* valores de q podem ser obtidos a partir de *um* par *qualquer* de grafos. Utilizamos no decorrer desta tese o método de GR no espaço real e também uma formulação conjectural cuja validade foi testada em vários casos fornecendo resultados muito próximos dos valores conhecidos (exata ou aproximadamente) existentes na literatura.

(*) Esta transformação foi sugerida por Onsager⁽⁹⁾ para o cálculo das temperaturas críticas do modelo de Ising nas redes triangular e colméia ("honeycomb"). Posteriormente Sykes e Essam⁽⁵²⁾ adaptaram-na para o caso de percolação de ligações.

CAPÍTULO 2

FENÔMENOS CRÍTICOS EM PERCOLAÇÃO E EM FERROMAGNETOS DE ISING E POTTS

Neste capítulo apresentamos, na subseção 2.1, os conceitos básicos de percolação e, em particular, a analogia existente entre a transição de fase geométrica característica da percolação e a transição de fase térmica usual que ocorre, por exemplo, nos modelos de Ising e Potts. Nas subseções 2.2 e 2.3 damos uma visão geral e sucinta do que tem sido pesquisado, respectivamente, nos modelos de Ising e Potts ferromagnéticos puros, enfocando principalmente os comportamentos críticos destes modelos, tais como a natureza de suas transições, diagramas de fase e expoentes críticos. Na subseção 2.4, consideramos transições de fase magnéticas em sistemas com desordem substitucional; em particular, discutimos qualitativamente as fronteiras críticas de ferromagnetos de Ising e Potts com ligações diluídas "quenched". Finalmente, apresentamos as conclusões na subseção 2.5.

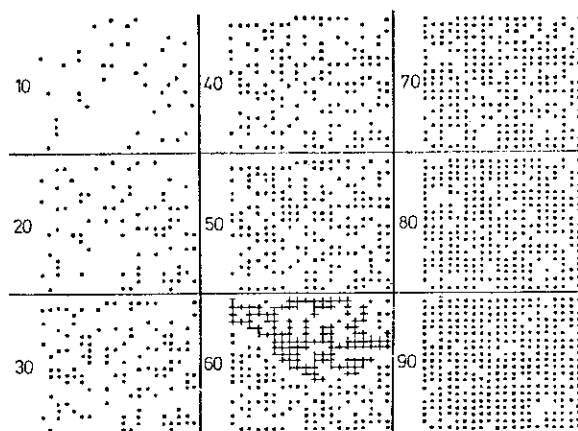
A parte referente à percolação é descrita mais detalhadamente, visto que a teoria de percolação é bem mais recente e menos conhecida do que a teoria de transições de fase térmicas usuais.

2.1 - PERCOLAÇÃO

2.1.1 - Definição e Exemplos

Considere uma rede cristalina onde cada sítio, independentemente dos outros, pode estar ocupado (ausente) aleatoriamente com uma probabilidade p ($1-p$). Quando esta probabilidade é pequena ($p \approx 0$) os sítios, em sua maioria, estão isolados com poucos pares ou trípletos presentes. Por outro lado, para p próximo a 1 ($p \approx 1$) quase todos os sítios ocupados estão conectados entre si formando um grande "cluster" (i.e., conjunto de pontos ocupados conectados por distâncias de primeiros vizinhos; vide Fig. 2.1.1.1 para $p=0.6$) que se estende de um lado a outro da

Fig.2.1.1.1 - Simulação Monte-Carlo (fig. 2 de Stauffer⁽⁵⁰⁾) de percolação numa rede quadrada com 20×20 sítios para $p = 0.1, 0.2, \dots, 0.9$. Somente os sítios ocupados estão marcados (por pontos). Em $p = 0.6$ está representado também o maior "cluster" "percolante" ($p_c \approx 0.59$).



rede. Para uma rede "infi-

nita"^(*) de dimensão espacial d existe 0, 1 ou um número infinito^(**) de "clusters" infinitos⁽⁵³⁾; para $d = 2$ Harris⁽⁵⁴⁾ e Fisher⁽⁵⁵⁾ provaram que existe no máximo 1 "cluster" infinito. Assim sendo existe, para uma rede infinita, uma *probabilidade crítica* p_c bem definida onde aparece pela primeira vez um "clus-

^(*) Estamos supondo que o número de pontos é tão grande que os efeitos de superfície podem ser desprezados e a rede pode ser substituída por um modelo com um número infinito de pontos ocupando um volume ilimitado.

^(**) Newman e Schulman⁽⁵³⁾ suspeitam que isto pode ocorrer talvez para redes com d suficientemente grande ($d > 6$), talvez com probabilidades de conexões anisotrópicas.

ter" infinito. Diz-se, então, que o sistema passou de um estado "não-percolante" ($p < p_c$) para um estado "percolante" ($p \geq p_c$). A Fig. 2.1.1.1 (extraída de (50) - fig. 2) ilustra bem a distribuição de sítios ocupados para diversos valores de p no caso de uma rede quadrada com 20×20 pontos.

O problema de percolação, do qual o exemplo acima é uma situação típica, foi formulado matematicamente pela primeira vez por Broadbent e Hammersley⁽⁴⁶⁾ em 1957 ao estudarem como as propriedades aleatórias de um "meio" influenciam a passagem de um "fluido" através deste. Daí a designação da palavra percolação (que deriva da palavra latina percolatione: per = através de, colo = coar, significando filtração no seu uso corriqueiro) por analogia com o problema de um filtro cujos poros, dependendo do tamanho, deixam ou não o fluido passar. "Meio" e "fluido" são usados aqui num sentido amplo, isto é, por "meio" entende-se um sistema constituído de um grande número de objetos (ou pontos) distribuídos no espaço que podem ou não estar conectados entre si de acordo com um mecanismo aleatório^(*), e por "fluido" entendemos a informação que é transmitida ou não de objeto a objeto. A comunicação a uma distância infinita (vide (*) da pág. anterior) ocorre, então, somente quando a probabilidade de conexão p é maior ou igual ao valor crítico p_c .

Situações como a descrita acima aparecem em numerosos contextos de diversos ramos da ciência (vide, por exemplo, Broadbent e Hammersley⁽⁴⁶⁾, Frisch e Hammersley⁽⁴⁷⁾, de Genes⁽⁴⁸⁾) tais como na propagação de epidemias, na transmissão

(*) aleatório é empregado aqui no sentido matemático do termo, isto é, cada configuração ocorre com uma dada probabilidade - os objetos não precisam ser necessariamente independentes.

de informações através de uma rede telefônica, na percolação de um fluido através de um sólido poroso, no modelo estocástico de formação de estrelas da evolução galáctica (Schulman e Seiden⁽⁵⁶⁾), na formação de um continente em função da altura do nível do mar, na condutância de uma rede de resistores distribuídos aleatoriamente, em transições sol-gel (que ocorrem na polimerização, na vulcanização da borracha, na formação de gelatinas, na formação de coalhadas, na imunização, etc), na transição isolante-semicondutor de, por exemplo, Si dopado com P, na transição para-ferromagnética à temperatura nula de ferromagnetos diluídos, etc.

2.1.2 - Tipos de Percolação

Há dois tipos básicos de percolação de acordo com o mecanismo aleatório do meio, a saber:

i) *percolação de sítios* - ocorre quando as posições ocupadas pelos objetos são aleatórias e as conexões entre eles são determinadas por uma regra que depende das posições. É o caso descrito no início deste capítulo que ocorre, por exemplo, em ferromagnetos diluídos de Potts do tipo $A_p B_{1-p}$ onde cada sítio da rede cristalina está ocupado aleatoriamente por A (magnético) com uma probabilidade p ou por B (não-magnético) com uma probabilidade $(1-p)$. A variação da temperatura crítica T_c em função da concentração p será discutida no final deste capítulo; em particular, ao longo do eixo $T = 0$ temos um problema de transição de fase puramente geométrico, i.e., de percolação, onde para $p < p_c$ não há formação de um "cluster" infinito de elemen-

tos magnéticos A (e portanto não há magnetização espontânea) e para $p \geq p_c$ aparece uma magnetização espontânea (vide Essam⁽⁵⁷⁾ e Klein e Coniglio⁽⁵⁸⁾).

ii) *percolação de ligações* - ocorre quando as posições dos pontos são fixas e as conexões entre eles são aleatórias. É análogo ao caso descrito no início deste capítulo onde, ao invés de sítios, temos ligações independentes distribuídas aleatoriamente sobre uma rede cristalina onde todos os sítios estão ocupados (p , nesta situação, representa a probabilidade de ocorrência de uma ligação). É o caso, por exemplo, de resistores distribuídos aleatoriamente (com probabilidade p) sobre uma rede cristalina. Se aplicarmos uma diferença de potencial entre pontos muito distantes e medirmos a condutância macroscópica do sistema verificaremos que para $p < p_c$ a condutância elétrica é nula, ao passo que para $p \geq p_c$ há passagem de corrente elétrica.

Estes 2 tipos de percolação correspondem às situações mais simples em percolação onde o problema considerado é descrito por uma *única* probabilidade (p) de conexão, a qual admitimos ser a *mesma* para qualquer conexão *independentemente* das conexões vizinhas (portanto não há correlações entre as conexões), e onde o "meio" é uma *rede regular*. Em situações mais complicadas é necessário introduzir modelos mais complexos tais como percolação de *sítios-ligações* (Nakanishi e Reynolds⁽⁵⁹⁾, Agrawal et al.⁽⁶⁰⁾, Shapiro⁽⁶¹⁾; onde ambas as conexões de sítios e de ligações são consideradas), percolação *anisotrópica* (Redner e Stanley⁽⁶²⁾, de Magalhães et al.⁽⁶³⁾, Nakanishi et al.⁽⁶⁴⁾, Oliveira⁽⁶⁵⁾; onde as conexões em direções diferen-

tes têm probabilidades distintas), percolação *correlacionada* (Turban⁽⁶⁶⁾, Chakrabarti et al.⁽⁶⁷⁾; onde as conexões não são independentes), percolação *direcionada* (Blease⁽⁶⁸⁾, Kinzel e Yeomans⁽⁶⁹⁾, Dhar et al.⁽⁷⁰⁾; onde as conexões dependem do sentido do fluxo de informação), percolação *polieromática* (Zallen⁽⁷¹⁾, Halley e Holcomb⁽⁷²⁾; onde as conexões podem estar em $n \geq 2$ estados diferentes), percolação "*bootstrap*" (Chalupa et al.⁽⁷³⁾, onde os sítios de uma rede vazia são primeiramente ocupados aleatoriamente, e depois todos os sítios ocupados que estão cercados por um número de sítios vizinhos ocupados menor que um dado número m são removidos: repete-se este processo várias vezes até que se atinja uma configuração estável), percolação com conexões entre *vizinhos distantes* (Domb e Dalton⁽⁷⁴⁾, Quinn et al.⁽⁷⁵⁾, Stephen e Aharony⁽⁷⁶⁾; onde se leva em conta conexões também entre pontos não primeiros vizinhos), percolação em *árvores* (Fisher e Essam⁽⁷⁷⁾, Stephen⁽⁷⁸⁾, Turban⁽⁷⁹⁾; onde os "clusters" são do tipo-árvore, isto é, sem curvas fechadas), percolação *contínua* (Webman et al.⁽⁸⁰⁾; onde o meio é contínuo), percolação *dependente do tempo* (Welsh⁽⁸¹⁾, Schulman e Seiden⁽⁵⁶⁾; é um problema de percolação direcionada onde a transmissão de informação é estudada em função do tempo transcorrido), percolação de *sítios-ligações correlacionada* (Coniglio et al.⁽⁸²⁾, Stauffer⁽⁸³⁾, Heermann e Stauffer⁽⁸⁴⁾), percolação *polieromática correlacionada* (Stanley⁽⁸⁵⁾).

As afirmações que faremos daqui em diante referem-se à percolação simples (ítems (i) e (ii)) salvo menção em contrário.

2.1.3 - Algumas Grandezas Estudadas em Percolação

A maior diferença entre a percolação e outros modelos de transição de fase é a *ausência de hamiltoniana*. A transição de percolação usual é um fenômeno puramente geométrico probabilístico onde os "clusters" são objetos estáticos bem definidos. Portanto a construção de uma teoria *microscópica* de percolação é um problema de geometria aleatória que se espera poder ser resolvido a partir do estudo da distribuição de tamanhos e formas dos "clusters". Tem-se feito algum progresso neste sentido, mas esse problema continua sendo amplamente discutido na literatura⁽⁵¹⁾. Muitas propriedades *macroscópicas* interessantes, no entanto, estão relacionadas apenas aos *tamanhos* dos "clusters" e não às formas particulares de cada "cluster". Uma grandeza que desempenha papel fundamental na estatística de "clusters" é o número médio $\langle n_s \rangle(p)$ de "clusters" (normalizado por sítio) de um dado tamanho s (o tamanho s é definido aqui pelo seu *conteúdo de sítios*, ou seja, pelo número de sítios em um "cluster", ainda que se trate de percolação de ligações). Conhecendo-se $\langle n_s \rangle(p)$ para todos valores de s podemos calcular todas as grandezas *macroscópicas* da percolação que são independentes das formas dos "clusters" (que são análogas às funções "termodinâmicas" extensivas e não às funções de correlação). Vejamos alguns exemplos:

i) *Número médio* $\langle n \rangle(p)$ *de "clusters" finitos por sítio* - é dado por

$$\langle n \rangle(p) = \sum_s \langle n_s \rangle(p) \quad (2.1.3.1)$$

onde a apóstrofe sobre o somatório indica a exclusão de um possível "cluster" infinito. $\langle A \rangle(p)$ refere-se a uma média configuracional no limite "termodinâmico", isto é

$$\langle A \rangle(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\text{config.}} p^i (1-p)^{N-i} A \quad (2.1.3.2)$$

onde cada configuração tem i sítios (ligações) presentes e $(N-i)$ sítios (ligações) ausentes no problema de percolação de sítios (ligações).

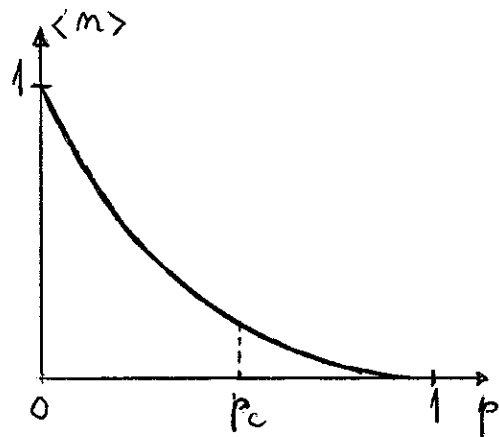
A grandeza $\langle n \rangle(p)$ apresenta singularidade para $p \rightarrow p_c$ e a forma assintótica de sua parte singular (que denotaremos pelo subscripto *sing*) é:

$$\langle n \rangle(p)_{\text{sing}} \sim (p_c - p)^{2-\alpha_p} \quad (p \rightarrow p_c^-) \quad (2.1.3.3a)$$

$$\langle n \rangle(p)_{\text{sing}} \sim (p - p_c)^{2-\alpha'_p} \quad (p \rightarrow p_c^+) \quad (2.1.3.3b)$$

onde os expoentes $\alpha_p = \alpha'_p$ são da ordem de: α_p ($d=2$) ≈ -0.7 , α_p ($d=3$) ≈ -0.4 , α_p ($d \geq 6$) = -1 (para estimativas mais precisas vide tabela do apêndice 1 da ref. (51)); denotaremos os expoentes da percolação por um subscripto p para diferenciarmos dos expoentes característicos de transições de fase térmicas (que subscriptaremos por t). Martin e Tsallis⁽⁸⁶⁾ calcularam a função $\langle n \rangle(p)$, para percolação de ligações em rede quadrada usando grupo de renormalização aplicado a ferromagnetos de Potts no limite $q \rightarrow 1$. A Fig. 2.1.3.1, semelhan

Fig. 2.1.3.1 - Número médio de "clusters" finitos por sítio em função da concentração de ligações p numa rede quadrada.



te a figura 5 da referência (86), ilustra a variação de $\langle n \rangle$ com p .

ii) *Probabilidade de Percolação* $P(p)$ - definida como a probabilidade de um sítio (ocupado ou não), escolhido ao acaso, pertencer a um "cluster" infinito. É dado por:

$$P(p) = 1 - \frac{p_F}{p_0} \quad (2.1.3.4a)$$

Nesta fórmula p_F é a probabilidade de um dado sítio, escolhido arbitrariamente como origem, estar ocupado e pertencer a um "cluster" finito (denotaremos este evento por F):

$$p_F = \sum_s p_S(p) \quad (2.1.3.4b)$$

com $p_S(p)$ sendo a probabilidade da origem pertencer a um "cluster" de tamanho s :

$$p_S(p) = \langle sn_S \rangle(p) \quad (2.1.3.4c)$$

O outro termo p_0 é o número total, normalizado por sítio, de sítios ocupados por todos os "clusters" da rede, ou seja, p_0 representa a probabilidade da origem pertencer a um "cluster", e se escreve como:

$$p_0 = \sum_s p_S(p) = \begin{cases} p & \text{(percolação de sítios)} \\ 1 & \text{(percolação de ligações)} \end{cases} \quad (2.1.3.4d)$$

Uma vez que não há "cluster" infinito para $p < p_c$, segue-se que $P(p < p_c) = 0$ e $P(p > p_c) > 0$. Para $p \rightarrow p_c^+$, $P(p)$ apresenta singularidade cujo comportamento assintótico é:

$$P_{\text{sing}}(p) \sim (p - p_c)^{\beta_p} \quad (p \rightarrow p_c^+) \quad (2.1.3.5)$$

onde o expoente β_p é da ordem de: $\beta_p(d=2) \approx 0.1$, $\beta_p(d=3) \approx 0.4$, $\beta_p(d \geq 6) = 1$ (para valores mais precisos veja Essam⁽⁵¹⁾). A figura 2.1.3.2 (extraída de Essam⁽⁵¹⁾) mostra um gráfico $P \times p$ típico que aparece em problemas de percolação.

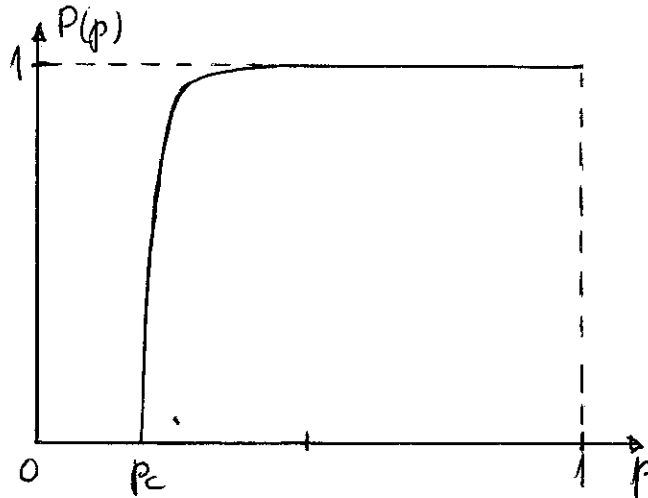


Fig. 2.1.3.2 - Probabilidade de percolação para problema de sítios na rede FCC (Fig. 7 de Essam⁽⁵¹⁾).

iii) *Tamanho médio* $S(p)$ (definido aqui pelo seu número médio de sítios) do "cluster" que contém a origem dado que F ocorre - é a média condicional $\langle s | F \rangle$ dada por:

$$S(p) = \langle s | F \rangle = \frac{1}{P_F} \sum_s s p_s(p) \quad (2.1.3.6)$$

A parte singular desta função diverge para $p \rightarrow p_c$ com um comportamento assintótico da forma

$$S_{\text{sing}}(p) \sim (p_c - p)^{-\gamma_p} \quad (p \rightarrow p_c^-) \quad (2.1.3.7a)$$

$$S_{\text{sing}}(p) \sim (p-p_c)^{-\gamma'_p} \quad (p \rightarrow p_c^+) \quad (2.1.3.7b)$$

e torna-se finita para $p \neq p_c$ visto que "clusters" infinitos não estão incluídos na média que aparece na def. (2.1.3.6). A Fig. 2.1.3.3 ilustra o comportamento típico de $S(p)$ em função

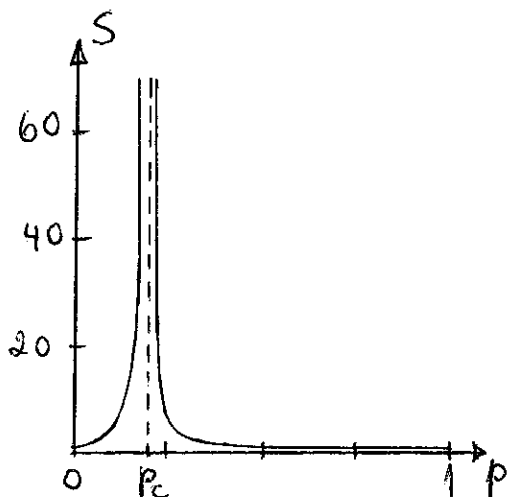


Fig. 2.1.3.3 - Tamanho médio de "clusters" finitos obtido no problema de percolação de sítios na rede FCC (Fig. 8(a) de Essam⁽⁵¹⁾).

de p (extraído de Essam⁽⁵¹⁾) obtido assumindo-se que $\gamma_p = \gamma'_p$. As expansões em série são consistentes com esta hipótese mas não existem provas destas simetrias e as evidências numéricas não são esmagadoras. As estimativas correntes de γ_p são melhores que as de β_p ; seus valores numéricos são da ordem de $\gamma_p(d=2) \approx 2.4$, $\gamma_p(d=3) \approx 1.6$, $\gamma_p(d \geq 6) = 1$ (para valores mais precisos vide referência ⁽⁵¹⁾).

Existem também grandezas *microscópicas* (que dependem não só do tamanho do "cluster" como também da sua forma específica) que desempenham um papel fundamental na teoria de percolação. A função análoga à função de correlação entre pares de spin definida para sistemas térmicos usuais é a conectividade entre pares. Vejamos então sua definição, bem como a do comprimento de correlação ξ_p .

a) *Conectividade entre pares* $C(\vec{r}, p)$ - é definida⁽⁵¹⁾ como sendo a probabilidade do sítio em \vec{r} estar conectado à origem 0 e o evento F (definido em (ii)) ocorrer. Assim sendo, $C(\vec{r}, p)$ es-

creve-se como:

$$C(\vec{r}, \vec{p}) = \langle \gamma(\vec{r}) | F \rangle p_F \quad (2.1.3.8a)$$

onde o indicador $\gamma(\vec{r})$ é definido como

$$\gamma(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \text{se a origem está conectada ao sítio em } \vec{r} \text{ ou se } \vec{r}=\vec{0} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.1.3.8b)$$

Analogamente ao caso de fenômenos térmicos usuais (onde o teorema de flutuação-dissipação relaciona a susceptibilidade com a soma, sobre todos os \vec{r} , da função de correlação entre um spin na origem e outro spin em \vec{r}), $S(p)$ relaciona-se, através de uma regra de soma, com $C(\vec{r}, p)$. Com a definição (2.1.3.8) o teorema análogo da flutuação-dissipação para percolação (provado na ref. (87) através da teoria de grafos) se escreve como (51):

$$S(p) = \frac{1}{p_F} \sum_{\vec{r}} C(\vec{r}, p) \quad . \quad (2.1.3.9)$$

A conectividade entre pares decai, para $p = p_c$, com uma lei de potências que depende da dimensão espacial d do sistema, a saber:

$$C_{\text{sing}}(\vec{r}, p_c) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta_p}} \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.1.3.10)$$

enquanto que, para $p \neq p_c$, $r^{d-2+\eta_p} C(r, p)$ tem um comprimento característico ξ_p (vide eq. (2.1.5.4a)), conhecido como comprimento de correlação. O comportamento típico de $C(r, p)$ para $p < p_c$ é do tipo e^{-r/ξ_p} (88).

b) *Comprimento de correlação* ξ_p - é a distância "raiz-quadrática média" (RMS) à origem de uma partícula em \vec{r} que está conecta

da ã origem, ou seja:

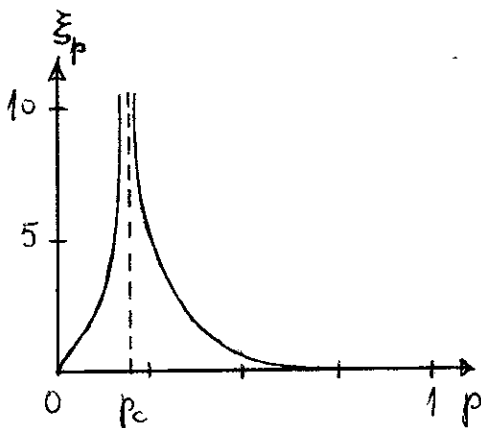
$$\xi_p(p) = \left[\frac{\sum_{\vec{r}} r^2 C(\vec{r}, p)}{\sum_{\vec{r}} C(\vec{r}, p)} \right]^{1/2} \quad (2.1.3.11)$$

Este comprimento caracteriza para $p < p_c$, o comprimento linear médio de "clusters" *finitos*. Para $p > p_c$, ξ_p é proporcional (Shapiro⁽⁶¹⁾ e refs. internas) à distância média entre nós vizinhos da "espinha dorsal" ("backbone", Shlifer et al⁽⁸⁹⁾) do "cluster" (isto é, do "cluster" sem as ligações soltas - se aplicarmos uma diferença de potencial às extremidades de um "cluster" de ligações condutoras e retirarmos as ligações por onde a corrente elétrica não flui teremos obtido a "espinha dorsal" do "cluster").

Tal como acontece com $S(p)$, $\xi_p(p)$ diverge para $p \rightarrow p_c$ e é finito para $p \neq p_c$. A forma assintótica da parte singular de ξ_p para $p \rightarrow p_c$ é:

$$\xi_{\text{sing}}(p) \sim (p_c - p)^{-\nu} p \quad (p \rightarrow p_c^-) \quad (2.1.3.12a)$$

$$\xi_{\text{sing}}(p) \sim (p - p_c)^{-\nu'} p \quad (p \rightarrow p_c^+) \quad (2.1.3.12b)$$



O comportamento típico de $\xi_p(p)$ está ilustrado na Fig. 2.1.3.4 extraída de Essam⁽⁵¹⁾. Essa curva foi obtida

Fig. 2.1.3.4 - Comprimento de correlação obtido no problema de percolação de sítios na rede FCC. Para $p > p_c$ ξ_p é esboçado. (Fig. 8(b) de Essam⁽⁵¹⁾).

assumindo-se que $v_p = v'_p$ consistentemente com evidências numéricas obtidas através de expansões em séries. As estimativas correntes de v_p são melhores que as de β_p e seus valores são da ordem de v_p ($d = 2$) ≈ 1.3 , v_p ($d=3$) ≈ 0.8 e v_p ($d \geq 6$) = $1/2$ (para valores mais precisos vide Essam⁽⁵¹⁾).

2.1.4 - Percolação: limite $q \rightarrow 1$ do Modelo de Potts com q Estados

O recente crescimento em popularidade do problema de percolação (para revisões recentes do tema veja Zallen⁽⁹⁰⁾, Thouless⁽⁴⁹⁾, Stauffer⁽⁵⁰⁾, Essam⁽⁵¹⁾) no meio dos físicos deve-se não só à sua grande aplicabilidade a diversos fenômenos físicos como também à sua similaridade com transições de fase térmicas. Desde cedo pressentia-se que havia uma analogia entre o comportamento da magnetização $M(T)$ num ferromagneto e a probabilidade de percolação $P(p)$. Mas durante longo tempo, a ausência de hamiltoniana no problema de percolação dificultou a formulação precisa desta similaridade. A solução foi dada finalmente por Kasteleyn e Fortuin⁽³¹⁾ em 1969 ao estabelecerem uma relação entre grandezas termodinâmicas do modelo de Potts com q estados (cuja hamiltoniana é dada por $\mathcal{H} = -qJ \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}$; vide eq. (2.3.1.1) onde $H=0$) e grandezas correspondentes da percolação de ligações no limite $q \rightarrow 1$. O método de Kasteleyn e Fortuin foi, desde então, focado de outras maneiras por Stephen⁽⁷⁸⁾ e Wu⁽⁹¹⁾, e estendido ao problema da percolação de sítios (Giri et al⁽³²⁾; Kunz e Wu⁽³³⁾) e à percolação de sítios-ligações (Kondor⁽⁹²⁾, Wu⁽⁹³⁾). As relações^(31,78,91) entre o modelo de Potts e a

percolação de ligações decorrem dos seguintes fatos: i) é possível, para $H = 0$, utilizando a identidade $e^{K\delta_{\sigma_i\sigma_j}} = 1 + (e^K - 1)\delta_{\sigma_i\sigma_j}$, associarmos a cada termo da função de partição $Z(q;K)$ (escrita em função da variável $v = e^K - 1$ onde $K = qJ/k_B T$) um grafo G (na rede) onde cada ligação presente indica que $\sigma_i = \sigma_j$ e representa o fator v , e cada ligação ausente indica que $\sigma_i \neq \sigma_j$ e representa o fator 1 ; ii) é possível, para $H = 0$, interpretar a função de partição (que envolve uma soma sobre todos os possíveis grafos na rede) em termos de uma média configuracional de uma certa grandeza $(q^{n_c(G)})$ onde $n_c(G)$ é o número de "clusters" existentes no grafo G se escolhermos $v = p/(1-p)$ onde $p = 1 - e^{-K}$ é a probabilidade de uma ligação estar presente e $(1-p) = e^{-K}$ a probabilidade de uma ligação estar ausente. Acrescentando-se à hamiltoniana de Potts um campo magnético externo $-H$ aplicado a um estado fixo α ($\alpha = 1, 2, \dots, q$) (vide eq. (2.3.1.1)), Wu⁽⁹¹⁾ obteve resultados similares onde a função de partição $Z(q;K, \hat{H}) \equiv Z(q;K, H/k_B T)$ envolve, neste caso, uma média configuracional de outra grandeza (que agora depende de \hat{H}). Uma outra maneira de interpretar os resultados para $H \neq 0$, utilizada por Kasteleyn e Fortuin⁽³¹⁾, consiste em simular o campo magnético (que interage separadamente com todos σ_i) acrescentando-se um *sítio "fantasma"* (introduzido por Griffiths⁽⁹⁴⁾ em modelos de Ising ($q=2$)) que pode ou não estar conectado com cada sítio da rede. Neste caso, associa-se a cada termo de $Z(q;K, \hat{H})$ (escrita em função das variáveis $v = e^K - 1$ e $u = e^{\hat{H}} - 1$) um grafo G^* (que difere de um do grafo G na rede pelo acréscimo do vértice "fantasma" e de possíveis ligações deste vértice fantasma com os vértices de G) onde cada ligação presente entre sítios da rede indica que $\sigma_i =$

σ_j e representa o fator v , e cada ligação presente entre o sítio "fantasma" e um sítio da rede indica que $\sigma_i = \alpha$ e representa o fator u ; todas as ligações ausentes representam o fator 1. Observa-se então que é possível interpretar $Z(q; K, \tilde{H})$ (que envolve uma soma feita agora sobre todos os possíveis grafos G^*) em termos de uma média configuracional (de $q^{n_c(G^*)}$ onde $n_c(G^*)$ é o número de "clusters" no grafo G^*) se escolhermos $v = p/(1-p)$ e $u = h/(1-h)$ onde $p = 1 - e^{-K}$ e $h = 1 - e^{-\tilde{H}}$ são, respectivamente, as probabilidades de ocupação de uma ligação entre dois sítios da rede e de uma ligação entre o sítio "fantasma" e um sítio da rede. Na formulação de Kasteleyn e Fortuin⁽³¹⁾ a dependência de Z em \tilde{H} aparece somente na média configuracional (que depende de p e h), enquanto que na formulação de Wu⁽⁹¹⁾ a dependência de Z em \tilde{H} aparece explicitamente na grandeza sobre a qual faz-se a média configuracional (que depende de p mas não de h). Seguindo a formulação de Kasteleyn e Fortuin⁽³¹⁾, chega-se às seguintes relações (vide Reynolds et al.⁽⁹⁵⁾) (no limite de número infinito de sítios da rede, isto é, $N \rightarrow \infty$) para as funções de percolação definidas na subseção anterior, sendo a probabilidade de ocupação de uma ligação dada por:

$$p = 1 - e^{-K} \quad (K \equiv J/k_B T) \quad (2.1.4.1)$$

i) o número médio $\langle n \rangle(p)$ de "clusters" finitos por sítio é dado por

$$\langle n \rangle(p) = G(p, 0) \quad (2.1.4.2a)$$

onde

$$G(p, h) \equiv \left[\frac{\partial}{\partial q} \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln Z(q; K, h)}{N} \right) \right]_{q=1} =$$

$$= \sum_s \langle n_s \rangle(p) e^{-hs} = \sum'_s \langle n_s \rangle(p) \Big|_{h=0} (1-h)^s \quad (2.1.4.2b)$$

com

$$h = 1 - e^{-\hat{H}} \quad (\hat{H} \equiv H/k_B T) \quad (2.1.4.2c)$$

e $\langle \dots \rangle$ refere-se à média configuracional definida em (2.1.3.2).

ii) a probabilidade de percolação $P(p)$ é dada por:

$$P(p) = P(p, 0) \quad (2.1.4.3a)$$

$$P(p, h) = 1 + \frac{(1-h)}{p_0} \frac{\partial G}{\partial h} = 1 - \frac{1}{p_0} \sum'_s s \langle n_s \rangle(p) \Big|_{h=0} (1-h)^s \quad (2.1.4.3b)$$

com p_0 definido em (2.1.3.4d).

iii) o tamanho médio $S(p)$ do "cluster" que contem a origem, dado que F ocorre, é:

$$S(p) = S(p, 0) \quad (2.1.4.4a)$$

$$S(p, h) = 1 - (1-h) \frac{\frac{\partial^2 G}{\partial h^2}}{\frac{\partial G}{\partial h}} = \frac{\sum'_s s^2 \langle n_s \rangle(p) \Big|_{h=0} (1-h)^s}{\sum'_s s \langle n_s \rangle(p) \Big|_{h=0} (1-h)^s} \quad (2.1.4.4b)$$

iv) a conectividade entre pares $C(\vec{r}, p)$ é dada por:

$$C(\vec{r}, p) = \left[\frac{\partial}{\partial q} \Gamma_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \hat{H} = 0^+) \right]_{q=1} \quad (2.1.4.5a)$$

onde $\Gamma_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \hat{H})$ é a função de correlação entre pares do modelo de Potts com campo externo:

$$\Gamma_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \hat{H}) = P_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \hat{H}) - q^{-2} = \langle \delta_{\sigma_0\alpha} \delta_{\sigma_r\alpha} \rangle - q^{-2} \quad (2.1.4.5b)$$

$P_{\alpha\alpha}(\vec{r}, \hat{H})$ sendo a probabilidade, no modelo de Potts com campo externo, das variáveis σ_i nos sítios da origem (σ_0) e em \vec{r} (σ_r) estarem ambas no mesmo estado α .

Assim como na termodinâmica a energia livre de Gibbs $G(T, H)$ é uma "função geradora" a partir da qual é possível obter-se todas as outras funções termodinâmicas através de derivadas apropriadas de G em relação a T ou H , a função $G(p, h)$ definida em (2.1.4.2b) é uma função geradora para o problema de percolação. $(1-p)$ faz o mesmo papel que a temperatura T (i.e., provoca desordem ou aleatoriedade) enquanto que h (que é a probabilidade de ocupação de uma ligação entre o sítio "fantasma" e um sítio da rede) desempenha um papel similar ao de um campo magnético H_{\parallel} aplicado numa direção tal que favoreça a ordem. Efetivamente ao adicionarmos à rede original um ponto "fantasma" fora da rede estamos aumentando a conectividade da rede (em particular, existirá um "cluster" infinito mesmo para $p < p_c|_{h=0}$) da mesma forma que um campo magnético H_{\parallel} cria uma magnetização mesmo para $T > T_c|_{H_{\parallel}=0}$. No entanto, contrariamente ao que ocorre nos problemas usuais térmicos, não podemos em percolação aplicar um campo numa direção tal que dificulte a ordem. Isto pode ser interpretado como só existindo uma úni-

ca direção para o campo, o que era de se esperar uma vez que a percolação é o limite de $q \rightarrow 1$ do modelo de Potts com q estados.

Portanto o número médio $G(p,h)$ de "clusters" finitos por sítio na ausência de ligações "fantasmas" (cf.def. (2.1.4.2b)) é o análogo em percolação à energia livre de Gibbs: sua primeira derivada em relação ao "campo" nos dá o parâmetro de ordem $P(p)$ ($P(p \leq p_c) = 0$ tal como $M(T \geq T_c) = 0$) e sua segunda derivada em relação ao "campo" nos dá o análogo da "susceptibilidade" $\chi(T)$ em percolação $S(p)$ ($S(p \rightarrow p_c) \rightarrow \infty$ tal como $\chi(T \rightarrow T_c) \rightarrow \infty$ num ferromagneto). Somos levados, então, às seguintes correspondências:

$$G(p,h) \longleftrightarrow \text{energia livre de Gibbs } G(T,H) \quad (2.1.4.6a)$$

$$P(p) \longleftrightarrow \text{magnetização espontânea } M(T) = - \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_{H \rightarrow 0} \quad (2.1.4.6b)$$

$$S(p) \longleftrightarrow \text{susceptibilidade isotérmica a campo nulo}$$

$$\chi(T) = - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_{H \rightarrow 0} \quad (2.1.4.6c)$$

$$(1-p) \longleftrightarrow \text{temperatura } T \quad (2.1.4.6d)$$

2.1.5 - Teoria de Escala e Universalidade

As correspondências acima levam-nos a esperar que as idéias de escala e universalidade se apliquem aos modelos de percolação. No caso do modelo de Ising, a teoria de escala para suas funções termodinâmicas é usualmente expressa (vide ,

por ex., Pfeuty e Toulouse⁽⁹⁶⁾) dizendo-se que, perto do ponto crítico (isto é, para $\varepsilon \equiv (T-T_c)/T_c \rightarrow 0$, $H \rightarrow 0$), a parte singular da energia livre de Gibbs $G(\varepsilon, H)$ e a parte singular da função de correlação a campo nulo $\Gamma(\varepsilon, r)$ (com $r \gg r_0$, r_0 sendo o alcance das forças) são assintoticamente funções homogêneas generalizadas. No caso da percolação, vários trabalhos têm sido feitos (vide Essam⁽⁵¹⁾ e referências internas) sobre leis de escala descrevendo o comportamento crítico perto de p_c . Em particular, os resultados Monte-Carlo de Nakanishi e Stanley⁽⁹⁷⁾ deixam pouca dúvida de que, perto do ponto crítico, i.e., $(p-p_c) \rightarrow 0$ e $h \rightarrow 0$, a parte singular de $G(p, h)$ é assintoticamente uma função homogênea generalizada satisfazendo a:

$$G_{\text{sing}}(b^y p_\varepsilon, b^y h_h) \sim b^d G_{\text{sing}}(\varepsilon, h) \quad (\varepsilon \rightarrow 0, h \rightarrow 0) \quad (2.1.5.1)$$

ou equivalentemente

$$G_{\text{sing}}(\varepsilon, h) \sim a_0 |\varepsilon|^{2-\alpha_p} F_{\pm}(h|\varepsilon|^{-\Delta_p}) \quad (2.1.5.2a)$$

onde

$$\varepsilon \equiv a_1 (p_c - p) / p_c \quad (2.1.5.2b)$$

$$\alpha_p = 2 - \frac{d}{\gamma_p} \quad (2.1.5.2c)$$

$$\Delta_p = \frac{\gamma_h}{\gamma_p} \quad (2.1.5.2d)$$

e o subscripto $+(-)$ corresponde a $\varepsilon > 0$ ($\varepsilon < 0$). As funções $F_{\pm}(x)$ são analíticas na vizinhança de $x = 0$. Os fatores de escala a_0 e a_1 dependentes da rede foram introduzidos (analogamente

gamente à transformação de escala rede-rede introduzida por Betts et al. ⁽⁹⁸⁾ em transições de fase térmicas) visando a tornar as funções $F_{\pm}(x)$ universais, de tal forma que $a_0 F_{\pm}(x)$ em função de x passa a ter o mesmo valor para diferentes redes de mesma dimensão espacial d . y_p e y_h são as *dimensões anômalas* ou *potências de escala* associadas respectivamente a ϵ e h , ou seja, sob uma dilatação da unidade de comprimento $a \rightarrow a' = ba$, ϵ e h se transformam respectivamente como $\epsilon \rightarrow \epsilon' = b^{y_p} \epsilon$ e $h \rightarrow h' = b^{y_h} h$.

No que diz respeito à homogeneidade da conectividade entre pares $C(\vec{r}, p)$ existem poucos resultados que permitem testá-la; no entanto cálculos de expansão de séries para os momentos esféricos $\mu_n(p) \equiv \sum_{\vec{r}} r^n C(\vec{r}, p)$ de $C(\vec{r}, p)$ (Dunn et al. ⁽⁹⁹⁾, Cox e Essam ⁽¹⁰⁰⁾) são consistentes com uma predição ($\mu_n(p) \sim |\epsilon|^{-\gamma} p^{-n\nu}$) decorrente da hipótese de que, para $\epsilon \rightarrow 0$ e $h = 0$, a parte singular de $C(\vec{r}, \epsilon)$ para longas distâncias ($r \gg a$) é assintoticamente uma função homogênea generalizada satisfazendo a:

$$C_{\text{sing}}(b^{-1} \vec{r}, b^{y_p} \epsilon) \sim b^{d-2+n_p} C_{\text{sing}}(\vec{r}, \epsilon) \quad (2.1.5.3)$$

ou equivalentemente

$$C_{\text{sing}}(\vec{r}, \epsilon) \sim \frac{1}{r^{d-2+n_p}} D_1\left(\frac{\vec{r}}{\xi_p}\right) \quad (\epsilon \rightarrow 0, h=0, r \rightarrow \infty, r/\xi_p \text{ fixo}) \quad (2.1.5.4a)$$

onde $D_1(x)$ é uma função analítica na vizinhança de $x=0$ e

$$\xi_p \sim |\epsilon|^{-\nu} \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad (2.1.5.4b)$$

com

$$v_p = \frac{1}{y_p} \quad (2.1.5.4c)$$

A transformada de Fourier $C(\vec{k}, \epsilon) = \sum_{\vec{r}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} C(\vec{r}, \epsilon)$, que pode ser medida diretamente através de experiências de espalhamento (vide, por exemplo, Birgeneau et al.⁽¹⁰¹⁾), toma assintoticamente a seguinte forma homogênea:

$$C(k, \epsilon) \sim \frac{1}{k^{2-\eta_p}} D_2(k\xi_p) \quad (k \rightarrow 0, \epsilon \rightarrow 0, \xi_p \rightarrow \infty) \quad (2.1.5.5)$$

onde $D_2(x)$ é uma função analítica na vizinhança de $x = 0$.

Os expoentes α_p , η_p e v_p que aparecem nas fórmulas acima foram definidos na subseção 2.1.3 e são chamados de *expoentes críticos*. Analogamente às transições de fase térmicas de 2^a ordem, definiram-se 6 expoentes críticos principais (assumimos que o mesmo expoente descreve o comportamento crítico para $p \rightarrow p_c^+$ e $p \rightarrow p_c^-$ quando apropriado) α_p , β_p , γ_p , δ_p , η_p e v_p para se descrever o comportamento não-analítico dominante, perto de p_c e $h = 0$, de certas variáveis "termodinâmicas" e da função de correlação. Os expoentes "termodinâmicos" α_p , β_p , γ_p e δ_p , que são definidos respectivamente pelas relações $G(\epsilon, 0) \sim |\epsilon|^{2-\alpha_p}$, $P(\epsilon, 0) \sim |\epsilon|^{\beta_p}$, $S(\epsilon, 0) \sim |\epsilon|^{-\gamma_p}$ e $P(0, h) \sim h^{1/\delta_p}$, podem ser obtidos diretamente a partir de (2.1.5.1) envolvendo apenas y_p e y_h :

$$\alpha_p = 2 - \frac{d}{y_p} \quad (2.1.5.6a)$$

$$\beta_p = \frac{d - y_h}{y_p} \quad (2.1.5.6b)$$

$$\gamma_p = \frac{2y_h - d}{y_p} \quad (2.1.5.6c)$$

$$\delta_p = \frac{\gamma_h}{d - \gamma_h} \quad (2.1.5.6d)$$

Alternativamente, pode-se também calcular estes expoentes a partir de (2.1.5.2a) envolvendo α_p e o "expoente de gap" Δ_p (cujo nome advem do fato de que, conforme (2.1.5.2a), derivadas sucessivas de G com respeito a h calculadas em $h = 0$ obedecem a leis de potências espaçadas por "gaps" Δ_p):

$$\beta_p = 2 - \alpha_p - \Delta_p \quad (2.1.5.7a)$$

$$\gamma_p = -2 + \alpha_p + 2\Delta_p \quad (2.1.5.7b)$$

$$\delta_p = \frac{\Delta_p}{2 - \alpha_p - \Delta_p} \quad (2.1.5.7c)$$

Das relações (2.1.5.6), ou equivalentemente de (2.1.5.7), segue-se que estes expoentes estão relacionados através das seguintes leis (chamadas de *leis de escala*) análogas às leis de Rushbrooke e Widom respectivamente:

$$\alpha_p + 2\beta_p + \gamma_p = 2 \quad (2.1.5.8)$$

$$\gamma_p = \beta_p(\delta_p - 1) \quad (2.1.5.9)$$

Quanto aos expoentes críticos de "flutuação" η_p e ξ_p , eles estão relacionados com os expoentes "termodinâmicos" pela seguinte lei de escala (análoga à lei de Fisher):

$$\gamma_p = \nu_p(2 - \eta_p) \quad (2.1.5.10)$$

que implica em:

$$\eta_p = d + 2 - 2\gamma_h \quad (2.1.5.11)$$

A lei de escala (2.1.5.10) é uma consequência direta do teorema de "flutuação-dissipação" (cf. eq. (2.1.3.9) vemos que $S(\epsilon) = p_F^{-1} C(k=0, \epsilon) \sim |\epsilon|^{-\gamma_p}$) e da hipótese de homogeneidade de $C(k, \epsilon)$ (para que $S(\epsilon) \sim |\epsilon|^{-\gamma_p}$ é preciso que, cf eq. (2.1.5.5), $D_2(x) \underset{k \rightarrow 0}{\sim} x^{2-\eta_p}$ acarretando, portanto, $C(k=0, \epsilon) \sim \xi_p^{2-\eta_p} \sim |\epsilon|^{-\nu_p(2-\eta_p)}$). Existe ainda uma outra lei de escala (análoga à lei de Josephson) que liga um expoente crítico "termodinâmico" com um expoente de "flutuação": esta é a única que contém explicitamente a dimensão d (conhecida também como lei de hiper-escala) e é dada por (cf. eqs. (2.1.5.4c) e (2.1.5.6a)):

$$\nu_p d = 2 - \alpha_p \quad (d \leq d_c) \quad (2.1.5.12)$$

onde d_c é a dimensão crítica acima da qual os expoentes críticos não variam mais com d . Portanto, devido às 4 leis de escalas (que são idênticas às originais descobertas no contexto de magnetismo), o problema de se determinar os 6 expoentes críticos reduz-se a determinar quaisquer 2 deles (excetuando o par ν_p, α_p), ou equivalentemente, a determinar as dimensões anômalas γ_p e γ_h .

O princípio de universalidade no contexto de percolação é baseado na idéia de que o comportamento crítico é determinado somente pelos aspectos globais dos "clusters" que são grandes comparados com a distância entre pontos vizinhos. Por causa disto os expoentes críticos e outras propriedades qualitativas tais como as formas das funções de escala (F_{\pm}, D_1, D_2 são chamadas de funções de escala) são universais, ou seja, não

dependem de detalhes tais como o alcance de interação (contanto que seja finito), a estrutura da rede, o tipo de percolação (de sítios ou de ligações); eles dependem somente da dimensão d (que, por sinal, aparece explicitamente na lei de hiper-escala) no caso de percolação simples (a percolação direcionada, por exemplo, está numa classe de universalidade diferente da percolação simples (Kinzel e Yeomans⁽⁶⁹⁾)). Acima da dimensão crítica d_c , os expoentes críticos não variam mais com d e a lei de hiper-escala deixa de ser válida. A solução exata (Essam e Gwilym⁽¹⁰²⁾) do modelo de percolação numa rede de Bethe (que é uma árvore de Cayley infinita e homogênea) fornece os valores $\alpha_p = -1$ e $\nu_p = 1/2$, satisfazendo portanto a lei (2.1.5.12) para $d = 6$. Esta pseudo-rede é um sistema com um número infinito de linhas ramificadas que nunca formam curvas fechadas; não podendo, portanto, ser embebida numa rede genuína de dimensão finita uma vez que em tal rede apareceria inevitavelmente restrições topológicas. Assim sendo, a rede de Bethe corresponde a uma dimensão infinita ($d \rightarrow \infty$) e como tal, Toulouse⁽¹⁰³⁾ sugeriu que seus expoentes críticos, à medida que d diminui, deveriam manter seus valores de dimensão infinita até atingirmos $d_c = 6$ na qual a lei de hiper-escala é satisfeita. Efetivamente, obtem-se $d_c = 6$ numa formulação Landau-Ginzburg do modelo de Potts para $q \rightarrow 1$ (vide, por ex., Pfeuty e Toulouse⁽⁹⁶⁾); portanto para $d \geq 6$ os expoentes críticos para percolação são os expoentes clássicos obtidos numa aproximação de campo médio (que é exata para $d \rightarrow \infty$), os mesmos encontrados para a rede de Bethe. Expansões dos expoentes não-clássicos em série de potências de $\epsilon = 6-d$ foram calculadas⁽¹⁰⁴⁾ pelo método de grupo de renormalização. Resultados obtidos por simula -

ção Monte-Carlo (Kirkpatrick⁽¹⁰⁵⁾) e por análise de séries (Gaunt et al.⁽¹⁰⁶⁾; Gaunt e Ruskin⁽¹⁰⁷⁾) corroboram com $d_c=6$.

Ao contrário dos expoentes críticos, a probabilidade crítica p_c depende de detalhes tais como a estrutura da rede, o tipo de percolação (Fisher e Essam⁽⁷⁷⁾ provaram que $p_c^{lig} \leq p_c^{sítios}$), o alcance das interações. Seu valor exato é bem estabelecido para cadeia unidimensional, redes de Bethe (Fisher e Essam⁽⁷⁷⁾), várias outras pseudo-redes (obtidas substituindo-se ligações e/ou sítios de uma rede de Bethe por subgrafos finitos arbitrários, por exemplo: cactos, cactos expandido)⁽⁷⁷⁾, e para as seguintes redes regulares bidimensionais (Sykes e Essam⁽⁵²⁾): redes quadrada, triangular e "honeycomb" no caso de percolação de ligações e redes triangular e Kagomé no caso de percolação de sítios.

2.1.6 - Principais Métodos Utilizados em Percolação

Uma consequência muito importante da formulação de Kasteleyn e Fortuin⁽³¹⁾ é a de permitir a aplicação ao problema de percolação de muitas das técnicas utilizadas em mecânica estatística e transições de fase, tais como expansões em séries, simulação Monte-Carlo, grupo de renormalização (GR). Vejamos sucintamente os principais métodos utilizados no cálculo aproximado de grandezas da percolação.

2.1.6.1 - Expansões em Séries

Conforme vimos na seção 2.1.4, as funções de percolação tais como a probabilidade de percolação $P(p)$ e o tamanho

médios $S(p)$ dos "clusters" finitos podem ser obtidas diferenciando-se a "energia livre de Gibbs" $G(p,h)$, que é a função geradora de $\langle n_s \rangle(p)$. Esta função $\langle n_s \rangle(p)$, para o problema de percolação de sítios, tem a seguinte forma ⁽¹⁰⁸⁾:

$$\langle n_s \rangle(p) = p^s \sum_t g_{st} r^t \equiv p^s D_s(r) \quad (r \equiv 1-p) \quad (2.1.6.1.1)$$

que substituída em (2.1.4.2b) fornece

$$G(p,h) = \sum_s' \sum_t g_{st} p^s r^t (1-h)^s \quad (2.1.6.1.2)$$

Nestas fórmulas t é o *perímetro* do "cluster" considerado (isto é, o número de sítios vazios que são primeiros vizinhos dos sítios pertencentes ao "cluster") e g_{st} é o número de *animais* (isto é, o número de configurações de "clusters" geometricamente diferentes de s sítios com perímetro t). $D_s(r)$ é conhecido como *perímetro polinomial* e seu cálculo para "clusters" de diversos tamanhos em várias redes tem sido feito exatamente (para uma lista extensa vide, por ex., refs. (109), (110), (111))^(*).

Os resultados exatos de $\langle n_s \rangle(p)$ têm a vantagem de serem válidos mesmo para p bem distante de p_c , porém têm a desvantagem de se restringirem a valores de s pequenos e intermediários ($s \leq 20$). Extrapolações para $s \rightarrow \infty$ de $\langle n_s \rangle(p)$ ^(112, 111, 113) fornecem resultados quase tão precisos quanto os resultados obtidos por Monte-Carlo ⁽⁵⁰⁾.

^(*) Polinômios similares podem ser definidos para o problema de ligações, mas neste caso eles determinam o número médio de "clusters" com b ligações $\langle n_b \rangle(p)$ e t é o número de ligações ausentes adjacentes ao "cluster".

Existem melhores métodos de extrapolação para calcular-se os expoentes críticos β_p , γ_p , etc. Ao invés de primeiro extrapolarmos $\langle n_s \rangle(p)$ para s grande, lida-se diretamente com a sua soma em s (que aparece na eq. (2.1.6.1.2)): *expansões em séries de baixa concentração* são obtidas expandindo-se $r^t \equiv (1-p)^t$ em potências de p e colecionando termos de mesma ordem. Vê-se da expressão (2.1.6.1.2) que o coeficiente de p^ℓ pode ser calculado exatamente contanto que se conheça os valores de g_{st} para $s \leq \ell$. Similarmente *expansões em séries de alta concentração* são obtidas fazendo $p=1-r$ e colecionando todos os termos com perímetro $t \leq \ell$. A análise de tais séries de potências para obter-se p_c e expoentes críticos envolve métodos usuais da teoria de transições de fase tais como método da razão (Sykes e Essam⁽¹¹⁴⁾, Sykes et al.⁽¹¹⁵⁾), aproximantes de Padé (Sykes et al.⁽¹¹⁶⁾, Gaunt et al.⁽¹¹⁷⁾), transformações de variáveis de expansão (Domb e Pearce⁽¹¹⁸⁾), etc. (para revisão destes métodos vide vol.3 da ref.(2)).

2.1.6.2 - Simulação Monte Carlo

O início do desenvolvimento sistemático de métodos Monte Carlo data de aproximadamente 1944; desde então tem sido amplamente aplicado^(119,120), a diversos ramos da ciência. No caso de um problema probabilístico, o método Monte Carlo mais simples consiste em primeiro criar números randômicos escolhidos de tal maneira que simulem diretamente os processos randômicos físicos do problema original, e em seguida inferir a solução desejada a partir dos resultados obtidos com tais números randômicos. Existem métodos Monte Carlo mais sofisticados: por exemplo, pode-se começar com um dado problema probabilístico,

formulá-lo em termos teóricos, discernir um segundo problema probabilístico (que pode ter, inclusive, um caráter totalmente diferente do primeiro) descrito pela teoria resultante, e finalmente resolver o primeiro problema simulando o segundo.

Desde 1961⁽¹²¹⁾, várias técnicas Monte Carlo têm sido utilizadas no problema de percolação tais como simulação da rede^(121,122,123,124,125,126,etc), acréscimo gradativo de pontos a uma distribuição de "clusters"⁽¹²⁷⁾, crescimento de um "cluster"^(128,129), flutuações de forma para um "cluster"^(130,131,132), etc. Essas técnicas estão descritas sucintamente nas referências (50) e (57) (para descrição mais detalhada do método de simulação da rede vide Cap. 11 do livro de Hammersley e Handscomb⁽¹¹⁹⁾). Os métodos Monte Carlo têm sido usados não só no cálculo de várias grandezas macroscópicas (vide seção 2.1.3) como também no cálculo de parâmetros relativos à estrutura de "clusters" tais como o raio, a área de superfície e o perímetro de "clusters" de um dado tamanho, parâmetros estes que servem para distinguir entre várias formas possíveis de um "cluster" ("ramificada", tipo "hidra", tipo "queijo suíço", etc).

2.1.6.3 - Grupo de Renormalização

A técnica de grupo de renormalização (GR) (vide ref. (19) e referências internas), cuja utilidade em transições de fase térmicas tem sido enorme, foi aplicada pela primeira vez à percolação em 1975 por Harris et al.⁽¹⁰⁴⁾. O GR em percolação está assentado sobre o fato básico do comprimento de correlação ξ_p ser muito grande na região crítica, divergindo para $p = p_c$ (cf. eqs. (2.1.3.12)). Portanto, quando $p = p_c$ todos os

comprimentos finitos tais como os diâmetros dos "clusters" são muito menores que ξ_p , e o sistema parece similar, à parte simples fatores de escala, qualquer que seja a escala de comprimento adotada para estudar o sistema. Isto permite "renormalizar" o sistema sem olhar para cada ponto deste individualmente, mas sim tomando médias sobre regiões cujas dimensões lineares são $\ll \xi_p$ (isto é, reduzindo o número de graus de liberdade), de tal maneira que o sistema renormalizado é uma versão reescalada do sistema original. Se esta transformação for feita na própria rede chama-se *GR no espaço real*; se for feita no espaço de Fourier chama-se de *GR no espaço recíproco* (é neste espaço que normalmente são feitas as expansões em ϵ).

As transformações de GR no espaço real substituem grupos locais de sítios e ligações por um número menor de sítios e ligações com parâmetros renormalizados escolhidos de modo a preservar a conectividade local. Uma relação é então estabelecida entre problemas similares com escalas de comprimento diferentes, a partir da qual pode-se obter os expoentes críticos. A primeira aplicação à percolação de GR no espaço real deve-se a Young e Stinchcombe⁽¹³³⁾; desde então vários trabalhos têm sido feitos utilizando diversas técnicas tais como dizimação (referências (133,134,135)), método Migdal-Kadanoff (refs. (136,137,138)), "método do eletrodo" (refs. (139,140,141)), transformações tipo célula-sítio ou célula-ligações (refs. (142,124, 143, 61,144,145,126,146,63)), etc.

Métodos de GR no espaço dos momentos referem-se a problemas similares com escalas de momentum (ou de número de onda) diferentes. Neste caso usa-se uma formulação hamiltoniana de Potts estendida para variável de spin σ_i contínua⁽¹⁴⁷⁾: a renormalização é feita sobre a transformada de Fourier da sua

função de partição (numa aproximação de lei Gaussiana) para $q=1$ usando teoria de perturbação em $\epsilon = 6-d$. Desta forma, os expoentes críticos foram calculados em ordem ϵ para o problema de ligações por Harris et al. ⁽¹⁰⁴⁾ e em ordem ϵ^2 por Amit ⁽¹⁴⁸⁾ e Priest e Lubensky ⁽¹⁴⁹⁾. A forma de escala para $G(p,h)$ foi obtida por Stephen ⁽¹⁵⁰⁾, e Giri et al. ⁽³²⁾ indicaram como os cálculos podem ser estendidos para percolação de sítios (em particular, assumindo que as generalizações que obtiveram para σ_i contínuas das hamiltonianas efetivas dos modelos de percolação de ligações e sítios fossem representativas destes modelos, mostraram que ambos os modelos têm expoentes críticos e comportamentos idênticos em $(6-\epsilon)$ dimensões).

2.2 - FERROMAGNETOS DE ISING PUROS

2.2.1 - Introdução

O modelo de Ising para um ferromagneto tem sido muito estudado desde a sua introdução ⁽⁷⁾ porque é o modelo teórico mais simples, exatamente solúvel em alguns casos, que exhibe fenômeno crítico (para sistemas, com interações finitas de alcance finito isto ocorre para $d > 1$). O modelo ferromagnético introduzido por Ising ⁽⁷⁾ consiste de spins $S = 1/2$ localizados sobre os sítios de uma rede, spins cujas componentes z ($S_i^z = \pm 1/2$) podem estar no estado "up" ($\sigma_i = +1$) ou no estado "down" ($\sigma_i = -1$) e que interagem entre pares i e j de primeiros vizinhos com uma energia $-J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ ($J_{ij} > 0$)

para ferromagnetos) e com um eventual campo magnético externo H com uma energia $-H\sigma_i$. A hamiltoniana que descreve este modelo estatístico é então:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (\sigma_i = \pm 1 \forall i; J_{ij} > 0, H \geq 0) \quad (2.2.1.1)$$

onde $\langle ij \rangle$ refere-se a sítios primeiros vizinhos.

Ising⁽⁷⁾ resolveu exatamente este problema para uma cadeia linear unidimensional e provou que, neste caso, não há transição de fase (temperatura de Curie $T_c = 0$ para $d=1$). O primeiro resultado para $d=2$ foi obtido por Peierls em 1936⁽⁸⁾ mostrando que para uma temperatura suficientemente baixa, deve haver uma magnetização espontânea. A aplicação do método de matriz transferência a este modelo na rede quadrada e a descoberta da dualidade por Kramers e Wannier⁽¹⁵¹⁾ em 1941 permitiu o cálculo exato da temperatura crítica ($T_c \neq 0$ e portanto há transição de fase para-ferromagnética como previsto por Peierls⁽⁸⁾). Logo em seguida, deu-se um enorme passo quando Onsager⁽⁹⁾ em 1944 calculou exatamente a função de partição, a tensão de "contorno" (o equivalente à tensão superficial para $d=3$) e o calor específico do modelo ferromagnético de Ising anisotrópico sem campo magnético na rede quadrada. Oito anos depois, Yang⁽¹⁰⁾ calculou a magnetização espontânea (a qual já tinha sido anunciada por Onsager numa conferência de transições de fase proferida na Universidade de Cornell em 1948) para a rede quadrada isotrópica. Um número enorme de trabalhos usando os mais variados métodos têm sido feitos^(21,152,153) (para referências de trabalhos mais recentes veja ref. (154)) para diversas redes em várias dimensões d , incluindo ou não: anisotropia, intera-

ções com vizinhos distantes, campo magnético externo paralelo ou transversal, extensões do modelo para interações a n spins, extensões do modelo para spins diferentes de $1/2$ (onde a componente z do spin S_i , representada por σ_i , pode assumir neste caso mais de 2 valores). Apesar de tantos esforços envidados, ninguém conseguiu ainda calcular exatamente para $d = 2$ a expressão analítica para a função de partição com um campo magnético externo qualquer. Para sistemas d -dimensionais ($d \geq 3$) a situação é bem pior: não se conhece nenhuma expressão analítica exata para grandezas termodinâmicas; somente alguns teoremas gerais foram estabelecidos rigorosamente⁽¹⁵⁵⁾.

Devido à existência de algumas soluções exatas e da possibilidade de se obter expansões em séries de altas e baixas temperaturas, o modelo de Ising para spins $1/2$ serviu como pioneiro no estudo de comportamentos críticos, e muitos resultados importantes na teoria de fenômenos críticos foram descobertos com a aplicação ao modelo de Ising. Além do grande interesse teórico que este modelo apresenta, o modelo de Ising também é importante sob o ponto de vista experimental visto que descreve com uma boa aproximação diversas substâncias magnéticas⁽²⁴⁾ tais como CoCs_3Br_5 ($d=2$), CoCs_3Cl_5 ($d=3$) e DyPO_4 ($d=3$), bem como sistemas adsorvidos em substratos ($d=2$)⁽²⁵⁾ como, por exemplo, átomos de ^4He adsorvidos em kriptônio "preplated" grafite⁽²⁶⁾.

2.2.2 - Natureza da Transição, Fronteiras e Expoentes Críticos

É sabido que a transição de fase que ocorre no ferro

magneto de Ising é *contínua* qualquer que seja a dimensão $d > 1$ do sistema considerado. No que concerne às fronteiras críticas que separam as fases paramagnética da ferromagnética, a introdução de várias transformações (que relacionam a função de partição de uma rede com a de outra rede) tais como dualidade^(151, 9), triângulo-estrela^(9, 156), decoração-iteração⁽¹⁵⁷⁾ possibilitaram o cálculo *exato* de várias fronteiras críticas associadas a redes *planas* anisotrópicas e inhomogêneas (vide (153) e refs. internas) (tais como as redes quadrada, triangular, 4-8, Kagomé, 3-12 e suas respectivas duais). São conhecidos *exatamente* também os expoentes críticos para $d=2$ (potência de escala térmica $y_t = 1$ e potência de escala magnética $y_h = 15/8$, e portanto, usando relações idênticas às equações (2.1.5.6), (2.1.5.4c) e (2.1.5.11) com $y_p \leftrightarrow y_t$, vê-se que $\alpha=0$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$, $\delta = 15$, $\nu = 1$, $\eta = 1/4$). Para $d = 3$ existem várias estimativas numéricas obtidas por expansão em séries, métodos Monte Carlo, GR, etc, para os pontos críticos (vide, por exemplo, Tabela I-a do Apêndice D) e expoentes críticos (vide, por exemplo, Le Guillou e Zinn-Justin⁽¹⁵⁸⁾ e referências internas). Para $d \geq 4$ existem algumas estimativas para a temperatura crítica (vide, por exemplo, Tab. I-b do Apêndice D) e para expoentes críticos (vide, por exemplo Fisher e Gaunt⁽¹⁵⁹⁾ para $d = 4, 5, 6$; Moore⁽¹⁶⁰⁾ e Pfeuty e Toulouse⁽⁹⁶⁾ para $d = 4$). No limite $d \rightarrow \infty$, séries de altas temperaturas tornam-se equivalentes às séries da teoria de campo médio. Na realidade, no que concerne aos expoentes críticos, os valores de campo médio são atingidos muito antes, com $d_c = 4$ sendo a dimensão crítica⁽⁹⁶⁾ que separa o comportamento chama-

do de clássico (campo médio) do comportamento não-clássico. Os valores obtidos para os expoentes críticos usando a teoria clássica de Landau são: $\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, $\delta = 3$, $\nu = 1/2$, $\eta = 0$ (que correspondem a $y_t = 2$ e $y_h = 3$).

2.3 - FERROMAGNETOS DE POTTS PUROS

2.3.1 - Introdução: Definição e Importância do Modelo

O modelo de Potts usual com q estados⁽²⁷⁾, também chamado de modelo de Ashkin-Teller-Potts por razões históricas (a versão $q=4$ deste modelo foi estudada primeiramente por Ashkin e Teller⁽¹⁶¹⁾), originalmente introduzido como uma generalização para um número maior do que $q=2$ estados do modelo de Ising, tem-se tornado nesta última década um foco de interesse crescente para físicos teóricos e experimentais (para uma revisão detalhada recente veja Wu⁽²⁸⁾). Do ponto de vista teórico, o modelo de Potts é muito importante devido às suas relações com vários problemas importantes da mecânica estatística em redes, bem como à riqueza e à complexidade do seu comportamento crítico. As suas conexões com vários outros modelos estatísticos de soluções em geral não conhecidas têm possibilitado o estudo das propriedades destes modelos a partir de resultados conhecidos do modelo de Potts e vice-versa. Desta forma é que a maioria das propriedades críticas conhecidas do modelo de Potts bidimensional foram estabelecidas. Exemplos de modelos relacionados com o de Potts são: modelos de vértices

que contém em particular modelos com regras de gelo ^(162,163,164), modelo $Z(N)$ ^(29,30,165), percolação de ligações ($q \rightarrow 1$) ⁽³¹⁾, percolação de sítios (limite de $q \rightarrow 1$ do modelo de Potts com interações a n corpos ^(32,33)), percolação de sítios-ligações (limite de $q \rightarrow 1$ do modelo de Potts com interações a 2 e a $n > 2$ corpos ^(92,93)), percolação de ligações em árvores ($q \rightarrow 0$ ^(166,167,168)), resistências lineares distribuídas aleatoriamente sobre uma rede ($q \rightarrow 0$ ⁽¹⁶⁶⁾), vidros de spin diluído ($q \rightarrow 1/2$ ^(34,35)), sistemas de spins clássicos ⁽²⁸⁾.

Do ponto de vista experimental, há vários sistemas físicos reais que pertencem à mesma classe de universalidade (isto é, que possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos) que à do modelo de Potts, fornecendo assim diversas realizações experimentais do modelo de Potts. Por exemplo, é sabido ^(36,37,25) que transições de fase em monocamadas e submonocamadas adsorvidas em superfícies de cristais são bem descritas por modelos de Potts bidimensionais para diversos valores de q : átomos de ^4He adsorvidos em kriptônio intercalado com grafite com cobertura $1/2$ ($q=2$ ⁽²⁶⁾), idem com cobertura $1/3$ ($q = 3$ ⁽³⁸⁾), átomos de O_2 adsorvidos em níquel ($q=4$ ⁽³⁹⁾). Diversas realizações experimentais do modelo de Potts tridimensional também foram feitas tais como: ferromagneto cúbico DyAl_2 submetido a campo magnético diagonal em relação aos seus 3 eixos fáceis ($q = 3$ ⁽⁴⁰⁾), transição de fase estrutural em SrTiO_3 submetido à pressão externa ($q = 3$ ⁽⁴¹⁾), mistura de fluidos etileno-glicol+água+álcool laurílico+nitro-metano+nitro-etano ($q=3$ ⁽¹⁶⁹⁾), transição ordem-desordem de C_6Li ($q=3$ ⁽¹⁷⁰⁾), antiferromagnetos FCC do tipo I ($q=3$ e $q=4$ ⁽¹⁷¹⁾), gelação e vulcanização em políme-

meros ramificados ($0 \leq q \leq 1$ ⁽¹⁷²⁾).

O modelo de Potts usual consiste em associar a cada sítio i de uma rede uma variável randômica σ_i que pode assumir q valores distintos ($\sigma_i = 1, 2, \dots, q \forall i$); a energia de interação entre pares $\langle ij \rangle$ de primeiros vizinhos é $-qJ_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j}$ ($J_{ij} > 0$ para ferromagnetos) e com um eventual campo magnético externo H aplicado ao estado α é $-qH \delta_{\sigma_i \alpha}$. A hamiltoniana que descreve, então, um ferromagneto de Potts submetido a um campo magnético H pode ser escrita como:

$$\mathcal{H} = -q \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - qH \sum_i \delta_{\sigma_i \alpha} \quad (\sigma_i = 1, 2, \dots, q \forall i; J_{ij} > 0, H \geq 0) \quad (2.3.1.1)$$

Observe que para $q = 2$ a hamiltoniana (2.3.1.1) reduz-se à de Ising (fórmula (2.2.1.1)) a menos de uma mudança do zero de energia.

2.3.2 - Natureza da Transição

Uma questão importante que tem sido muito investigada no estudo das propriedades críticas do modelo de Potts refere-se à variação do valor crítico q_c com a dimensão espacial d (a transição é de 1^a ordem para $q > q_c(d)$ e é contínua para $q \leq q_c(d)$). No limite $q \rightarrow \infty$, Pearce e Griffiths ⁽¹⁷³⁾ provaram recentemente a conjectura de Mittag e Stephen ⁽¹⁷⁴⁾, qual seja: a transição é de 1^a ordem para $d \geq 2$ (ou seja, a teoria de campo médio ^(175,176,174), a qual prediz uma transição de 1^a ordem para $q > 2 \forall d$, é assintoticamente exata para $q \rightarrow \infty$). Resul

tados de GR ^(177,178) fornecem que q_c diverge como $e^{2/(d-1)}$ no limite de $d \rightarrow 1^+$. No que concerne $d = 2$, está agora bem estabelecido que $q_c(2) = 4$ ^(179,176;180). Para $d = 3$ não se conhecem resultados exatos e, em particular, muitos trabalhos têm sido feitos visando a elucidar a ordem da transição para $q = 3$. Resultados de GR (expansão em ε ⁽¹⁸¹⁾ fornecem transição de 1^a ordem, enquanto que GR no espaço real ⁽¹⁸²⁾ prediz transição de 2^a ordem) e de séries (expansões de altas temperaturas ⁽¹⁸⁰⁾ indicam que a transição é de 1^a ordem para $q \geq 3$, enquanto que Miyashita et al ⁽¹⁸³⁾ acharam que expansões de baixas temperaturas são inadequadas para identificar a natureza da transição) são inconclusivos. Mas simulações Monte Carlo ^(184,185), cálculos Monte Carlo aplicado a grupo de renormalização ⁽¹⁸⁶⁾, cálculos de método variacional em "clusters" ⁽¹⁸⁷⁾, e experiências em sistemas pertencentes à mesma classe de universalidade que a do modelo de Potts tridimensional com $q = 3$ estados fornecem evidências claras da transição ($q=3, d=3$) ser de 1^a ordem. Inclusive um cálculo numérico recente ⁽¹⁷⁸⁾ de GR variacional indica que esta transição é definitivamente de 1^a ordem. Assim sendo, acredita-se atualmente que o modelo de Potts ($q=3, d=3$) possui uma transição de 1^a ordem. Para $d > 3$, poucos trabalhos foram realizados. Resultados de Monte Carlo aplicado a GR ⁽¹⁸⁶⁾, expansões em ε ⁽¹⁸⁸⁾ e de GR variacional ⁽¹⁷⁷⁾ indicam que a transição no modelo de Potts com $q=3$ e $d=4$ é de 1^a ordem. Ditzian e Kadanoff ⁽¹⁸⁹⁾, através de uma análise de expansão em séries de altas e baixas temperaturas, chegaram à mesma conclusão para o caso ($q=4, d=4$). Para $d > 4$, os resultados de Andelman e Berker ⁽¹⁷⁷⁾ e de Aharony e Pytte ⁽¹⁸⁸⁾ são consistentes com

$$q_c(d \geq 4) = 2.$$

Na Fig. 2.3.2.1 mos-
tramos a variação qualitativa
de q_c em função da dimensão
espacial d do sistema, levan-
do-se em conta o comportamen-
to assintótico de q_c para $d \rightarrow$
 $\rightarrow 1^+$, o ponto exato $q_c(2) = 4$,
o resultado não provado mas
muito provavelmente certo da
transição ser levemente de 1^a
ordem para $q = 3$ e $d = 3$, e o
resultado $q_c(d \geq 4) = 2$ de GR
(Aharony e Pytte⁽¹⁸⁸⁾). Gráfi-
cos parecidos podem ser vis-
tos em Riedel⁽¹⁹⁰⁾, Nienhuis et al.⁽¹⁷⁸⁾ e em Wu⁽²⁸⁾.

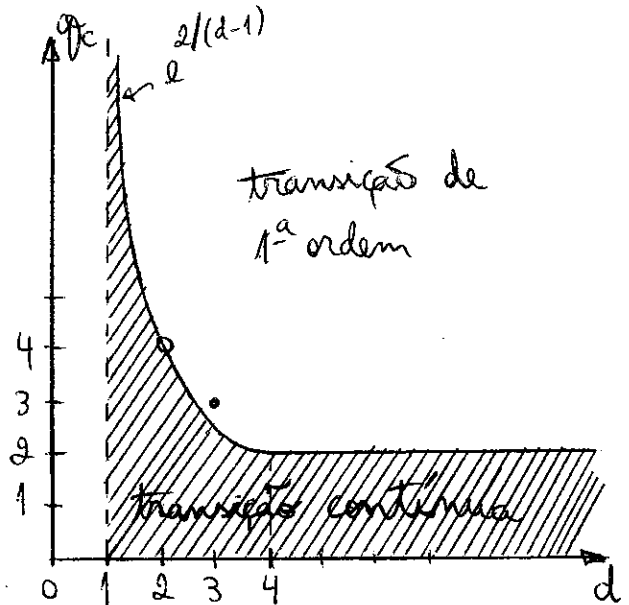


Fig. 2.3.2.1 - Gráfico qualitativo de q_c versus d (para $q > q_c(d)$ a transição é de 1^a ordem). Resultados exatos (o) e aproximado (•) também estão indicados. A região hachureada refere-se a transições contínuas.

2.3.3 - Fronteiras e Expoentes Críticos

O modelo de Potts ferromagnético foi resolvido *exatamente* para a rede de Bethe⁽¹⁹¹⁾ e para o modelo de Ising ($q=2$) nos casos que mencionamos na Seção 2.2.1. No entanto, vários resultados exatos (provenientes, por ex., de relações de dualidade, de conexões com modelos de solução conhecida) e aproximados referentes a propriedades críticas de ferromagnetos de Potts têm sido estabelecidos. As únicas fronteiras críticas de ferromagnetos de Potts anisotrópicos com *interações a 2 corpos* que são conhecidas *exatamente* correspondem às redes quadrada, tri-

angular e "honeycomb" para $q \geq 4$ ⁽⁸⁸⁾ e para $q = 2$ ^(9, 192). Espera-se que as expressões analíticas em função de q encontradas para estas fronteiras críticas continuem sendo exatas para $q < 4$ (o que ocorre rigorosamente para $q = 2$), embora isto não tenha sido provado rigorosamente. Estas fronteiras críticas para qualquer valor de q foram conjecturadas (assumindo que exista uma *única* transição de fase) inicialmente por Potts ⁽²⁷⁾ para a rede quadrada isotrópica e por Kim e Joseph ⁽¹⁹³⁾ para a rede triangular isotrópica; depois foram estendidas para o caso anisotrópico independentemente por Baxter et al. ⁽¹⁶⁴⁾ e por Burkhardt e Southern ⁽¹⁹⁴⁾. Baxter ⁽¹⁷⁹⁾ e Baxter et al. ⁽¹⁶⁴⁾ mostraram que, para $q > 4$, ocorre realmente uma transição de primeira ordem para as temperaturas críticas conjecturadas; posteriormente, Hintermann et al. ⁽⁸⁸⁾ provaram que esta transição é *única*. No que concerne aos expoentes críticos para $d=2$ e $q \leq 4$, existe uma conjectura de den Nijs ⁽¹⁹⁵⁾ para a potência de escala térmica $y_t(q)$ e uma conjectura formulada independentemente por Nienhuis et al. ⁽¹⁹⁶⁾ (usando GR variacional) e por Pearson ⁽¹⁹⁷⁾ (usando ajuste numérico) para a potência de escala magnética $y_h(q)$ que são muito provavelmente exatas: há várias evidências (ref. ⁽²⁸⁾ e refs. internas) corroboram com ambas conjecturas.

Para $d > 2$ não existem resultados exatos; estimativas para os pontos críticos em várias redes, obtidas mediante diversas técnicas tais como expansões em séries, Monte Carlo, Monte Carlo aplicado a GR, podem ser vistas nas Tabs. Ia e Ib do Apêndice D e Tabs. II e III de Wu ⁽²⁸⁾. Quanto aos expoentes críticos, são poucos os resultados disponíveis para $d \geq 3$.

No entanto, Nienhuis et al. (178) calcularam numericamente ambos $y_t(q)$ e $y_h(q)$ para $d = 1,58, 2, 2,32$ (usando GR variacional) e para $1 \leq d \leq 5$ (usando a aproximação de Migdal-Kadanoff).

2.4 - SISTEMAS MAGNÉTICOS RANDÔMICOS

2.4.1 - Introdução

Durante os últimos anos, muitos esforços têm sido dispendidos no estudo de transições de fase magnéticas em sistemas randômicos (198,199); em particular, consideraremos aqui somente sistemas com desordem substitucional (*). A aleatoriedade pode ser proveniente ou da substituição de átomos magnéticos por átomos diferentes (*problema de sítios*) ou de interações de super-troca ("super-exchange") randômicas entre átomos magnéticos iguais (*problema de ligações*). Em particular quando as interações se anulam aleatoriamente estamos diante de um problema de ligações diluídas. Além disso, a desordem pode ser "annealed" ou "quenched" conforme o método de preparação do sistema. No sistema "annealed", a temperatura e eventuais parâmetros externos são variados muito lentamente de tal forma que o sistema esteja sempre num verdadeiro equilíbrio termodinâmico (nesse caso a energia livre é dada por $F = -k_B T \ln \langle \text{Tr } e^{-\beta H} \rangle_{\text{conf}}$ onde $\langle \dots \rangle_{\text{conf}}$ indica uma média configuracional). Ao passo que o sistema "quenched" é obtido esquentando-o a uma tempera-

(*) onde a desordem está na *distribuição* dos átomos sobre uma rede cristalina e não nas posições ocupadas pelos átomos (que corresponderia a uma desordem estrutural).

tura muito alta e depois resfriando-o subitamente para uma certa temperatura (neste caso a distribuição aleatória de spins está congelada e as posições dos spins podem ser consideradas *independentes* uma vez que não há tempo para se correlacionarem; a energia livre é então dada por $F = -k_B T \langle \ln \text{Tr} e^{-\mathcal{H}/k_B T} \rangle_{\text{conf}}$). Os modelos ferromagnéticos "annealed" são num certo sentido mais fáceis de serem tratados pois estão relacionados ⁽²⁰⁰⁾ com os modelos puros correspondentes: o conhecimento da solução exata do modelo puro considerado permite, então, resolver exatamente o modelo "annealed" correspondente. Nos modelos "quenched" (os únicos que serão considerados ao longo deste trabalho), o tratamento teórico do problema de sítios é mais complicado que o de ligações pois a ausência de uma ligação não altera as contribuições dos sítios vizinhos que estão ocupados. Por outro lado, o problema de ligações é mais difícil de ser tratado experimentalmente do que o problema de sítios onde vários sistemas foram estudados: $K_2\text{Cu}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_4$ ⁽²⁰¹⁾, $\text{Rb}_2\text{Co}_p\text{Mg}_{1-p}\text{F}_4$ ⁽²⁰²⁾, $\text{Rb}_2\text{Mn}_p\text{Mg}_{1-p}\text{F}_4$ ⁽¹⁰¹⁾, $\text{Mn}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$ ⁽²⁰³⁾, $\text{Co}_p\text{Zn}_{1-p}\text{F}_2$ ⁽²⁰⁴⁾, $\text{KMn}_p\text{Ni}_{1-p}\text{F}_3$ ⁽²⁰⁴⁾, etc. Uma realização experimental do problema de ligações pode ser obtida em sistemas análogos ao $\text{Co}(\text{S}_p\text{Se}_{1-p})_2$ ⁽²⁰⁵⁾ onde os átomos de Co interagem entre si essencialmente via "super-exchange" através de átomos de S ou de Se.

2.4.2 - Diagrama de Fase de Ferromagnetos de Ising com Ligações Diluídas "Quenched"

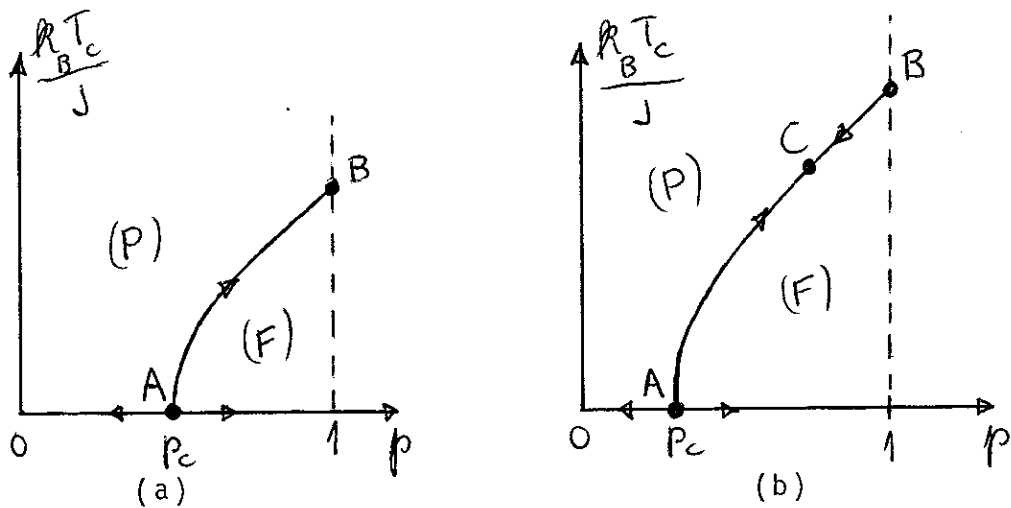
Os modelos em sistemas randômicos que vamos conside-

rar ao longo deste trabalho restringem-se a ferromagnetos com ligações randômicas "quenched": Ising diluído (Cap. 6) e Potts com uma distribuição qualquer $\mathbb{P}(J_{ij})$ de ligações (vide subseção 5.4.6). O estudo de propriedades críticas na vizinhança de transições de fase térmicas contínuas em sistemas randômicos "quenched" leva naturalmente ao estudo de transições de fase geométricas abordadas na Seção 2.1. Em particular, em ferromagnetos diluídos "quenched", não existe transição de fase magnética sem a formação de um "cluster" infinito de íons magnéticos. Portanto, nestes sistemas, devemos considerar o problema geométrico da formação de um "cluster" infinito em função da concentração p de íons magnéticos. Para fixar idéias, consideremos o modelo de Ising ferromagnético "quenched" com ligações diluídas entre primeiros vizinhos cuja hamiltoniana é dada pela eq. (2.2.1.1) onde $H = 0$ e a intensidade de ligação J_{ij} é uma variável randômica independente com uma distribuição de probabilidade

$$\mathbb{P}(J_{ij}) = (1-p)\delta(J_{ij}) + p\delta(J_{ij}-J) \quad (J > 0) \quad (2.4.2.1)$$

Para $p = 1$ (ferromagneto puro) temos um problema de transição de fase térmica onde a competição entre a tendência à ordem (o alinhamento dos momentos magnéticos diminui a energia no caso de um ferromagneto) e a tendência à desordem (o desalinhamento dos momentos magnéticos favorece a entropia) depende da temperatura T : somente para $T \leq T_c$ a ordem ganha, dando origem à magnetização espontânea $M \neq 0$. Para $T = 0$ temos um problema de percolação pura onde $M = 0$ para $p < p_c$ e $M \neq 0$ para

$p > p_c$ (57, 58). Para valores intermediários de p ($p_c < p < 1$) e para $T \neq 0$, há uma mistura entre aspectos térmicos e geométricos (o tratamento estatístico deste problema envolve pois médias térmicas e configuracionais simultaneamente): o aparecimento de $M \neq 0$ ocorre para $T \leq T_c(p)$, onde a temperatura crítica T_c diminui à medida que diluimos o sistema (pois ao diminuirmos a concentração de elementos cooperativos estamos dificultando o ordenamento dos momentos magnéticos) até anular-se quando $p = p_c$. A temperatura crítica $T_c(p)$ é, portanto, uma função monótona crescente em p que liga os pontos $A(T_c(p_c) = 0)$ e $B(T_c(1) = T_c^{\text{puro}})$ indicados nas Figs. 2.4.2.1a e 2.4.2.1b. No



Figs. 2.4.2.1 - Fronteira crítica para (P) - ferromagnética (F)(qualitativa) para modelos de Ising com ligações diluídas "quenched" para (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. Os pontos A e B correspondem respectivamente aos pontos fixos da percolação pura e do Ising puro; C corresponde ao ponto fixo randômico. As setas indicam os sentidos dos fluxos esperados.

ponto A, a tangente é infinita devido ao fato de aparecer um "gap" entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado no espectro de magnons, e conseqüentemente deveríamos esperar para baixas temperaturas um comportamento assintótico $e^{-cte/T_c} \sim cte(p-p_c)$. Este ponto A é um ponto multicrítico-

χ_c (206); a transição é do tipo percolativa ou térmica conforme nos aproximamos do ponto A ao longo do caminho $T = 0$ ou do caminho $p = p_c$ respectivamente. Para $p \sim p_c$ e $T \sim 0$ existe um "crossover" do regime percolativo para um regime crítico térmico. Várias formas de escala para o "crossover" foram propostas (206, 207, 101, 208). Wallace e Young (209) mostraram rigorosamente que o expoente de "crossover" ϕ (definido por $\chi k_B T = |p - p_c|^{-\gamma} p^A \{e^{-2J/k_B T} / (p - p_c)^\phi\}$ onde χ é a susceptibilidade magnética, a qual está relacionada com $S(p)$ em $T=0$ através de $\chi k_B T = S(p)$) é igual a 1 concordando com suposições anteriores "ad hoc". Quanto ao ponto B (ferromagneto puro), o comportamento para $p \sim 1$ é linear porque trata-se essencialmente de um problema com uma ligação ausente (o que não implica que $T_c(p)$ seja uma função analítica em $p=1$ (199)), e espera-se que no limite $p \rightarrow 1$:

$$T - T_c(1) \sim a(1-p) + b(1-p)^{2+x} \quad (2.4.2.2)$$

onde a, b são constantes e x é eventualmente não-nulo.

Uma questão de fundamental importância refere-se à variação dos expoentes críticos ao longo da fronteira crítica. Para $p = p_c$ existe um conjunto de expoentes críticos (α_p, β_p , etc) característicos da percolação que são diferentes do conjunto (α_t, β_t , etc) relativo ao modelo de Ising puro ($p = 1$). Para $p_c < p < 1$, Harris (210) sugeriu, usando argumentos gerais, que o conjunto de expoentes críticos é o mesmo que o de Ising puro se $\alpha_t < 0$, enquanto que se $\alpha_t > 0$ então aparece um novo conjunto de expoentes críticos associados a um ponto fixo ran-

dômico representado por C na Fig. 2.4.2.1b; para o caso marginal $\alpha_t = 0$ o critério de Harris é inconclusivo. O critério de Harris pode ser obtido também⁽²¹¹⁾ pelo método das réplicas⁽²¹²⁾ combinado com argumentos de escala; tal análise fornece que o expoente de "crossover" correspondente a uma perturbação associada à aleatoriedade é dado por $\phi = \alpha_t/\nu_t$ (onde α_t e ν_t estão associados ao modelo de Ising puro). Uma vez que $\alpha_t > 0$ ⁽¹⁵⁸⁾ para o modelo de Ising tridimensional, deveríamos obter, em termos de GR, uma linha crítica com os fluxos nos sentidos indicados na Fig. 2.4.2.1b. Quanto ao modelo de Ising diluído bidimensional (onde $\alpha_t = 0$), simulações Monte Carlo^(213, 214, 215, 216) são consistentes com a Fig. 2.4.2.1a onde o ponto fixo correspondente ao Ising puro é estável com respeito à aleatoriedade.

A fronteira crítica para-ferromagnética $T_c(p)$ do modelo de Ising com ligações diluídas "quenched" não é conhecida exatamente em redes regulares; no entanto, soluções *exatas* foram obtidas para pseudo-redes tais como a rede de Bethe⁽²¹⁷⁾ e cacto^(218, 219). No entanto, alguns resultados exatos são conhecidos tais como os pontos críticos e suas derivadas^(210, 220, 221) nos pontos extremos $T_c(1)$ e $T_c(p_c) = 0$, bem como limites superiores e inferiores para $T_c(p)$ ⁽²²²⁾. Vários resultados aproximados para a fronteira crítica foram obtidos mediante diversas técnicas tais como expansões em séries^(210, 223), Monte Carlo^(224, 213), método variacional⁽²²⁵⁾, interações efetivas^(226, 227, 228), argumentos de dualidade e/ou método das réplicas^(229, 220, 230) e grupo de renormalização^(231, 44, 232, 233, 234, 235, 236).

2.4.3 - Diagrama de Fase de Ferromagnetos de Potts com Ligações Randômicas "Quenched"

A fronteira crítica exata do modelo de Potts com ligações randômicas "quenched" em redes regulares não é conhecida ; no caso de redes de Bethe, Southern e Thorpe⁽²³⁷⁾ calcularam a fronteira exata para o modelo diluído, cuja extensão para ligações com uma distribuição de probabilidade $\mathbb{P}(J_{ij})$ qualquer foi conjecturada por de Magalhães e Tsallis⁽²³⁸⁾ (vide eq.(5.4.6.2)). Apesar da relação de dualidade ter sido estabelecida rigorosamente^(237, 200) para o modelo de Potts bidimensional com ligações randômicas "quenched", esta relação não é suficiente para se determinar a fronteira crítica do ferromagneto de Potts "quenched" com ligações mistas (onde a cada ligação está associada uma distribuição de probabilidades independente $P(J_{ij}) = p\delta(J-J_1) + (1-p)\delta(J-J_2)$; $J_1 \geq 0, J_2 \geq 0$) na rede (auto-dual) quadrada ; mas no caso $p = 1/2$ a invariância por permutação $J_1 \leftrightarrow J_2$ junto com a relação de dualidade permite calcular o ponto crítico *exato* obtido primeiramente por Fisch⁽²³⁹⁾ para $q = 2$ e estendido posteriormente por Kinzel e Domany⁽²¹¹⁾ para qualquer valor de q . Apesar desta fronteira crítica não ser conhecida exatamente para qualquer p , Levy et al.⁽²³⁴⁾ fizeram, para $q=2$, uma proposta numérica com uma ótima precisão e que satisfaz todos os resultados exatos conhecidos. No caso mais geral de um ferromagneto de Potts em rede quadrada anisotrópica com distribuições arbitrárias de probabilidades $P(J_{ij})$ para as ligações horizontais e $P'(J_{ij})$ para ligações verticais, Tsallis⁽²⁴⁰⁾ propôs, como aproximação muito acurada para sua fronteira crítica, uma forma analítica que contém vários resultados exatos como casos

particulares. Recentemente Tsallis⁽²⁴¹⁾ estendeu essa proposta para a rede triangular anisotrópica.

No caso de ferromagnetos de Potts bidimensionais com ligações diluídas "quenched", espera-se um comportamento qualitativo para $T_c(p)$ do tipo esquematizado na Fig. 2.4.3.1. No-

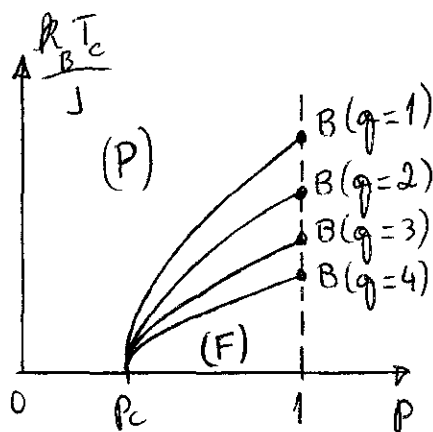


Fig. 2.4.3.1 - Gráfico esquemático da fronteira crítica para (P)-ferromagnética (F) do ferromagneto de Potts com ligações diluídas "quenched" para valores diferentes de q . p_c é a probabilidade crítica de percolação.

te que aumentar o valor de q corresponde a diminuir as interações ferromagnéticas "efetivas" (pois a probabilidade de termos em sítios vizinhos $\sigma_i = \sigma_j$ diminui) e conseqüentemente $T_c(p)$ decresce. As mesmas considerações que fizemos sobre o modelo de Ising ($q=2$) diluído valem também para qualquer valor de q : para $T_c \rightarrow 0$ temos um comportamento assintótico da forma $e^{-qJ/k_B T_c} \sim c(p-p_c)$ (onde $c = \ln q [p_c(q-1)]^{-1}$ foi calculado exatamente, para $d = 2$, por Southern e Thorpe⁽²³⁷⁾) e para $p \rightarrow 1$ $T_c(p)$ apresenta um comportamento linear (Southern e Thorpe⁽²³⁷⁾ obtiveram exatamente, para $d=2$, $[\overline{T_c}(1)]^{-1} (dT_c/dp)_{p=1} = p_c / [K_c(1-p_c)\epsilon_c]_{p=1}$ onde $K_c = qJ/k_B T_c$ e $\epsilon_c = N_b^{-1} \partial(\ln Z) / \partial K$ representa essencialmente a energia interna por ligação; N_b é o número de ligações da rede). Outrossim, o argumento de escala formulado para o ponto multicrítico A ($T_c=0$) foi estendido por Lubensky⁽²⁴²⁾ para qualquer valor de q . Wallace e Young⁽²⁰⁹⁾ mostraram rigorosamente que o expoente de "crossover" ϕ é igual a 1 para o modelo de Potts contínuo no limite $q \rightarrow 1$. Coniglio⁽²⁴³⁾

provou, através de um procedimento de renormalização que é exato perto de $T = 0$, que $\phi = 1 \forall q \forall d$. Uma vez que nos modelos de Potts puros bidimensionais $\alpha_t > 0$ para $q = 3$ e $q = 4$, espera-se, de acordo com o critério de Harris, que os comportamentos críticos dos sistemas diluídos para $q = 3$ e 4 sejam diferentes dos comportamentos dos sistemas puros correspondentes (ou seja, os fluxos dos diagramas $T_c \times p$ são do mesmo tipo da Fig. 2.4.2.1b): isto foi verificado recentemente por cálculos de GR no espaço real^(244,211). Este modelo foi estudado também pela "aproximação de interação efetiva"⁽²⁴⁵⁾ que corresponde⁽²⁰⁰⁾ à solução do modelo "annealed".

2.5 - CONCLUSÕES

Conforme vimos, a teoria de percolação estuda as propriedades geométricas de "clusters" dos objetos de um sistema, fornecendo um modelo matemático bem definido e intuitivamente satisfatório para fenômenos espacialmente randômicos. Por outro lado, a formação de "clusters" de átomos magnéticos vizinhos que estão no mesmo estado desempenham papel fundamental no estabelecimento da ordem magnética de longo alcance nos ferromagnetos diluídos de Potts. A distribuição destes "clusters" depende das interações entre os átomos e da temperatura que atua desfavorecendo a ordem: há, portanto, uma mistura de aspectos térmicos com geométricos. Mas no caso particular de temperatura nula, deparamo-nos com um problema puramente de geometria aleatória característico da percolação. Além desta co-

nexão com o ferromagneto de Potts diluído, vimos também que existe um isomorfismo entre o problema de percolação e o modelo de Potts puro no limite de $q \rightarrow 1$. Portanto vemos, claramente, que os modelos de percolação e de Potts (que inclui o modelo de Ising como caso particular) puro ou diluído estão muito interligados.

PERCOLAÇÃO ISOTRÓPICA EM REDES
HIPERCÚBICAS ($d = 2, 3, 4$)

3.1 - INTRODUÇÃO

Conforme vimos no capítulo anterior, após os artigos pioneiros de Harris et al. ⁽¹⁰⁴⁾ (expansão em $\varepsilon \equiv 6-d$) e de Young e Stinchcombe ⁽¹³³⁾ (GR no espaço real), sucederam-se um grande número de trabalhos de GR aplicados à percolação. Em particular, em vários deles (Young e Stinchcombe ⁽¹³³⁾, Kirkpatrick ⁽¹³⁶⁾, Reynolds et al. ^(142,124,146), Bernasconi ⁽¹⁴³⁾, Shapiro ⁽⁶¹⁾, Tsallis e Schwachheim ⁽¹⁴⁴⁾, Chaves et al. ⁽¹⁴⁵⁾, Nakanishi e Reynolds ⁽⁵⁹⁾, de Magalhães et al. ^(126,63), Riera et al. ⁽²⁴⁶⁾, Oliveira et al. ⁽²⁴⁷⁾, Nakanishi et al. ⁽²⁴⁸⁾) a renormalização é feita diretamente sobre as probabilidades de ocupação sem utilizar a formulação de Kasteleyn e Fortuin ⁽³¹⁾. Neste capítulo estudamos, através de uma linha de raciocínio similar a de Reynolds et al. ⁽¹⁴²⁾, o problema de percolação de ligações em redes hipercúbicas d -dimensionais ($d = 2, 3, 4$) e em redes quadradas com ligações entre primeiros e segundos vizinhos (ligações estas assumidas terem a mesma probabilidade de ocorrência).

3.2 - MÉTODO DE GR UTILIZADO

3.2.1 - Descrição do Método

O procedimento de GR no espaço real que utilizamos consiste em:

i) fazer uma partição da rede em células (cujos tamanhos são caracterizados por um comprimento linear b), vale dizer, escolher a célula que será renormalizada numa célula menor;

ii) escolher os terminais, ou seja, as entradas e saídas (as quais indicamos por setas: veja Figs. 3.3.1.1.1, 3.3.1.2.1, Figs. 2 e 4 do Apêndice A) da célula maior, definindo assim a direção da percolação considerada;

iii) associar à célula maior (cujas ligações têm probabilidades de ocupação independentes p) um polinômio $R_b(p)$ que representa a probabilidade desta célula percolar. $R_b(p)$ é da seguinte forma:

$$R_b(p) = \sum_{i=0}^{n_b} A_b^{(i)} p^i (1-p)^{n_b-i} = \sum_{i=0}^{n_b} B_b^{(i)} p^i \quad (3.2.1.1)$$

onde o grau n_b do polinômio é igual ao número de ligações relevantes^(*) da célula e o coeficiente $A_b^{(i)}$ é o número de configurações percolantes com i ligações relevantes presentes e (n_b-i) ligações relevantes ausentes.

(*)

Por exemplo, a célula da Fig.3.3.1.1.1b tem 8 ligações, mas somente 5 são relevantes para a percolação na direção indicada.

iv) escolher uma nova célula (usualmente do mesmo tipo), com dimensões lineares $b' < b$, que representa a célula original renormalizada;

v) escolher as entradas e saídas da célula menor;

vi) associar, similarmente ao item (iii), à célula menor (cuja ligações têm probabilidades independentes p') um polinômio $R_{b'}(p')$ cuja expressão analítica é análoga à eq. (3.2.1.1);

vii) definir a transformação de GR que renormaliza a célula maior numa célula menor através de:

$$R_{b'}(p') = R_b(p) \quad (3.2.1.2)$$

Com esta transformação dilatamos então o parâmetro de rede a (que é tomado como unidade de comprimento da rede) de um fator b/b' (chamado de fator de expansão ou de reescalonamento).

Portanto nesta transformação, a substituição de células maiores por células menores corresponde a fazer uma "mê - dia", no sentido de renormalização, sobre regiões de dimensões lineares b . Obviamente há várias maneiras (vide, por exemplo, Tsallis e Schwachheim⁽¹⁴⁴⁾) de se definir esta "mêdia" (isto é, de escolher a forma, o tamanho e os terminais da célula) preservando a conectividade local; uma célula é tanto melhor quanto mais ela simule a rede, ou seja, quanto mais elementos de simetria da rede ela contiver e quanto maior for seu tamanho. Os resultados obtidos para grandes "clusters" ou extrapolados para $b \rightarrow \infty$ não dependem da definição precisa da "mêdia"; mas a rapidez de convergência para o resultado final corresponden-

te ao limite $b \rightarrow \infty$ depende desta definição⁽¹⁴⁶⁾. Esta transformação de GR com um único parâmetro é obviamente uma aproximação (chamada de aproximação de "célula independente" ou de "uma única célula") pois o problema renormalizado é muito mais complicado que o problema original, sendo eventualmente necessário introduzir mais parâmetros para especificá-lo bem. Por exemplo, não é levado em conta os possíveis ganhos ou perdas de caminhos conexos entre células no processo de renormalização. Uma análise detalhada deste problema é feita, por exemplo, em Shapiró⁽⁶¹⁾ e Reynolds et al.⁽¹⁴⁶⁾.

Vejamos, a seguir, como podemos calcular a probabilidade crítica p_c e certos expoentes críticos a partir da transformação (3.2.1.2).

3.2.2 - Cálculo de p_c e y_p

Podemos obter uma aproximação para p_c através do ponto fixo ($p^* = p' = p$) instável $p^*(b, b')$ da transformação (3.2.1.2). Este ponto é, portanto, uma raiz não trivial ($p^* \neq 0, 1$) da seguinte equação:

$$R_{b'}(p^*) = R_b(p^*) \quad . \quad (3.2.2.1)$$

Repetindo-se este cálculo para células cada vez maiores e extrapolando-se convenientemente para $b \rightarrow \infty$ ($\forall b'$) podemos então obter p_c com grande precisão (vide por exemplo, Reynolds et al.^(124, 146)) através de:

$$p_c = \lim_{b \rightarrow \infty} p^*(b, b') \quad \forall b' \quad . \quad (3.2.2.2)$$

Vejamos agora como se obtem a potência de escala y_p . A equação (3.2.1.2) expressa como o parâmetro p se transforma mediante a seguinte dilatação da unidade de comprimento a

$$a \rightarrow a' = (b/b')a \quad (3.2.2.3)$$

Portanto as distâncias r medidas em termos do novo parâmetro de rede são reduzidas de acordo com

$$r \rightarrow r' = \frac{r}{(b/b')} \quad (3.2.2.4)$$

e, em particular:

$$\xi_p \rightarrow \xi'_p = \frac{\xi_p}{(b/b')} \quad (3.2.2.5)$$

Perto do ponto fixo $p^*(b,b')$ temos que

$$\xi_p \sim |p-p^*|^{-\nu_p} \rightarrow \xi'_p \sim |p'-p^*|^{-\nu_p} = \frac{|p-p^*|^{-\nu_p}}{(b/b')} \quad (3.2.2.6)$$

que leva a

$$\left. \frac{dp'}{dp} \right|_{p^*(b,b')} = (b/b')^{1/\nu_p} = (b/b')^{y_p} \quad (3.2.2.7)$$

Por outro lado $(dp'/dp)_{p=p^*}$ pode ser obtido a partir da linearização da transformação (3.2.1.2) em torno do ponto fixo $p^*(b,b')$ fornecendo então a seguinte aproximação para y_p :

$$y_p(b,b') = \frac{\ln \lambda_p(b,b')}{\ln(b/b')} \quad (3.2.2.8a)$$

onde

$$\lambda_p(b, b') \equiv \left. \frac{dp'}{dp} \right|_{p^*(b, b')} = \left[\begin{array}{c} \frac{dR_b(p)}{dp} \\ \frac{dR_{b'}(p')}{dp'} \end{array} \right]_{p^*(b, b')} \quad (3.2.2.8b)$$

Finalmente, usando extrapolações convenientes para $b \rightarrow \infty$, podemos obter y_p com boa precisão (vide, por exemplo, Reynolds et al. (146)) através de

$$y_p = \lim_{b \rightarrow \infty} y_p(b, b') \quad (\forall b') \quad (3.2.2.9)$$

3.2.3 - Cálculo de y_h

Conforme vimos na subseção 2.1.4, para calcularmos a potência de escala y_h introduz-se um sítio "fantasma" exterior à rede que se liga a todos os sítios da rede por "ligações fantasmas" com probabilidades de ocupação independentes h . Em nível de células de tamanhos finitos, devemos então acrescentar a cada célula correspondente a $h = 0$ ligações fantasmas que contêm somente os sítios que não pertencem a células vizinhas. Neste caso, o GR fica definido pelas seguintes relações:

$$\begin{aligned} R_{b'}(p', h') &\equiv R_{b'}(p', 0) + h'^2 \tilde{R}_{b'}(p', h') = \\ &= R_b(p, h) \equiv R_b(p, 0) + h^2 \tilde{R}_b(p, h) \end{aligned} \quad (3.2.3.1a)$$

$$Q_{b'}(p', h') \equiv h' \tilde{Q}_{b'}(p', h') = Q_b(p, h) \equiv h \tilde{Q}_b(p, h) \quad (3.2.3.1b)$$

$R_b(p, h) (R_{b'}(p', h'))$ é a probabilidade de atravessarmos a célula

la maior (menor) ou pelos caminhos percolantes anteriores correspondentes a $h = 0$ ou por caminhos que partindo da célula chegam ao ponto fantasma e saem pela célula (contém, portanto, no mínimo duas ligações fantasmas - daí os fatores explícitos h^2 e h'^2 que aparecem nas eqs. (3.2.3.1)). $Q_b(p,h)(Q_b(p',h'))$ é a probabilidade de atingirmos o ponto fantasma partindo de pontos escolhidos da célula maior (menor); como todos caminhos possíveis contém pelo menos uma ligação fantasma, explicitamos o fator h em Q_b (e h' em Q_b').

Vê-se claramente das eqs. (3.2.3.1) que este sistema de equações reduz-se, para $h = h' = 0$, à eq. (3.2.1.2) e que $(p^*(b,b'), h^* = 0)$ é ponto fixo deste par de transformações. A linearização destas equações em torno deste ponto fixo fornece uma matriz Jacobiana $\left. \frac{\partial(p',h')}{\partial(p,h)} \right|_{p^*,0}$ cujos elementos não diagonais são nulos. Conseqüentemente seus auto-valores são $(\partial p'/\partial p)_{p^*,0} \equiv \lambda_p(b,b')$ e $(\partial h'/\partial h)_{p^*,0} \equiv \lambda_h(b,b')$; seus respectivos auto-vetores são horizontal e vertical no plano $p-h$. Em outras palavras, as eqs. (3.2.3.1a) e (3.2.3.1b) se *desacoplam* ao serem linearizadas em torno do ponto $(p^*(b,b'), h^* = 0)$ da seguinte maneira:

$$(p' - p^*) = \lambda_p (p - p^*) \quad (3.2.3.2a)$$

$$h' = \lambda_h h \quad (3.2.3.2b)$$

onde λ_p é o *mesmo* auto-valor $\lambda_p(b,b')$ (definido em (3.2.2.8b)) do problema de percolação sem sítio "fantasma" e $\lambda_h(b,b')$ pode ser calculado simplesmente a partir da eq. (3.2.3.1b) como:

$$\lambda_h(b,b') \equiv \left. \left(\frac{\partial h'}{\partial h} \right)_{p^*(b,b'), h^*=0} \right|_{p^*(b,b')} = \frac{\tilde{Q}_b(p,0)}{\tilde{Q}_b(p',0)} \Big|_{p^*(b,b')} \quad (3.2.3.3)$$

Das eqs. (3.2.3.2) segue-se que as aproximações para as escalas de potência (definidas por $\lambda_x = (b/b')^{y_x}$; $x = p, h$) associadas aos campos de escala ($p-p^*$) e h são dadas respectivamente por (3.2.2.8a) e por:

$$y_h(b, b') = \frac{\ln \lambda_h(b, b')}{\ln (b/b')} \quad . \quad (3.2.3.4)$$

Uma estimativa do verdadeiro valor de y_h pode então ser feita através de uma fórmula semelhante à eq. (3.2.2.9).

3.3 - APLICAÇÕES DO MÉTODO

3.3.1 - Rede Quadrada com Ligações Entre Primeiros Vizinhos

3.3.1.1 - Cálculo de y_p

Nesta seção vamos aplicar o método descrito à rede quadrada. Escolhemos a família de células auto-duais (vide Fig. 3.3.1.1.1) que são generalizações diretas do "cluster" de forma H ("ponte de Wheatstone", veja Bernasconi⁽¹⁴³⁾) introduzido por Reynolds et al.⁽¹⁴²⁾.

Há duas maneiras possíveis de cálculo dos polinômios associados $R_b(p')$ e $R_b(p)$ (vide eq. (3.2.1.1)), a saber:

(i) examina-se todas as configurações (em número de 2^{n_b}); somente as configurações percolantes contribuem para os coeficientes $A_b^{(i)}$ (método este utilizado, por exemplo, por Reynolds et al.⁽¹⁴²⁾);

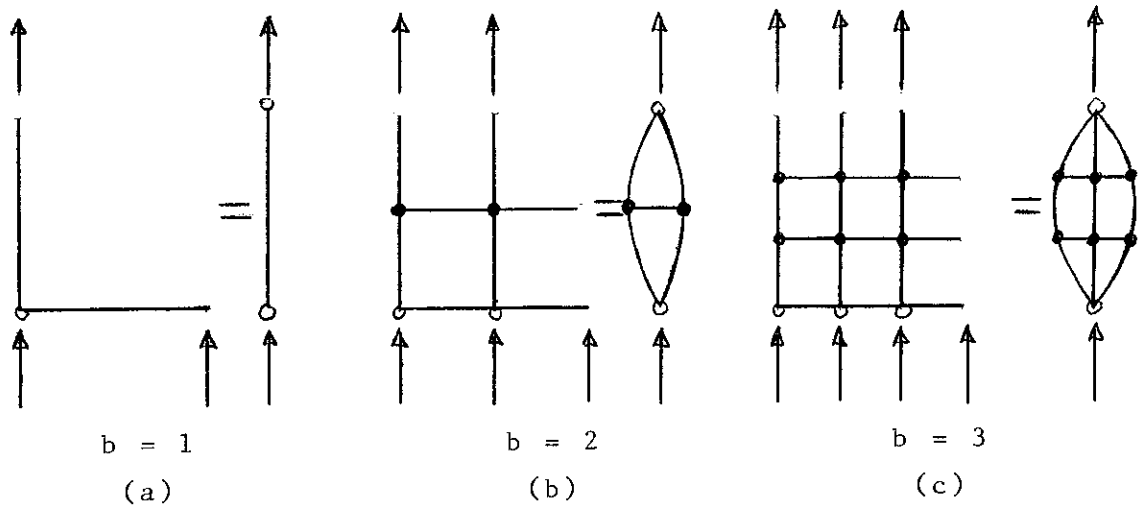


Fig. 3.3.1.1.1 - Células quadradas auto-duais com comprimentos lineares (a) $b = 1$; (b) $b = 2$; (c) $b = 3$ e seus respectivos grafos. As setas indicam as entradas e saídas para percolação vertical. Círculos abertos (fechados) denotam os nós terminais (internos) dos grafos.

(ii) obtêm-se os coeficientes $B_p^{(i)}$ através da regra de eliminação - contração (vide Tsallis⁽²⁴⁹⁾ e referências internas; as fórmulas utilizadas estão resumidas no Apêndice 1 do Apêndice B) aplicada aos grafos correspondentes. Estes grafos são obtidos eliminando-se as ligações irrelevantes e colapsando-se as entradas num único ponto (nó terminal) e as saídas num outro ponto (nó terminal) (vide Fig. 3.3.1.1.1).

Utilizando um programa de computação baseado no método (ii) obtivemos as funções (exatas) $R_b(p)$ para $b = 2, 3, 4$ (os gráficos $R_b(p)$ para $2 \leq b \leq 5$ podem ser vistos na Fig. 2 de Oliveira et al.⁽²⁴⁷⁾; $R_2(p)$ coincide com a eq. (12) da referência (142), e $R_3(p)$ está explicitado na eq. (5) do Apêndice A).

Os coeficientes $A_b^{(i)}$ de $R_b(p)$ satisfazem a seguinte relação:

$$A_b^{(i)} + A_b^{(n_b - i)} = \frac{n_b!}{i!(n_b - i)!} \quad (\forall i, \forall b) \quad (3.3.1.1.1)$$

que decorre da auto-dualidade da família de "clusters" escolhida. Isto faz com que todos os gráficos $R_b(p)$ versus p sejam centro-simétricos em relação ao ponto $(1/2, 1/2)$. Portanto, esta família de células representa muito bem a rede quadrada, uma vez que o ponto fixo $p^*(b, b')$ é igual ao valor exato $p_c = 1/2$ quaisquer que sejam b e b' . Os valores encontrados exatamente para $v_p(b, 1)$ são $v_p(2, 1) \approx 1.428$ (igual ao de Reynolds et al. ⁽¹⁴²⁾), $v_p(3, 1) \approx 1.380$ (igual ao de Bernasconi ⁽¹⁴³⁾) e $v_p(4, 1) \approx 1.363$. Oliveira et al. ⁽²⁴⁷⁾ obtiveram independentemente os mesmos resultados, bem como $v_p(5, 1) \approx 1.355$.

Para cálculos maiores ($5 \leq b \leq 15$) utilizamos um método Monte Carlo, que consiste essencialmente em colocar cada coeficiente $A_b^{(i)}$ do polinômio $R_b(p)$ (eq. (3.2.1.1)) na seguinte forma:

$$A_b^{(i)} = r_b^{(i)} \frac{n_b!}{i!(n_b-i)!} \quad (3.3.1.1.2)$$

onde $r_b^{(i)}$ pode ser interpretado como a probabilidade de um "cluster" (de dimensão linear b) percolar com i ligações presentes (portanto com $n_b - i$ ligações ausentes; para a família de células escolhida n_b é igual a $b^2 + (b-1)^2$) distribuídas aleatoriamente. A aproximação Monte Carlo é introduzida então ao substituirmos $r_b^{(i)}$ pela frequência de configurações percolantes satisfazendo as condições mencionadas logo acima. Trabalhamos para todos os valores de b considerados (não somente para a rede quadrada, como também para a rede quadrada com ligações entre primeiros e segundos vizinhos e para a rede cúbica simples, as quais serão apresentadas nas subseções 3.3.2 e 3.3.3) com um número total N_b de realizações Monte Carlo da ordem de $N_b n_b \geq 10^6$

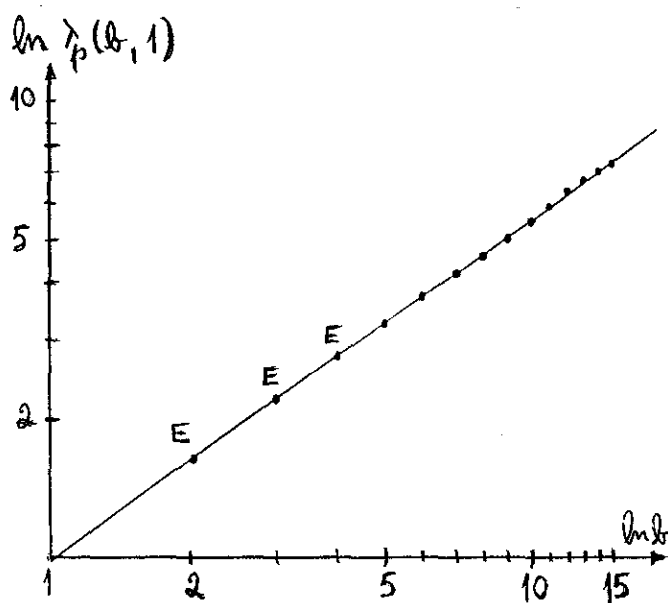
(limitação de tempo computacional). Sempre que era possível comparamos os resultados Monte Carlo com os exatos, as discrepâncias observadas eram pequenas. Para obtermos uma estimativa para o verdadeiro valor de y_p (correspondente a $b \rightarrow \infty$) seguimos um método de extrapolação (Fisher⁽²⁵¹⁾, Reynolds et al.⁽¹²⁴⁾), onde y_p é suposto satisfazer assintoticamente a seguinte relação:

$$\ln \lambda_p(b,1) = y_p \ln b - c \quad (3.3.1.1.3)$$

ou equivalentemente

$$y_p = y_p(b,1) + c/\ln b \quad (3.3.1.1.3')$$

Fig. 3.3.1.1.2 - Gráfico log-log de $\lambda_p(b,1)$ versus b ($2 \leq b \leq 15$) para a rede quadrada. Os resultados obtidos exatamente estão indicados (E).



Fazendo-se, então, o gráfico de $\ln \lambda_p(b,1)$ vs $\ln b$ (vide Fig.3.3.1.1.2) obtivemos $y_p = 0.7496 \pm 0.0064$; enquanto que através de um gráfico de $y_p(b,1)$ vs $(\ln b)^{-1}$ obteríamos (vide eq.(3.3.1.1.3')) $y_p = 0.7524 \pm 0.0096$. Nossa proposta é então:

$$y_p = 0.751 \pm 0.008 \quad (3.3.1.1.4)$$

que leva a:

$$v_p = 1.332 \pm 0.014 \quad (3.3.1.1.5)$$

Este valor de y_p está em excelente acordo com a conjectura de Den Nijs⁽¹⁹⁵⁾ ($y_p^{\text{Nijs}} = 3/4$) que é muito provavelmente⁽²⁸⁾ o resultado exato.

3.3.1.2 - Cálculo de y_h

Ao acrescentarmos um sítio fantasma à rede, as células da Fig. 3.3.1.1.1 transformam-se, para $b=1$ e 2 , nas células desenhadas na Fig. 3.3.1.2.1. Para a construção dos poli

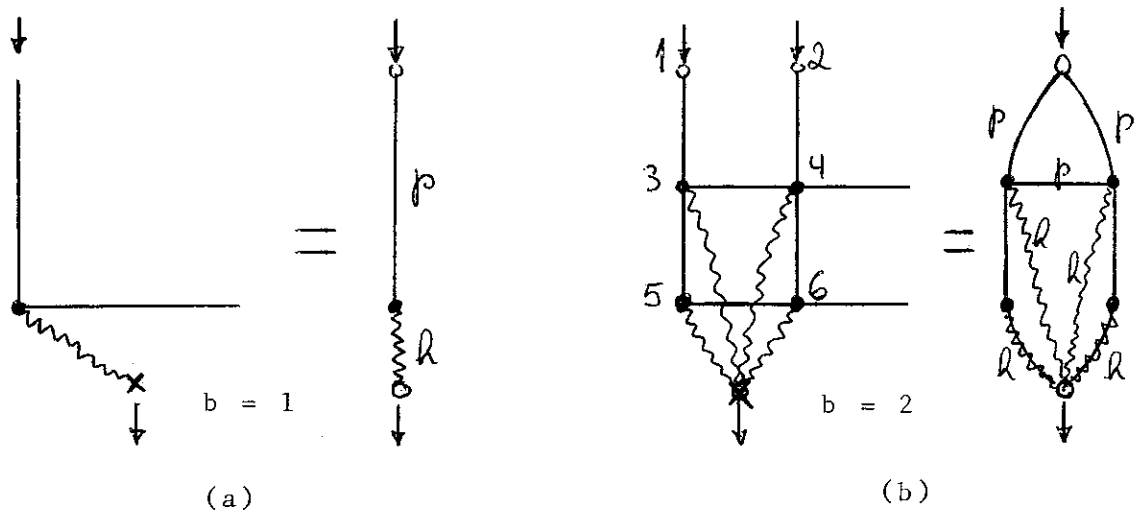


Fig. 3.3.1.2.1 - Células de tamanhos lineares $b = 1$ (a) e $b = 2$ (b) com sítio "fantasma" (representados por (x)) e seus respectivos grafos. As linhas onduladas representam as ligações "fantasmas", cada uma com probabilidade de ocupação independente h . As entradas e a saída utilizadas na construção de $Q_b(p,h)$ estão indicadas por setas.

nômios $Q_b(p,h)$ e $Q_b(p',h')$ (vide eq. (3.2.3.1b)) correspondentes à situação na qual o sítio fantasma é um nó terminal de saída, escolhemos, para o caso $b = 2$, os sítios 1 e 2 como entradas (vide Fig. 3.3.1.2.1). Oliveira et al.⁽²⁴⁷⁾ escolheram os sítios 3, 5 e 6 e obtiveram outros resultados para $y_h(b,1)$ (vide Tab. 3.3.1.2.1).

Aplicando-se as fórmulas do Apêndice 1 do Apêndice B

Tabela 3.3.1.2.1 - Valores de $y_h(b,b')$ obtidos mediante a família de células da Fig. 3.3.1.2.1. Os valores entre parênteses referem-se aos resultados de Oliveira et al. (247).

$b \backslash b'$	1	2	3
2	1.907 (1.907)	—	—
3	1.963 (1.886)	2.060	—
4	1.982 (1.878)	2.058	2.056
propostas para y_h	$91/48 \approx 1.8958$ (196,197) 1.8947 ± 0.0042 (250) 1.898 ± 0.003 (124,146)	—	—

aos grafos da Fig. 3.3.1.2.1 encontramos as seguintes expressões para $Q_b(p,h)$:

$$Q_1(p,h) = ph \tag{3.3.1.2.1}$$

e

$$Q_2(p,h) = h \left[(2p+4p^2-2p^4) + h(-5p^2-6p^3+3p^4+2p^5) + h^2(6p^3+2p^4-4p^5) + h^3(-3p^4+2p^5) \right] . \tag{3.3.1.2.2}$$

Obtivemos também expressões exatas para $Q_3(p,h)$ e $\tilde{Q}_4(p,0)$, o que nos permitiu calcular $y_h(b,b')$ para $1 \leq b' < b \leq 4$ (vide Tabela 3.3.1.2.1)

Se fizéssemos gráficos de $\ln \lambda_h(b,b')$ vs $\ln(b/b')$ (veja Reynolds et al. (146)) para b' fixo ($b'=1$; $b'=2$) obteríamos retas (correspondendo, num ajuste de mínimos quadrados, a um

coeficiente de correlação linear 0.9999998 quando $b'=1$) cujos coeficientes angulares são 2.058 e 2.056 para $b'=1$ e $b'=2$ respectivamente; Oliveira et al. ⁽²⁴⁷⁾ obtiveram um coeficiente angular de 1.850. Nossos valores estão cerca de 8,5% acima do provável ⁽²⁸⁾ resultado exato $y_h = 91/48 \approx 1.8958\dots$ conjecturado independentemente por Nienhuis et al. ⁽¹⁹⁶⁾ e Pearson ⁽¹⁹⁷⁾, enquanto que o resultado de Oliveira et al. ⁽²⁴⁷⁾ está aproximadamente 2,4% abaixo. Estas discrepâncias resultam do fato dos valores de b utilizados estarem longe da região assintótica e, portanto, estes coeficientes angulares não representam os valores extrapolados de $y_h(b, b')$ para $b \rightarrow \infty$.

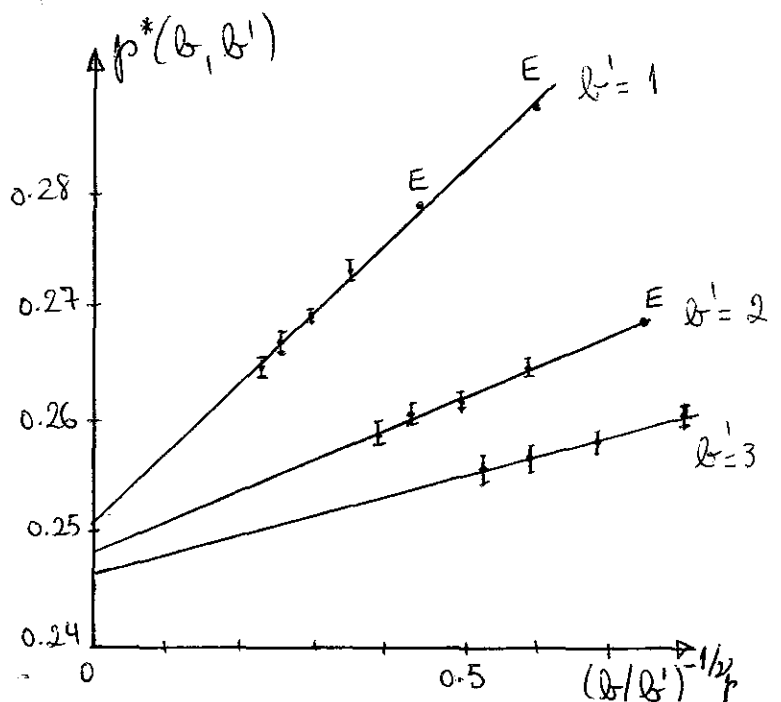
3.3.2 - Rede Quadrada com Ligações entre Primeiros e Segundos Vizinhos

Consideremos agora uma rede quadrada com ligações entre primeiros e segundos vizinhos, ambas ligações tendo a mesma probabilidade de ocupação independente p . Usamos uma família de células que generaliza a utilizada na Seção 3.3.1.1 (veja, por exemplo, na Fig. 2 do Apêndice A o caso $b=2$). Obtemos então para $R_b(p)$ as expressões exatas para $b \leq 3$ e expressões aproximadas Monte Carlo para $4 \leq b \leq 7$ (vide eqs.(7) e (8) do Apêndice A nos casos de $b=1$ e $b=2$). Os pontos fixos calculados exatamente são $p^*(2,1) \approx 0.2874$, $p^*(3,1) \approx 0.2786$ e $p^*(3,2) \approx 0.2688$. Para obtermos uma estimativa para p_c usamos um método de extrapolação baseado na teoria de escala para tamanhos finitos (Fisher ⁽²⁵¹⁾, Sur et al. ⁽¹²²⁾, Suzuki ⁽²⁵²⁾, Reynolds et al. ⁽¹⁴⁶⁾):

$$p_C - p^*(b, b') \sim \left(\frac{b}{b'}\right)^{-1/v_p} \quad (3.3.2.1)$$

Fazendo-se, então, um gráfico de $p^*(b, b')$ em função de $(b/b')^{-1/v_p}$ para b' fixo obtem-se uma reta cuja interseção $(b/b')^{-1/v_p} = 0$ nos dá uma extrapolação para p_C da rede considerada.

Fig. 3.3.2.1 - Gráficos de $p^*(b, b')$ em função de $(b/b')^{-1/v_p}$ (com $v_p = 4/3$) para a rede quadrada com 1^{os.} e 2^{os.} vizinhos. (E) indica um resultado obtido exatamente.



Gráficos deste tipo estão desenhados na Fig. 3.3.2.1 para $b' = 1, 2, 3$ e $v_p = 4/3$ (Den Nijs⁽¹⁹⁵⁾). Os resultados para $b' = 4$ e 5 não foram considerados uma vez que a imprecisão cometida na determinação do ponto de interseção entre os polinômios $R_b(p)$ e $R_{b'}(p)$ ($4 \leq b' < b \leq 7$), ambos sendo derivados por método Monte Carlo, é muito grande. Através de ajustes de mínimos quadrados obtivemos retas cujas interseções são 0.2510, 0.2484, 0.2465 para $b' = 1, 2, 3$ respectivamente. Tomando a média destes números chegamos à seguinte proposta para p_C :

$$p_C = 0.249 \pm 0.003 \quad (3.3.2.2)$$

a qual difere um pouco da nossa proposta inicial 0.250 ± 0.003 (de Magalhães et al. ⁽¹²⁶⁾) calculada com o valor 1.351 para v_p . Observamos que a estimativa de p_c que obtivemos aqui está em excelente acordo com o valor que conjecturamos ⁽²⁵³⁾ ($p_c = 0.249 \pm 0.011$) por outro método totalmente independente deste.

3.3.3 - Rede Cúbica Simples

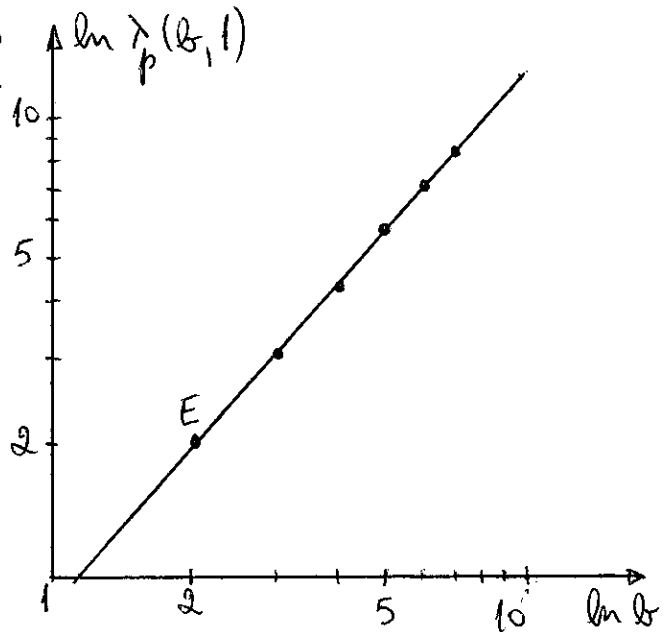
A família de "clusters" escolhida para rede cúbica simples é uma generalização direta para $d=3$ da família de células usada na Subseção 3.3.1.1; o caso $b=2$ está ilustrado no Apêndice A. Calculamos $R_b(p)$ exatamente para $b = 1, 2$ (a expressão de $R_2(p)$, bem como os valores de $p^*(2,1) = 0.2085$ e $v_p(2,1) = 1.031$ são idênticos aos obtidos por Bernasconi ⁽¹⁴³⁾) e por método Monte Carlo para $3 \leq b \leq 7$.

Na Fig. 3.3.3.1 fizemos o gráfico de $\ln \lambda_p(b,1)$ versus $\ln b$ (vide eq. (3.3.1.1.3) cuja extrapolação para $b \rightarrow \infty$ fornece:

$$v_p = 0.86 \pm 0.03 \quad (3.3.3.1)$$

Nossa estimativa para v_p coincide com a de Kirkpatrick ⁽¹⁰⁵⁾ e está acima de outros valores: 0.82 ± 0.05 (Dunn et al ⁽⁹⁹⁾), 0.845 ± 0.015 (Kirkpatrick ⁽⁴⁵⁾). Quanto ao cálculo de y_h , usamos grafos (correspondentes somente a $b=1, 2$) que são extensões diretas para $d = 3$ dos grafos mostrados na Fig. 3.3.1.2.1 e obtivemos, então, $y_h(2,1) = 2.739$.

Fig. 3.3.3.1 - Gráfico log-log de $\lambda_p(b,1)$ versus b para a rede SC. (E) indica um resultado obtido exatamente.



Na Fig. 3 do Apêndice A apresentamos o gráfico de $p^*(b,1)$ em função de b^{-1/v_p} para o valor de $v_p = 0.840$ que forneceu o melhor coeficiente de correlação linear (aproximadamente 0.9994) no ajuste de mínimos quadrados; para $v_p = 0.86$ obtem-se um gráfico indistinguível do anterior na escala utilizada. Quanto ao valor extrapolado, p_c permanece praticamente inalterado para uma variação considerável v_p ($0.79 \leq v_p \leq 0.89$). Nossa melhor proposta para p_c é então:

$$p_c = 0.2526 \pm 0.0013 \quad (3.3.3.1)$$

que está um pouco acima de outras estimativas: 0.247 ± 0.003 (Sykes et al. ⁽¹¹⁰⁾, Gaunt e Ruskin ⁽¹⁰⁷⁾), 0.2465 ± 0.0002 (Fisch ⁽²⁵⁴⁾), 0.2495 ± 0.0005 (Kirkpatrick ⁽⁴⁵⁾). Observe-se que nossa estimativa difere somente 1.2% do resultado de ⁽⁴⁵⁾ onde $b \leq 80$ e $N_b n_b \geq 10^8$.

3.3.4 - Rede Hipercúbica Quadri-Dimensional

No caso da rede hipercúbica simples a quatro dimensões, a família de células escolhida é do mesmo tipo que as famílias usadas para $d = 2,3$. Neste caso, calculamos apenas

$R_1(p)$ e $R_2(p)$ (a expressão exata de $R_2(p)$ é dada pela eq. (9) do Apêndice A) a partir dos quais obtivemos $p^*(2,1) = 0.1014$ e $v_p(2,1) = 0.932$. Nossa extrapolação ingênua (de Magalhães et al. ⁽¹²⁶⁾ - Apêndice A) para p_c usando resultados obtidos para $d = 2$ e 3 levam a uma estimativa $p_c = 0.149 \pm 0.010$ cerca de 7% inferior aos resultados de série 0.1600 ± 0.0002 (Fisch ⁽²⁵⁴⁾) e 0.161 ± 0.0015 (Gaunt e Ruskin ⁽¹⁰⁷⁾). Quanto ao valor de v_p ; nossa estimativa (Apêndice A) $v_p = 0.667 \pm 0.030$ proveniente de uma extrapolação do mesmo gênero está em bom acordo com o valor 0.66 ± 0.02 obtido por Kirkpatrick ⁽⁴⁵⁾.

3.3.5 - Simetria da Célula e Direção de Percolação

Com o intuito de averiguar como a simetria da célula básica influencia os resultados, calculamos, para a rede quadrada, p_c e v_p usando os "clusters" assimétricos desenhados nos quatro primeiros exemplos da Fig. 4 do Apêndice A. Observamos que os grafos associados com a primeira e a terceira células são duais (bem como os grafos associados com a segunda e quarta células) e, conseqüentemente, suas probabilidades renormalizadas satisfazem a relação (vide Apêndice 1 do Apêndice B ou mais detalhadamente Tsallis ⁽²⁴⁹⁾)

$$R_b(p) + R_{b_D}(1-p) = 1 \quad (3.3.5.1)$$

a partir da qual se segue que

$$p^*(b,1) + p_D^*(b_D,1) = 1 \quad (3.3.5.2)$$

e

$$\frac{v_p(b,1)}{v_p^D(b_D,1)} = \frac{\ln b}{\ln b_D} \quad (3.3.5.3)$$

onde D refere-se à célula dual; $b(b_D)$ é o comprimento linear entre os terminais da célula (célula dual).

Notamos também que uma percolação "vertical" na terceira célula (gerando uma probabilidade de ligação renormalizada p_V') corresponde a uma percolação "horizontal" na primeira célula (com uma probabilidade de ligação renormalizada p_H'), e vice-versa (o mesmo se aplica às quarta e segunda células).

Todos os quatro primeiros "clusters" violam a simetria global de rotação de 90° da rede quadrada. Comparando os resultados para a primeira e segunda (ou terceira e quarta) células, verificamos que $p^*(b,1)$ e $v_p(b,1)$ se aproximam dos valores esperados à medida que b cresce. Obviamente isto ocorre devido ao fato da quebra de simetria tornar-se mais "diluída" em células maiores. Para concluir vemos que os resultados da Fig. 4 do Apêndice A são notavelmente piores que os obtidos ($p^* = 1/2$, $v_p(2,1) = 1.428$, $v_p(3,1) = 1.380$) com células auto-duais e, portanto, o uso de células que preservam menos a simetria total da rede piora os resultados.

Os três últimos exemplos da Fig. 4 do Apêndice A referem-se à percolação numa direção inclinada. Os valores de $p^*(b,1)$ e $v_p(b,1)$ para $b = 2,3$ indicados nesta figura são consideravelmente piores que os valores obtidos através de células auto-duais e, além disso, convergem mais lentamente para os resultados conhecidos.

3.4 - CONCLUSÕES

Concluimos que o método de GR que utilizamos mostrou ser muito eficiente para percolação de ligações, tal como ocorreu no caso de percolação de sítios (Reynolds et al. ⁽¹⁴⁶⁾). Em particular, as células do tipo H generalizado, devido às suas auto-dualidades, são extremamente adequados à rede quadrada com ligações entre primeiros vizinhos, uma vez que fornecem o resultado exato $p_c = 1/2$ qualquer que seja o tamanho da célula e apresentam uma rápida convergência no que concerne a v_p .

Levando-se em conta que nossos resultados numéricos ($d = 2$ com ou sem ligações entre segundos vizinhos, e $d = 3$) para p_c e v_p foram obtidos mediante extrapolações de valores referentes a células de tamanhos relativamente pequenos ($b \leq 15$ no caso mais favorável), podemos dizer que nossas estimativas comparam bem com resultados de expansão em séries e de Monte Carlo aplicado a células muito grandes. No que concerne y_h , limitamo-nos a calcular $y_h(b, b')$ para células muito pequenas não permitindo pois extrapolações credíveis.

Nossa proposta $p_c = 0.249 \pm 0.003$ para rede quadrada com ligações entre primeiros e segundos vizinhos está em perfeito acordo com nossa conjectura para o modelo de Potts que exporemos no Capítulo 5 (a qual fornece para $q = 1$: $p_c = 0.249 \pm 0.011$); não existem, em nosso conhecimento, outras propostas disponíveis na literatura (o que não ocorre para percolação de sítios; veja, por exemplo, Essam ⁽⁵⁷⁾ e Kirkpatrick ⁽¹⁰⁵⁾).

Finalmente mostramos, através de vários exemplos, que células que respeitam pouco a simetria da rede, ou direções de percolação inconvenientes através delas, podem deteriorar seria

mente os valores numéricos bem como a velocidade de convergência do processo, apesar deles apresentarem as tendências corretas em todos os casos.

CAPÍTULO 4

PERCOLAÇÃO EM REDES PLANAS ANISOTRÓPICAS E "INOMOGÊNEAS"

4.1 - INTRODUÇÃO

Problemas de percolação anisotrópica têm sido estudados por vários métodos, tais como teoria de grafos (Sykes e Essam⁽⁵²⁾), expansões em séries (Redner e Stanley⁽⁶²⁾), métodos Monte Carlo (Sarychev e Vinogradoff⁽²⁵⁵⁾, Guyon et al.⁽²⁵⁶⁾), métodos de "sítio fantasma" (Turban⁽⁷⁹⁾) e GR (Lage⁽²⁵⁷⁾, Ikeda⁽²⁵⁸⁾, Turban⁽¹³⁸⁾, Chaves et al.⁽¹⁴⁵⁾, Nakaniishi et al.⁽⁶⁴⁾, Lobb et al.⁽²⁵⁹⁾, Oliveira⁽⁶⁵⁾).

Neste Capítulo estudamos, através de um formalismo de GR no espaço real do mesmo tipo que o descrito na Seção 3.2, percolação de ligações sem correlações em duas redes planas : (i) rede quadrada anisotrópica, (ii) rede 4-8 "inmogênea" (onde a palavra inmogênea significa que introduzimos duas probabilidades de ocupação diferentes p e q). Discutimos a fronteira crítica (FC) no espaço p - q , bem como o expoente crítico ν_p , associada com a rede quadrada anisotrópica através de dois métodos distintos de GR que chamaremos de canônico (GRC) e paramétrico (GRP). Finalmente, estudamos a rede 4-8 usando o método GRP e um procedimento de extrapolação conveniente; propomos também uma expressão analítica para sua fronteira crítica que

concorda muito bem com os resultados numéricos, podendo inclusive ser exata.

4.2 - REDE QUADRADA ANISOTRÓPICA

Vamos considerar uma rede quadrada com ligações entre primeiros vizinhos onde as probabilidades de ocupação independentes para as ligações "vertical" e "horizontal" são respectivamente p e q . Sua FC *exata* (que separa as regiões percolante da não-percolante) foi obtida pela primeira vez em 1963 por Sykes e Essam⁽⁵²⁾ mediante o uso da teoria de grafos:

$$p + q = 1 \quad . \quad (4.2.1)$$

Esta equação foi reobtida posteriormente por diversos outros métodos: expansão em séries (Redner e Stanley⁽⁶²⁾), dizimação autoconsistente num contexto de teoria de meio efetivo (Lage⁽²⁵⁷⁾), transformações de GR anisotrópicas usando como ponto de partida a rede quadrada isotrópica (Turban⁽¹³⁸⁾), GR no espaço real com células que se reduzem a uma *única* cadeia linear nos limites unidimensionais (Oliveira⁽⁶⁵⁾). Nesta Seção vamos apresentar os mencionados métodos GRC (que foi usado independentemente por Chaves et al.⁽¹⁴⁵⁾ e, entre outros métodos, por Nakanishi et al.⁽⁶⁴⁾) e GRP: ambos dão suporte à eq. (4.2.1).

O tratamento de GR no espaço real de um problema cujo espaço dos parâmetros (p,q) é bidimensional (estamos assumindo que o espaço dos parâmetros após a renormalização continua sen

do bidimensional – que é o caso de aproximações a uma célula aqui considerado) requer, evidentemente, duas relações recursivas geradas pela renormalização de uma célula apropriada numa outra menor. Em ambos métodos GRC e GRP, uma destas relações é obtida de uma forma similar à descrita no capítulo anterior. Assim sendo, considerando a percolação ao longo de uma direção, por exemplo, vertical e renormalizando uma célula de tamanho linear b numa menor de lado b' , chega-se, então, à seguinte equação (extensão direta da eq. (3.2.1.2)):

$$R_{b'}(p',q') = R_b(p,q) \quad (4.2.2)$$

onde $R_b(p,q)$ ($R_{b'}(p',q')$) representa a probabilidade dos dois terminais do grafo associado à célula maior (menor) estarem conectados. Escolhemos uma família de células do tipo H generalizado (vide Figs. 1(a) e 1(b) do Apêndice B onde estão desenhadas as células e seus respectivos grafos para $b=1$ e $b=2$ respectivamente); estas células foram utilizadas também por Chaves et al.⁽¹⁴⁵⁾ e num dos casos analisados por Nakanishi et al.⁽⁶⁴⁾.

Para completarmos o procedimento recursivo do GR precisamos de uma segunda relação do tipo

$$T_{b'}(p',q') = T_b(p,q) \quad (4.2.3)$$

cuja escolha é diferente para os métodos GRC e GRP.

4.2.1 - GR Canônico (GRC)

4.2.1 - GR Canônico (GRC)

No procedimento GRC a segunda relação é obtida considerando-se a percolação ao longo de outra direção da *mesma* célula considerada; no caso presente escolhemos a direção "horizontal", de onde se segue que:

$$T_b(p, q) = R_b(q, p) \quad (4.2.1.1a)$$

$$T_{b'}(p', q') = R_{b'}(q', p') \quad . \quad (4.2.1.1b)$$

O par de relações (4.2.2) e (4.2.3) com as escolhas (4.2.1.1) definem uma transformação de GR com dois parâmetros, cujas linhas de fluxo no espaço p-q permitem achar a fronteira crítica que procuramos. Para achar-se uma linha de fluxo procede-se da seguinte maneira:

- (i) escolhe-se um ponto qualquer (p_0, q_0) ;
- (ii) acha-se sua imagem (p'_0, q'_0) resolvendo o sistema de eqs. (4.2.2) e (4.2.3);
- (iii) faz-se $(p'_0, q'_0) = (p_1, q_1)$ e acha-se a imagem (p'_1, q'_1) deste novo ponto (p_1, q_1) ;
- (iv) repete-se este processo várias vezes até que cheguemos a um ponto fixo estável (onde sua imagem coincide com o próprio ponto);
- (v) a seqüência de pontos obtidos desta maneira constitui uma linha de fluxo.

Utilizamos o termo "canônico" porque este é o procedimento tradicional (Niemeyer e Van Leeuwen⁽²⁶⁰⁾, Young e Stinchcombe⁽¹³³⁾) no qual a fronteira crítica é dada pela linha di

visória (linha de fluxo que contém um ponto fixo semiestável) que separa regiões de fluxo diferentes; cada região de fluxo englobando todas as linhas de fluxo que chegam a um mesmo ponto fixo (vide como exemplo as regiões I, II, III e IV da Fig. 2 do Apêndice B). Portanto, este procedimento fornece uma aproximação *numérica* (e não uma expressão analítica para a FC) para a fronteira crítica; mas os pontos fixos, os expoentes críticos e as tangentes à FC nos pontos fixos podem ser calculados analiticamente. A linearização das eqs. (4.2.2) e (4.2.3) em torno de um ponto fixo (p^*, q^*) (onde $p^* = p' = p$ e $q^* = q' = q$) fornece uma matriz jacobiana $J(p^*, q^*)$ dada por:

$$J(p^*, q^*) \equiv \frac{\partial(p', q')}{\partial(p, q)} \Big|_{p^*, q^*} = \begin{pmatrix} \frac{\partial p'}{\partial p} & \frac{\partial p'}{\partial q} \\ \frac{\partial q'}{\partial p} & \frac{\partial q'}{\partial q} \end{pmatrix} \Big|_{p^*, q^*} \equiv \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} \\ j_{21} & j_{22} \end{pmatrix} \quad (4.2.1.2a)$$

onde

$$\frac{\partial p'}{\partial p} \Big|_{p^*, q^*} = \left\{ \frac{1}{\Delta} \left(\frac{\partial R_b}{\partial p} \frac{\partial T_{b'}}{\partial q'} - \frac{\partial R_{b'}}{\partial q'} \frac{\partial T_b}{\partial p} \right) \right\} \Big|_{p^*, q^*} \quad (4.2.1.2b)$$

$$\frac{\partial p'}{\partial q} \Big|_{p^*, q^*} = \left\{ \frac{1}{\Delta} \left(\frac{\partial R_b}{\partial q} \frac{\partial T_{b'}}{\partial q'} - \frac{\partial R_{b'}}{\partial q'} \frac{\partial T_b}{\partial q} \right) \right\} \Big|_{p^*, q^*} \quad (4.2.1.2c)$$

$$\frac{\partial q'}{\partial p} \Big|_{p^*, q^*} = \left\{ \frac{1}{\Delta} \left(\frac{\partial R_{b'}}{\partial p'} \frac{\partial T_b}{\partial p} - \frac{\partial R_b}{\partial p} \frac{\partial T_{b'}}{\partial p'} \right) \right\} \Big|_{p^*, q^*} \quad (4.2.1.2d)$$

$$\left. \frac{\partial q'}{\partial q} \right|_{p^*, q^*} = \left\{ \frac{1}{\Delta} \left(\frac{\partial R_{b'}}{\partial p'} \frac{\partial T_b}{\partial q} - \frac{\partial T_{b'}}{\partial p'} \frac{\partial R_b}{\partial q} \right) \right\}_{p^*, q^*} \quad (4.2.1.2e)$$

com

$$\Delta \Big|_{p^*, q^*} = \left\{ \frac{\partial R_{b'}}{\partial p'} \frac{\partial T_{b'}}{\partial q'} - \frac{\partial R_{b'}}{\partial q'} \frac{\partial T_{b'}}{\partial p'} \right\}_{p^*, q^*} \quad (4.2.1.2f)$$

O conhecimento dos auto-valores λ_1 e λ_2 e respectivos autovetores \vec{v}_1 e \vec{v}_2 da matriz Jacobiana calculada em um ponto fixo pertencente à fronteira crítica permite calcular grandezas críticas relevantes.

Os valores de λ_i dão a direção do fluxo em torno do ponto fixo: $\lambda_i > 1$ ($\lambda_i < 1$) significa que o ponto fixo é instável (estável) com respeito a perturbações na direção do autovetor \vec{v}_i . Quando $\lambda_1 > 1$ e $\lambda_1 > \lambda_2$ podemos obter uma aproximação para o expoente crítico ν_p através de $\nu_p(b, b') = \ln(b/b') / \ln \lambda_1$. Quando $\lambda_1 > 1$ e $\lambda_2 > 1$ o ponto fixo é totalmente instável e, portanto, haverá um "crossover" do comportamento do tipo, digamos, 1 (associado a λ_1) para o do tipo 2 (associado a λ_2). Neste caso, o expoente de "crossover" ϕ é dado por $\phi = y_2/y_1 = (\ln \lambda_2) / (\ln \lambda_1)$. Quanto ao cálculo da tangente à FC num dado ponto fixo, ela pode ser obtida, no caso em que $\lambda_1 > \lambda_2$, pelo coeficiente angular da direção do autovetor \vec{v}_2 .

Antes de vermos os resultados numéricos particulares, vejamos alguns resultados genéricos relacionados com a simetria deste problema particular. Primeiramente, notamos que, devido às igualdades (4.2.1.1) o sistema de relações recursivas (4.2.2) e (4.2.3) respeita a invariância por permutação $p \leftrightarrow q$ que o pro

blema físico apresenta. Esta propriedade reflete-se claramente no diagrama de fluxo que é simétrico em relação ao eixo $p=q$ (vide Fig. 2 do Apêndice B). Além disso, a propriedade fundamental de auto-dualidade da rede quadrada é automaticamente satisfeita pela escolha de células auto-duais (vide Apêndice 1 do Apêndice B; para maiores detalhes vide Tsallis⁽²⁴⁹⁾ e referências internas), e, portanto:

$$R_b(p,q) + R_b(1-p,1-q) = 1 \quad \forall b \quad \forall (p,q) \quad (4.2.1.3)$$

Esta relação implica imediatamente numa segunda simetria (no diagrama de fluxos), qual seja uma simetria pontual com respeito a $(p,q) = (1/2,1/2)$, que junto com a primeira simetria dá origem a um novo eixo de simetria determinado por $p+q = 1$ (vide Fig. 2 do Apêndice B).

A transformação de GR, com a qual estamos lidando, tem nove pontos fixos para quaisquer valores finitos de b e b' , a saber: o ponto $(1/2,1/2)$ que corresponde ao resultado exato do caso isotrópico, os pontos triviais $(0,0)$ e $(1,1)$, os pontos da cadeia linear $(0,1)$ e $(1,0)$ e 4 pontos dependentes de b e b' dados por $(p_0,0)$, $(1-p_0,1)$, $(0,p_0)$ e $(1,1-p_0)$ onde p_0 satisfaz (conforme a regra de contração-eliminação; vide Tsallis⁽²⁴⁹⁾ e refs. internas) a

$$(1-p_0^{b'})^{b'} - (1-p_0^b)^b = 0 \quad \forall (b,b') \quad (4.2.1.4)$$

A origem destes quatro pontos espúrios deve-se ao fato de as células escolhidas reduzirem-se, nos limites unidimensionais $(0,q)$ e $(p,0)$, a b cadeias lineares que se misturam nas extremidades (ao contrário da rede real que se reduz a cadeias *independentes* nestes limites). Isto origina, portanto,

uma superestimação da probabilidade renormalizada (vide Fig. 2 de Nakanishi et al. (64)) e, conseqüentemente, uma subestimação da real probabilidade crítica (que é igual a 1). Felizmente estes pontos não-físicos convergem, no limite de $b \rightarrow \infty$, para os pontos físicos unidimensionais (0,1) e (1,0); a convergência mais rápida acontece para $b'=b-1$ (este fato está ilustrado nos exemplos numéricos dados no Apêndice B).

O diagrama de fluxos obtido para $b = 2$ está representado na Fig. 2 do Apêndice B; para $b = 3$ e 4 (e $b'=1$) encontramos diagramas de fluxo similares (Chaves et al. (145)) obtiveram independentemente estes diagramas de fluxos; vide Fig. 2 da Referência (145). No ponto fixo isotrópico (1/2,1/2), os autovetores da matriz Jacobiana (cujos elementos satisfazem a $j_{12} = j_{21}$ e $j_{11} = j_{22} \forall b, b'$) apontam sempre na direção $p = q$ (associado ao maior auto-valor $\lambda_1 = j_{11} + j_{12}$, o qual coincide com $\lambda_p \equiv (dp'/dp)_{p^*=1/2}$ do caso isotrópico e, portanto, fornece os mesmos valores de $v_p(b, b')$ encontrados na Subseção 3.3.1.1) e na direção tangente à fronteira crítica $p+q = 1$ (associado ao auto-valor $\lambda_2 = j_{11} - j_{12}$). Em todos os diagramas de fluxo observados ambos auto-valores λ_1 e λ_2 são maiores que 1 (por exemplo, $\lambda_1 = 13/8$ e $\lambda_2 = 11/8$ para $b = 2$), fazendo com que o ponto fixo isotrópico seja totalmente instável em relação a uma perturbação anisotrópica. Em particular a instabilidade ao longo da linha $p+q=1$ indica, então, um "crossover" (inexistente no problema físico real) de um comportamento crítico bidimensional para um comportamento unidimensional. Esta instabilidade errônea do ponto isotrópico desaparece quando se usa células que se reduzem a uma *única* cadeia linear nos limites unidimen-

sionais. Efetivamente, Oliveira⁽⁶⁵⁾ obteve, recentemente, o sentido do fluxo correto e a fronteira crítica exata (para qualquer b) usando uma família de células auto-duais que têm a propriedade mencionada logo acima. Esta mesma família de células tem sido utilizada muito recentemente por Oliveira e Tsallis⁽²⁶¹⁾ para o modelo de Potts ferromagnético fornecendo os fluxos corretos e as fronteiras críticas exatas para todos valores de q ($q \leq 4$) e b .

Vemos na Fig. 2 do Apêndice B que as "linhas divisórias" (linhas tracejadas) dividem o espaço p - q em 4 regiões (I, II, III e IV), cada uma delas estando associada a um ponto fixo atrativo ($(1,0)$, $(1,1)$, $(0,1)$ e $(0,0)$ respectivamente). Quando b aumenta, para digamos um b' fixo, as regiões I e III encolhem enquanto as regiões II e IV se expandem (vide Fig. 2 da Ref. (145)). Por esta e outras razões acreditamos que as fronteiras GRC convergem não-uniformemente para a fronteira exata $p+q = 1$.

4.2.2 - GR Paramétrico (GRP)

Outra escolha para as funções T_b e $T_{b'}$, da eq.(4.2.3), ao invés das eqs. (4.2.1.1) pode ser

$$T_{b'}(p',q') = T_b(p,q) \equiv \epsilon \quad (4.2.2.1)$$

onde ϵ é um parâmetro e a função $T_b(p,q)$ é arbitrária. Eis alguns exemplos^(*) simples:

(*)A escolha (4.2.2.2) foi usada por Ikeda⁽²⁵⁸⁾ para a rede quadrada nos limites quase-unidimensional e quase-isotrópico.

$$T_b(p, q) = q/p \quad \forall b \quad (4.2.2.2)$$

$$T_b(p, q) = q \quad \forall b \quad (4.2.2.3)$$

$$T_b(p, q) = p \quad \forall b \quad (4.2.2.4)$$

É importante ressaltar que, no contexto do presente procedimento aproximado, *todos os pontos da fronteira crítica são pontos fixos* uma vez que a eq. (4.2.2.1) é automaticamente satisfeita para $p = p' = p^*$ e $q = q' = q^*$. Conseqüentemente o procedimento GRP não pode ser utilizado no cálculo de expoentes de "crossover". Outrossim, a equação de linha crítica (que denotaremos por $\Gamma(b, b')$), a saber

$$R_{b'}(p^*, q^*) = R_b(p^*, q^*) \quad (4.2.2.5)$$

é independente da escolha de $T_b(p, q)$. Por outro lado, os expoentes críticos (em particular ν_p) dependem da escolha de $T_b(p, q)$ visto que todas as funções que aparecem nas eqs. (4.2.2) e (4.2.3) são necessárias para a recorrência na vizinhança da fronteira crítica. Além disso, os expoentes críticos aproximados variam, ao longo desta fronteira, com o parâmetro ϵ (dependência esta não-física). Para que haja coerência com os princípios de universalidade, esta variação deve ir diminuindo à medida que aumentamos os tamanhos das células até desaparecerem totalmente no limite de $b \rightarrow \infty$. No entanto, como veremos mais adiante, isto não ocorre (pelo menos para $b \leq 4$).

Fazendo uso da eq. (4.2.2.5) obtivemos várias fronteiras críticas $\Gamma(b, b')$ ($2 \leq b \leq 5$ e $1 \leq b' \leq 4$), das quais algumas estão indicadas na Fig. 3 do Apêndice B. Todas as fron

teiras $\Gamma(b,b')$ foram obtidas exatamente, exceto as $\Gamma(5,b')$ ($1 \leq b' \leq 4$) que foram tratadas por uma generalização para duas variáveis do método Monte Carlo apresentado no Capítulo 3. Trabalhamos, não só para a rede quadrada como também para a rede 4-8, com um número N_b de realizações Monte Carlo da ordem de $N_b n_b(p) n_b(q) \geq 10^7$ (onde $n_b(p)$ e $n_b(q)$ representam, respectivamente, os números de ligações p e q relevantes da célula de tamanho linear b) para todos valores de b e b' considerados.

Todas as fronteiras $\Gamma(b,b')$ incluem o ponto isotrópico exato $(1/2,1/2)$ e preservam, da mesma forma que as fronteiras GRC, a simetria pontual com respeito a este ponto (veja eqs. (4.2.1.3) e (4.2.2.5)). Mas, no entanto, suas derivadas calculadas neste ponto, contrariamente ao que acontece no GRC, não são iguais à exata (-1) , mas tendem (pelo menos para os casos que examinamos) a este valor à medida que os tamanhos das células aumentam. Observamos também que as curvas $\Gamma(b,b')$ não são simétricas com relação à linha $p=q$, visto que a eq. (4.2.2.5) não é invariante sob a transformação $p^* \leftrightarrow q^*$ (vide Fig. 3 do Apêndice B). Queremos ressaltar que o ponto $(p_0(b,b'),0)$ (cf. eq. (4.2.1.4)) também pertence a $\Gamma(b,b')$: isto decorre do fato de ambas funções $T_b(p,0)$ e $T_b(p',0)$ (cf. eqs.(4.2.1.1)) se anularem fazendo com que a eq. (4.2.3) seja identicamente nula para $q = 0$, e, portanto, ambos procedimentos GRC e GRP passam a ser regidos pela mesma e única eq. (4.2.2). Finalmente queremos salientar o fato das fronteiras GRC serem, para os mesmos valores de (b,b') , melhores (embora seja mais trabalhoso calculá-las) que as fronteiras GRP (veja Fig. 2 do Apêndice B); no

entanto todas as fronteiras examinadas tendem à linha exata $p+q = 1$.

Quanto ao cálculo do expoente crítico aproximado $v_p(b, b'; \epsilon)$ observamos que, para as células pequenas que examinamos ($2 \leq b \leq 4$, $1 \leq b' \leq 3$), a dependência^(*) artificial de v_p em ϵ (para as três escolhas de ϵ , a saber, q/p , q e p) aumenta, ao invés de diminuir, quando usamos células maiores; não sabemos se esta tendência se inverterá para células maiores.

4.3 - REDE 4-8 INOMOGÊNEA

Vamos agora considerar uma rede 4-8 onde os dois tipos de ligações topologicamente diferentes que estão numa razão 1:2 (veja Fig. 1f do Apêndice B) têm probabilidades de ocupação independentes p e q , respectivamente. Este sistema reduz-se à rede quadrada para $q = 1$ ou $p = 1$. Os polinômios $R_b(p, q)$ correspondentes às células desenhadas nas Figs. 1(e) ($b=1$) e 1(f) ($b = 2$) do Apêndice B encontram-se respectivamente nas eqs. (19) e (20) do mesmo Apêndice.

Conforme ilustramos na seção anterior, as aproximações para as fronteiras críticas obtidas através de ambos procedimentos GRC e GRP tendem, para células cada vez maiores, pa

(*) O tratamento de Ikeda⁽²⁵⁸⁾ apresentou uma variação similar de v_p na vizinhança do caso isotrópico $p=q = 1/2$. Ele obteve $v_p(q^* = \epsilon p \approx 0.543) \approx 1.25$ e $v_p(q^* = \epsilon p = 0.5) \approx 1.10$; nossos resultados nos mesmos pontos (para $b = 2$, $b' = 1$) são respectivamente 1.40 e 1.43.

ra a fronteira crítica exata; no entanto, nos restringiremos somente ao procedimento GRP visto que ele é muito mais simples operacionalmente. Aplicando, então, o método GRP às células do tipo mencionado logo acima, obtivemos as curvas $\Gamma(b,1)$ ($b=2,3,4$) (calculada exatamente para $b = 2$ e por método Monte Carlo para $b = 3,4$) indicadas na Fig. 7 do Apêndice B. Uma vez que as células escolhidas reduzem-se, para $q=1$, às células auto-duais do tipo H generalizado utilizados na Subseção 3.3.1.1., todas as curvas $\Gamma(b,b')$ contêm o ponto exato $(p,q) = (1/2,1)$. Além disso, podemos mostrar (veja Apêndice 2 do Apêndice B) que neste ponto $(1/2,1)$, devido ao fato da rede 4-8 (bem como as células que escolhemos) ser constituída^(*) de polígonos com ligações q conectados entre si por ligações p , temos que

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{dp}{dq} \right)_p &= \frac{1}{2} = 0 & \forall (b,b') \\ q &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (4.3.1)$$

Vale a pena ressaltar também que, no caso particular de $p = 1$, nossas células reduzem-se para $b = 2$ e 3 respectivamente aos dois últimos diagramas da Fig. 4 do Apêndice A (usados para ilustrar a percolação inclinada na rede quadrada). Podemos constatar na Fig. 7 do Apêndice B que q^* se aproxima do valor exato $1/2$ à medida que b aumenta, como deveria acontecer.

Vamos agora expor um procedimento de extrapolação que

(*) A rede 3-12 inomogênea também apresenta esta propriedade topológica, sendo que para $q=1$ reduz-se à rede "honeycomb" cuja probabilidade crítica é $p_c = 1-2 \text{ sen}(\pi/18)$. Portanto a tangente (dp/dq) à sua fronteira crítica deve ser nula para $p=p_c$ e $q = 1$. Observamos que a proposta $p(q+q^2-q^3) = p_c$ de Tsallis⁽²⁶²⁾ satisfaz a esta condição.

desenvolvemos para obter, a partir das curvas $\Gamma(b,1)$ ($b=2,3,4$), nossa melhor proposta Γ_∞ para a fronteira crítica. Inicialmente interceptamos as curvas $\Gamma(b,1)$ com, digamos, linhas retas parametrizadas por ϵ (por exemplo, $\epsilon = p$ ou $\epsilon = q$ ou $\epsilon = q/p$); denotamos os valores para a abcissa (ou equivalentemente a ordenada) que são então obtidos por $Y_b^*(\epsilon)$. Em seguida fazemos um gráfico de $Y_b^*(\epsilon)$ em função de b^{-1/ν_p} , e extrapolando linearmente até a origem obtemos o limite $Y_c(\epsilon)$ para este particular valor de ϵ . O conjunto de pontos $\{ Y_c(\epsilon) \}$ será nossa melhor proposta de Γ_∞ para esta família particular de linhas retas (por exemplo, $\epsilon = q$ ou $\epsilon = q/p$). Verificamos que $\Gamma_\infty(\epsilon=p)$, $\Gamma_\infty(\epsilon=q)$ e $\Gamma_\infty(\epsilon = q/p)$ estão extremamente próximas umas das outras (veja Fig. 7 do Apêndice B). Um outro teste de autoconsistência do presente procedimento pode ser feito verificando-se, num gráfico de $\log [Y_b^*(\epsilon) - Y_c(\epsilon)]$ versus $\log b$, se obtemos *linhas retas paralelas* para diferentes escolhas de famílias de linhas retas (por exemplo, $\epsilon = p$, etc) e de valores do parâmetro ϵ (veja Fig. 8 do Apêndice B) — este fato dá suporte à hipótese básica de ν_p ser independente de tais escolhas. Este procedimento é uma espécie de generalização, para um espaço de probabilidades bidimensional, da teoria de escala para tamanhos finitos mencionada no capítulo anterior (vide eq.(3.3.2.1) que é freqüentemente usada para o caso de um único parâmetro; em outras palavras, estamos admitindo a validade de uma equação do tipo

$$Y_b^*(\epsilon) - Y_c(\epsilon) \sim b^{-1/\nu_p} \quad . \quad (4.3.2)$$

Aplicando então esta extrapolação obtivemos, atra -

vés de três famílias diferentes de linhas retas, os pontos marcados na Fig. 7 do Apêndice B; a autoconsistência do método de extrapolação pode ser constatada na Fig. 8 do Apêndice B. Nesta extrapolação usamos o valor 1.35 para v_p ; se usássemos o valor conjecturado por Den Nijs⁽¹⁹⁵⁾ $v_p = 4/3$ obteríamos pontos indistinguíveis (com discrepâncias inferiores a 0.2%), na escala adotada, dos anteriores. Extrapolação na vizinhança de $p = 1$ fornece a seguinte estimativa para a derivada:

$$\left. \left(\frac{dq}{dp} \right) \right|_{\substack{p=1 \\ q=1/2}} = - 0.45 \pm 0.10 \quad . \quad (4.3.3)$$

No caso particular homogêneo $p = q$, conseguimos calcular $p^*(b,1)$ para células maiores ($b \leq 7$). A partir do gráfico de $p^*(b,1)$ versus b^{-1/v_p} (veja Fig. 9 do Apêndice B) onde $v_p = 1.35$, estimamos (esta estimativa não se altera para $v_p = 4/3$ visto que a discrepância entre os valores extrapolados é de 0.0003) que

$$p_c = q_c = 0.681 \pm 0.005 \quad (4.3.4)$$

que difere muito pouco de Y_c ($q/p = 1$) ≈ 0.684 (onde $b \leq 4$). Nossa estimativa compara bem com resultados anteriores: $0.675 \pm \pm 0.027$ (Dean⁽²⁶³⁾), 0.684 (Neal⁽²⁶⁴⁾) e o intervalo $[0.645, 0.707]$ (Ottavi⁽²⁶⁵⁾), bem como com a nossa conjectura⁽²⁵³⁾ 0.679 ± 0.006 (vide Capítulo seguinte) feita posteriormente a este trabalho⁽⁶³⁾.

Finalmente, observamos que a relação analítica simples

$$v = \frac{1}{3} (2u^2 + u^3) \quad (4.3.5a)$$

onde

$$v \equiv 2 \left(p - \frac{1}{2} \right) \quad (4.3.5b)$$

e

$$u = 2 (1-q) \quad (4.3.5c)$$

determina uma fronteira crítica que:

- (i) contem os pontos exatos $(1, 1/2)$ e $(1/2, 1)$;
- (ii) satisfaz à propriedade (4.3.1);
- (iii) fornece

$$\left. \left(\frac{dq}{dp} \right) \right|_{\substack{p=1 \\ q=1/2}} = -\frac{3}{7} \approx -0.43 \quad (4.3.6)$$

e

$$p_c = q_c \approx 0.6801 \quad (4.3.7)$$

(em concordância com a estimativa (4.3.3) e com a proposta (4.3.4) respectivamente);

(iv) concorda muito satisfatoriamente com os pontos extrapolados restantes (veja Fig. 7 do Apêndice B). Além disso, esta proposta analítica está em ótimo acordo com a conjectura que relatamos posteriormente (vide Capítulo 5). Portanto cremos que a eq. (4.3.5a) tem chance de ser a resposta exata, ou pelo menos, deve fornecer valores numéricos bem próximos dos pontos da fronteira crítica exata.

4.4 - CONCLUSÕES

Verificamos na rede quadrada anisotrópica que os pro

cedimentos de grupo de renormalização canônico (GRC) e de grupo de renormalização paramétrico (GRP) que usamos fornecem resultados satisfatórios no que concerne à fronteira crítica de percolação. Enquanto as aproximações numéricas $\Gamma(b,b')$ obtidas para a fronteira crítica são melhores quando calculadas pelo método GRC, o procedimento GRP é muito mais fácil de se trabalhar em termos operacionais; no entanto, ambos procedimentos geram linhas críticas que tendem, para células cada vez maiores, à fronteira exata $p+q = 1$.

No que concerne aos expoentes críticos, o presente tratamento GRC da rede quadrada anisotrópica fornece um sentido errado das linhas de fluxos (contrariando o resultado esperado de que $v_p = v_p$ ($d=2$) ao longo de toda a fronteira crítica exceto para $p = 0$ ou $q = 0$ onde $v_p = v_p$ ($d=1$) e, conseqüentemente, não podemos esperar obter valores confiáveis para os expoentes críticos). Isto se deve ao fato de as células auto-duais escolhidas não se reduzirem a uma *única* cadeia linear nos casos unidimensionais (problema este resolvido muito recentemente por Oliveira⁽⁶⁵⁾). O tratamento GRP fornece, por construção, uma fronteira crítica constituída inteiramente por pontos fixos; portanto v_p não satisfaz os princípios de universalidade e não faz sentido calcular o expoente de "crossover".

A fronteira crítica correspondente à rede 4-8 "inomegênea" é estimada, no contexto GRP, através de um procedimento de extrapolação aplicável a um espaço de probabilidades com duas dimensões e que exhibe propriedades autoconsistentes bastante satisfatórias. Nossos resultados numéricos extrapolados se

ajustam bem à equação possivelmente exata

$$3(p - \frac{1}{2}) = 4 \left[(1-q)^2 + (1-q)^3 \right]$$

a qual concorda muito bem com a nossa conjectura posterior (Tsallis e de Magalhães⁽²⁵³⁾) que exporemos no próximo Capítulo.

Não incluímos neste capítulo a rede quadrada "inomegênea" com ligações entre primeiros e segundos vizinhos que constou no nosso trabalho (de Magalhães et al.⁽⁶³⁾) porque acreditamos que o procedimento de extrapolação mencionado acima não funciona em caso de convergência não uniforme (atualmente há fortes evidências⁽²⁴⁶⁾ de que a fronteira crítica exata satisfaz a $(dq/dp)_{\substack{p=0 \\ q=1/2}} \rightarrow \infty$; observe-se que todas as curvas $\Gamma(b, b')$ desenhadas na Fig. 5 do Apêndice B possuem derivadas finitas).

CAPÍTULO 5

FRONTEIRAS CRÍTICAS DE FERROMAGNETOS DE
POTTS: CONJECTURAS

5.1 - INTRODUÇÃO

Conforme vimos no capítulo 2, o modelo de Potts ferromagnético com q estados apresenta uma transição de fase contínua para $d > 1$ e $q \leq q_c(d)$ (vide fig. 2.3.2.1). Várias fronteiras críticas (FC's) correspondentes a diversas redes *planas* anisotrópicas e/ou inhomogêneas são conhecidas exatamente para $q=2$ (vide Syozi⁽¹⁵³⁾ e referências internas), ao passo que para $q=1,4$ e muito provavelmente $q=3$ as únicas FC's exatas bem estabelecidas referem-se às redes quadrada, triangular e "honeycomb" anisotrópicas. Vários pontos críticos foram estimados para redes planas em percolação de ligações ($q=1$) e para redes d -dimensionais ($d \geq 2$) no modelo de Ising ($q=2$), porém para $q \neq 1,2$ em redes d -dimensionais ($d \geq 2$) e inclusive para $q=1$ e $d \neq 2$ existem poucas ou nenhuma estimativa para os pontos críticos. Neste capítulo apresentamos uma conjectura, formulada inicialmente para $d=2$ ⁽²⁵³⁾ e generalizada⁽²³⁸⁾ posteriormente para redes d -dimensionais ($d > 1$), que permite, a partir do conhecimento para um valor particular $q_0 (1 \leq q_0 \leq q_c(d))$ do ponto crítico (ou eventualmente da FC) associado a uma dada rede, estimar com uma boa aproximação o ponto crítico (ou eventualmente a FC) associado a transições contínuas (ou levemente^(*) de 1ª ordem) na mesma rede para outros valores de

(*) No sentido de que a discrepância entre os dois pontos metaestáveis associados é pequena comparada com o ponto de transição.

$q(1 \leq q \leq q_c(d))$. Eventualmente nossa conjectura se aplica também a transições de 1ª ordem.

5.2 - DEFINIÇÃO E PROPRIEDADES DA VARIÁVEL $t_i^{(q)}$

Consideremos a i -ésima ligação (cuja constante de acoplamento é $J_i > 0$) de um conjunto de ligações de um ferromagneto de Potts com q -estados; sua energia de interação é $-qJ_i \delta_{\sigma\sigma'}$, onde σ e σ' são as variáveis randômicas de Potts respectivamente associadas aos dois sítios unidos por esta ligação i . É conveniente introduzir uma variável $t_i^{(q)}$ (que chamaremos, daqui em diante, de transmissividade térmica ^(266,240,261)) definida como:

$$t_i^{(q)} \equiv \frac{1 - e^{-K_i}}{1 + (q-1)e^{-K_i}} \quad (K_i \equiv qJ_i/k_B T ; J_i > 0) \quad (5.2.1)$$

Esta variável $t_i^{(q)}$ coincide precisamente, para qualquer q , com a variável p utilizada por Stephen ⁽¹⁶⁷⁾ no problema de percolação em árvores. Queremos ressaltar que $t_i^{(1)} = 1 - e^{-K_i}$ é justamente a variável isomórfica ⁽³¹⁾ à probabilidade de ocupação (p_i) de percolação usual de ligações (vide eq. 2.1.4.1).

A vantagem principal da variável $t_i^{(q)}$ é fornecer um algoritmo do tipo-probabilidade (vide fórmula A1.1 do apêndice B) para calcular a transmissividade $t_s^{(q)}$ de duas ligações em série cujas transmissividades são $t_1^{(q)}$ e $t_2^{(q)}$, a saber ⁽²⁶⁶⁾:

$$t_s^{(q)} = t_1^{(q)} t_2^{(q)} \quad (5.2.2)$$

Para duas ligações, em *paralelo*, a transmissividade equivalente $t_p^{(q)}$ (266,240) é:

$$t_p^{(q)} = \frac{t_1^{(q)} + t_2^{(q)} + (q-2)t_1^{(q)}t_2^{(q)}}{1 + (q-1)t_1^{(q)}t_2^{(q)}} \quad (5.2.3)$$

que pode ser colocada sob a mesma forma do algoritmo de séries introduzindo-se a transmissividade *dual* (266,165)

$$\left[t_i^{(q)} \right]^D \equiv \frac{1 - t_i^{(q)}}{1 + (q-1)t_i^{(q)}} \quad \forall i \quad (5.2.4)$$

onde D significa dual (*).

Assim sendo, $t_p^{(q)}$ satisfaz a seguinte relação:

$$\left[t_p^{(q)} \right]^D = \left[t_1^{(q)} \right]^D \left[t_2^{(q)} \right]^D \quad (5.2.5)$$

5.3 - REDES PLANAS

5.3.1 - Definição e Propriedades da Variável $s_i^{(q)}$

Vamos definir uma outra variável (240) que generaliza a variável s (vide def. 6.3.2.2) introduzida, para $q = 2$, por Levy et al (234), a saber :

(*) Em se tratando de modelos de Potts em redes, a transmissividade dual é equivalente à relação existente entre a temperatura K de uma rede e a temperatura K^D da rede dual dada por (28) $(e^K - 1)(e^{K^D} - 1) = q$

$$s_i^{(q)} \equiv s\{t_i^{(q)}\} \equiv \frac{\ell_n [1 + (q-1)t_i^{(q)}]}{\ell_n q} \quad (5.3.1.1)$$

que satisfaz à seguinte propriedade notável:

$$[s_i^{(q)}]^D \equiv s \left\{ [t_i^{(q)}]^D \right\} = 1 - s_i^{(q)} \quad (\forall i) \quad (\forall q) \quad (5.3.1.2)$$

i.e., a variável s transforma-se, sob dualidade, como uma probabilidade. Observa-se ⁽²⁴⁰⁾ que, no caso de duas ligações, em geral $s_s \neq s_1 s_2$ e portanto $s_p^D \neq s_1^D s_2^D$; mas s_p satisfaz a relação $s_p = s_1 + s_2 - s_s$ análoga à relação $p_p = p_1 + p_2 - p_s$ existente no caso probabilístico. Outrossim, verifica-se que, no limite $q \rightarrow 1$:

$$s_i^{(1)} = t_i^{(1)} = p_i \equiv 1 - e^{-K_i} \quad (\forall i) \quad (5.3.1.3)$$

5.3.2 - Formulação da Conjectura

Vamos assumir como conhecida, para uma certa rede $p\bar{l}a$ na, a FC para um valor fixo q_0 ($1 \leq q_0 \leq q_c(2)$), a saber:

$$\phi\{s_1^{(q_0)}, s_2^{(q_0)}, \dots, s_n^{(q_0)}\} = 0 \quad (5.3.2.1)$$

onde $s_1^{(q_0)}, s_2^{(q_0)}, \dots, s_n^{(q_0)}$ estão associadas às constantes de acoplamentos independentes J_1, J_2, \dots, J_n do sistema considerado. Conjecturamos, então, que a equação

$$\phi\{s_1^{(q)}, s_2^{(q)}, \dots, s_n^{(q)}\} = 0 \quad (5.3.2.2)$$

representa também, ou exatamente ou com grande precisão, a FC do modelo de Potts correspondente com q estados para *outros* valores de q ($1 \leq q \leq q_c(2)$).

5.3.3 - Verificações da Conjectura

5.3.3.1 - Rede Quadrada Anisotrópica

A FC exata de percolação de ligações na rede quadrada anisotrópica é dada por ⁽⁵²⁾:

$$p_1 + p_2 = 1 \quad (5.3.3.1.1)$$

De acordo com nossa conjectura, esta FC se generaliza para:

$$s_1^{(q)} + s_2^{(q)} = 1 \quad (5.3.3.1.2)$$

que reproduz a temperatura crítica *exata* para $q \geq 4$, $q=2$ e muito provavelmente para outros valores de q , também ⁽¹⁶⁴⁾, ⁽¹⁹⁴⁾, ⁽⁸⁸⁾. Vemos, portanto, que para este sistema a presente conjectura é *exata* para qualquer valor de q . Outrossim, achamos que isto acontece somente para esta rede regular, como consequência da sua auto-dualidade.

5.3.3.2 - Redes Triangular e "Honeycomb" Anisotrópicas

A FC exata de percolação de ligação na rede triangular anisotrópica é dada por ⁽⁵²⁾:

$$1-p_1-p_2-p_3+p_1p_2p_3 = 0 \quad (5.3.3.2.1)$$

(a FC da rede "honeycomb" pode ser obtida da eq. 5.3.3.2.1 substituindo-se p_i por $p_i^D = 1-p_i$, $\forall i$). Portanto, no presente contexto, a FC para qualquer valor de q ($1 \leq q \leq 4$) é aproximada por:

$$1-s_1^{(q)}-s_2^{(q)}-s_3^{(q)}+s_1^{(q)}s_2^{(q)}s_3^{(q)} = 0 \quad (5.3.3.2.2)$$

Vamos agora comparar esta equação com a eq. exata para $q = 2, 4$ e muito provavelmente para $q = 3$ (164, 194, 88). Verificamos imediatamente que elas coincidem quando uma das 3 constantes de acoplamento se anula (limite de rede quadrada anisotrópica). Em seguida, comparamos nossa proposta com a exata no caso de discrepância máxima, qual seja, no limite isotrópico $J_1 = J_2 = J_3$. Nossa conjectura fornece para esta rede:

$$s^{(q)} = 2 \operatorname{sen} \frac{\pi}{18} \quad (5.3.3.2.3)$$

enquanto que a resposta exata é dada por:

$$\frac{t^{(q)}}{1-t^{(q)}} = \frac{2}{q} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{q}{2} - 1 \right) \right] - \frac{1}{q} \quad (q \leq 4) \quad (5.3.3.2.4)$$

A comparação entre nossas conjecturas e as respostas exatas (ou pretendidas como exatas) para a rede triangular e "honeycomb" isotrópicas pode ser vista na fig. 1 do apêndice C. As discrepâncias para $q = 2, 3$ e 4 são respectivamente 1.4%, 2% e 2.4%. É fácil verificar que, no limite $q \rightarrow 0$, temos que:

$$t^{(q)} \sim 1 - L\sqrt{q} \quad (q \rightarrow 0) \quad (5.3.3.2.5)$$

o que implica em

$$s^{(q)} \sim \frac{1}{2} + \frac{\ln L}{\ln q} \quad (q \rightarrow 0) \quad (5.3.3.2.6)$$

onde L é um número puro que depende da rede ($L=1, \sqrt{3}, 1/\sqrt{3}$ para as redes quadrada, triangular e "honeycomb" respectivamente; na realidade, para qualquer par de redes duais vale $L^D = L^{-1}$). Observamos que as conjecturas de Tsallis⁽²⁶²⁾ para os pontos críticos exatos das redes planas 3-12, Kagomé, L_1 e L_2 (as redes L_1 e L_2 estão desenhadas respectivamente nas figs. 1b e 1c da ref. 144) também apresentam este comportamento assintótico para $q \neq 0$. Na realidade, acreditamos, embora não saibamos demonstrar, que a eq. 5.3.3.2.5 seja válida para *qualquer* rede plana, i.e., que todas as redes, para $q \rightarrow 0$, tornem-se auto-duais no sentido de $s^{(q)} \rightarrow 1/2$. Acreditamos, outrossim, que a nossa conjectura falhou para $q \sim 0$ devido a esta tendência de $s^{(q)}$ de se aproximar de $1/2$; a discrepância em $s^{(q)}$ para q próximo, mas não igual, a zero é pequena devido ao fato da tangente $(ds/dq)_{q=0}$ ser infinita. Recentemente, Tsallis⁽²⁶²⁾ verificou para as redes planas quadrada, triangular, "honeycomb", bem como para as conjecturas que formulou para as FC's das redes 3-12, L_1 , L_2 e Kagomé, que no limite $q \rightarrow \infty$, $t^{(q)} \sim cq^{-\theta}$ ($c=c\frac{te}{t} > 0$, $\theta > 0$) e $[t^{(q)}]^D \sim c^{-1} q^{1-\theta}$.

5.3.3.3 - Rede 4-8 Inomogênea e sua Dual ($q=1,2$)

As FC's exatas associadas ao modelo de Ising na re-

de 4-8 "inomogênea" (uma célula desta rede está representada na fig. 1f do apêndice B) e na sua dual (rede quadrada com ligações diagonais que não se cruzam; vide fig. 10a de Syozi⁽¹⁵³⁾) são conhecidas⁽¹⁵³⁾. Uma vez que existe uma relação imediata entre as FC's de qualquer par de redes duais (se $\phi\{s_i^{(q)}\} = 0$ representa a FC de uma rede então $\phi\{[s_i^{(q)}]^D\} = 0$ representa a FC da sua dual), restringiremos nossa discussão aqui à rede 4-8. Denotaremos as constantes de acoplamentos associadas às ligações topologicamente diferentes que estão numa razão 2:1 por J_1 e J_2 . A FC exata, para $q = 2$, no espaço $s_1^{(2)} - s_2^{(2)}$ está representada na fig. 2 do apêndice C. Podemos verificar que :

$$s_1^{(2)} = s_2^{(2)} \approx 0.6792 \quad (5.3.3.3.1)$$

$$\left. \frac{ds_1^{(2)}}{ds_2^{(2)}} \right|_{s_2^{(2)} = 1} \approx -0.414 \quad (5.3.3.3.2)$$

e

$$\left(s_2^{(2)} - \frac{1}{2} \right) \approx A^{(2)} (s_1^{(2)} - 1)^2 \quad (s_1^{(2)} \rightarrow 1 ; A^{(2)} \approx 1.39) \quad (5.3.3.3.3)$$

De acordo com a presente conjectura, esta FC deveria, com precisão satisfatória, ser a mesma para $q = 1$; comparando-a com a conjectura para a forma analítica da FC que fizemos no capítulo 4 para a percolação de ligações na rede 4-8 (vide eqs (4.3.5) com $q = s_1^{(1)}$ e $p = s_2^{(1)}$) vemos que (i) $s_1^{(1)} = s_2^{(1)} \approx 0.6801$ difere somente 0.13% do valor 0.6792; (ii) a derivada $(ds_1^{(1)}/ds_2^{(1)})_{s_2^{(1)}=1} \approx -0.429$ difere de 3.5% do valor - 0.414; (iii)

$(s_2^{(1)} - 1/2) \sim A^{(1)} (s_1^{(1)} - 1)^2$ para $s_1^{(1)} \rightarrow 1$ onde $A^{(1)} = 4/3$ que difere de 4.2% de 1.39. Como podemos ver, as FC's associadas a $q = 1$ e $q = 2$ coincidem satisfatoriamente (sendo indistinguíveis na escala da fig. 2 do apêndice C).

5.3.3.4 - Algumas Outras Redes

Os pontos críticos exatos para as redes Kagomé, 3-12 e suas duais ("diced" e Asanoha respectivamente) isotrópicas (vide figs. 14, 15 e 19 de Syozi⁽¹⁵³⁾) são bem estabelecidos somente para $q = 2$ (Syozi 1972⁽¹⁵³⁾); para $q = 1$ existem apenas estimativas numéricas. O valor exato $s^{(2)} = 0.521\dots$ correspondente à rede Kagomé compara bem com as estimativas para $p_c = s^{(1)}$ de Neal⁽²⁶⁴⁾ (0.526), de Ottavi⁽²⁶⁵⁾ ($0.522 \leq p_c \leq 0.529$), e também com as conjecturas de Tsallis⁽²⁶²⁾ (0.52237) e de Wu⁽²⁶⁷⁾ (0.52443...; Enting e Wu⁽²⁶⁸⁾ mostraram recentemente que esta conjectura é inexata). No caso da rede 3-12, o valor exato $s^{(2)} = 0.740\dots$ está bem próximo ao valor de $s^{(1)}$ conjecturado por Tsallis⁽²⁶²⁾ (0.73983...) e difere de 1.5% da estimativa de Neal⁽²⁶⁴⁾ (0.751). Queremos ressaltar que Tsallis⁽²⁶²⁾ verificou que suas conjecturas para as FC's das redes Kagomé, 3-12, L_1 , L_2 e suas duais (as quais acreditamos estarem, pelo menos, bem próximas das FC's exatas visto que contém como casos particulares vários resultados exatos) satisfazem à quase-universalidade em $s^{(q)}$ ($1 \leq q \leq 4$). Na fig. 5.3.3.4.1 reproduzimos seus resultados (para rede Kagomé obtiveram $s^{(3)} = 0.52122$ e $s^{(4)} = 0.52119$ e para a rede 3-12 obtiveram $s^{(3)} = 0.73985$ e $s^{(4)} = 0.73905$) que estão em ótimo acordo com nossas predições indicadas na Tabela I do apêndice C.

Apesar da rede quadrada com 1^{os} e 2^{os} vizinhos não ser estritamente plana (no sentido de que não pode ser embecida no plano), podemos considerá-la praticamente plana, visto que a sua extensão tridimensional (finita) é muito menor que a sua extensão bidimensional (infinita). Para esta rede, só existem resultados aproximados para os pontos críticos correspondentes a $q = 1$ e $q = 2$. Podemos ver da Ta

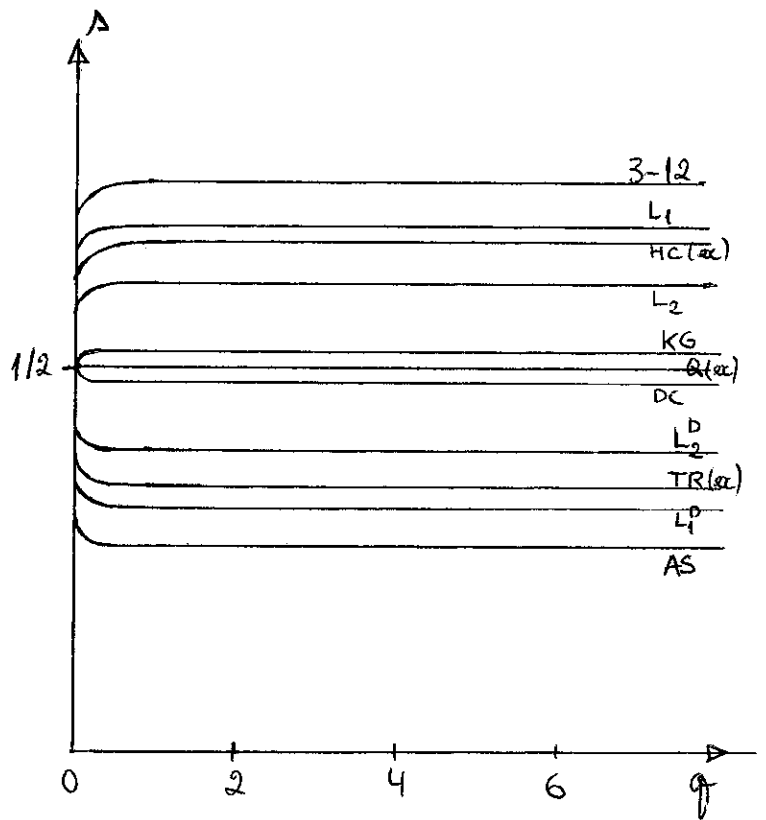


Fig.5.3.3.4.1 - Variáveis s conjecturadas por Tsallis⁽²⁶²⁾ em função do nº de estados q associados às diversas redes isotrópicas (HC = "honeycomb", KG = Kagomê, Q=quadrada, DC = "diced", TR = triangular, AS = Asano ha). Estas conjecturas coincidem com as repostas exatas nos casos indicados (ex.).

bela I do apêndice C que as estimativas para $s^{(2)}$ diferem muito pouco (0.4%) da estimativa para $s^{(1)}$, verificando, portanto, nossa conjectura.

5.3.4 - Predições da Conjectura

5.3.4.1 - Rede 4-8 Inomogênea e sua Dual

Verificamos nossa conjectura para a rede 4-8 inomogênea (e sua dual) nos casos $q = 1$ e $q = 2$ (cujas representações gráficas coincidem dentro da escala usada na fig. 2 do apêndice C). Conjecturamos, portanto, que a forma funcional da FC para $q = 1$

na rede 4-8 continue sendo válida para outros valores de $q(1 \leq q \leq 4)$, a saber:

$$3(s_2^{(q)} - 1/2) - 4[(1-s_1^{(q)})^2 + (1-s_1^{(q)})^3] = 0 \quad (1 \leq q \leq 4) \quad (5.3.4.1.1)$$

(para a rede dual basta substituir $s_i^{(q)}$ por $(1-s_i^{(q)})$ ($i = 1, 2$). Observamos que os valores dos pontos críticos isotrópicos para $q = 3$ e $q = 4$ estão indicados na Tabela I do apêndice C.

5.3.4.2 - Algumas Outras Redes

Os pontos críticos das redes Archimedianas (cujas descrições podem ser vistas em Tóth ⁽²⁶⁹⁾) foram estimados ⁽²⁶⁴⁾ somente para $q = 1$. Portanto, usamos estes valores de $p_c = s^{(1)}$ para prever as temperaturas críticas para $q \neq 1$ mostradas na Tabela I do apêndice C.

No caso da rede quadrada com ligações entre primeiros e segundos vizinhos onde verificamos nossa conjectura para $q = 1$ e 2, fizemos predições para $q = 3$ e 4 baseados no valor do ponto crítico $s^{(2)}$. Estas predições estão sendo testadas por Oliveira e Tsallis ^(*) através de cálculos de GR no espaço real. Nas três últimas linhas da Tabela I do apêndice C, apresentamos os pontos críticos isotrópicos associados às redes triangular com ligações entre primeiros e segundos vizinhos, quadrada com ligações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos e triangular com ligações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos para $q = 1, 3, 4$ que conjecturamos a partir das esti

(*) Comunicação privada.

mativas de temperatura crítica de Ising ^(270,271,74). No que concerne à rede triangular com primeiros e segundos vizinhos, muito recentemente Oitmaa ⁽²⁷²⁾ estendeu o cálculo ⁽²⁷⁰⁾ de treze anos atrás de expansões em altas temperaturas para a susceptibilidade incluindo até dez termos e obteve $J/K_B T_C = 0.1140 \pm 0.0005$. Este valor fornece $s^{(2)} = 0.1551 \pm 0.0006$, que está em ótimo acordo com nossa conjectura 0.155 ± 0.001 .

Observamos que as barras de erro na tabela dos pontos críticos para $q = 1, 2, 3, 4$ associados a várias redes isotrópicas e homogêneas (Tab.I do apêndice C) foram estimadas levando-se em conta a dispersão dos valores disponíveis na literatura, bem como o erro (conhecido exatamente para as redes triangular e "honeycomb") introduzido pela presente conjectura.

5.4 - GENERALIZAÇÃO PARA REDES D-DIMENSIONAIS ($d > 1$)

Vamos agora generalizar para todas dimensões (pelomenos para $d > 1$) a conjectura que fizemos para redes planas, estendendo heurísticamente a variável s .

5.4.1 - Definição e Propriedades da Variável $s(q, h(d); t^{(q)})$

Queremos que a variável s , que procuramos, satisfaça as três condições seguintes: i) Devido ao isomorfismo (vide seção 2.1.4) existente entre o modelo de Potts para $q \rightarrow 1$ e a percolação de ligações, e levando-se em conta que $t^{(1)}$ corresponde a uma probabilidade, vamos impor que

$$s^{(1)} = t^{(1)} \quad \forall d \quad \forall t^{(1)} \quad (5.4.1.1)$$

ii) Vamos impor também, para todos os valores de q , que

$$s(d \rightarrow \infty) = t^{(q)} \quad \forall q \quad \forall t^{(q)} \quad (5.4.1.2)$$

Como veremos posteriormente, esta restrição possibilita a obtenção de resultados exatos para a rede de Bethe e o comportamento assintótico exato em redes regulares para $d \rightarrow \infty$.

iii) a variável s generalizada deve conter a expressão (5.3.1.1) como caso particular para $d = 2$.

Estas três condições podem ser satisfeitas simultaneamente através da definição

$$s(q, h(d); t^{(q)}) \equiv \frac{\ln[1+(q-1)h(d)t^{(q)}]}{\ln[1+(q-1)h(d)]} \quad (5.4.1.3)$$

onde $h(d)$ é um número que depende da rede particular d -dimensional ($d > 1$) considerada; a restrição (5.4.1.2) junto com a definição (5.4.1.3) implica que:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} h(d) = 0 \quad (5.4.1.4)$$

condição esta que, como veremos mais adiante, é verificada rigorosamente para redes hipercúbicas. Queremos ressaltar que os resultados que obtivemos para redes planas podem ser reobtidos fazendo-se $h(2) = 1$ para *qualquer* rede plana. A propósito, notemos que

$$s(q, h(d); \frac{1-t^{(q)}}{1+(q-1)h(d)t^{(q)}}) = 1-s(q, h(d); t^{(q)}) \quad (5.4.1.5)$$

que, para $d = 2$ e $h(2) = 1$, expressa a transformação de dualidade (5.3.1.2).

5.4.2 - Formulação da Conjectura

Podemos agora formular nossa conjectura: *para qualquer rede d -dimensional ($d > 1$) existe um número $h(d)$ tal que o ponto crítico ferromagnético $s_c \equiv s(q, h(d); t_c)$ depende da rede mas praticamente não depende de q ($1 \leq q < q_c(d)$; q não é necessariamente inteiro). Impondo-se, por exemplo,*

$$s(1, h; t_c^{(1)}) = s(2, h; t_c^{(2)}) \quad (5.4.2.1)$$

podemos obter para uma dada rede, o valor correspondente de h . É assim que obtivemos os valores de h apresentados na Tabela II do apêndice D (veja também fig. 1 do apêndice D), onde para isto usamos os pontos críticos indicados nas Tabelas Ia e Ib do apêndice D e, no caso de redes planas, usamos a tabela I do apêndice C e os valores conjecturados por Wu⁽²⁶⁷⁾. Observamos que as conjecturas de Tsallis⁽²⁶²⁾ levam a valores diferentes para h , que valem aproximadamente 1.015, 0.986, 0.986, 1.012 nos casos correspondentes às redes Kagomé, "diced", 3-12 e Asanoha respectivamente. Queremos ressaltar que, para uma dada dimensão d , h não varia muito ($h(2) \approx 1$, $h(3) \approx 0.38$ com erro de cerca de 10%). Portanto, para as redes cujas variações das constantes de acoplamentos independentes J_1, J_2, \dots, J_n não mudam d , podemos estender a presente conjectura para a fronteira crítica inteira similarmente à subseção 5.3, a saber:

$$\text{se } \phi\{s_1(q_0, h), s_2(q_0, h), \dots, s_n(q_0, h)\} = 0$$

é a FC para um valor fixo q_0 ($1 \leq q_0 \leq q_c^{(d)}$) então

$$\phi\{s_1(q,h), s_2(q,h), \dots, s_n(q,h)\} = 0 \quad (5.4.2.2)$$

representa, com boa precisão, a FC para outros valores de q também ($1 \leq q \leq q_c^{(d)}$); $s_i(q,h)$ é definida por:

$$s_i(q,h) \equiv s(q,h; t_i^{(q)}) \quad (5.4.2.3)$$

5.4.3 - Verificações da Conjectura

5.4.3.1 - Redes Planas

Conforme vimos na subseção (5.3.3) esta conjectura foi verificada para várias

redes planas usando o valor $h(2)=1$, o qual fornece a FC exata somente para a rede quadrada. No entanto, se usarmos os valores de h apropriados esperamos que a precisão da presente conjectura aumente. Os erros percentuais máximos na variável $s(q,h)$ (que ocorrem, no ca-

Redes	$\frac{\Delta s_{\max}}{s(1)} (h=1)$	$\frac{\Delta s_{\max}}{s(1)} (h)$
quadrada(ex.)	0	0
triangular(ex.)	2.4	0.32
"honeycomb"(ex.)	1.3	0.21
Kagomé ⁽⁺⁾	0.23	0.029
Kagomé ⁽⁺⁺⁾	1.2	0.40
diced ⁽⁺⁾	0.25	0.21
diced ⁽⁺⁺⁾	1.3	0.43
3-12 ⁽⁺⁾	0.10	0.22
Asanoha ⁽⁺⁾	0.30	0.66

Tabela 5.4.3.1 - erro percentual máximo da variável $s(q,h)$ (o qual ocorre para $q=4$) em relação a $s(1)=p_c$ cometido na conjectura anterior (onde $h=1$) e na conjectura presente (h apropriado) para diversas redes planas isotrópicas. Os valores dos pontos críticos conjecturados por Tsallis⁽⁺⁾ (262) e por Wu⁽⁺⁺⁾ (267) foram usados; os resultados exatos estão indicados (ex.).

so da rede triangular anisotrópica, no limite isotrópico) em relação a $s(1,h) = p_c$ cometidos na conjectura anterior (onde $h=1$) e na presente conjectura estão indicados na tabela (5.4.3.1). Efectivamente a introdução de um número $h \neq 1$ melhora a nossa conjectura anterior, exceto para a rede 3-12 e sua dual onde usamos os valores dos pontos críticos recentemente conjecturados em (262). Eventualmente este fato inesperado poderia estar relacionado com a topologia especial da rede 3-12 (e consequentemente da sua dual), qual seja, de ser constituída de polígonos fechados havendo sempre uma ligação entre dois polígonos vizinhos.

5.4.3.2 - Redes Tridimensionais

Usando os valores de h indicados na Tabela II do apêndice D e os pontos críticos encontrados na Tabela Ia do apêndice D e, no caso da rede BCC, os valores $s(3, h^{BCC}) = 0.181 \pm 0.003$ (180) e $s(3, h^{BCC}) = 0.1763 \pm 0.0033$ (183), verificamos que nossas conjecturas para os pontos críticos $q=3$ associados às redes SC, FCC e BCC concordam muito bem (a discrepância máxima em s é cerca de 0.4%, 1% e 1.4% respectivamente).

5.4.3.3 - Redes Regulares ($q=1,2; d \rightarrow \infty$)

Vamos considerar uma rede com um número de coordenação z . A aproximação de Bethe fornece para p_c (77):

$$p_c = \frac{1}{\sigma} \quad (5.4.3.3.1a)$$

onde

$$\sigma = z-1 \quad (5.4.3.3.1b)$$

Ao passo que o ponto crítico do modelo de Ising na aproximação de Bethe ⁽²⁰⁾ é dado por:

$$t_c^{(2)} = \frac{1}{\sigma} \quad (5.4.3.3.2)$$

Ambas expressões (5.4.3.3.1a) e (5.4.3.3.2) são assintoticamente exatas no limite de $d \rightarrow \infty$ para *todas* as redes regulares. Usando estas expressões e a condição (5.4.1.4) vemos que:

$$s(1, h(d \rightarrow \infty); t_c^{(1)}) \sim s(2, h(d \rightarrow \infty); t_c^{(2)}) \sim \frac{1}{\sigma} \quad (5.4.3.3.3)$$

confirmando, portanto, a nossa conjectura para $q = 1$ e 2 .

5.4.3.4 - Rede de Bethe Isotrópica com Ligações Diluídas "Quenched"

Até este ponto referimo-nos somente a ferromagnetos de Potts *puros*. Vamos agora considerar ferromagnetos de Potts com ligações diluídas "quenched" (onde $\mathbb{P}(J_{ij})$ é dado pela expressão (2.4.2.1)) numa rede de Bethe (vide Fig. 5.4.4.3.1a) isotrópica. Seu ponto crítico exato é dado por ⁽²²¹⁾

$$pt_c^{(q)} = \frac{1}{\sigma} \quad (\forall q, \forall z) \quad (5.4.3.4.1)$$

com σ definido em (5.4.3.3.1b).

Uma vez que a rede de Bethe tem uma dimensão efetiva infinita, podemos usar a condição (5.4.1.2) e reescrever a eq.(5.4.3.4.1) como

$$\langle s(q, h(d \rightarrow \infty)); t_c^{(q)} \rangle = \frac{1}{\sigma} \quad (\forall q, \forall z) \quad (5.4.3.4.2)$$

onde $\langle \dots \rangle$ significa a média associada a $\mathbb{P}(J_{ij})$ definido em (2.4.2.1). Vemos portanto que, neste caso randômico, a nossa conjectura se verifica exatamente $(\forall q)$ para a variável $\langle s(q, h(d)); t^{(q)} \rangle$ ao invés de $s(q, h(d)); t^{(q)}$.

5.4.4 - Predições da Conjectura para Pontos Críticos de Ferromagnetos Puros

5.4.4.1 - Redes regulares d-dimensionais ($d \geq 3$)

A aplicação da presente conjectura prediz vinte e cinco novos pontos críticos aproximados em redes regulares não planas indicadas nas Tabelas Ia (excluindo a rede BCC) e Ib do apêndice D (vide regiões delimitadas por linhas reforçadas). Estas tabelas foram calculadas usando:

- i) os valores de h indicados na Tabela II do apêndice D quando os pontos críticos são conhecidos para dois ou mais valores de q ;
- ii) o valor de $h(d)$ correspondente à rede hipercúbica d-dimensional para todas as redes com ligações apenas entre primeiros vizinhos onde somente um ponto crítico é conhecido;
- iii) o valor de h da rede com ligações entre primeiros vizinhos para as redes correspondentes com ligações entre primei-

ros e outros vizinhos mais distantes (no caso da rede quadrada com ligações entre primeiros e segundos vizinhos, esta escolha leva a uma discrepância de apenas 1% em h ; vide Tabela II do apêndice D).

Queremos esclarecer que os valores centrais da variável s indicados nas tabelas Ia e Ib do apêndice D foram obtidos usando-se os valores centrais de $t^{(2)}$ e/ou $t^{(1)} \equiv p_c$ reproduzidos na mesma linha (que aparecem logo no topo da linha). As barras de erro foram estimadas levando-se em conta o erro e/ou a dispersão existente na literatura, o erro proveniente da incerteza na determinação de h e, finalmente, o erro intrínseco da própria conjectura (este último erro mostrou ser desprezível em todas as situações onde era possível testá-lo). Vale a pena ressaltar que nessas tabelas a incerteza global nos valores de $t_c^{(q)}/q$ e $k_B T_c/qJ$ é cerca de 1% para todos os casos examinados, exceto para a rede HCP (para a qual não existe, em nosso conhecimento, nenhuma estimativa recente para p_c).

Para as redes tridimensionais (Tabela Ia do apêndice D) restringimo-nos a $1 \leq q \leq 3$ que correspondem à transição contínua ou levemente de primeira ordem. Para dimensões finitas $d \geq 4$ (Tabela Ib do apêndice D) a transição é de segunda ordem se $q \leq 2$ (cf. fig. 2.3.2.1); no entanto vale a pena ressaltar que, para a rede HSC com $d = 4$ e $q = 3$, a presente conjectura continua válida ($3J/K_B T_c = 0.3875 \pm 0.0010$ ⁽¹⁸⁶⁾) e, portanto, $s_c = 0.158 \pm 0.004$ que difere apenas de 1.9% do valor 0.161 ± 0.002 da Tabela Ib do apêndice D)

5.4.4.2 - Redes regulares no limite $d \rightarrow \infty$

Gaunt e Ruskin⁽¹⁰⁷⁾ calcularam a seguinte expansão (provavelmente assintótica) para a probabilidade crítica de ligações p_c numa rede hipercúbica simples d -dimensional:

$$p_c \equiv s(1, h; t_c^{(1)}) = \frac{1}{\sigma} + \frac{5}{2\sigma^3} + \frac{15}{2\sigma^4} + \frac{57}{\sigma^5} + \dots \quad (5.4.4.2.1)$$

onde $\sigma \equiv z-1 = 2d-1$, z sendo o número de coordenação.

Outrossim, Fisher e Gaunt⁽¹⁵⁹⁾ obtiveram uma expansão (provavelmente assintótica) para o ponto crítico de Ising, de onde se segue que:

$$t_c^{(2)} = \frac{1}{\sigma} + \frac{1}{\sigma^3} + \frac{3}{\sigma^4} + \frac{15}{\sigma^5} + \frac{256}{3\sigma^6} + \dots \quad (5.4.4.2.2)$$

É mais conveniente trabalhar aqui com expansão em σ do que em z porque os resultados numéricos obtidos para $2 \leq d \leq 7$ (possivelmente para $d > 7$ também) ficam melhores; daí termos escolhido σ^{-1} para abcissa da Fig. 1 do apêndice D.

Impondo-se que $s(1, h; t_c^{(1)}) = s(2, h; t_c^{(2)})$, obtem-se a seguinte expansão (provavelmente assintótica) para h :

$$h(\sigma) = \frac{3}{\sigma^2} + \frac{12}{\sigma^3} + \dots \quad (5.4.4.2.3)$$

Observamos que o termo σ^{-1} que aparece nas expansões (5.4.4.2.1) e (5.4.4.2.2) correspondem à aproximação de Bethe (vide eqs. (5.4.3.3.1a) e (5.4.3.3.2)) que é assintoticamente exata no limite $d \rightarrow \infty$ para *todas* redes regulares. Verificamos

imediatamente, no caso de redes hipercúbicas, a condição (5.4.1.4), a qual assegura a validade da conjectura até o termo dominante assintótico para *todas* as redes regulares. Os casos correspondentes a $q > 2$ não foram incluídos na Tabela Ib do apêndice D; no entanto, pelo menos, para todos valores de q e $d \gg 1$ para os quais a transição é apenas levemente de primeira ordem, esperamos que:

$$s(q, h(d \rightarrow \infty); t_c^{(q)}) \sim t_c^{(q)} \sim \frac{1}{\sigma} \quad (q \geq 1) \quad (5.4.4.2.4)$$

5.4.4.3 - Cactos e Árvores de Husimi

Vamos considerar cactos triangulares com números de coordenação z ($z/2$ triângulos partindo de cada sítio; vide Fig. 5.4.4.3.1b) e árvores quadradas de Husimi ($z/2$ quadrados partindo de cada sítio, vide Fig. 5.4.4.3.1c) cujos pontos críticos exatos são conhecidos para $q = 1, 2$. O valor crítico p_c para $q = 1$ associado a um cacto triangular é dado por ^(77,273):

$$p_c + p_c^2 - p_c^3 = \frac{1}{\sigma - 1} \quad (5.4.4.3.1)$$

com σ definido em (5.4.3.3.1b). Veja Tabela Ib do apêndice D para os valores correspondentes a $z = 4, 6, 8, 12$; $\sigma \rightarrow \infty$ fornece $p_c \sim \sigma^{-1}$, i.e., o limite da rede de Bethe (eq. (5.4.3.4.1) para $t^{(q)} = 1$). O valor crítico para $q = 2$ fornece ⁽²⁷³⁾

$$t_c^{(2)} = \frac{1}{2}(\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 4}) \quad (5.4.4.3.2)$$

veja Tab. Ib do apêndice D para valores correspondentes a $z = 4$,

6,8,12; $\sigma \rightarrow \infty$ leva a $t_c^{(2)} \sim \sigma^{-1}$, i.e., o limite da rede de Bethe (eq. 5.4.3.4.1 para $p = 1$ e $q = 2$). Analogamente temos que, para a árvore quadrada de Husimi ($z = 4$), o caso $q = 1$ fornece⁽⁷⁷⁾:

$$1 - 2p_c - 2p_c^2 - 2p_c^3 + 3p_c^4 = 0 \quad (5.4.4.3.3)$$

(veja Tab. Ib do apêndice D para o valor de P_c) e $q = 2$ leva a (Ono⁽²¹⁹⁾):

$$1 - 2t_c^{(2)} - 2(t_c^{(2)})^2 - 2(t_c^{(2)})^3 + (t_c^{(2)})^4 = 0 \quad (5.4.4.3.4)$$

(veja Tab. Ib do apêndice D para o valor de $t_c^{(2)}$).

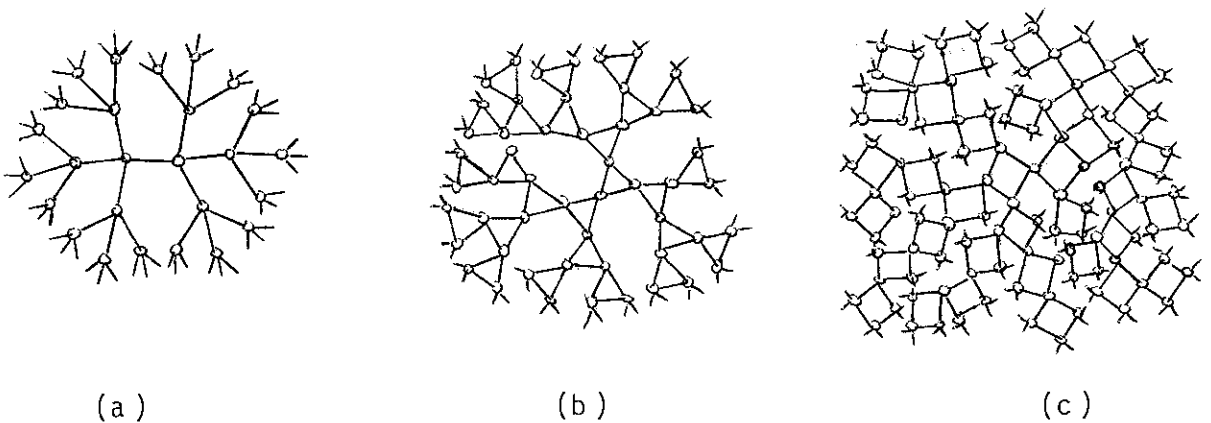


Fig. 5.4.4.3.1 - Algumas pseudo-redes: (a) rede de Bethe com $z = 4$; (b) cacto triangular com $z = 4$; (c) árvore quadrada de Husimi com $z = 4$.

Na situação presente, não podemos testar a nossa conjectura, mas podemos usá-la (i.e., impor que $p_c = s(2, h(d_{ef}); t_c^{(2)})$) para calcular os valores de h associados (veja Tab. II do apêndice D) e, através da fig. 1 do apêndice D, estimar as dimen-

sões efetivas d_{ef} (Tab.II do apêndice D). Como os valores encontrados para d_{ef} são finitos e maiores que 4, parece plausível que nas árvores de Husimi e nos cactos as transições, para $q \geq 3$, são de primeira ordem. Vimos anteriormente, no caso da rede HSC com $d = 4$ e $q = 3$, que nossa conjectura fornece estimativas razoáveis mesmo para transições de fase de primeira ordem. Se isto permanecer verdadeiro para as árvores de Husimi e cactos, então esperaríamos que, para $q = 3$, $t_c^{(3)} \approx 0.339$ para a árvore quadrada de Husimi com $z = 4$, e $t_c^{(3)} \approx 0.364, 0.204, 0.144, 0.0911$ para cactos triangulares com números de coordenação 4, 6, 8 e 12 respectivamente.

5.4.5 - Predições da Conjectura para Fronteiras Críticas de Ferromagnetos Puros

Vamos agora aplicar nossa conjectura para calcular FC's inteiras como formulado na eq.(5.4.2.2).

5.4.5.1 - Rede Cúbica com ligações entre primeiros e segundos vizinhos

Seja uma rede cúbica com ligações entre primeiros e segundos vizinhos cujas constantes de acoplamento ferromagnéticas independentes são J_1 e J_2 associadas respectivamente às interações entre primeiros vizinhos e entre segundos vizinhos. Como em ambos casos extremos $J_2/J_1 = 0$ (rede SC com primeiros vizinhos) e $J_1/J_2 = 0$ (rede constituída de duas sub-redes independentes FCC com primeiros vizinhos) não há mudança de dimensão

d, podemos aplicar nossa conjectura.

Nenhuma proposta foi feita, em nosso conhecimento, para a FC desta rede nos casos $q \neq 2$. As temperaturas críticas aproximadas para $q = 2$ foram calculadas por Dalton e Wood⁽²⁷⁰⁾, através de expansões em séries para $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$. A partir dos resultados da ref. (270) obtivemos (usando $h = h^{SC} = 0.377$), no espaço $s_1^{(2)} - s_2^{(2)}$, a curva com uma linha cheia mostrada na fig. 2 do apêndice D. A incerteza no valor de h^{SC} produz uma incerteza na FC desenhada pelas duas linhas tracejadas; a superior coincide, na escala da fig. 2 do apêndice D, com a FC do modelo de Ising obtida usando-se

$$h = h^{FCC} = 0.412$$

Conjecturamos, então, que a FC, para *qualquer* q (pelo menos para $1 \leq q \leq 3$), é bem aproximada, para $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$, pela curva em linha cheia cuja extrapolação (em linha pontilhada) para valores superiores de J_2/J_1 deve interceptar o eixo $s_2^{(q)}$ no valor

$$s_2^{(q)} = p_c^{FCC} = 0.119 \pm 0.001$$

(veja Tab. Ia do apêndice D).

5.4.5.2 - Rede BCC com ligações entre primeiros e segundos vizinhos

Vamos considerar uma rede BCC onde J_1 e J_2 estão associados respectivamente às interações ferromagnéticas entre

primeiros e segundos vizinhos. Analogamente ao caso anterior, podemos aplicar nossa conjectura, visto que ambos os casos limites $J_2/J_1=0$ (rede BCC entre primeiros vizinhos) e $J_1/J_2=0$ (rede constituída de duas sub-redes independentes SC com primeiros vizinhos) são tridimensionais também.

A FC para esta rede foi calculada, em nosso conhecimento, somente para $q=2$. Usando os valores de Dalton e Wood⁽²⁷⁰⁾ para as temperaturas críticas de Ising para $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ e $h = h^{BCC} = 0.372 \pm 0.037$, obtivemos a FC para $q=2$ (representada por uma linha cheia na fig. 3 do apêndice D), com uma certa margem de erro (linhas tracejadas). Queremos ressaltar que h^{BCC} e h^{SC} diferem tão pouco (veja Tab. II do apêndice D) entre si que se usássemos h^{SC} obteríamos uma curva indistinguível, na escala da fig. 3 do apêndice D, da curva anterior. De acordo com nossa conjectura, a referida FC continua válida também para outros valores de q (pelo menos para $1 \leq q \leq 3$). A extrapolação para $J_2/J_1 > 1$ (linha pontilhada na fig. 3 do apêndice D) deve interceptar o eixo $s_2^{(q)}$ no valor

$$s_2^{(q)} = p_c^{SC} = 0.247 \pm 0.003$$

(veja Tab. Ia do apêndice D).

5.4.5.3 - Rede FCC com ligações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos

Vamos denotar por J_1 , J_2 e J_3 as constantes de aco-

plamentos independentes associados respectivamente às interações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos na rede FCC. Mais uma vez, todos os casos limites $J_2/J_1 = J_3/J_1 = 0$ (rede FCC com primeiros vizinhos), $J_1/J_2 = J_3/J_2 = 0$ (rede constituída de 4 sub-redes independentes SC com primeiros vizinhos) e $J_1/J_3 = J_2/J_3 = 0$ (rede FCC com terceiros vizinhos; $z=24$) têm a mesma dimensão $d=3$, permitindo pois a aplicação de nossa conjectura. A superfície crítica para esta rede foi estimada, em nosso conhecimento, somente para $q=2$. Philhours⁽²⁷⁴⁾ calculou as temperaturas críticas de Ising $0 \leq J_2/J_1 \leq 2$ e $0 \leq J_3/J_1 \leq 2$, enquanto que Dalton e Wood⁽²⁷⁰⁾ consideraram somente o caso particular da rede FCC com primeiros e segundos vizinhos para $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ ($J_3/J_1 = 0$). Estes resultados fornecem (para $h=h^{\text{FCC}}=0.412 \pm 0.026$) a superfície crítica desenhada (linha cheia) na fig. 4 do apêndice D. O erro introduzido pela incerteza em h é invisível na escala adotada. O mesmo acontece com a discrepância (inferior a 0.3% nas variáveis $s_i^{(2)}$) entre os resultados das referências⁽²⁷⁰⁾ (indicados por cruzeiros na fig. 4 do apêndice D) e ⁽²⁷⁴⁾. Uma vez mais conjecturamos que esta superfície crítica é válida para, pelo menos, $1 \leq q \leq 3$; na sua extrapolação deve interceptar o eixo $s_2^{(q)}$ em (cf. Tab. Ia do apêndice D)

$$s_2^{(q)} = p_c^{\text{SC}} = 0.247 \pm 0.003$$

e o eixo $s_3^{(q)}$ em

$$s_3^{(q)} = p_c^{\text{FCC}}(3) = 0.054 \pm 0.004$$

cuja estimativa foi obtida comparando-se extrapolações no espa-

ço $s_1^{(2)} - s_2^{(2)} - s_3^{(2)}$, de diferentes linhas críticas iso- J_2/J_1 .

5.4.5.4 - Rede de Bethe Anisotrópica

Turban⁽⁷⁹⁾ obteve a FC *exata* para percolação de ligações numa rede de Bethe (de número de coordenação z) com n_1 e $n_2 = z - n_1$ ligações com probabilidades de ocupação p_1 e p_2 respectivamente (veja eq. (5.4) da ref. (79)). Seguindo seu procedimento⁽⁷⁹⁾, generalizamos esta FC para o caso de n_1, n_2, \dots, n_N ligações (onde $\sum_{i=1}^N n_i = z$) com probabilidades p_1, p_2, \dots e p_N respectivamente. Obtivemos então, sob forma de determinante, a seguinte equação crítica:

$$\begin{vmatrix} 1-p_1(n_1-1) & -p_1 n_2 & \dots & -p_1 n_N \\ -p_2 n_1 & 1-p_2(n_2-1) & \dots & -p_2 n_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -p_N n_1 & -p_N n_2 & \dots & 1-p_N(n_N-1) \end{vmatrix} = 0 \quad (5.4.5.4.1)$$

Como vimos que $s(q, 0; t_i^{(q)}) = t_i^{(q)}$ para uma rede de Bethe, então conjecturamos (de acordo com eq. (5.4.5.4.1)) que a FC *exata* para todos valores de q é dada por:

$$\begin{vmatrix} 1-t_1^{(q)}(n_1-1) & -t_1^{(q)} n_2 & \dots & -t_1^{(q)} n_N \\ -t_2^{(q)} n_1 & 1-t_2^{(q)}(n_2-1) & \dots & -t_2^{(q)} n_N \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -t_N^{(q)} n_1 & -t_N^{(q)} n_2 & \dots & 1-t_N^{(q)}(n_N-1) \end{vmatrix} = 0 \quad (\forall q)$$

(5.4.5.4.2)

5.4.6 - Predições da Conjectura para Fronteiras Críticas de Ferromagnetos de Potts com Ligações Randômicas Genéricas "Quenched" em Redes de Bethe Isotrópicas.

Conforme vimos na subseção 5.4.3.4, a nossa conjectura estendida para $\langle s \rangle$ foi verificada para ferromagnetos de Potts com ligações diluídas "quenched". Recentemente Tsallis⁽²⁴⁰⁾ aplicou esta conjectura para ferromagnetos de Potts "quenched" em redes quadradas anisotrópicas com distribuições arbitrárias de probabilidades $P_1(J_{ij})$ para as ligações horizontais e $P_2(J_{ij})$ para ligações verticais (propôs, como uma boa aproximação desta FC para $1 \leq q \leq 4$, a equação $\langle s_1 \rangle p_1 + \langle s_2 \rangle p_2 = 1$ que tem a mesma forma funcional da FC exata no caso puro, i.e., eq. (5.3.3.1.2)). Obteve, então, resultados muito satisfatórios que contém, como casos particulares, um grande número de comportamentos assintóticos exatos (ou que acreditamos serem exatos). Assim sendo, podemos aplicar a nossa conjectura para o modelo de Potts ferromagnético com ligações randômicas "quenched" numa rede de Bethe isotrópica (com número de coordenação z). A FC para $q=2$ correspondente ao problema de ligações mistas genéricas "quenched" (onde a constante de acoplamento J_{ij} associada a cada ligação é uma variável randômica independente com uma distribuição de probabilidades $P(J_{ij})$ arbitrária, $J_{ij} \geq 0$) pode ser escrita como⁽²⁷⁵⁾:

$$\langle t_c^{(2)} \rangle_{P(J_{ij})} = \frac{1}{\sigma} \quad (5.4.6.1)$$

onde σ é definido em (5.4.3.3.1b)

Conjecturamos que a FC exata para qualquer q é:

$$\langle t_c^{(q)} \rangle_{P(J_{ij})} = \frac{1}{\sigma} \quad (\forall q) \quad (5.4.6.2)$$

onde $\langle \dots \rangle$ significa a média associada a $P(J_{ij})$.

Observamos que no caso diluído reobtemos o resultado de Southern e Thorpe ⁽²²¹⁾ (vide eq.(5.4.3.4.1)).

5.5 - CONCLUSÕES

Neste capítulo formulamos uma conjectura referente a fronteiras críticas de ferromagnetos de Potts com q -estados. Esta conjectura estabelece essencialmente que, através do uso de uma variável conveniente (variável s), podemos exhibir para uma dada rede, uma quase-universalidade com respeito a q . Esta conjectura foi verificada, com uma precisão satisfatória (exata no caso da rede quadrada anisotrópica), para várias redes planas e não planas (SC, FCC, BCC, redes regulares no limite $d \rightarrow \infty$, rede de Bethe isotrópica para o problema ferromagnético com ligações diluídas "quenched").

A presente conjectura permitiu uma série de predições a saber:

- i) cinquenta *novos* pontos críticos aproximados (vinte e cinco pontos em redes planas - vide Tab. I do apêndice C; vinte e cinco pontos em redes não-planas - vide Tabs. Ia e Ib do apêndice D) para ferromagnetos de Potts puros em redes regulares;
- ii) o ponto crítico possivelmente exato do ferromagneto de Potts com q -estados em *qualquer* rede regular d -dimensional (com número de coordenação z) é, no limite $d \rightarrow \infty$, assintoticamente dado, para todos os valores de $q \geq 1$, pela eq.(5.4.4.2.4), ou seja,

$$\frac{K_B T_c}{J} \sim q / \ln \left(\frac{z+q-2}{z-2} \right);$$

- iii) os pontos críticos aproximados para ferromagnetos de Potts puros em alguns cactos triangulares e na árvore de Husimi com $z=4$ (esperamos que a transição seja de primeira ordem para $q>2$);
- iv) a fronteira crítica aproximada para ferromagnetos de Potts puros nas redes 4-8 inhomogênea (eq. 5.3.4.1.1) e sua dual.
- v) as linhas (ou superfícies) críticas aproximadas para ferromagnetos de Potts puros na rede cúbica com primeiros e segundos vizinhos, na rede BCC com primeiros e segundos vizinhos e na rede FCC com primeiros, segundos e terceiros vizinhos;
- vi) a fronteira crítica possivelmente exata para o ferromagneto de Potts puro em redes de Bethe totalmente anisotrópicas (eq.(5.4.5.4.2));
- vii) a fronteira crítica possivelmente exata para o ferromagneto de Potts com ligações randômicas genéricas "quenched" em redes de Bethe isotrópicas (eq.(5.4.6.2)).

CAPÍTULO 6

FRONTEIRAS CRÍTICAS DE FERROMAGNETOS DE ISING COM LIGAÇÕES DILUÍDAS "QUENCHED" NAS REDES TRIANGULAR E "HONEYCOMB"

6.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo calculamos, através de doze procedimentos diferentes de GR no espaço real (todos eles usando transformações do tipo triângulo-estrela e dualidade), aproximações acuradas para as fronteiras críticas associadas a ferromagnetos de Ising (de spin 1/2) com ligações (entre primeiros vizinhos) diluídas "quenched" nas redes triangular e "honeycomb" isotrópicas. A hamiltoniana que descreve estes modelos é dada pela eq. (2.2.1.1) onde $H = 0$ e a constante de acoplamento J_{ij} é uma variável randômica independente com distribuição de probabilidades $\mathbb{P}(J_{ij})$ definida em (2.4.2.1). É conveniente usarmos a variável transmissividade térmica de uma ligação definida em (5.2.1) que, para $q = 2$, reduz-se a:

$$t \equiv \tanh(J_{ij}/k_B T) \quad (6.1.1)$$

Esta variável aparece naturalmente em problemas de Ising com spins 1/2 (Domb ⁽²⁰⁾, Nelson e Fisher ⁽²⁷⁶⁾, Young e Stinchcombe ⁽⁴³⁾, Yeomans e Stinchcombe ⁽²³²⁾, Tsallis e Levy ⁽²³³⁾ entre outros); a lei da probabilidade (2.4.2.1) pode ser reescrita como:

$$P(t) \equiv P(t;p,t_0) = (1-p)\delta(t) + p\delta(t-t_0) \quad (6.1.2a)$$

com

$$t_0 \equiv \tanh(J/k_B T) \quad (6.1.2b)$$

As FC's exatas para este modelo nas redes triangular e "honeycomb" ainda são desconhecidas; os únicos resultados *exatos* disponíveis são a temperatura crítica para $p = 1$ ⁽¹⁵⁶⁾, a probabilidade crítica p_c para $T = 0$ ⁽⁵²⁾ e as derivadas $(dt_0/dp)_{p=1}$ e $(dt_0/dp)_{p=p_c}$ ⁽²³⁷⁾ (limites superior e inferior ⁽²²²⁾ para $t_0(p)$ são conhecidos também). Em nosso conhecimento, todas as FC's a proximadas, à exceção de uma, que foram propostas (Tatsumi e Kawasaki ⁽²³¹⁾, Oguchi e Ueno ⁽²⁷⁷⁾, Yeomans e Stinchcombe ⁽²³²⁾, Turban ⁽²²⁷⁾, Guilmin e Turban ⁽²²⁸⁾, Kinzel e Domany ⁽²¹¹⁾) não são simultaneamente *exatas* em *ambos* limites $T = 0$ e $p = 1$; a única exceção é a "aproximação a três ligações" de Guilmin e Turban ⁽²²⁸⁾ (a qual passaremos a referir por GT). Eles usaram uma extensão para "clusters" da aproximação de interação efetiva onde o meio efetivo escolhido foi o modelo de Ising puro; esta escolha leva também a um valor exato para $(dt_0/dp)_{p=1}$. Nosso objetivo principal é a determinação *acurada* das mencionadas FC's para as redes triangular e "honeycomb".

6.2 - RESULTADOS EXATOS DOS MODELOS PUROS OBTIDOS POR UM PROCEDIMENTO UNIFICADO DE GRAFOS

6.2.1 - Revisão do Procedimento Original

A transformação triângulo-estrela (TTE) (introduzida por Onsager ⁽⁹⁾ em 1944) e a transformação de dualidade (TD) (introduzida por Kramers e Wannier ⁽¹⁵¹⁾ em 1941, interpretada

geometricamente por Onsager em 1944 e colocada em termos de ligações série-paralelo por Tsallis e Levy⁽²³³⁾ e Alcaraz e Tsallis⁽¹⁶⁵⁾) são os ingredientes básicos que, em contextos diferentes, conduzem aos pontos críticos *exatos* $K_C^\Delta \equiv J/k_B T_C^\Delta$ e $K_C^\Upsilon \equiv J/k_B T_C^\Upsilon$ ⁽¹⁵⁶⁾ do modelo de Ising puro e p_C^Δ e p_C^Υ ⁽⁵²⁾ do modelo de percolação de ligações puro (Δ e Υ denotam, respectivamente, as redes triangular e "honeycomb"). Vamos, a seguir, rever sucintamente os argumentos originais que foram utilizados para obter estes pontos críticos para, digamos, a rede triangular.

Para o modelo de Ising, Wannier⁽¹⁵⁶⁾ estabeleceu, através da TTE (veja Fig. 1 do apêndice E), uma conexão entre a função de partição $Z_\Delta(K)$ da rede triangular num ponto K e a função de partição $Z_\Upsilon(R)$ da rede "honeycomb" no ponto $R = \arg \cosh[(1+e^{4K})/2]/2$. Por outro lado, através da TD, ele relacionou $Z_\Upsilon(R)$ com $Z_\Delta(K')$ onde $K' = \text{arc cotanh } e^{2R} \equiv R^D$ (onde relembramos que D refere-se a dual). Desta forma, Wannier deduziu uma relação entre a função de partição Z_Δ de rede triangular nos pontos K e K' que, sob a hipótese de haver uma única singularidade em Z_Δ , conduz a $K_C^\Delta = K = K' = (\ln 3)/4$.

Para o problema de percolação de ligações, Sykes e Essam⁽⁵²⁾ estabeleceram inicialmente uma relação (análoga à mencionada TD) entre séries do número médio de "clusters" finitos por sítio (que desempenha o mesmo papel que a energia livre em problemas térmicos; vide subseção 2.1.4) $\langle n \rangle_\Delta(p)$ da rede triangular para $p \ll p_C^\Delta$ e séries de $\langle n \rangle_\Upsilon(1-p)$ da rede "honeycomb" para $p \gg p_C^\Upsilon$; assumindo um único ponto singular em $\langle n \rangle_\delta(p)$ (onde $\delta = \Delta$ ou Υ) eles obtiveram que $p_C^\Upsilon = (p_C^\Delta)^D \equiv 1-p_C^\Delta$. Em seguida, con

sideram um único triângulo-estrela (por exemplo, ABCO na fig.1 do apêndice E) onde as ligações do triângulo e as da estrela tinham probabilidades de ocupação p e $p^D \equiv 1-p$ respectivamente. Igualando a conectividade no triângulo com a conectividade na estrela, chegaram a uma única equação independente não-trivial (equivalente à eq. (j) da Tab. 1 do apêndice E). A raiz desta equação é a probabilidade crítica exata $p_c^\Delta = 2 \text{ sen}(\pi/18)$.

6.2.2 - Procedimento Unificado de Grafos

Para o modelo de Ising puro, podemos reobter os resultados de Wannier⁽¹⁵⁶⁾ considerando o par de grafos com *dois terminais* (vide Tsallis e Levy⁽²⁶⁶⁾ e referências internas) mostrados na Fig. (a) da Tab. 1 do apêndice E ($i=2$) (ou alternativamente o par de grafos com *dois terminais* da Fig(b) da Tab.1 do apêndice E ($i=2D$)) onde introduzimos as transmissividades térmicas $t_0 \equiv \tanh K$ e $r_0 \equiv \tanh R$. Para ser mais preciso, associamos $t_0(r_0)$ com cada ligação do triângulo (estrela) da Fig.(a) da Tab. 1 do apêndice E e obtivemos (veja, por exemplo, Yeomans e Stinchcombe⁽²³²⁾, Tsallis e Levy⁽²⁶⁶⁾) a transmissividade equivalente $G_\Delta^{(2)}(t_0)$ ($G_Y^{(2)}(r_0)$) entre os dois terminais (veja item (d) da Tab. 1 do apêndice E). A TTE usual (que envolve um traço sobre todas as configurações possíveis do spin central do "cluster" Y) leva a:

$$\frac{t_0 + t_0^2}{1 + t_0^3} = r_0^2 \quad (6.2.2.1)$$

Se consideramos agora que, no ponto crítico, $r_0 = t_0^D \equiv (1-t_0)/(1+t_0)$

obtemos a equação indicada no item (d) da Tab. 1 do apêndice E. O procedimento que acabamos de utilizar para as células que aparecem na Fig. (a) da Tab. 1 do apêndice E pode ser aplicado também às células mostradas na Fig. (b) da mesma tabela (estas células são, na realidade, as duais⁽²⁶⁶⁾ das células anteriores) fornecendo, então, a equação indicada no item (e) da Tab. 1 do apêndice E.

Para o modelo de percolação de ligações puro, podemos reobter os resultados de Sykes e Essam⁽⁵²⁾ considerando-se os grafos com *três terminais* ($i=3$) desenhados na Fig. (c) da Tab. 1 do apêndice E, onde p e p^D são as probabilidades de ocupação das células triângulo e estrela respectivamente. Igualando as probabilidades equivalentes $G_{\Delta}^{(3)}(p)$ e $G_Y^{(3)}(p^D)$ entre os terminais (i.e., as probabilidades dos três terminais estarem conectados) em ambas as células obtivemos a eq. (j) da Tab. 1 do apêndice E, cuja raiz é o valor exato p_C^{Δ} .

Em outras palavras, vimos que a TTE usual definida no ponto crítico do modelo de Ising puro pode ser escrita em termos de pares de grafos com *dois terminais* ($i=2$ ou $2D$), enquanto que a TTE definida no ponto crítico de percolação de ligação pura pode ser expressa em termos de um par de grafos com *três terminais* ($i=3$). Portanto, surge naturalmente a seguinte questão: poderíamos obter *ambos* pontos críticos *exatos* usando o *mesmo* par de grafos? A resposta é positiva e podemos verificar que isto é possível para *cada* par de grafos ($i=2, 2D, 3$) que consideramos na Tab. 1 do apêndice E (para deduzirmos a equação indicada no item (f) da mesma tabela usamos o método de "corte-colaço"⁽²⁶⁶⁾). Mais genericamente, pode-se verificar que isto ocorre

para pares de células maiores (tais como o da Fig. 1 do apêndice E) com um número qualquer de terminais posicionados sobre quaisquer vértices (vide apêndice F) para o modelo ferromagnético de Potts *anisotrópico* (onde há uma quebra da simetria de permutação nos grafos). Na realidade, entre os três pares de grafos da Tab. 1 do apêndice E e para o modelo ferromagnético de Potts *anisotrópico* com ligações randômicas genéricas "quenched", o par de grafos com *três terminais* ($i=3$) é o *único* que fornece FC's que não violam ⁽²⁴¹⁾ o isomorfismo ⁽³¹⁾ existente entre o modelo de Potts para $q \rightarrow 1$ e a percolação de ligações. Portanto, para problemas mais gerais, o par de grafos triângulo-estrela com *três terminais* ($i=3$) desenhado no item (c) da Tab. 1 do apêndice E é superior a qualquer um dos pares de grafos com *dois terminais* ($i=2, 2D$) que aparecem na mesma tabela.

Até este ponto consideramos somente a rede triangular; os pontos críticos exatos para a sua rede dual ($t_c^Y = (t_c^\Delta)^D = 1/\sqrt{3}$ e $p_c^Y = (p_c^\Delta)^D = 1 - 2\text{sen}(\pi/18)$) podem ser deduzidos similarmente substituindo-se $\tau \leftrightarrow \tau^D$ ($\tau = t_0, p$).

6.3 - MODELO DE ISING COM LIGAÇÕES DILUÍDAS "QUENCHED" NA REDE TRIANGULAR

6.3.1 - Método dos Grafos

O fato das transformações combinadas TTE e TD definidas em ambos os casos limites $p = 1$ (eqs. que aparecem nos itens (d), (e), e (f) da Tab. 1 do apêndice E) e $t_0 = 1$ (eqs. indicadas nos itens (g), (h) e (j) da Tab. 1 do apêndice E) poderem ser expressas pelos *mesmos* pares de grafos, permite-nos generali-

zar estes resultados para *qualquer* p e t_0 , obtendo então aproximação para a FC associada à rede triangular. Para realizarmos isto associamos a cada ligação dos grafos mostrados na Tab. 1 do apêndice E, as distribuições $P(t)$ (eq. (6.1.2a) (convencionaremos que estes grafos são do tipo $\Delta^{(i)}$) e $P^D(t)$ (convencionaremos que estes grafos são do tipo $\Upsilon^{(i)}$) ao invés de τ e τ^D respectivamente, onde $P^D(t)$ é a distribuição dual de $P(t)$, ou seja, é a distribuição de probabilidades associada à variável randômica $t^D \equiv (1-t)/(1+t)$. $P^D(t)$ deve, portanto, satisfazer a:

$$P^D(t) |dt| = P(t^D) |dt^D| \quad \forall t \quad (6.3.1.1)$$

ou seja:

$$P^D(t) = \frac{2}{(1+t)^2} P(t^D) \quad (6.3.1.2)$$

de onde se segue, para o caso particular de $P(t)$ dado por (6.1.2a), que

$$P^D(t) \equiv P^D(t;p,t_0) = (1-p)\delta(t-1) + p\delta(t-t_0^D) \quad (6.3.1.3)$$

As distribuições equivalentes de transmissividades $P_\delta^{(i)}(t)$ ($\delta = \Delta, \Upsilon$; $i = 2, 2D, 3$) associadas a cada um dos grafos desenhados nas Figs. (a), (b) e (c) da Tab. 1 do apêndice E estão dadas pelas eqs. (6a-6f) do apêndice E. Cada distribuição equivalente $P_\delta^{(i)}(t)$ foi calculada da seguinte forma:

$$P_\delta^{(i)}(t) = \sum_{\ell=0}^{n_\delta^{(i)}} a_{\ell\delta}^{(i)} p^\ell (1-p)^{n_\delta^{(i)} - \ell} [t - D_{\ell\delta}^{(i)}(t_0)] \quad (6.3.1.4)$$

($\delta = \Delta, \Upsilon$; $i = 2, 2D, 3$)

onde, para cada um dos três grafos do tipo $\Delta^{(i)}$ ($\Upsilon^{(i)}$) ($i=2, 2D, 3$) representados na Tab. 1 do apêndice E, $a_{\ell\Delta}^{(i)}$ ($a_{\ell\Upsilon}^{(i)}$) é o número de configurações topologicamente equivalentes que têm ℓ ligações (relevantes) com transmissividade t_0 (t_0^D) e $n_{\Delta}^{(i)-\ell}$ ($n_{\Upsilon}^{(i)-\ell}$) ligações (relevantes) com transmissividade 0(1); estas configurações têm uma transmissividade equivalente $D_{\ell\Delta}^{(i)}(t_0)$ ($D_{\ell\Upsilon}^{(i)}(t_0^D)$).

Neste ponto, vamos usar procedimentos similares ao utilizado nos "GR do tipo-dual" (que inclui RG3 a RG6) introduzido por Tsallis e Levy⁽²³³⁾ no caso do modelo de Ising com ligações diluídas "quenched" na rede quadrada. Este método consiste em construir GR's que renormalizam $P_{\Delta}^{(i)}(t)$ em

$$P_{\Upsilon}^{(i)}(t) \equiv P_{\Upsilon}^{(i)}[P^D(t; p', t_0')] \quad (i = 2, 2D, 3) \quad (6.3.1.5)$$

Vamos utilizar então, similarmente ao problema de GR com dois parâmetros que abordamos no capítulo 4 (vide subseções 4.2.1 e 4.2.2), dois procedimentos diferentes de GR, a saber: GR canônico do tipo-dual (GRCD) e GR paramétrico do tipo-dual (GRPD).

6.3.2 - Grupos de Renormalização Canônicos do tipo-dual (GRCD)

O tratamento GRCD é similar ao RG4 de Tsallis e Levy⁽²³³⁾ e envolve o cálculo de linhas de fluxo e pontos fixos pelo procedimento usual que descrevemos no capítulo 4. Construímos seis GRCD's distintos que denotamos por (r, i) -GRCD ($r=t$ ou s ; $i=2, 2D$ ou 3), onde $s=s^{(2)}$ é um caso particular ($q=2$) da variável $s^{(q)}$ definida em (5.3.1.1), r é a variável sobre a qual é feita a média e i refere-se ao par de grafos triângulo-estrela correspondente (veja Tab.1 do apêndice E). Cada (r, i) -GRCD é definido a

través do seguinte par de equações:

$$\langle r \rangle_{P_{\Delta}}^{(i)} \equiv h_r^{(i)}(p, t_0) = \langle r \rangle_{P_Y}^{(i)} \equiv f_r^{(i)}(p', t_0^D) \quad (6.3.2.1a)$$

$$\langle r^2 \rangle_{P_{\Delta}}^{(i)} \equiv k_r^{(i)}(p, t_0) = \langle r^2 \rangle_{P_Y}^{(i)} \equiv g_r^{(i)}(p', t_0^D) \quad (6.3.2.1b)$$

$$(r=t, s; i=2, 2D, 3)$$

onde relembramos que

$$s \equiv \frac{\ln(1+t)}{\ln 2} \quad (6.3.2.2)$$

e $\langle \dots \rangle_P$ denota uma média sobre a distribuição P .

Usamos a variável s visando a obter o valor *exato* de $(dt_0/dp)_{p=p_c^{\Delta}}$, tal como ocorreu para o modelo de Ising com ligações diluídas "quenched" na rede quadrada ⁽²³⁴⁾. Observe que as eqs. (6.3.2.1) poderiam ser escritas equivalentemente em termos dos cumulantes de primeira ordem $K_1^{(r)}(P^{(i)})$ e de segunda ordem $K_2^{(r)}(P^{(i)})$ associados com $P^{(i)}$ (onde $P^{(i)} = P_{\Delta}^{(i)}, P_Y^{(i)}$) da seguinte forma:

$$K_1^{(r)}(P_{\Delta}^{(i)}) = K_1^{(r)}(P_Y^{(i)}) \quad (6.3.2.3a)$$

$$(P^{(i)} = P_{\Delta}^{(i)}, P_Y^{(i)})$$

$$K_2^{(r)}(P_{\Delta}^{(i)}) = K_2^{(r)}(P_Y^{(i)}) \quad (6.3.2.3b)$$

onde

$$K_1^{(r)}(P^{(i)}) \equiv \langle r \rangle_P^{(i)} \quad (6.3.2.4a)$$

e

$$(P^{(i)} = P_{\Delta}^{(i)}, P_Y^{(i)})$$

$$K_2^{(r)}(P^{(i)}) \equiv \langle r^2 \rangle_P^{(i)} - (\langle r \rangle_P^{(i)})^2 \quad (6.3.2.4b)$$

Cumpra ressaltar que as eqs. que aparecem na Tab. 1 do apêndice E são casos particulares ($p = p' = 1$, $t_0 = t'_0$ e $t_0 = t'_0 = 1$, $p = p'$) do sistema de eqs. (6.3.2.1). Portanto, *todos os GRCD's contêm os pontos críticos exatos dos modelos de Ising puro* ($1, t_C^{\Delta}$) *e da percolação de ligações pura* ($p_C^{\Delta}, 1$) *como pontos fixos*. A linha de fluxos que une esses pontos fornece para cada (r, i) -GRCD, uma aproximação para a FC que estamos procurando (veja Tabs. 2a e 3a do apêndice E). Os $(s, 2)$ - e $(s, 2D)$ -GRCD's fornecem uma mesma FC devido a certas propriedades especiais^(*) da variável s e às seguintes relações

$$P_{\Delta}^{(2D)}(t) = [P_Y^{(2)}(t)]^D \quad (6.3.2.5a)$$

e

$$P_Y^{(2D)}(t) = [P_{\Delta}^{(2)}(t)]^D \quad (6.3.2.5b)$$

Todas estas cinco FC's distintas são bem representadas pela mesma curva (T) desenhada na Fig. 2a (ou 2b) do apêndice E, uma vez que as discrepâncias entre elas (menores que 1.1% na variável t_0) são invisíveis nas escalas das figuras.

Vamos agora discutir mais detalhadamente como as eqs. (6.3.2.1) fornecem várias propriedades críticas do presente modelo, em particular o valor *exato* da derivada $(dt_0/dp)_{p=p_C^{\Delta}}$ nas aproximações (s, i) -GRCD's ($i=2, 2D, 3$). Primeiramente, queremos ressaltar que as distribuições de transmissividades $P_{\Delta}^{(i)}(t)$ e

(*) Estas propriedades são $K_1^{(s)}(P) = 1 - K_1^{(s)}(P^D)$ e $K_2^{(s)}(P) = K_2^{(s)}(P^D)$, onde P é uma distribuição arbitrária.

$p'_{\Upsilon}^{(i)}(t)$ ($i=2, 2D, 3$) (veja eqs. (6) do apêndice E) têm as seguintes formas gerais:

$$p_{\Delta}^{(i)}(t) = \alpha_0^{(i)}(p) \delta(t) + \sum_{\ell=1,2,\dots} \alpha_{\ell}^{(i)}(p) \delta[t - A_{\ell}^{(i)}(t_0)] \quad (6.3.2.6a)$$

$$(i=2, 2D, 3)$$

$$p'_{\Upsilon}^{(i)}(t) = \beta_0^{(i)}(p') \delta(t-1) + \sum_{\ell=1,2,\dots} \beta_{\ell}^{(i)}(p') \delta[t - B_{\ell}^{(i)}(t_0^D)] \quad (6.3.2.6b)$$

onde

$$\alpha_1^{(i)}(p) = (p)^{n_{\Delta}^{(i)}} ; \quad \beta_1^{(i)}(p') = (p')^{n_{\Upsilon}^{(i)}} \quad (6.3.2.7a)$$

$$\alpha_{\ell}^{(i)}(p) = (1-p) \phi_{\ell}^{(i)}(p) ; \quad \beta_{\ell}^{(i)}(p') = (1-p') \theta_{\ell}^{(i)}(p') \quad (\ell \neq 1) \quad (6.3.2.7b)$$

$$\sum_{\ell=0,1,\dots} \alpha_{\ell}^{(i)}(p) = \sum_{\ell=0,1,\dots} \beta_{\ell}^{(i)}(p) = 1 \quad \forall p \quad (6.3.2.7c)$$

$$(i=2, 2D, 3)$$

sendo $n_{\Delta}^{(i)}$ ($n_{\Upsilon}^{(i)}$) o número de ligações relevantes do grafo do tipo $\Delta^{(i)}$ ($\Upsilon^{(i)}$) ($i=2, 2D, 3$).

Segue-se das igualdades (6.3.2.7) que:

$$\alpha_{\ell}^{(i)}(p=1) = \beta_{\ell}^{(i)}(p'=1) = \delta_{\ell,1} \quad (\text{delta de Kronecker}) \quad (\ell=0,1,\dots)$$

$$(i=2, 2D, 3)$$

$$(6.3.2.8a)$$

Observamos também que, uma vez que a transmissividade equivalente t_{eq} de qualquer grafo constituído de ligações cujas trans-

missividades são todas iguais a $1(0)$ e $t_{eq}=1(0)$, $A_{\ell}^{(i)}(t_0)$ e $B_{\ell}^{(i)}(t_0^D)$ satisfazem a:

$$A_{\ell}^{(i)}(t_0=1) = 1 \quad (\ell=1,2,\dots) \quad (6.3.2.8b)$$

e $(i=2,2D,3)$

$$B_{\ell}^{(i)}(t_0^D=0) = 0 \quad (\ell=1,2,\dots) \quad (6.3.2.8c)$$

As propriedades (6.3.2.8) são de fundamental importância pois elas dão origem a vários resultados especiais que mencionaremos abaixo. Cumpre ressaltar que estas propriedades valem para *grafos genéricos quaisquer* cujas ligações estão associadas à distribuição $P(t)$ definida em (6.1.2a) ou à distribuição $P^D(t)$ definida em (6.3.1.3) (vide, por exemplo, a distribuição equivalente para a célula do tipo H a 2 e 3 dimensões na ref.(235)).

A partir das eqs. de transformação (6.3.2.1) obtivemos, para cada (r,i) -GRCD ($r=t, s; i=2,2D,3$), somente *dois* pontos fixos ($p'=p=p^*, t_0=t'_0=t_0^*$) que são precisamente os pontos já mencionados correspondentes aos pontos exatos puros. Linearizando estas equações (analogamente ao que fizemos na subseção 4.2.1), para cada (r,i) -GRCD, em torno do ponto fixo de percolação obtivemos a matriz jacobiana $J(p_C^{\Delta}, 1)^{(r,i)} \equiv \left. \frac{\partial (p', t'_0)^{(r,i)}}{\partial (p, t_0)} \right|_{p^*=p_C^{\Delta}}$;

seu elemento $j_{21}^{(r,i)} \Big|_{p^*=p_C^{\Delta}} = \left. \left(\frac{\partial t'_0}{\partial p} \right)_{p^*=p_C^{\Delta}}^{(r,i)} \right|_{p^*=p_C^{\Delta}}$ ($r=t,s; i=2,2D,3$) se anula devido às propriedades (6.3.2.8b) e (6.3.2.8c). Conseqüentemente, seus auto-valores são $\left. \left(\frac{\partial p'}{\partial p} \right)_{p^*=p_C^{\Delta}}^{(r,i)} \right|_{p^*=p_C^{\Delta}} \equiv \lambda_p^{(r,i)}$ e $\left. \left(\frac{\partial t'_0}{\partial t_0} \right)_{p^*=p_C^{\Delta}}^{(r,i)} \right|_{p^*=p_C^{\Delta}}$;

seus respectivos autovetores são horizontal e tangente à FC no

ponto $(p_C^\Delta, 1)$. Em outras palavras, as relações recursivas (6.3.2.1) fornecem ao longo do eixo p o *mesmo* auto-valor que o problema de percolação pura fornece, ou seja:

$$\lambda_p^{(r,i)} \equiv \left(\frac{\partial p'}{\partial p} \right)_{p^*=p_C^\Delta}^{(r,i)} = \frac{\frac{dh_r^{(i)}(p,1)}{dp}}{\frac{df_r^{(i)}(p',0)}{dp'}} \Bigg|_{p^*=p_C^\Delta} \quad (r=t,s; i=2,2D,3) \quad (6.3.2.9)$$

Além disso é fácil de verificar que:

$$\lambda_p^{(t,i)} = \lambda_p^{(s,i)} \equiv \lambda_p^{(i)} \quad (i=2,2D,3) \quad (6.3.2.10)$$

cujos valores numéricos estão na Tab. 4 do apêndice E. A tangente à FC em $(p_C^\Delta, 1)$ é dada por:

$$\frac{dt_0^{(r,i)}}{dp} \Bigg|_{p^*=p_C^\Delta} = \frac{\frac{\partial t_0^{(r,i)}}{\partial t_0} - \lambda_p^{(i)}}{\frac{\partial p'}{\partial t_0}} \Bigg|_{p^*=p_C^\Delta} \quad (r=t,s; i=2,2D,3) \quad (6.3.2.11)$$

No caso $r = t$ verifica-se que

$$\left(\frac{\partial t_0^{(t,i)}}{\partial t_0} / \frac{\partial p'}{\partial t_0} \right)_{p^*=p_C^\Delta} = - \frac{1}{p_C^\Delta} \quad (i=2,2D,3) \quad (6.3.2.12a)$$

e

$$\left(\lambda_p^{(t,i)} \middle/ \frac{\partial p^{(t,i)}}{\partial t_0} \right)_{p^*=p_C^\Delta} = \frac{1}{2p_C^\Delta} \quad (i=2,2D,3) \quad (6.3.2.12b)$$

Segue-se das relações (6.3.2.12) que:

$$\frac{dt_0^{(t,i)}}{dp} \bigg|_{p^*=p_C^\Delta} = - \frac{3}{2p_C^\Delta} \quad (i=2,2D,3) \quad (6.3.2.13)$$

Por outro lado, usando-se as propriedades (6.3.2.8b) e (6.3.2.8c), é fácil de provar as seguintes relações entre as derivadas obtidas pelos métodos (s,i)-GRCD e (t,i)-GRCD:

$$\frac{\partial p^{(s,i)}}{\partial t_0} \bigg|_{p^*=p_C^\Delta} = \frac{1}{2\ell n 2} \frac{\partial p^{(t,i)}}{\partial t_0} \bigg|_{p^*=p_C^\Delta} \quad (6.3.2.14a)$$

e

(i=2,2D,3)

$$\frac{\partial t_0^{(s,i)}}{\partial t_0} \bigg|_{p^*=p_C^\Delta} = \frac{1}{2} \frac{\partial t_0^{(t,i)}}{\partial t_0} \bigg|_{p^*=p_C^\Delta} \quad (6.3.2.14b)$$

Portanto, usando todos estes resultados (das eqs. (6.3.2.10) até as eqs. (6.3.2.14)), obtemos que:

$$\frac{dt_0^{(s,i)}}{dp} \bigg|_{p^*=p_C^\Delta} = - \frac{2\ell n 2}{p_C^\Delta} \quad (i=2,2D,3) \quad (6.3.2.15)$$

que coincide com o resultado exato ⁽²³⁷⁾.

No ponto fixo de Ising $(1, t_c^\Delta)$ podemos mostrar facilmente, usando a propriedade (6.3.2.8a), que $j_{12}^{(r,i)} \Big|_{t^*=t_c^\Delta} \equiv \frac{\partial p^{(r,i)}}{\partial t_0} \Big|_{t^*=t_c^\Delta} = 0$.

Portanto, a matriz jacobiana calculada neste ponto fixo tem auto-valores $(\partial t'_0 / \partial t_0)^{(r,i)} \Big|_{t^*=t_c^\Delta} \equiv \lambda_t^{(r,i)}$ e $(\partial p' / \partial p)^{(r,i)} \Big|_{t^*=t_c^\Delta}$ associados respectivamente ao auto-vetor vertical e ao auto-vetor tangente à FC no ponto $(1, t_c^\Delta)$. Neste caso também o auto-valor $\lambda_t^{(r,i)}$ é o do caso puro, i.e.,

$$\lambda_t^{(r,i)} \equiv \left(\frac{\partial t'_0(r,i)}{\partial t_0} \right)_{t^*=t_c^\Delta} = \frac{\frac{dh_r^{(i)}(1, t_0)}{dt_0}}{\frac{df_r^{(i)}(1, t_0^D)}{dt'_0}} \Big|_{t^*=t_c^\Delta} \quad \begin{array}{l} (r=t, s; \\ i=2, 2D, 3) \end{array} \quad (6.3.2.16)$$

Verificamos também que

$$\lambda_t^{(t,i)} = \lambda_t^{(s,i)} \equiv \lambda_t^{(i)} \quad (i=2, 2D, 3) \quad (6.3.2.17)$$

(para valores numéricos vide Tab. 4 do apêndice E). A tangente à FC no ponto fixo de Ising, obtida através do (r,i) -CRG, é dada por ⁽²³²⁾:

$$\frac{dt_0(r,i)}{dp} \Big|_{t^*=t_c^\Delta} = \frac{\frac{\partial t'_0(r,i)}{\partial p}}{\frac{\partial p'}{\partial p} - \frac{\partial t'_0(r,i)}{\partial t_0}} \Big|_{t^*=t_c^\Delta} \quad (6.3.2.18)$$

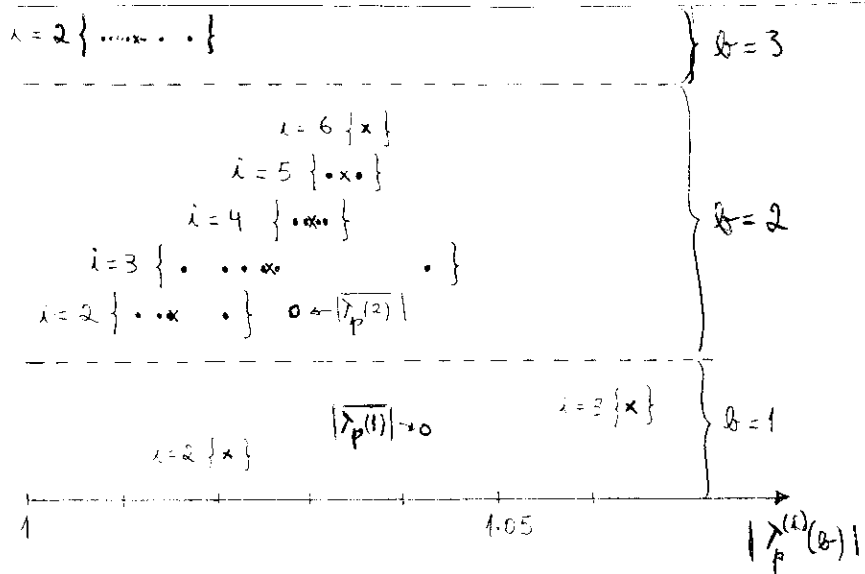
(veja Tab. 2a do apêndice E para valores numéricos específicos).

Queremos ressaltar que, no contexto do GR do tipo dual, não é possível calcular aproximação para os expoentes crí

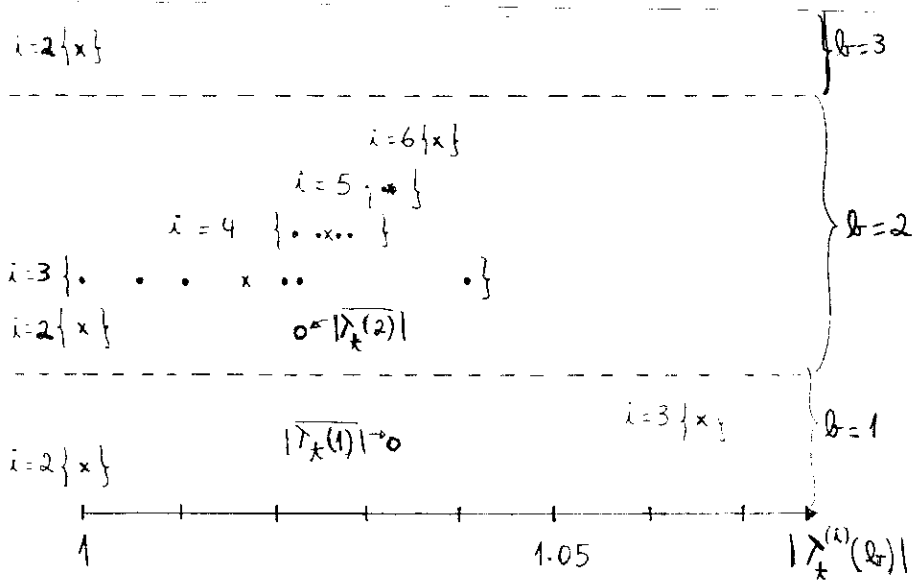
ticos de correlação $v_p^{(i)} = \ln(b/b')/\ln|\lambda_p^{(i)}|$ e $v_t^{(i)} = \ln(b/b')/\ln|\lambda_t^{(i)}|$ uma vez que, por construção, não expandimos a célula original (fator de expansão linear $b/b'=1$, onde b e b' são, respectivamente, os comprimentos lineares das células Δ e Υ) para todos (r,i) -GRCD. Podemos constatar na Tab. 1 do apêndice E que $|\lambda_p^{(i)}(b=1)| \approx 1$ e $|\lambda_t^{(i)}(b=1)| \approx 1$ (com um erro inferior a 6.5%), em particular, $|\lambda_t^{(2)}(b=1)| = |\lambda_t^{(2D)}(b=1)| = 1$. O cálculo de $|\lambda_p^{(i)}(b)|$ e $|\lambda_t^{(i)}(b)|$ em pares de células $\Upsilon^{(i)} - \Delta^{(i)}$ maiores ($b=2,3$; uma célula com $b=2$ está representada na Fig. 1 do apêndice E) com i "terminais" ($i=2$ a 6 para $b=2$ e $i=2$ a 10 para $b=3$) mostra (vide apêndice F) que:

- i) para qualquer célula tal que $(b,i) \neq (1,3)$, $|\lambda_p^{(i)}(b)| < |\lambda_p^{(3)}(1)|$ e que $|\lambda_t^{(i)}(b)| < |\lambda_t^{(3)}(1)|$;
- ii) $|\lambda_t^{(2)}(b)| = 1$ para qualquer célula com dois terminais ($\forall b$);
- iii) as médias $\overline{|\lambda_p^{(i)}(b)|}$ e $\overline{|\lambda_t^{(i)}(b)|}$, tomadas sobre todos as células com o mesmo número i de terminais e o mesmo valor de b , aumentam com i crescente (para b fixo) e aproximam-se de 1 quando b cresce (para i fixo);
- iv) as médias $\overline{|\lambda_p(b)|}$ e $\overline{|\lambda_t(b)|}$, feitas agora sobre todas as células que têm o mesmo valor de b , aproximam-se de 1 à medida que b aumenta.

Queremos acrescentar que, no caso mais geral do modelo de Potts ferromagnético com q -estados, constatamos que os fatos (i), (iii) e (iv) continuam válidos para $q=3,4$ (vide apêndice F). Todas estas tendências sugerem fortemente que $|\lambda_p^{(i)}(b)| \rightarrow 1$ e $|\lambda_t^{(i)}(b)| \rightarrow 1$ no limite $b \rightarrow \infty$ ($\forall i$) originando consistentemente (como esperado) uma indeterminação em v_p e v_t , como aconteceu no GR do tipo-dual utilizado por Tsallis e Levy⁽²³³⁾.



(a)



(b)

Figs. 6.3.2.1 - Representação, em escala, dos valores de (a) $|\lambda_p^{(i)}(b)|$ (b) $|\lambda_t^{(i)}(b)|$ para várias células com um número i de terminais e comprimento linear b . As médias $|\lambda_p^{(i)}(b)|$ e $|\lambda_t^{(i)}(b)|$ feitas sobre todas as células com mesmo i e b estão indicadas por cruces (x); as médias $|\lambda_p(b)|$ e $|\lambda_t(b)|$ tomadas sobre todas as células com o mesmo b estão representadas também (o).

O fato de não haver expansão da rede ($b/b'=1$) em todas as aproximações (r,i) -GRCD's faz com que não possamos atribuir um significado físico aos sentidos dos fluxos dos GR's do tipo-dual.

6.3.3 - Grupos de Renormalização Paramétricos do tipo-dual (GRPD)

O procedimento de GR paramétrico do tipo dual (GRPD) que usamos aqui é similar ao RG3 de Tsallis e Levy⁽²³³⁾. A idéia básica deste método é a mesma do GRP que apresentamos na subseção 4.2.2, a qual foi também utilizada na ref.⁽²³⁵⁾. Em todos estes trabalhos^(233,63,235) o procedimento GRP forneceu, de uma maneira consideravelmente menos trabalhosa e mais imediata, resultados para FC's similares aos do GRC. O método GRPD consiste, no caso que estamos estudando, em resolver a eq.(6.3.2.1a) para cada (r,i) -GRPD ($r=t,s;$ $i=2,2D,3$) mantendo, durante a transformação de renormalização considerada, um parâmetro ϵ fixo (por ex. $p, t_0, t_0/p$, etc.). Desta forma reduzimos a dimensão $n=2$ do espaço de parâmetros do (r,i) -GR para $n=1$; cada aproximação (r,i) -GRPD para a FC independe da escolha do parâmetro ϵ e todos seus pontos são pontos fixos.

Os resultados principais obtidos através dos seis (r,i) -GRPD's presentes ($r=t,s;$ $i=2,2D,3$) estão indicados nas Tabs. 2a e 3a do apêndice E. Queremos ressaltar que todos (s,i) -GRPD's ($i=2,2D,3$) fornecem a mesma aproximação para a FC, a saber:

$$3p \ln(1+t_0) - p^3 \ln(1+t_0^3) - \ln 2 = 0 \quad (6.3.3.1)$$

cuja tangente, no ponto fixo de percolação é *exata*. Na realidade, eq. (6.3.3.1) constitui uma aproximação *analítica* excelente (conforme veremos adiante) e simples para a FC que procuramos. As aproximações GRPD's para a FC diferem muito pouco entre si (a discrepância máxima em t_0 ocorre em $p \approx 0.45$ e vale cerca de 0.65%) e são, como foi o caso das aproximações GRCD's, bem representadas pela curva (T) desenhada na fig. (2a) (ou 2b) do apêndice E.

6.3.4 - Comparações

Conforme mencionamos na introdução 6.1, Guilmin e Turban⁽²²⁸⁾ obtiveram, na aproximação que chamaram de "aproximação a três-ligações" (GT), uma FC que contém ambos pontos puros exatos e a derivada exata $(dt_0/dp)_{p=1}$. Calculamos, então, na aproximação GT a derivada no outro ponto e obtivemos que:

$$\left. \frac{dt_0}{dp} \right|_{p=p_c^\Delta}^{(GT)} = - \frac{12(1+p_c^\Delta)}{p_c^\Delta(9+7p_c^\Delta)} \approx - 4.0725 \quad (6.3.4.1)$$

Calculamos também, para fins de comparação com nossas curvas, alguns pontos da FC de Guilmin e Turban (vide Tab. 3a do apêndice E).

Todas as FC's aproximadas que consideramos até agora ((r,i)-GRCD's, (r,i)-GRPD's e GT; r=t,s; i=2,2D,3) são muito próximas entre si (a diferença em t_0 sendo cerca de 2% no caso mais desfavorável); elas estão representadas pela mesma curva (T) dentro das escalas das figs. 2a e 2b do apêndice E. To-

dos os s-GR's fornecem o valor *exato* de $(dt_0/dp)_{p=p_C}^\Delta$ (cf. Tab. 2a do apêndice E). Note que as FC's obtidas através das aproximações GRPD's estão, no espaço $p-t_0$, um pouco acima das GRCD's, como foi o caso para as redes quadrada ⁽²³³⁾ e cúbica simples ⁽²³⁵⁾. Uma vez que a FC exata $t_0(p)$ é uma função monótona em p ⁽²²²⁾, e presumivelmente a derivada dt_0/dp também, a análise das derivadas dos casos puros sugere que a FC (desconhecida) *exata encontra-se entre as aproximações GT* (limite inferior para t_0 ; 2% de erro em $(dt_0/dp)_{p=p_C}^\Delta$) e a nossa (s,3)-CRGD (limite superior para t_0 ; 0.15% de erro em $(dt_0/dp)_{p=1}$); veja os números no interior da região assinalada na Tab. 3a do apêndice E. A discrepância máxima (em t_0) entre as curvas GT e (s,3)-GRCD ocorre em $p \approx 0.45$ e vale aproximadamente 0.002 (implicando portanto numa discrepância percentual de 0.27%).

6.4 - MODELO DE ISING COM LIGAÇÕES DILUÍDAS "QUENCHED" NA REDE "HONEYCOMB"

6.4.1 - Método de Grafos

No caso da rede "honeycomb", a lei de distribuição $P(t)$ (eqs.(6.1.2)) é associada agora a cada ligação dos "clusters" do tipo $\Upsilon^{(i)}$ ($i=2,2D,3$) enquanto que sua distribuição dual $P^D(t)$ é associada a cada ligação das células correspondentes do tipo $\Delta^{(i)}$ (vale dizer, substitui-se τ^D por $P(t)$ e τ por $P^D(t)$ nas figs. (a), (b) e (c) da Tab. 1 do apêndice E). Seguindo o mesmo procedimento e notação da subseção 6.3.1, obtivemos as distribuições de transmissividade equivalentes associadas com os grafos das figs, (a), (b) e (c) da Tab. 1 do apêndice E. Estas

distribuições encontram-se nas eqs. (12a-12f) do apêndice E. A partir destas, construímos, similarmente à seção 6.3, doze GR's que renormalizam $P_Y^{(i)}(t)$ em:

$$P_{\Delta}^{(i)}(t) \equiv P_{\Delta}^{(i)}[P^D(t;p',t_0)] \quad (i=2,2D,3) \quad (6.4.1.1)$$

6.4.2 - Grupos de Renormalização Canônicos do Tipo-Dual (GRCD)

Similarmente à subseção 6.3.2, cada (r,i)-GRCD (r=t, s; i=2,2D,3) é definido pelo seguinte sistema de equações:

$$\langle r \rangle_{P_Y^{(i)}} \equiv \bar{h}_r^{(i)}(p, t_0) = \langle r \rangle_{P_{\Delta}^{(i)}} \equiv \bar{f}_r^{(i)}(p', t_0^D) \quad (6.4.2.1a)$$

$$\langle r^2 \rangle_{P_Y^{(i)}} \equiv \bar{k}_r^{(i)}(p, t_0) = \langle r^2 \rangle_{P_{\Delta}^{(i)}} \equiv \bar{g}_r^{(i)}(p', t_0^D) \quad (6.4.2.1b)$$

$$(r=t, s; i=2, 2D, 3)$$

As linhas de fluxo associadas a estas equações fornecem cinco FC's distintas (visto que as aproximações (s,2) e (s,2D) levam a FC's numericamente idênticas, tal como aconteceu para a rede triangular) que diferem tão pouco entre si (menos que 0.8% em t_0) que são representadas, na escala da fig. 2a (ou 2b) do apêndice E, pela mesma e única curva (H); suas derivadas nos pontos *exatos* $(1, t_c^Y)$ e $(p_c^Y, 1)$, bem como alguns pontos das FC's aproximadas, encontram-se respectivamente nas Tabs. 2b e 3b do apêndice E.

Uma vez que as relações (6.3.2.6), (6.3.2.7) e (6.3.2.

8) continuam válidas, se substituirmos $\Delta \xrightarrow{\tau} Y$, para a rede "honeycomb", segue-se que todas as suas conseqüências (mencionadas na subseção 6.3.2) permanecem também válidas. Levando-se em conta que as equações correspondentes aos casos *puros* para a rede "honeycomb" podem ser obtidas a partir das correspondentes para a rede triangular por uma simples substituição $\tau \xrightarrow{D} \tau'$ ($\tau = p, t_0$), pode-se mostrar facilmente que

$$\lambda_p^{(i)\Delta} \lambda_p^{(i)Y} = \lambda_t^{(i)\Delta} \lambda_t^{(i)Y} = 1 \quad (i=2, 2D, 3) \quad (6.4.2.2)$$

(veja a tab.4 do apêndice E para valores numéricos dos λ 's). Devido ao fato de não haver expansão da célula original ($b/b'=1$), os sentidos das linhas de fluxo ao longo de cada aproximação (r,i) -GRCD para a FC, bem como os pontos fixos espúrios (veja Tab. 2b do apêndice E) que aparecem nos três (s,i) -GRCD's ($i=2, 2D, 3$), são desprovidos de significado físico. À primeira vista pode parecer estranho o fato de que a topologia do conjunto de FC's (por ex., o número de interseções entre as FC's e o número de pontos fixos) associado à rede "honeycomb" seja diferente da topologia correspondente para a rede triangular (compare Tabs. 3a e 3b do apêndice E). Isto provem do fato de estarmos considerando um problema restrito (ligações diluídas ao invés de ligações mistas): a simetria global deveria aparecer se tivéssemos assumido que $P(t) = (1-p)\delta(t-t_1) + p\delta(t-t_0)$ ao invés da eq. (6.1.2a).

6.4.3 - Grupos de Renormalização Paramétricos do Tipo-Dual(GRPD)

similarmente à subseção 6.3.3, obtivemos as FC's $(r,$

i)-GRPD's ($r=t, s; i=2, 2D, 3$) através das linhas de pontos fixos associados à transformação (6.4.2.1a). No caso $r=s$, esta relação fornece, como anteriormente, a *mesma* equação para as três FC's (s, i)-GRPD's ($i=2, 2D, 3$), a saber

$$3p^2(1-p)\ln(1+t_0^2) + p^3\ln(1+3t_0^2) - \ln 2 = 0 \quad (6.4.3.1)$$

que conduz ao valor *exato* da derivada $(dt_0/dp)_{p=p_C^Y}$ (eq. (6.4.3.1) é uma aproximação *analítica* excelente e simples para a FC, como veremos logo adiante). As FC's aproximadas GRPD's são muito próximas umas das outras (a discrepância em t_0 sendo inferior a 0.41%) e são representadas pela curva (H) desenhada na fig. 2a (ou 2b) do apêndice E); os principais resultados e alguns pontos na região intermediária das FC's podem ser vistos respectivamente nas Tabs. 2b e 3b do apêndice E.

6.4.4 - Comparação

Na aproximação GT para a FC, os pontos extremos e a derivada $(dt_0/dp)_{p=1}$ são exatos. Calculamos, na aproximação GT, a outra derivada e obtivemos:

$$\left. \frac{dt_0}{dp} \right|_{p=p_C^Y} = - \frac{6(2-p_C^Y)}{p_C^Y(9-5p_C^Y)} \approx - 2.1590 \quad (6.4.4.1)$$

Para fins comparativos, calculamos também alguns pontos da FC de Guilmin e Turban (vide tab. 3b do apêndice E).

Similarmente ao caso da rede triangular, todas as aproximações (GRCD's, GRPD's e GT) para a FC da rede "honeycomb" diferem muito pouco entre si (menos que 1.3% na variável t_0) e suas representações gráficas reduzem-se a uma única curva (H) na escala da fig. 2a (ou 2b) do apêndice E. Em todos s-GR's, o valor de $(dt_0/dp)_{p=p_c^Y}$ coincide com o *exato* (veja Tab. 2a do apêndice E). Aqui também (tal como na seção 6.3), os valores de t_0 , para qualquer p fixo, pertencentes às FC's GRPD's estão um pouco acima dos obtidos através dos GRCD's. A análise das derivadas nos pontos extremos p_c^Y e $p=1$ (veja Tab. 2b do apêndice E) sugere que a FC (desconhecida) *exata está compreendida entre a curva (s,2)-GRCD* (limite superior para t_0 ; erro de 0.96% em $(dt_0/dp)_{p=1}$) e a curva (limite inferior para t_0 ; as derivadas em ambos casos puros são exatas) *constituída da (s,3)-GRCD para $p_c \leq p \leq 0.90$ e da GT para $0.90 \leq p \leq 1$* (veja a região assinalada na Tab. 3b do apêndice E). A discrepância máxima em t_0 entre os limites inferior e superior ocorre em $p \approx 0.90$ e vale aproximadamente 0.001 (correspondendo a uma discrepância percentual de 0.14%).

6.5 - CONCLUSÕES

Mostramos que a transformação triângulo-estrela conjugada com a dualidade, a partir da qual podemos obter os pontos críticos *exatos* dos modelos de Ising (e mais genericamente do modelo de Potts com um número q qualquer de estados) e percolação de ligações puros, pode ser formulada dentro de um contexto unificado de grafos (vale dizer, é possível obtermos si-

multaneamente *ambos* pontos críticos exatos usando *um par qualquer* de grafos triângulo-estrela; ilustramos este fato para vários tais pares de grafos). Esta constatação possibilitou-nos construir, num contexto de grupo de renormalização no espaço real, doze procedimentos diferentes para calcular as fronteiras críticas associadas ao modelo de Ising (de spins 1/2) com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e ligações diluídas "quenched" para as redes triangular e "honeycomb". Obtivemos nove fronteiras críticas diferentes aproximadas com boa precisão (que diferem menos de 2% em t_0) para a rede triangular, e outras nove fronteiras críticas diferentes aproximadas (com discrepância máxima de 1.3% em t_0) para a rede "honeycomb". Todas estas fronteiras críticas contêm os pontos críticos puros *exatos* de Ising e percolação de ligações, bem como as derivadas (no espaço $p - t_0$) *exatas ou quase exatas* em ambos limites $p=1$ e $t_0=1$.

Em termos *analíticos*, propomos para ambas redes fronteiras críticas aproximadas excelentes e simples, ambas fornecendo o valor *exato* da derivada $(dt_0/dp)_{p=p_c}$. A proposta (6.3.3.1) para a rede triangular contém um erro de 0.40% na derivada $(dt_0/dp)_{p=1}$ e um erro máximo (em $p \approx 0.45$) estimado em cerca de 0.31% na variável t_0 . A proposta (6.4.3.1) para a rede "honeycomb" conduz a um erro de 1.4% na derivada $(dt_0/dp)_{p=1}$ e a um erro máximo (em $p \approx 0.90$) estimado em cerca de 0.14% em t_0 .

Em termos *numéricos*, foi possível obter-se aproximações até mesmo mais precisas. A fronteira crítica exata desconhecida para a rede triangular está compreendida muito provavelmente entre a presente aproximação (s-3)-GRCD $((dt_0/dp)_{p=p_c}^\Delta)$ exato

e erro de 0.15% em $(dt_0/dp)_{p=1}$) e a "aproximação a três-ligações" de Guilmin e Turban⁽²²⁸⁾ ($(dt_0/dp)_{p=1}$ exato e 2% de erro em $(dt_0/dp)_{p=p_c^\Delta}$); a discrepância máxima entre estas curvas é de 0.27% (em $p \approx 0.45$). Os respectivos limites superior e inferior (para t_0) para a fronteira crítica da rede "honeycomb" são muito provavelmente a presente aproximação (s,2)-GRCD ($(dt_0/dp)_{p=p_c^\Upsilon}$ exato e 0.96% de erro em $(dt_0/dp)_{p=1}$) e uma curva que, para $p_c \leq p \lesssim 0.90$, coincide com a presente aproximação (s,3)-GRCD ($(dt_0/dp)_{p=p_c^\Upsilon}$ exato) e, para $0.90 \lesssim p \leq 1$, coincide com a "aproximação a três-ligações" de Guilmin e Turban⁽²²⁸⁾ ($(dt_0/dp)_{p=1}$ exato); a pior discrepância entre estes limites ocorre para $p \approx 0.90$ e vale 0.14%. Em nosso conhecimento, a diferença entre os limites $t_0(p)$ presentes para as fronteiras críticas exatas desconhecidas correspondentes às redes triangular e "honeycomb" é a menor existente na literatura. Concluimos, portanto, que os métodos de grupo de renormalização no espaço real quando aliados a simetrias e transformações convenientes podem ser extremamente eficientes no cálculo de fronteiras críticas.

CAPÍTULO 7

- CONCLUSÕES -

Ao longo deste trabalho obtivemos vários pontos e/ou fronteiras críticas correspondentes aos modelos de percolação, Ising e Potts com q-estados em redes variadas. Em todos os casos, nossas propostas ou diferem pouco de resultados conhecidos na literatura ou são inéditas. Vamos enumerar a seguir os resultados *originais*, em nosso conhecimento, que obtivemos:

a) a probabilidade crítica de percolação de ligação para a rede quadrada com primeiros e segundos vizinhos:

$$p_c = 0.249 \pm 0.003$$

b) cinquenta pontos críticos aproximados para ferromagnetos de Potts puros em redes regulares com dimensão $d=2,3,4$ (vide Tabelas I do apêndice C e Tabelas Ia e Ib do apêndice D).

c) o comportamento assintótico (para $d \rightarrow \infty$) *possivelmente exato* do ponto crítico de ferromagnetos de Potts puros com $q > 2$ estados para redes *regulares* com número de coordenação z :

$$\frac{k_B T_c}{J} \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} q / \ln \left(\frac{z+q-2}{z-2} \right)$$

d) pontos críticos aproximados para ferromagnetos de Potts pu-

ros com $q > 2$ estados em cactos triangulares com $z=4,6,8,12$ e árvore quadrada de Husimi ($z=4$) (esperamos que a transição seja de primeira ordem para $q > 2$).

e) fronteira crítica aproximada para ferromagnetos de Potts puros com, pelo menos, $1 \leq q \leq 4$ e $q \neq 2$ estados na rede 4-8 inomogênea:

$$3(s_2^{(q)} - 1/2) - 4[(1-s_1^{(q)})^2 + (1-s_1^{(q)})^3] = 0$$

f) fronteiras (ou superfície) críticas aproximadas para ferromagnetos de Potts puros com, pelo menos, $1 \leq q \leq 3$ e $q \neq 2$ estados para as redes cúbica e BCC ambas com primeiros e segundos vizinhos, e FCC com primeiros, segundos e terceiros vizinhos (vide figs. 2,3 e 4 do apêndice D respectivamente).

g) fronteira crítica *possivelmente exata* para ferromagnetos de Potts puros com $q \neq 1$ estados para redes de Bethe anisotrópicas (eq. 5.4.5.4.2).

h) fronteira crítica *possivelmente exata* para ferromagnetos de Potts com ligações randômicas quaisquer "quenched" com $q \neq 2$ estados em redes de Bethe isotrópicas:

$$\langle t_c^{(q)} \rangle_{\mathbb{P}(J_{ij})} = \frac{1}{(z-1)}$$

Além de fronteiras críticas obtivemos também as seguintes estimativas para os expoentes críticos de comprimento de correlação $\nu_p(d)$ correspondentes à percolação isotrópica em

redes d-dimensionais:

$$v_p(d=2) = 1.332 \pm 0.014$$

$$v_p(d=3) = 0.86 \pm 0.03$$

Considerando-se que estas propostas resultam de extrapolações de valores obtidos para células de dimensões lineares b relativamente pequenas (no caso mais favorável $b \leq 15$), podemos afirmar que estão em bom acordo com resultados provenientes de expansões em séries e de métodos Monte Carlo aplicados a células bem maiores. Queremos ressaltar também que o método Monte Carlo aplicado a grupos de renormalização que utilizamos é uma variante original: ele fornece *separadamente cada coeficiente* do polinômio $R_b(p)$ (ou $R_b(p,q)$ no caso mais geral de percolação anisotrópica), polinômio este que representa a probabilidade equivalente entre os terminais de uma célula de tamanho linear b , ao passo que outros métodos Monte Carlo usualmente fornecem o gráfico por pontos de $R_b(p)$ versus p .

Verificamos que, no contexto de grupos de renormalização no espaço real, a *topologia da célula* (incluindo a escolha das entradas e saídas, ou seja, dos nós terminais) desempenha um papel fundamental no cálculo de grandezas críticas tais como fronteiras e expoentes críticos. Quanto mais a célula respeitar as simetrias da rede original mais eficiente é o grupo de renormalização, vale dizer, os resultados obtidos para células cada vez maiores convergem mais rapidamente para o verdadeiro valor correspondente à rede inteira ($b \rightarrow \infty$). Em particular, vimos que as células auto-duais do tipo H generalizado pos

suem uma topologia extremamente adequada para a rede quadrada com ligações entre primeiros vizinhos, visto que conduzem ao resultado *exato* da probabilidade crítica de percolação de ligações para *qualquer* valor de b , bem como fornecem resultados, no que concerne $v_p(d=2)$, que convergem rapidamente.

No que concerne aos problemas de magnetismo aleatório vimos, nos cálculos de fronteiras críticas dos modelos de Ising com ligações diluídas ferromagnéticas "quenched" para as redes triangular e "honeycomb", que a variável sobre a qual se faz a média influi consideravelmente nos resultados. Em particular, a variável s (definida em (6.3.2.2) para o modelo de Ising) conduz ao valor *exato* da derivada $(dt_0/dp)_{p=p_c}$, similarmente ao caso do modelo de Ising com ligações ferromagnéticas diluídas "quenched" na rede quadrada estudado por Levy et al ⁽²³⁴⁾. Cumpre ressaltar que os procedimentos de grupo de renormalização do tipo dual utilizados para o cálculo das mencionadas fronteiras críticas não envolvem expansões das células originais (ou seja, $b/b'=1$), podendo portanto fornecer somente fronteiras críticas e não expoentes críticos.

Quanto aos procedimentos de grupos de renormalização que utilizamos em problemas com um espaço de parâmetros *bidimensional*, verificamos que os paramétricos (incluindo os do tipo dual), além de serem consideravelmente menos trabalhosos que os canônicos, fornecem fronteiras críticas que diferem pouco das obtidas pelos métodos canônicos. Embora os procedimentos paramétricos sejam eficientes no cálculo de fronteiras críticas, o mesmo não acontece no cálculo (quando há expansão da célula original) dos expoentes críticos, os quais estão em desacordo com

os princípios de universalidade.

Exibimos, para vários pares de grafos triângulo-estrela com um número de terminais quaisquer em quaisquer posições e para diversos tamanhos, que os pontos críticos *exatos* de ferromagnetos de Potts puros com (pelo menos) $q = 1, 2, 3, 4$ estados podem *todos* ser obtidos a partir de *um par qualquer* de tais grafos. É possível verificar-se que isto ocorre também para o caso anisotrópico, tal como aconteceu na ref. (266) para a célula de tamanho linear $b = 1$ com $i = 3$ terminais. Portanto seria possível construir-se grupos de renormalização do tipo dual para obter-se fronteiras críticas de ferromagnetos de Potts anisotrópicos com ligações mistas "quenched". Uma outra perspectiva oferecida por este trabalho é a construção, através de um raciocínio similar ao utilizado por Tsallis⁽²⁶²⁾, de grupos de renormalização do tipo dual visando ao cálculo de fronteiras críticas de ferromagnetos de Potts anisotrópicos com ligações mistas "quenched" para as redes 3-12 e sua dual. Cálculos similares poderiam ser feitos para as redes Kagomé e "diced" mediante uma combinação conveniente das transformações triângulo-estrela, decoração-iteração⁽¹⁵³⁾ e dualidade.

Vimos que a variável s é muito conveniente no cálculo de fronteiras críticas, porém não é a ideal visto que, por exemplo, não fornece o valor exato da derivada $(dt_0/dp)_{p=1}$. Acreditamos que isto provem do fato da variável s não satisfazer o algoritmo de séries análogo ao das probabilidades (relembremos que $s_s \neq s_1 s_2$). Portanto seria muito interessante pesquisar-se uma nova variável r para problemas térmicos que tivesse um papel semelhante ao da variável p nos problemas de percolação, vale dizer, que satisfizesse *ambas* as relações $r_s = r_1 r_2$ e $r^D = 1 - r$. Acre-

ditamos que o uso dessa variável r conduziria muito provavelmente a resultados exatos para fronteiras críticas.

Finalmente queremos ressaltar que este tipo de trabalho é o ponto de partida natural para cálculos de grandezas termodinâmicas como o calor específico, a magnetização, a susceptibilidade, etc.

Probability renormalisation group treatment of bond percolation in square, cubic and hypercubic lattices

A C N de Magalhães, C Tsallis and G Schwachheim

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq, Av. Wenceslau Braz 71, Rio de Janeiro, Brazil

Received 23 May 1979

Abstract. By using the real space renormalisation group method proposed by P J Reynolds, W Klein and H E Stanley we treat bond percolation on d -dimensional cubic lattices and obtain (through various extrapolation methods): (i) $p_c = \frac{1}{2}$ (exact), $\nu_p = 1.351 \pm 0.012$ (-0.020) and $\alpha_p = -0.700 \pm 0.040$ (-0.024) for the first-neighbour square lattice; (ii) $p_c = 0.250 \pm 0.003$ for the first- and second-neighbour square lattice; (iii) $p_c = 0.2526 \pm 0.0013$, $\nu_p = 0.840 \pm 0.020$ and $\alpha_p = -0.520 \pm 0.060$ for the first-neighbour cubic lattice; (iv) $p_c = 0.149 \pm 0.010$, $\nu_p = 0.667 \pm 0.030$ and $\alpha_p = -0.67 \pm 0.12$ for the first-neighbour four-dimensional hypercubic lattice.

Whenever comparison is possible these figures agree fairly well with other available results. We also discuss the 'magnetic' scaling power γ_s for the square lattice. The influence on p_c and ν_p of the symmetry of the cluster and of the 'direction' of percolation is exhibited through several two-dimensional examples.

1. Introduction

Recently, the percolation problem (for reviews see Shante and Kirkpatrick 1971 and Essam 1972) has received a great deal of attention, mainly because of its applications to a variety of physical phenomena, its similarity to thermal phase transitions and its relationship (established by Kasteleyn and Fortuin 1969) with the critical behaviour of the one-component limit of the Ashkin-Teller-Potts model. The renormalisation group (RG) approaches introduced for cooperative thermodynamic systems (Ma 1973, Fisher 1974, Nicmeyer and Van Leeuwen 1974, Wilson and Kogut 1974, Wallace and Zia 1978) has been applied to bond and site percolation problems. Harris *et al* (1975, 1976) and Dasgupta (1976) made an RG ϵ -expansion ($\epsilon \equiv 6 - d$). Young and Stinchcombe (1975), Stinchcombe and Watson (1976), Kirkpatrick (1977) and Marland and Stinchcombe (1977) have directly renormalised the occupancy probabilities. In particular, Reynolds *et al* (1977) (hereafter referred to as RKS) have proposed a simple and efficient position space RG for the site and bond percolation problems. Some aspects of this treatment have been analysed in the case of site percolation on a square lattice (Tsallis and Schwachheim 1979). On the other hand, Bernasconi (1978) has formulated an approach for the conductivity of bond-disordered conductance lattices which contains, as a particular case, the RKS bond probability renormalisation. Very recently, Reynolds *et al* (1978) have also applied their method (RKS) to the site percolation problem on a square lattice using a sequence of increasingly large finite cells, and by convenient extrapolations have calculated with a rather high degree of accuracy the critical concentration p_c and the 'thermal' γ_p and

'magnetic' y_h scaling powers†. Finally, the influence of the 'direction' of percolation through a given finite RG cluster has been investigated by Sarychev (1977) for site percolation on the square lattice.

In the present work, through the RKS approach, we treat the bond percolation problem on d -dimensional cubic lattices. Let us summarise this approach. Firstly, we partition the lattice into cells or clusters (whose size will be characterised by a length b) which shall be renormalised into smaller cells (usually of the same type, characterised by a length b'). The expansion or rescaling factor is clearly given by b'/b . The macroscopic process shall be simulated, at the finite size cells level, by the (relatively arbitrary) adoption of the 'entries' and 'exits' (which we will indicate by arrows: see figures 2 and 4) of each cluster. This choice clearly defines the 'direction' of percolation. Next we associate with the bigger (smaller) cluster a polynomial $R_b(p)$ ($R'_b(p')$), where by p we denote the independent bond occupancy probability. Finally, the RG is defined by

$$R'_b(p') = R_b(p) \tag{1}$$

where p' plays the role of renormalised occupancy probability. The non-trivial fixed point $p^*(b, b')$ gives an approximation for the critical probability, p_c , we are looking for. Furthermore, the critical exponent ν_p is approximated at this level by (see for example Niemeyer and Van Leeuwen 1974 and RKS)

$$\nu_p(b, b') = \frac{\ln(b/b')}{\ln \lambda_p(b, b')} \tag{2}$$

where

$$\lambda_p(b, b') \equiv \left. \frac{dp'}{dp} \right|_{p^*(b, b')} = \left[\frac{dR_b(p)}{dp} / \frac{dR'_b(p')}{dp'} \right]_{p^*(b, b')}$$

is the eigenvalue of the linearised transformation equation (1) in the neighbourhood of $p^*(b, b')$. Of course, we expect that

$$p_c = \lim_{b \rightarrow \infty} p^*(b, b') \quad \text{and} \quad \nu_p = \lim_{b \rightarrow \infty} \nu_p(b, b') \quad \forall b'$$

By introducing a 'ghost' site (Kasteleyn and Fortuin 1969), the scaling power y_h can be calculated in a similar way (see Reynolds *et al* 1978).

In §2 we discuss the bond percolation on square lattices (p_c, ν_p, y_h for the first-neighbour case and, as universality is expected to hold, only p_c for the first- and second-neighbour case). In §3 we present the results (p_c and ν_p) for cubic and hypercubic first-neighbour bond percolation. In §4 we analyse, through some examples, the influence of the symmetry of the cluster and of the 'direction' of percolation.

2. Square lattice

In this section we apply the above procedure to the square lattice. Let us first of all consider only first-neighbour bonds. We shall adopt the family of (self-dual) clusters obtained by straightforward generalisation of the H-shaped ('Wheatstone bridge', see

† We recall that $\nu_p = y_p^{-1}$, $\alpha_p = 2 - (d/y_p)$, $\gamma_p = (2y_h - d)y_p$, $\eta_p = d + 2 - 2y_h$, $\beta_p = (d - y_h)y_p$, $\delta_p = y_h(d - y_h)$.

also Bernasconi 1978) cluster introduced by RKS. The associated polynomials may be written as follows:

$$R_b(p) = \sum_{i=0}^{n_b} A_b^{(i)} p^i (1-p)^{n_b-i} \quad (3)$$

where

$$A_b^{(i)} + A_b^{(n_b-i)} = (n_b! / i!(n_b-i)!) \quad \forall i, \forall b. \quad (4)$$

The degree n_b of the polynomial is equal to the number of (relevant[†]) bonds of the cluster and the coefficient $A_b^{(i)}$ is the number of percolating configurations with i unblocked bonds (for a given b). Relation (4) holds because of the self-duality of the chosen family of clusters, and implies that all the $R_b(p)$ are centro-symmetric with respect to the point $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Hence they are particularly suitable for the first-neighbour square lattice, as the fixed point $p^*(b, b')$ is equal to the exact value $p_c = \frac{1}{2}$ for any choice of b and b' . For instance, we may verify the above properties on the following example for a cluster with the shape



$$\begin{aligned} R_3(p) &= p^{13} + 13p^{12}(1-p) + 78p^{11}(1-p)^2 + 283p^{10}(1-p)^3 \\ &\quad + 677p^9(1-p)^4 + 1078p^8(1-p)^5 + 1089p^7(1-p)^6 \\ &\quad + 627p^6(1-p)^7 + 209p^5(1-p)^8 + 38p^4(1-p)^9 + 3p^3(1-p)^{10} \\ &= 18p^{13} - 117p^{12} + 298p^{11} - 352p^{10} + 149p^9 + 39p^8 \\ &\quad - 10p^7 - 37p^6 + 2p^5 + 8p^4 + 3p^3. \end{aligned} \quad (5)$$

We were able to establish this kind of closed form only for $b \leq 4$ (see table 1); bigger values ($5 \leq b \leq 15$) were treated by a Monte Carlo method, which essentially consists of presenting every coefficient of the polynomial (3) in the following form:

$$A_b^{(i)} = r_b^{(i)} [n_b! / i!(n_b-i)!] \quad (6)$$

where $r_b^{(i)}$ can be interpreted as the probability that a cluster (of size b) with i randomly distributed unblocked bonds (hence $n_b - i$ blocked bonds) percolates. The Monte Carlo approximation is introduced at the level where $r_b^{(i)}$ is replaced by the frequency of percolating configurations satisfying the conditions we have just described. We have worked for all values of b (and not only for the first-neighbour square lattice we are discussing here, but also for the first- and second-neighbour square and simple cubic lattices we shall present later) around $N_b n_b \geq 10^6$, where by N_b we denote the total number of Monte Carlo runs. Whenever comparison between Monte Carlo and closed form results was possible the agreement was very good. In figure 1 we have plotted $v_p(b, 1)$ against b^{-1} . We observe that for $b \geq 4$ the numbers oscillate randomly around their mean value 1.351 ($\frac{2}{3}$ of the points belong to the interval $[1.347; 1.365]$). Our best proposal is given by

$$1.351 \begin{matrix} +0.012 \\ -0.020 \end{matrix}$$

which leads to

$$\alpha_p = -0.700 \begin{matrix} +0.040 \\ -0.024 \end{matrix}.$$

[†] For example, the cluster in figure 2 has 16 bonds, but only 14 'relevant' ones.

Table I. Results obtained for the bond percolation on the first- and second-neighbour square, simple cubic and simple hypercubic lattices (z = coordination number).†

Lattice	Subject	b	p_c	ν_p	ν_h	
$d = 2$ $z = 4$	$b' = 1$	2	$\frac{1}{2}^*$	1.428*	1.907	
		3	$\frac{1}{2}^\ddagger$	1.380‡	1.963	
		4	$\frac{1}{2}^\ddagger$	1.363	1.982	
	Our best proposal	∞	$\frac{1}{2}$ (exact)	$1.351^{+0.012}_{-0.020}$	2.0 ± 0.1	
	Other proposals	—	$\frac{1}{2}$ (exact)	$1.34 \pm 0.02^{(a)}$	$1.89 \pm 0.02^{(a)\S}$	
		—	$\frac{1}{2}$ (exact)	$1.356 \pm 0.015^{(b)}$	$1.898 \pm 0.003^{(b)}$	
				$\frac{\ln\sqrt{3}}{\ln(3/2)} \approx 1.3547^{(b)(c)}$	—	
$d = 2$ $z = 8$	$b' = 1$	2	0.2874	—	—	
		3	0.2786	—	—	
		Our best proposal	∞	0.250 ± 0.003	—	—
$d = 3$ $z = 6$	$b' = 1$	2	0.2085‡	1.031‡	2.739	
		Our best proposal	∞	0.2526 ± 0.0013	0.840 ± 0.020	—
		Other proposals	—	$0.247 \pm 0.005^{(d)}$	$0.82 \pm 0.05^{(a)}$	$2.54 \pm 0.13^{(a)\S}$
—	$0.254 \pm 0.013^{(e)}$		$0.86 \pm 0.03^{(f)}$	$2.55 \pm 0.17^{(f)\S}$		
$d = 4$ $z = 8$	$b' = 1$	2	0.1014	0.932	—	
		Our best proposal	∞	0.149 ± 0.010	0.667 ± 0.030	—
		Other proposals	—	—	$0.66 \pm 0.04^{(f)\S}$	—

* These values coincide with those obtained by Reynolds *et al* (1977).

† The values we obtained by Monte Carlo methods are not quoted here.

‡ These values coincide with those obtained by Bernasconi (1978).

§ These values were derived by us through use of scaling laws and values established (for other critical exponents) by the quoted authors.

(a) Dunn *et al* (1975). (b) Reynolds *et al* (1978). (c) Klein *et al* (1978). (d) Sykes and Essam (1964). (e) Vyssotsky *et al* (1961). (f) Kirkpatrick (1976).

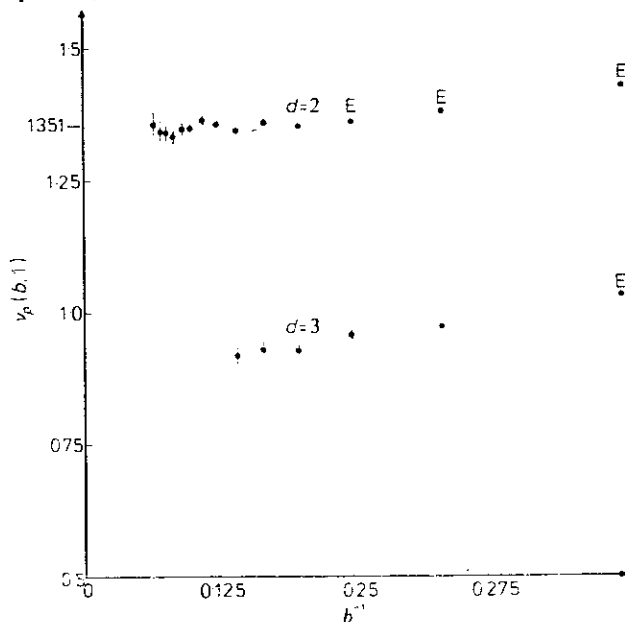


Figure 1. The approximative critical exponent $\nu_p(b, 1)$ as a function of the inverse renormalisation expansion parameter for simple square and cubic lattices. ('E' means that the particular point has been obtained from a closed form expression; the others were obtained through a Monte Carlo method).

In what concerns the 'magnetic' scaling power y_h we have performed the calculations only for $b, b' \leq 4$ ($y_h(3, 2) = 2.060$; $y_h(4, 2) = 2.058$; $y_h(4, 3) = 2.056$; see table 1 for $y_h(b, 1)$). By different kinds of extrapolation we arrive at the result 2.0 ± 0.1 , which is comparable with other available results (around 1.9; see table 1). However, we must admit that the central value 2.0 is probably wrong (for instance, it leads to $\beta_p = \eta_p = \delta_p^{-1} = 0$, which is certainly very hard to believe from the physical analysis of this particular case).

Let us turn our attention to the first- and second-neighbour square lattice within the assumption that there is a unique occupancy probability p . We have used a family of clusters which generalises the previous one (see, for example, in figure 2 the case $b = 2$).

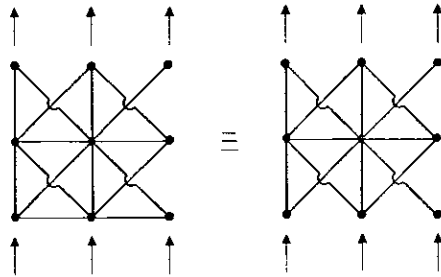


Figure 2. An example ($b = 2$) of the renormalisation clusters we used to discuss the bond percolation in the first- and second-neighbour square lattice.

We have obtained closed forms for $b \leq 3$ and Monte Carlo forms for $b = 4-7$. For illustration, let us present two examples:

$$R_1(p) = p^3 + 3p^2(1 - p) + 3p(1 - p)^2 = p^3 - 3p^2 + 3p \tag{7}$$

$$\begin{aligned} R_2(p) &= p^{14} + 14p^{13}(1 - p) + 91p^{12}(1 - p)^2 + 364p^{11}(1 - p)^3 + 1001p^{10}(1 - p)^4 \\ &\quad + 2002p^9(1 - p)^5 + 3001p^8(1 - p)^6 + 3412p^7(1 - p)^7 + 2919p^6(1 - p)^8 \\ &\quad + 1810p^5(1 - p)^9 + 743p^4(1 - p)^{10} + 164p^3(1 - p)^{11} + 14p^2(1 - p)^{12} \\ &= 4p^{14} - 48p^{13} + 259p^{12} - 824p^{11} + 1696p^{10} - 2312p^9 + 2007p^8 \\ &\quad - 908p^7 - 66p^6 + 320p^5 - 137p^4 - 4p^3 + 14p^2 \end{aligned} \tag{8}$$

(See table 1 for the closed form values of $p^*(b, 1)$). We also obtained $p^*(4, 1) \simeq 0.2734$, $p^*(5, 1) \simeq 0.2696$, $p^*(6, 1) \simeq 0.2673$, $p^*(7, 1) \simeq 0.2648$, $p^*(3, 2) \simeq 0.2688$, $p^*(4, 2) \simeq 0.2652$, $p^*(4, 3) \simeq 0.2614$, $p^*(5, 2) \simeq 0.2624$, $p^*(5, 3) \simeq 0.2589$ and $p^*(5, 4) \simeq 0.2563$. Through two different extrapolation methods (one of them consists of plotting $p^*(b, 1)$ against $b^{-1/p}$ (see, for example, Reynolds *et al* 1978 and also § 3); and the second is a variant adapted to $b' \geq 2$) we arrive at our best proposal

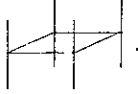
$$p_c = 0.250 \pm 0.003.$$

As universality is expected to hold, we have calculated neither ν_p nor y_h . For comparison, we recall that the estimates for the corresponding value for the site problem are 0.410 ± 0.010 and 0.387 ± 0.014 (see Essam 1972), which are greater than our bond result, as required by theory.

3. Cubic and hypercubic lattices

Let us first examine the bond percolation on first-neighbour simple cubic lattices. The family of clusters we have chosen are the straightforward generalisation for $d = 3$ of the

corresponding family we used in the previous section; for example, $b = 2$ corresponds to



We have established a closed form of $R_b(p)$ only for $b = 2$ (which is exactly the same as that presented in equation (16) of Bernasconi 1978). We treated $3 \leq b \leq 7$ with a Monte Carlo method. The plot of $v_p(b, 1)$ against b^{-1} shown in figure 1 did not allow us to obtain a reliable estimate of v_p . In figure 3 we plot $p^*(b, 1)$ against b^{-1}/v_p , as suggested by the finite-size relation (Fisher 1971, Sur *et al* 1976, Reynolds *et al* 1978)

$$p_c - p^*(b, 1) \sim b^{-1}/v_p.$$

The best fit of our data (corresponding to a linear correlation close to 0.9994) was obtained with the following values: $p_c = 0.2526 \pm 0.0013$ and $v_p = 0.840 \pm 0.020$ which compare well with other available results (see table 1). Let us add that, in the fitting process, p_c remains almost unchanged for a rather wide range of v_p ($0.79 \leq v_p \leq 0.89$). For the case $b = 2$ we have also established the scaling factor y_h (see table 1).

Let us now turn our attention onto the four-dimensional first-neighbour simple hypercubic lattice. Once more the chosen family of clusters is of the same type as those used for $d = 2, 3$. The unique closed form we established is for $b = 2$:

$$\begin{aligned} R_2(p) = & -1862p^{28} + 38416p^{27} + 374204p^{26} + 2285136p^{25} - 9794464p^{24} \\ & + 31250840p^{23} - 76787640p^{22} + 148188216p^{21} - 226831310p^{20} \\ & + 275829488p^{19} - 264550124p^{18} + 196352600p^{17} - 108377337p^{16} \\ & + 40698288p^{15} - 7838992p^{14} - 631312p^{13} + 525580p^{12} + 93736p^{11} \\ & - 77264p^{10} - 3144p^9 + 3694p^8 + 2296p^7 - 376p^6 - 264p^5 - 28p^4 \\ & + 24p^3 + 8p^2. \end{aligned} \tag{9}$$

The fixed point $p^*(2, 1)$ and $v_p(2, 1)$ are indicated in table 1. In spite of the fact that we have not studied bigger values of b , it is possible to estimate p_c in the following way. Let us first define the ratio $f_d \equiv p_c/p^*(2, 1)$ for different dimensionalities. Hence $f_2 = 0.5/0.5 = 1$ and $f_3 \simeq 0.2526/0.2085 \simeq 1.2115$. A linear extrapolation leads to $f_4 \simeq 1.4230$, and as we know $p^*(2, 1)$ for $d = 4$ we can immediately obtain our first estimate $p_c \simeq 0.1443$. Furthermore, we have used another type of extrapolation; let us define the ratio $g_d \equiv p_c(\text{site})/p_c(\text{bond})$, hence $g_2 \simeq 0.5935/0.5 \simeq 1.187$ (the value 0.5935 has been taken from Reynolds *et al* 1978) and $g_3 \simeq 0.312/0.2526 \simeq 1.2352$ (the value 0.312 has been taken from Kirkpatrick 1976). A linear extrapolation leads to $g_4 \simeq 1.2833$, hence (by using $p_c(\text{site}; d = 4) \simeq 0.198$ from Kirkpatrick 1976) $p_c(\text{bond}) \simeq 0.1543$, which is quite close to our first estimate. Finally, our proposal will be the mean value $p_c = 0.149 \pm 0.010$. The simple procedure we have adopted here is not, of course, expected to be reliable for more than, let us say, one 'step' in dimension (from $d = 3$ to $d = 4$ in our case); it cannot take into account, for instance, the fact that $d \rightarrow \infty$ implies $g_d \rightarrow 1$, as expected from general theory. The value of v_p has been determined by the same kind of procedure. By defining $h_d = v_p(2, 1)/v_p(h_2 \simeq 1.428/1.351 \simeq 1.0570, h_3 \simeq 1.031/0.840 \simeq 1.2274, \text{ hence } h_4 \simeq 1.3978)$ we have obtained $v_p = 0.667 \pm 0.030$, which compares fairly well with the result of Kirkpatrick (see table 1) for site percolation.

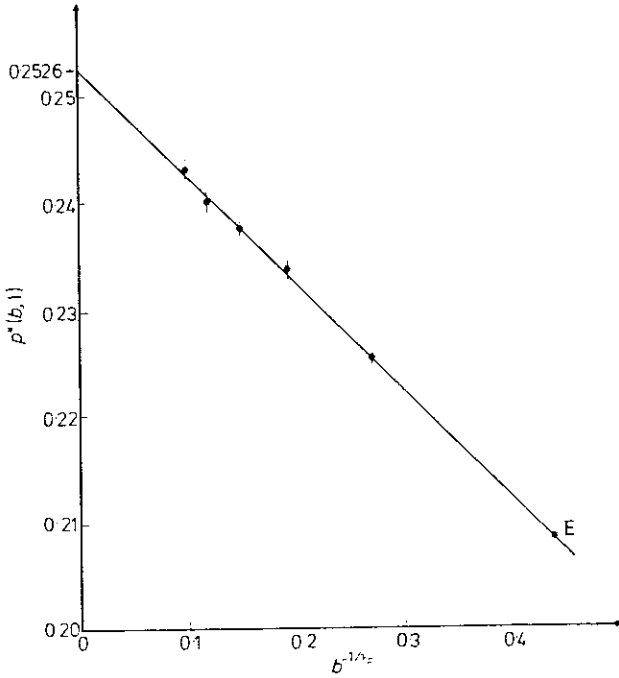


Figure 3. The approximate critical probability $p^*(b, 1)$ for the simple cubic lattice as a function of $b^{-1/2}$ with $v_p = 0.840$. ('E' means that the particular point has been obtained from a closed form expression; the others were obtained through a Monte Carlo method).

4. Symmetry of the cluster and direction of percolation

In order to investigate how the symmetry of the basic cell influences the results, we have calculated, for the square lattice, p_c and v_p using the 'asymmetric' clusters shown in figure 4 (the first four examples). We observe that the graphs associated with the first and third cells are dual one of the other (as well as the second and fourth ones among them) and, consequently, their renormalised probabilities satisfy the relation

$$R_b(p) + R_{b_D}(1 - p) = 1 \tag{10}$$

from which it follows that

$$p^*(b, 1) + p_D^*(b_D, 1) = 1 \tag{11}$$

and

$$[v_p(b, 1)]/[v_p^D(b_D, 1)] = \ln b / \ln b_D \tag{12}$$

where D refers to 'dual'.

Note that a 'vertical' percolation in the third cell (giving a renormalised probability bond p'_V) corresponds to a 'horizontal' percolation in the first cell (with a renormalised probability bond p'_H), and vice versa. (This also applies to the fourth and second cells.)

All the first four clusters violate the full $\pi/2$ rotational symmetry of the square lattice. Comparing the results for the first and second (or the third and fourth) clusters, we verify that $p^*(b, 1)$ and $v_p(b, 1)$ approach the expected values as b increases. This, of course, happens because the lack of symmetry becomes more 'diluted' in larger cells.

Let us conclude this point by saying that a comparison of table 1 and figure 4 shows that the results get noticeably worse when we use clusters which do not preserve the total symmetry of the lattice.

Original cluster	Renormalised / cluster	b	$p^*(b, 1)$	$\nu_p(b, 1)$
		2	0.304	1.155
		3	0.410	1.231
		3	0.696	1.829
		4	0.590	1.553
		2	0.671	1.429
		2	0.449	1.593
		3	0.466	1.555

Figure 4. Results obtained, through closed forms, for the bond percolation on the first-neighbour square lattice; the first four clusters do not completely preserve the symmetry of the lattice, and the last three refer to a biased 'direction' of percolation.

In the last three examples of figure 4, we have constructed a renormalisation group by use of a 'biased' percolation. The values of $p^*(b, 1)$ and $\nu_p(b, 1)$ for $b = 2, 3$ indicated in figure 4 are considerably worse than the previous values (see table 1 for $d = 2$) and they exhibit a slower convergence to the known results.

5. Conclusion

Let us conclude by saying that the RKS proposal for RG proved to be very efficient for bond percolation. In particular, the generalised H-shaped clusters are, because of their self-duality, extremely well adapted to the first-neighbour square lattice, as they lead to the exact result $p_c = \frac{1}{2}$ for any order, and they present a fast convergence in what concerns v_p .

All our numerical results ($d = 2$ with or without inclusion of second neighbours, $d = 3$ and $d = 4$) for p_c and v_p (hence α_p) compare fairly well with other available results, with the unique exception of y_h for $d = 2$ (we obtained $y_h \simeq 2$ instead of $y_h \simeq 1.9$ which is the most commonly accepted value). This discrepancy is not surprising as we did not try to increase the number of points of the series in order to see what happens.

To the best of our knowledge our proposals

$$p_c = 0.250 \pm 0.003$$

for the first- and second-neighbour square lattice and $p_c = 0.149 \pm 0.010$ for the simple $d = 4$ hypercubic lattice are the first ones available in the literature (this is not the case for site percolation; see, for example, Essam 1972 and Kirkpatrick 1976). Also let us recall that our proposal for the simple cubic lattice is $p_c = 0.2526 \pm 0.0013$.

Finally we showed, through several examples, that clusters which do not entirely respect the symmetry of the lattice, or inconvenient 'directions' of percolation on them, may seriously deteriorate the numerical values as well as the speed of the convergence process, although they present the correct tendencies in all the cases.

Acknowledgments

One of us (CT) acknowledges interesting comments from P J Reynolds.

Note added in proof. Through a method quite similar to the one presented here, S Kirkpatrick 1978 (*IBM Res. Rep.* RC 7296) obtained for bond percolation in d -dimensional simple cubic lattices: (a) $d = 2$: $v_p = 1.365 \pm 0.015$; (b) $d = 3$: $p_c = 0.2495 \pm 0.0005$ and $v_p = 0.845 \pm 0.015$; (c) $d = 4$: $p_c = 0.1435 \pm 0.001$ and $v_p = 0.66 \pm 0.02$. These agree fairly well with our own results.

References

- Bernaseconi J 1978 *Phys. Rev.* B18 2185-91
- Dasgupta C 1976 *Phys. Rev.* B14 1248-70
- Dunn A G, Essam J W and Ritchie D S 1975 *J. Phys. C: Solid St. Phys.* 8 4219-35
- Essam J W 1972 *Phase Transitions and Critical Phenomena* vol 2 ed C Domb and M S Green (New York: Academic Press) pp 197-270
- Fisher M E 1971 *Critical Phenomena. Proc. Int. Sch. Phys. 'Enrico Fermi' Course 51* ed M S Green (New York: Academic Press)
- 1974 *Rev. Mod. Phys.* 46 597-616
- Harris A B, Lubensky T C, Holcomb W K and Dasgupta C 1975 *Phys. Rev. Lett.* 35 327-30
- Harris A B, Lubensky T C and Chen J H 1976 *Phys. Rev. Lett.* 36 415-8
- Kasteleyn P W and Fortuin C M 1969 *J. Phys. Soc. Japan (suppl.)* 26 11-4
- Kirkpatrick S 1976 *Phys. Rev. Lett.* 36 69-72
- 1977 *Phys. Rev.* B15 1533-8

- Klein W, Stanley H E, Reynolds P J and Coniglio A 1978 *Phys. Rev. Lett.* **41** 1145-8
Ma S K 1973 *Rev. Mod. Phys.* **45** 589-614
Marland L G and Stinchcombe R B 1977 *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **10** 2223-32
Niemeyer Th and Van Leeuwen J M J 1974 *Physica* **71** 17-40
— 1976 *Phase Transitions and Critical Phenomena* vol 6 ed C Domb and M S Green (New York: Academic Press) pp 425-505
Reynolds P J, Klein W and Stanley H E 1977 *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **10** L167-72
Reynolds P J, Stanley H E and Klein W 1978 *J. Phys. A: Math. Gen.* **11** L199-207
Sarychev A K 1977 *Sov. Phys.—JETP* **45** 524-5
Shante V K S and Kirkpatrick S 1971 *Adv. Phys.* **20** 325-57
Stinchcombe R B and Watson B P 1976 *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **9** 3221-47
Sur A, Lebowitz J L, Marro J, Kalos M H and Kirkpatrick S 1976 *J. Stat. Phys.* **15** 345-53
Sykes M F and Essam J W 1964 *Phys. Rev.* **133** A310-15
Tsallis C and Schwachheim G 1979 *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **12** 9-15
Vyssotsky V A, Gordon S B, Frisch H L and Hammersley J M 1961 *Phys. Rev.* **123** 1566-7
Wallace D J and Zia R K P 1978 *Rep. Prog. Phys.* **41** 1-85
Wilson K G and Kogut J 1974 *Phys. Rep.* **12C** 1-85
Young A P and Stinchcombe R B 1975 *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **8** L535-40

Renormalisation group treatment of bond percolation in anisotropic and ‘inhomogeneous’ planar lattices

Aglaé C N de Magalhães, Constantino Tsallis and Georges Schwachheim
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq, Av. Wenceslau Braz 71, Rio de Janeiro, Brasil

Received 23 April 1980, in final form 27 November 1980

Abstract. The uncorrelated bond percolation problem is studied in three planar systems where there are two distinct occupancy probabilities. We apply two different real space renormalisation group approaches (referred as the ‘canonical’ (CRG) and the ‘parametric’ (PRG) ones) to the anisotropic first-neighbour square lattice, and both of them exhibit the expected tendency towards the exactly known phase boundary ($p + q = 1$). Then we introduce, within the context of PRG calculations for increasingly large cells, an extrapolation method which leads to analytical proposals for the other two lattices, namely $p + q = \frac{1}{2}$ for the first- and second-neighbour square lattice (p and q are respectively the first- and second-neighbour occupancy probabilities), and $3(p - \frac{1}{2}) = 4[(1 - q)^2 + (1 - q)^3]$ (p and q are respectively the occupancy probabilities of the topologically different bonds which are in a 1:2 ratio) for the 4–8 lattice.

1. Introduction

The percolation problem has been the subject of many recent works exploring its analogies and connections with thermodynamic phase transitions (see for instance the reviews of Zallen 1978, Stauffer 1979, Essam 1980). Many real-space renormalisation group (RG) approaches have been developed for bond, site and site–bond percolation. Some authors (Harris *et al* 1975, Dasgupta 1976, Marland and Stinchcombe 1977, Kunz and Wu 1978, Burkhardt and Southern 1978) made use of the relationship between the percolation problem and the s -state Potts model in the limit $s \rightarrow 1$ (Kasteleyn and Fortuin 1969). Others (Young and Stinchcombe 1975, Kirkpatrick 1977, Reynolds *et al* 1977, 1978, Nakanishi and Reynolds 1979, Shapiro 1979, Tsallis and Schwachheim 1979, Murase and Yuge 1979, Magalhães *et al* 1980) have constructed RG transformations which act *directly* on the space of occupancy probabilities. Concerning bond percolation problems where more than one probability appear, some exact or approximate results have been obtained by graph theory (Sykes and Essam 1963), series expansions (Redner and Stanley 1979), ‘ghost site’ methods (Turban 1979a) and RG (Lage 1979, Ikeda 1979, Turban 1979b, Nakanishi *et al* 1980).

In the present work we study, within a real space RG framework, uncorrelated bond percolation in three planar lattices, namely the anisotropic first-neighbour square lattice and the ‘inhomogeneous’ first- and second- neighbour square and 4–8 lattices, where the word ‘inhomogeneous’ stands for the fact that two different occupancy probabilities p and q are introduced. The critical frontier in the p - q space (as well as the connectivity

critical exponent ν_p) associated with the anisotropic first-neighbour square lattice is discussed (§2) within two different RG approaches, to which we refer as the canonical (CRG) and the parametric (PRG) ones. Both of them exhibit the correct tendency towards the well known (Sykes and Essam 1963) exact result $p + q = 1$. The first- and second-neighbour square lattice (§3) and 4-8 lattice (§4) are discussed only within the PRG framework by using a convenient extrapolation procedure. Finally, for both critical lines we propose analytical expressions which fit the numerical results extremely well, and might therefore be the exact ones.

2. Anisotropic first-neighbour square lattice

Let us consider a first-neighbour square lattice where the independent occupation probabilities for 'vertical' and 'horizontal' bonds are p and q respectively. Its exact critical line (which separates the percolating and non-percolating regions) is already known (Sykes and Essam 1963):

$$p + q = 1. \tag{1}$$

This equation has recently been confirmed by different approaches: series expansions (Redner and Stanley 1979), self-consistent decimation within the context of an effective medium theory (Lage 1979), and anisotropic RG transformations using as a starting point the isotropic square lattice (Turban 1979b). In this section we present the already mentioned CRG and PRG approaches†: both of them support equation (1).

Let us first of all choose a family of clusters (whose size will be characterised by b) which completely cover the lattice (those associated with $b = 1$ and $b = 2$ are respectively indicated in figures 1(a) and 1(b)). Next we associate with each cluster a graph by collapsing the entries and exits into two terminals and by eliminating the irrelevant bonds (several examples of such graphs appear in figure 1). Finally, through the deletion-contraction rule (see Appendix 1), we associate with each graph a polynomial (denoted $R_b(p, q)$) which represents the probability of the two terminals being connected, in particular

$$R_1(p, q) = p \tag{2}$$

$$R_2(p, q) = 2p^2 - p^4 + q(2p^2 - 4p^3 + 2p^4) \tag{3}$$

$$\begin{aligned} R_3(p, q) = & 3p^3 - 3p^6 + p^9 + 8q(p^3 - p^4 - p^5 + p^7 + p^8 - p^9) \\ & + q^2(10p^3 - 30p^4 + 12p^5 + 18p^6 + 24p^7 - 60p^8 + 26p^9) \\ & + 4q^3(p^3 - 6p^4 + 8p^5 + 11p^6 - 36p^7 + 31p^8 - 9p^9) \\ & + q^4(2p^3 - 19p^4 + 72p^5 - 140p^6 + 148p^7 - 81p^8 + 18p^9). \end{aligned} \tag{4}$$

These expressions can be re-obtained by explicit counting of all the percolating bond configurations‡ (Young and Stinchcombe 1975, Reynolds *et al* 1977). Notice that $R_2(p, p)$ and $R_3(p, p)$ reproduce equation (12) of Reynolds *et al* (1977) and equation (5) of Magalhães *et al* (1980) respectively.

† The CRG procedure has been used independently by Nakanishi *et al* (1980).

‡ For details of the method, see for instance Magalhães *et al* (1980).

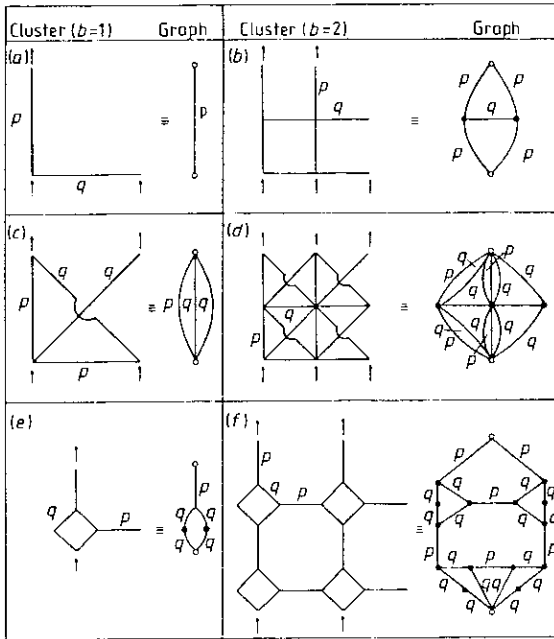


Figure 1. Examples of clusters ($b = 1, 2$) and their associated graphs, used for the treatment of the anisotropic first-neighbour square lattice ((a) and (b)) and the 'inhomogeneous' first- and second-neighbour square ((c) and (d)) and 4-8((e) and (f)) lattices. The arrows indicate the entries and exits of the clusters. Open (full) circles denote the terminal (internal) nodes of the graphs.

By considering 'vertical' percolation and renormalising a cell of side b into a smaller one of side b' (therefore the lattice expansion factor will be b/b'), we get the following relation:

$$R_b(p', q') = R_b(p, q). \tag{5}$$

In order to complete the RG recursive procedure we need a second relation (among p' , q' , p and q) which can be obtained through the CRG or the PRG procedures which we shall now discuss.

2.1. Canonical RG procedure (CRG)

Herein the second relation comes from consideration of percolation along another direction; in the present case we shall choose this direction to be the 'horizontal' one; hence

$$R_b(q', p') = R_b(q, p) \tag{6}$$

The relations (5) and (6) define a two-parameter RG transformation, whose flow lines in the p - q space yield the critical frontier we are looking for. The term 'canonical' comes from the fact that this is the traditional procedure (Niemeyer and Van Leeuwen 1974, 1976, Young and Stinchcombe 1975).

Let us now point out some general results related to the symmetry of this particular problem. First of all, we notice that the system of recursive relations (5) and (6) leads to

a flow diagram which is symmetric with respect to the axis $p = q$ (see figure 2). Furthermore, the clusters of the family we have chosen are self-dual (see the last part of Appendix 1); hence

$$R_b(p, q) + R_b(1 - p, 1 - q) = 1 \quad \forall \quad b, (p, q). \tag{7}$$

This relation immediately implies a second symmetry (in the flow diagram), namely a point symmetry with respect to $(p, q) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, which together with the first one leads to a new symmetry axis (determined by $p + q = 1$).

The RG transformation we are dealing with has nine fixed points for any finite values of b and b' , namely the point $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ which corresponds to the exact results of the isotropic case, the trivial points $(0, 0)$ and $(1, 1)$, the linear chain points $(0, 1)$ and $(1, 0)$ and the four points dependent on b and b' $(p_0, 0)$, $(1 - p_0, 1)$, $(0, p_0)$ and $(1, 1 - p_0)$, where p_0 satisfies (of the contraction-deletion rule)

$$(1 - p_0^{b'})^{b'} - (1 - p_0^b)^b = 0 \quad \forall \quad (b, b'). \tag{8}$$

We verify that $p_0(b, b')$ tends towards unity if $b \rightarrow \infty$ (we recall that $b' < b$); the quickest convergence is obtained for $b' = b - 1$. This fact is illustrated with the following examples:

$p_0(2, 1) = (\sqrt{5} - 1)/2 \simeq 0.6180$	$p_0(3, 1) = 0.6823$
$p_0(20, 1) \simeq 0.8939$	$p_0(200, 1) \simeq 0.9805$
$p_0(1000, 1) \simeq 0.9948$	$p_0(20, 19) \simeq 0.9651$
$p_0(200, 199) \simeq 0.9965.$	

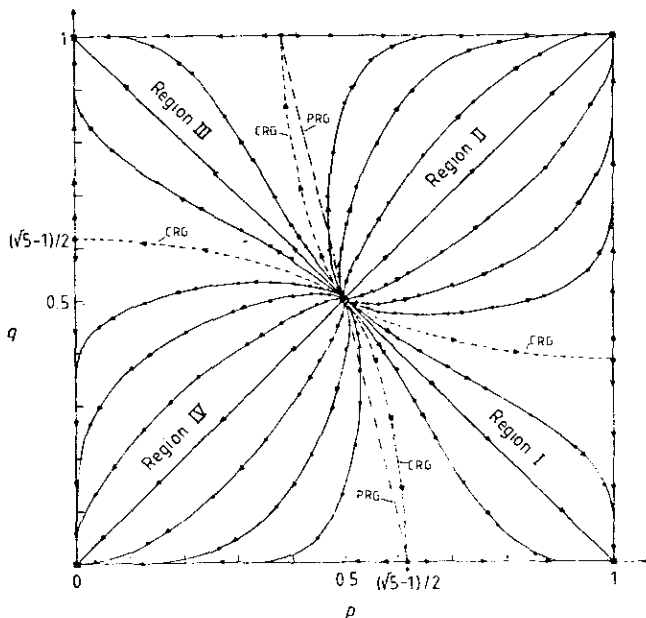


Figure 2. An example ($b = 2, b' = 1$) of flow diagram in the p - q space for the anisotropic first-neighbour square lattice. Each full line represents a CRG trajectory followed by some arbitrary initial point in the neighbourhood of the fixed point $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. The successive points exhibit the velocity of convergence within flow lines. The broken and chain lines respectively indicate the CRG and PRG critical frontiers. The fixed points can be fully stable (■), fully unstable (□) and partially stable (●).

Bond percolation in anisotropic and 'inhomogeneous' planar lattices 1397

The linearisation of equations (5) and (6) in the neighbourhood of the point $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ leads to a Jacobian matrix whose two eigenvectors are in the directions $p = q$ (associated to the largest eigenvalue, which coincides with the isotropic one, namely

$$\lambda \equiv \left\{ \frac{dR_b(p, p)}{dp} \left[\frac{dR_b(p, p)}{dp} \right]^{-1} \right\}_{p=\frac{1}{2}}$$

and $p + q = 1$, as can be seen in figure 2. The connectivity critical exponent is given, within the present approximation, by $\nu_p(b, b') = \ln(b/b')/\ln \lambda$ (cf Magalhães *et al* 1980, $\nu_p(2, 1) \simeq 1.428$, $\nu_p(3, 1) \simeq 1.380$, $\nu_p(4, 1) \simeq 1.363$ and the extrapolated value is $\nu_p = 1.351^{+0.012}_{-0.020}$). We verify that the flow diagrams associated with $b = 3, 4$ are very similar to that of $b = 2$ (figure 2). In all of them this fixed point is unstable in all directions, in particular along the line $p + q = 1$, contrary to what we (and Nakanishi *et al* 1980) were expecting on account of universality. We were not able to find any explanation for this fact other than the possibility of reversal of this tendency for sufficiently high b .

In figure 2 we can see that 'division' lines (broken lines) separate the p - q space into four regions (namely I, II, III and IV), each of them associated with an attractive fixed point $((1, 0), (1, 1), (0, 1)$ and $(0, 0)$ respectively). As b increases, for e.g. a fixed b' , regions I and III shrink; this fact, together with the tendency of p_0 towards unity when $b \rightarrow \infty$, strongly suggests that the CRG frontiers coalesce onto the exact one $p + q = 1$.

2.2. Parametric RG procedure (PRG)

Another choice, instead of equation (6), which completes (with equation (5)) the RG recursive set of transformations we are looking for, might be

$$Q(p', q') = Q(p, q) \equiv \varepsilon \tag{9}$$

where ε is a parameter and the function $Q(p, q)$ is an arbitrary one. Simple examples are†

$$Q(p, q) = q/p \tag{10}$$

$$Q(p, q) = q \tag{11}$$

$$Q(p, q) = p. \tag{12}$$

It is important to remark that within the present approximate procedure *every point of the critical line is a fixed one*; consequently the PRG cannot be applied to calculate the crossover exponent. Furthermore, the equation of this critical line (referred to hereafter as $\Gamma(b, b')$), namely

$$R_b(p^*, q^*) = R_{b'}(p^*, q^*) \tag{13}$$

is *independent* of the choice of $Q(p, q)$. On the other hand, the critical exponents (in particular ν_p) *depend* on the choice of $Q(p, q)$ as this function determines the recursion in the neighbourhood of the critical frontier. Moreover, the approximate critical exponents exhibit, along this frontier, an unphysical dependence on the parameter ε , which in order to support universality should disappear with increasing cluster sizes.

We have obtained, by using equation (13), several frontiers $\Gamma(b, b')$ ($2 \leq b \leq 5$ and $1 \leq b' \leq 4$): some of them are indicated in figure 3. All the frontiers $\Gamma(b, b')$ were derived from closed forms of equation (13), with the exception of $\Gamma(5, b')$ ($1 \leq b' \leq 4$) which

† The choice (10) has been used for a square lattice by Ikeda (1979) in the quasi-unidimensional and nearly isotropic cases.

were treated by a two-variable version of the Monte Carlo method presented elsewhere (Magalhães *et al* 1980). Throughout this paper we have worked, for every (b, b') , around $N_b n_b(p)n_b(q) \gtrsim 10^7$ (N_b being the total number of Monte Carlo runs and $n_b(p), n_b(q)$ standing respectively for the number of relevant p and q bonds of the cluster characterised by b).

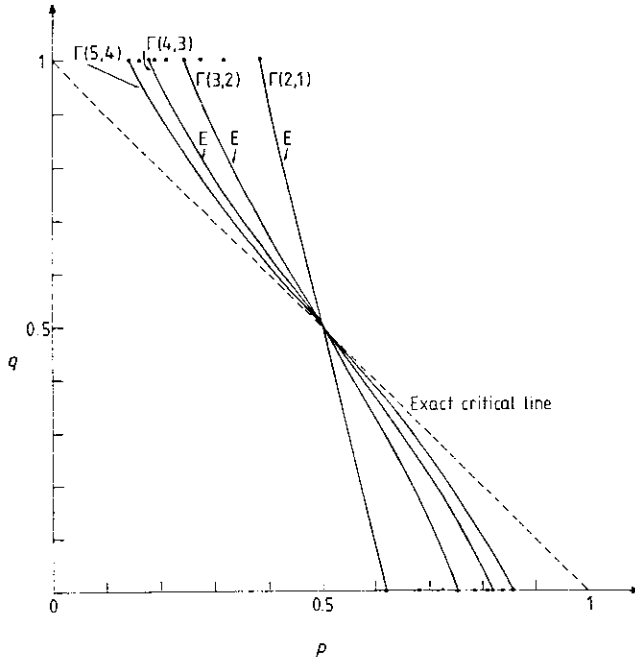


Figure 3. Examples of PRG critical frontiers for the first-neighbour square lattice (E denotes closed form frontiers; the other is a Monte Carlo one). The $q = 0$ points, namely $p(2, 1) < p(3, 1) < p(4, 1) < p(5, 1) \simeq p(3, 2) < p(4, 2) < p(5, 2) < p(4, 3) < p(5, 3) < p(5, 4)$ and their respective symmetric $q = 1$ points are also indicated. The broken line represents the exact critical line.

Let us note that all the frontiers $\Gamma(b, b')$ include the exact isotropic point $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, and preserve, like the CRG frontiers, the point symmetry with respect to this point (see equations (7) and (13)). On the other hand, their derivatives evaluated at this point, contrary to what happens in the CRG, are not the exact one (namely -1), but they tend to it for increasing cluster sizes in all the cases we have examined. Let us also observe that the curves $\Gamma(b, b')$ are not symmetric with respect to the line $p = q$ since equation (13) is not invariant under the transformation $p^* \leftrightarrow q^*$ (see figure 3). It is worth remarking that the point $(p_0(b, b'), 0)$ (see equation (8)) belongs to $\Gamma(b, b')$: this is due to the fact that both sides of equation (6) identically vanish for $q = 0$, and therefore both the CRG and the PRG treatments rely on one and the same equation (5). Let us finally remark that the CRG frontiers are for the same values of (b, b') , better (though harder to work out) than the PRG ones (see figure 2); nevertheless all of them tend towards the exact line $p + q = 1$.

In what concerns the calculation of the approximate critical exponent $\nu_p(b, b'; \epsilon)$ we observe that, for the small examined clusters ($2 \leq b \leq 4, 1 \leq b' \leq 3$), the artificial

dependence† of v_p on ε (for the three choices of ε , namely q/p , q and p) increases, instead of disappearing, as we use bigger cells; we do not know if this tendency will be reversed for larger clusters.

3. 'Inhomogeneous' first- and second-neighbour square lattice

In this section we study the bond percolation on isotropic first- and second-neighbour square lattices where p and q are respectively the independent occupancy probabilities for the first and second neighbour bonds. We remark that in both particular cases $q = 0$ and $p = 0$, this lattice reduces to one and two disconnected first-neighbour square lattices respectively, whose critical probability is $\frac{1}{2}$.

We shall use the same family of cells we considered (Magalhães *et al* 1980) for the $p = q$ case (see figures 1(c) and 1(d)). Application of the contraction-deletion rule to their respective graphs yields the following vertical renormalised probabilities $R_b(p, q)$:

$$R_1(p, q) = p + 2q(1 - p) - q^2(1 - p) \tag{14}$$

and

$$\begin{aligned} R_2(p, q) = & 2p^2 + 2p^3 - 5p^4 + 2p^5 + q(6p + 2p^2 - 30p^3 + 26p^4 - 4p^6) \\ & + q^2(6 - 4p - 56p^2 + 92p^3 - 2p^4 - 64p^5 + 28p^6) \\ & + q^3(-4 - 38p + 128p^2 - 24p^3 - 248p^4 + 270p^5 - 84p^6) \\ & + q^4(-8 + 64p - 36p^2 - 338p^3 + 708p^4 - 530p^5 + 140p^6) \\ & + q^5(8 - 6p - 198p^2 + 690p^3 - 942p^4 + 588p^5 - 140p^6) \\ & + q^6(2 - 52p + 272p^2 - 608p^3 + 682p^4 - 380p^5 + 84p^6) \\ & + q^7(-4 + 38p - 140p^2 + 260p^3 - 260p^4 + 134p^5 - 28p^6) \\ & + q^8(1 - 8p + 26p^2 - 44p^3 + 41p^4 - 20p^5 + 4p^6). \end{aligned} \tag{15}$$

These equations respectively reproduce, if $p = q$, equations (7) and (8) of Magalhães *et al* (1980), as it should be. As illustrated in the previous section, both CRG and PRG procedures tend, for increasingly large cells, towards the exact frontiers; however, because of its operational simplicity we shall from now on use the latter.

We notice that for $q = 0$ expressions (14) and (15) (and those corresponding to higher values of b) reduce to those associated with the first-neighbour square lattice (Reynolds *et al* 1977, Magalhães *et al* 1980). Therefore *all* the frontiers $\Gamma(b, b')$ we are looking for will contain the point $(p, q) = (\frac{1}{2}, 0)$. On the other hand, the case $p = 0$ deserves a few comments, as here every graph $R_b(0, q_0)$ becomes a parallel array of a certain graph (noted $G_b(q)$) with its dual (noted $G_b^D(q)$); see figure 4 and Appendix 1. Therefore equation (13) becomes

$$G_b(q_0) + G_b^D(q_0) - G_b(q_0)G_b^D(q_0) = G_b(q_0) + G_b^D(q_0) - G_b(q_0)G_b^D(q_0). \tag{16}$$

Hence

$$G_b(q_0) = G_b(q_0). \tag{16'}$$

† Ikeda's treatment (1979) presents a similar variation of v_p in the neighbourhood of the isotropic case $p = q = \frac{1}{2}$. He obtains $v_p(q^* = xp \simeq 0.543) \simeq 1.25$ and $v_p(q^* = xp = 0.5) \simeq 1.10$; our results on the same points (for $b = 2, b' = 1$) are respectively 1.40 and 1.43. All these numbers are to be compared with the nearly exact value 1.35 (den Nijs 1979 conjectures a value of $\frac{4}{3}$).

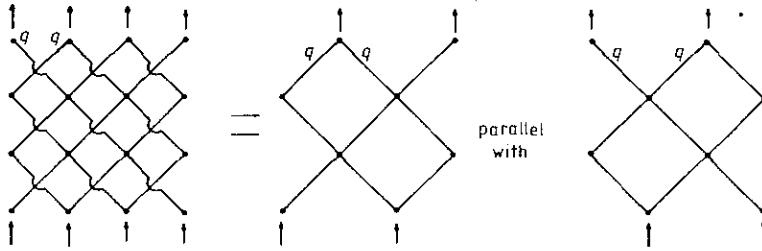


Figure 4. Example of a cluster with odd b ($b = 3$), associated with the case $p = 0$ of the first- and second-neighbour square lattice; it can be decomposed into a self-dual graph in parallel with itself.

Furthermore, we can see that $G_b^D(q) = G_b(q)$ if and only if b is an odd number, and consequently if both b and b' are odd numbers equation (16') admits the root $q_0(b, b') = \frac{1}{2}$, which is the exact answer. On the other hand, if b and/or b' is even, $q_0(b, b')$ is different from $\frac{1}{2}$ but tends to it for increasingly large cells, as can be seen in table 1.

Table 1. RG closed form values of $q_0(b, b')$ associated with the $p = 0$ bond percolation on the first- and second-neighbour square lattice.

$b' \backslash b$	2	3	4	5
1	0.4923	$\frac{1}{2}$	0.4997	$\frac{1}{2}$
2	—	0.5090	0.5042	0.5032
3	—	—	0.4989	$\frac{1}{2}$
4	—	—	—	0.5011

The lines $\Gamma(b, 1)$ for $2 \leq b \leq 5$ (obtained through equation (13)) are indicated in figure 5. We shall next specify an extrapolation procedure we have developed in order to obtain our best proposal Γ_∞ for the critical line. We first cut the curves $\Gamma(b, 1)$ with let us say straight lines parametrised by ε (e.g. $\varepsilon = p$ or $\varepsilon = q$ or $\varepsilon = q/p$); we shall call $Y_b^*(\varepsilon)$ the abscissa (or equivalently the ordinate) values which are thus obtained. Next we plot $Y_b^*(\varepsilon)$ against b^{-1/ν_p} (where we choose for ν_p the best available value), and through linear extrapolation to the origin we obtain the limit $Y_c(\varepsilon)$ for that particular value of ε . The set of $\{Y_c(\varepsilon)\}$ will be our proposal of Γ_∞ for that particular family of straight lines (e.g. $\varepsilon = p$). We repeat this procedure with other families (e.g. $\varepsilon = q$ or $\varepsilon = q/p$). We have verified that $\Gamma_\infty(\varepsilon = p)$, $\Gamma_\infty(\varepsilon = q)$ and $\Gamma_\infty(\varepsilon = q/p)$ are extremely close to each other (see figure 5). Another test of self-consistency of the present procedure can be performed by verifying, on a plot of $\log [Y_b^*(\varepsilon) - Y_c(\varepsilon)]$ against $\log b$, that we obtain parallel straight lines for different choices of families of straight lines (e.g. $\varepsilon = p$ etc) and of values of the parameter ε (see figure 6) -this fact supports the basic assumption that ν_p is independent of such choices. Let us point out that the whole of the above procedure is nothing but a generalisation, for a two-dimensional probability space, of the finite-size scaling law (Fisher 1971, Sur *et al* 1976, Suzuki 1977, Reynolds *et al* 1978) which is frequently used for the one-parameter case, i.e. we are admitting the validity of an equation of the type

$$Y_b^*(\varepsilon) - Y_c(\varepsilon) \sim b^{-1/\nu_p}. \tag{17}$$

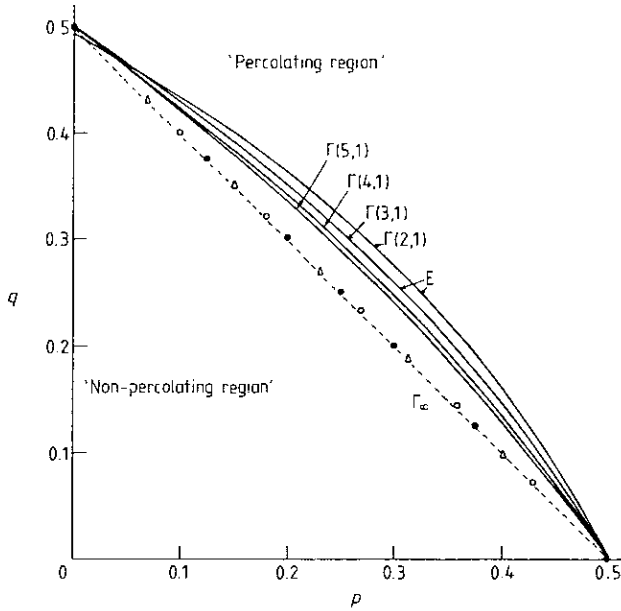


Figure 5. PRG critical frontiers and extrapolated points for the first- and second-neighbour square lattice (E denotes closed form frontiers; the others are Monte Carlo ones). The extrapolated points were obtained through three different families of straight lines, where, because of universality, the nearly exact value 1.35 has been adopted for ν_p . The proposal $p + q = \frac{1}{2}$ is indicated by the broken line. ●, $\varepsilon = q/p$; ○, $\varepsilon = p$; △, $\varepsilon = q$.

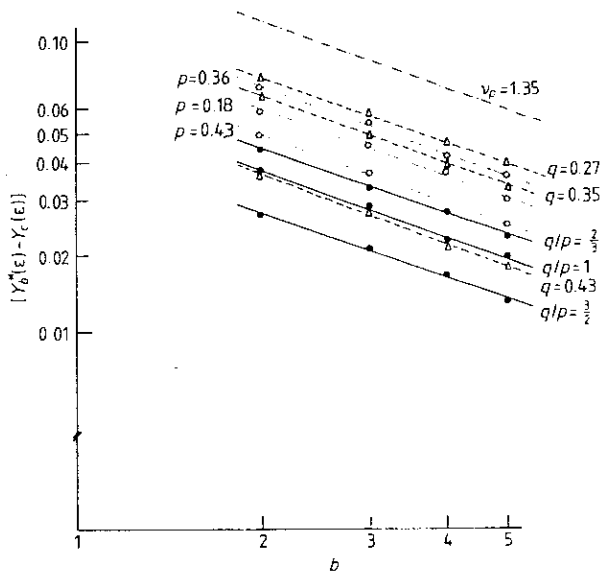


Figure 6. Log-log plot of $[Y_b^*(\varepsilon) - Y_c(\varepsilon)]$ as a function of b for the first- and second-neighbour square lattice (for simplicity only a few examples are shown). A straight chain line with slope equal to $-(1.35)^{-1}$ is shown. △, $\varepsilon = q$; ●, $\varepsilon = q/p$; ○, $\varepsilon = p$.

Such a behaviour is expected to hold for very large b . Nevertheless it turns out that surprisingly small values of b already satisfy it. Let us recall that, for the critical probability of bond percolation on a simple cubic lattice, we have obtained (Magalhães *et al* 1980), by using $b \leq 7$, $p_c = 0.2526$, which is extremely close to the value $p_c = 0.2495$ obtained by Kirkpatrick (1978) by using clusters with $b \leq 80$.

Let us now turn back to the critical line of the first- and second-neighbour square lattice. We have verified that the three families we have chosen (namely, $\varepsilon = p$, $\varepsilon = q$ and $\varepsilon = q/p$) lead to points (see figure 5) which lie on straight lines within a linear correlation coefficient of 0.99995. Furthermore, we have previously estimated (Magalhães *et al* 1980) the critical probability for the particular case $p = q$, and have found $p_c = 0.250 \pm 0.003$. Finally we remark that the 1:1 ratio of the numbers of p and q bonds for the infinite lattice is not exactly respected for small clusters; hence the curves $\Gamma(b, 1)$ exhibit a slight asymmetry† (with respect to the line $p = q$) which disappears for increasingly large cells. All these reasons strongly suggest that the *exact* critical frontier is given by

$$p + q = \frac{1}{2} \tag{18}$$

though we have not succeeded in finding a rigorous argument to prove it.

We have also calculated $v_p(b, b'; \varepsilon)$ for different parameters ($\varepsilon = p$, q and q/p) and for $2 \leq b \leq 3$, $1 \leq b' \leq 2$. We observed the same tendency as before (§2), e.g. the increase of the percentage variation of v_p with ε for increasingly large cells. This fact shows that the PRG method is not suitable for calculating critical exponents.

4. 'Inhomogeneous' 4-8 lattice

Our last calculation refers to the critical frontier of the 4-8 lattice where the two topologically different bonds (see figure 1(f)) have occupancy probabilities p and q . Notice that for either $q = 1$ or $p = 1$ the system reduces to the simple square lattice. The probability polynomials $R_b(p, q)$ corresponding to the cells shown in figures 1(e) ($b = 1$) 1(f) ($b = 2$) are respectively

$$R_1(p, q) = 2pq^2 - pq^4 \tag{19}$$

and

$$\begin{aligned} R_2(p, q) = & q^4(8p^2 + 8p^3 + 2p^4) + q^5(-4p^3 - 6p^4 - 2p^5) + q^6(-8p^2 + 4p^3 - 4p^4 - 6p^5) \\ & + q^7(-10p^3 - 12p^4 - 14p^5 + 4p^6) + q^8(2p^2 - 26p^4 + 14p^5 + 20p^6) \\ & + q^9(6p^3 + 24p^4 + 130p^5 - 4p^6) + q^{10}(-2p^3 + 42p^4 - 58p^5 - 108p^6) \\ & + q^{11}(18p^4 - 162p^5 + 16p^6) + q^{12}(-40p^4 - 4p^5 + 232p^6) \\ & + q^{13}(-24p^4 + 144p^5 - 144p^6) + q^{14}(12p^4 + 32p^5 - 112p^6) \\ & + q^{15}(16p^4 - 104p^5 + 128p^6) + q^{16}(-7p^4 + 32p^5 - 32p^6). \end{aligned} \tag{20}$$

Similarly to the previous section, we have applied only the PRG method to the cells of the type mentioned just above, obtaining the curves $\Gamma(b, 1)$ ($b = 2, 3, 4$) indicated in figure 7. Since the chosen cells reduce, for $q = 1$, to the self-dual H -shaped clusters, all

† This asymmetry is evident in figure 6: the lines corresponding to, e.g. $\varepsilon = q/p = \frac{2}{3}$ and $\frac{3}{2}$ do not coincide (they would do so if the curves $\Gamma(b, 1)$ were symmetric with respect to the line $p = q$).

Bond percolation in anisotropic and 'inhomogeneous' planar lattices 1403

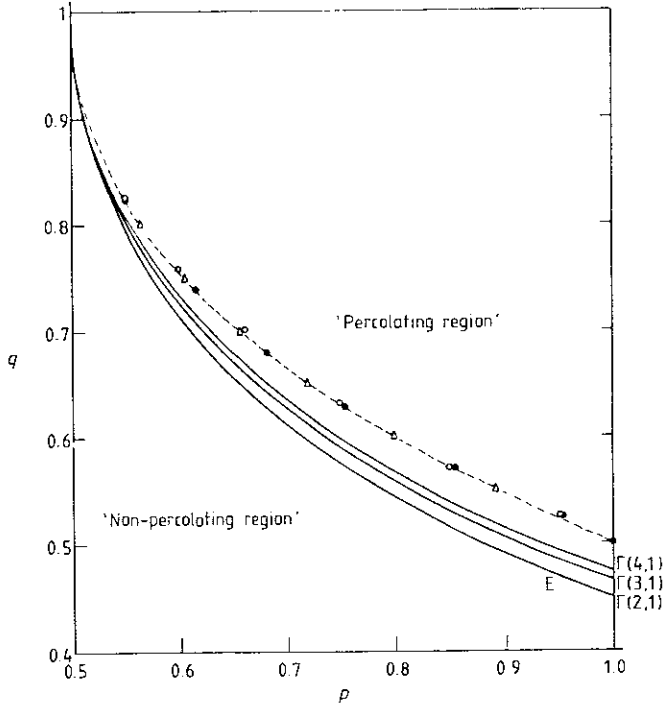


Figure 7. PRG critical frontiers and extrapolated points (with $v_p = 1.35$) for the 4-8 lattice (E denotes a closed form frontier; the other two are Monte Carlo ones). The broken line represents our analytic proposal (equation (24)). ●, $\epsilon = q/p$; ○, $\epsilon = p$; △, $\epsilon = q$.

curves $\Gamma(b, b')$ contain the exact point $(p, q) = (\frac{1}{2}, 1)$. Furthermore, we can show (see Appendix 2) that at this particular point, due to the fact that the 4-8 lattice (as well as the clusters we have chosen) is constituted by q bond polygons linked to each other by p bonds†, we have

$$(dp/dq)_{p=\frac{1}{2}, q=1} = 0 \quad \forall (b, b'). \tag{21}$$

It is also worth remarking that, in the particular case of $p = 1$, our clusters reduce for $b = 2$ and 3 respectively to the last ones drawn in figure 4 of our previous work (Magalhães *et al* 1980) (where they were introduced to illustrate a 'biased' percolation on a square lattice); we can see in figure 7 that q^* approaches the exact value $\frac{1}{2}$ as b increases, as it should.

Following the same extrapolation procedure of § 3 (see equation (17)), we have obtained, through three different families of straight lines, the points shown in figure 7; the self-consistency of the extrapolation method for this particular lattice can be checked in figure 8. Extrapolation in the neighbourhood of $p = 1$ yields the following estimate for the derivative:

$$(dq/dp)_{p=1, q=\frac{1}{2}} = -0.45 \pm 0.10. \tag{22}$$

† The 'inhomogeneous' 3-12 lattice also has this topological property, and hence equation (21) also holds for this lattice.

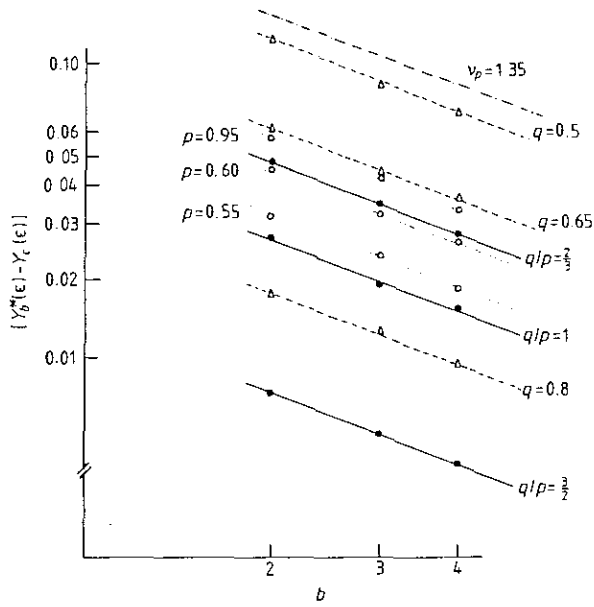


Figure 8. Log-log plot of $[Y_b^*(\epsilon) - Y_c(\epsilon)]$ as a function of b for the 4-8 lattice (for simplicity only a few examples are shown). A straight chain line with slope equal to $-(1.35)^{-1}$ is indicated. \bullet , $\epsilon = q/p$; \circ , $\epsilon = p$; Δ , $\epsilon = q$.

In the particular case $p = q$, we were able to calculate $p^*(b, 1)$ for bigger clusters ($b \leq 7$). From the plot of $p^*(b, 1)$ against b^{-1/ν_p} (see figure 9), we estimate that

$$p_c = q_c = 0.681 \pm 0.005 \tag{23}$$

which differs very little from $Y_c(q/p = 1) \simeq 0.684$ (where $b \leq 4$). These values are to be compared with 0.675 ± 0.027 (Dean 1963), 0.684 (Neal 1972) and the interval $[0.645, 0.707]$ (Ottavi 1979).

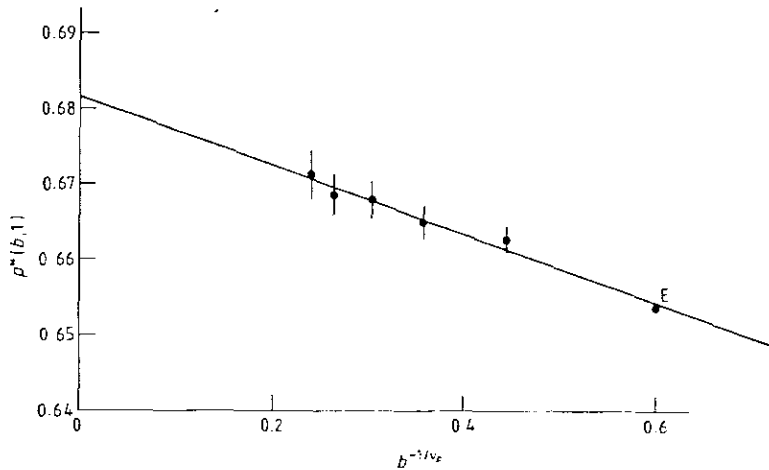


Figure 9. The approximate critical probability $p^*(b, 1) = q^*(b, 1)$ for the 4-8 lattice as a function of b^{-1/ν_p} with $\nu_p = 1.35$ (E) denotes a closed form point; the others are Monte Carlo ones).

Let us conclude by saying that the simple analytical relation

$$v = \frac{1}{3}(2u^2 + u^3) \tag{24}$$

where

$$v \equiv 2(p - \frac{1}{2})$$

and

$$u \equiv 2(1 - q)$$

determines a critical frontier which contains the exact points $(1, \frac{1}{2})$ and $(\frac{1}{2}, 1)$, satisfies the property (21), leads to

$$(dq/dp)_{p=1, p=\frac{1}{2}} = -\frac{3}{7} \simeq -0.43$$

(in agreement with estimate (22)) and to $p_c = q_c \simeq 0.680$ (in accordance with equation (23)), and fits very satisfactorily the rest of the extrapolated points (see figure 7). No doubt equation (24) has a good chance of being the exact one.

5. Conclusion

We have verified in the anisotropic first-neighbour square lattice that the canonical renormalisation group (CRG) and the parametric renormalisation group (PRG) procedures we have used yield satisfactory results in what concerns the percolation critical line. While the convergence properties are better in the CRG method, the PRG one is operationally much easier; however, both procedures lead to critical lines which tend for increasingly large clusters towards the critical frontier $p + q = 1$.

In what concerns the critical exponents, the present CRG treatment of the anisotropic square lattice leads to a rather pathological sense of the flow lines (against universality); therefore one must be cautious with regard to the numerical values of the critical exponents, unless the above sense reverses for cells larger than those presently considered. Furthermore, the PRG treatment leads, by construction, to a critical line entirely constituted by fixed points; therefore neither is ν_p universal nor does the calculation of the crossover exponent make sense.

The critical frontiers corresponding to the 'inhomogeneous' first- and second-neighbour square and 4-8 lattices are estimated within the PRG framework, by using an extrapolation procedure which applies for two- (or higher) dimensional probability space and which exhibits quite satisfactory self-consistent properties. All of our extrapolated numerical results are well fitted by the possibly exact equations $p + q = \frac{1}{2}$ for the former and

$$3(p - \frac{1}{2}) = 4 [(1 - q)^2 + (1 - q)^3]$$

for the latter.

Acknowledgments

It is a pleasure for us to acknowledge useful related discussions with R B Stinchcombe, H E Stanley, P M Oliveira, S L A Queiroz, C M Chaves and R Riera. C Tsallis also acknowledges interesting remarks from M E Fisher, P J Reynolds and H Nakanishi.

Appendix 1: Some useful formulae†

Series configuration. An array of n bonds in series with probabilities $p_1, p_2 \dots p_n$ is equivalent to a single bond with probability p_s given by

$$p_s = \prod_{i=1}^n p_i. \tag{A1.1}$$

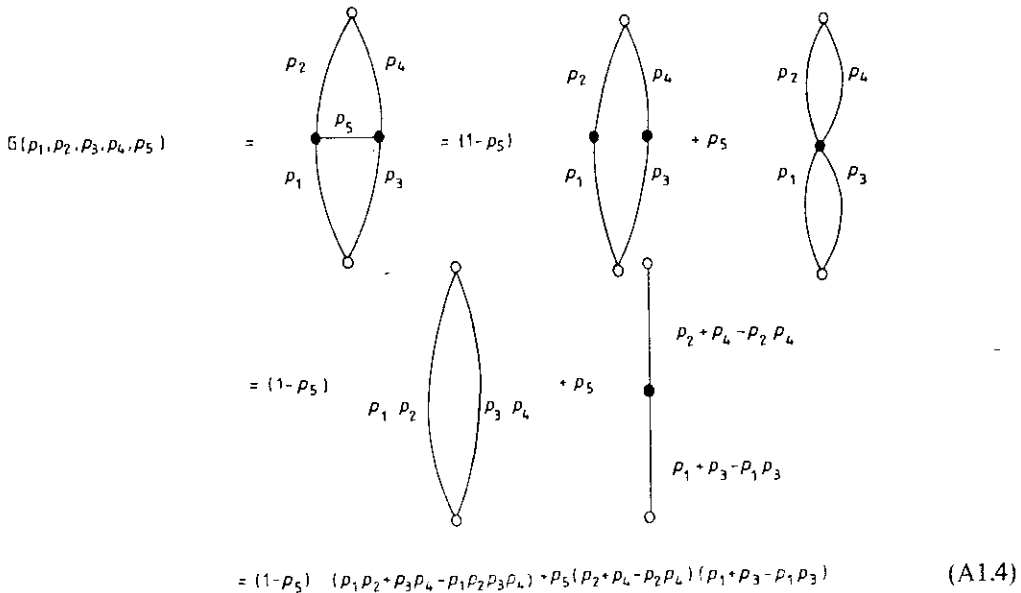
Parallel configuration. The equivalent probability p_p for n parallel bonds with probabilities $p_1, p_2 \dots p_n$ satisfies

$$1 - p_p = \prod_{i=1}^n (1 - p_i). \tag{A1.2}$$

Deletion-contraction rule. Consider a two-terminal graph (denoted $G(p_1, \dots, p_j, \dots)$) whose bonds are present with probabilities $p_1, p_2 \dots p_j \dots$. If we choose an *arbitrary* bond, let us say the j th bond, the following relation (called the ‘deletion-contraction rule’) holds:

$$G(p_1 \dots p_j \dots) = (1 - p_j)G_j^d(p_1 \dots p_{j-1}, p_{j+1} \dots) + p_j G_j^c(p_1 \dots p_{j-1}, p_{j+1} \dots) \tag{A1.3}$$

where $G_j^d(G_j^c)$ is the equivalent probability of the graph obtained from G by deleting (contracting) its j th bond (or in other words by making $p_j = 0$ ($p_j = 1$)). Let us illustrate this method by an example.



Duality. The two-terminal planar graphs G and G^D are said to be *dual* if they can be superimposed in such a way that each bond of a graph crosses one and only one bond of the other, and also that each internal (non-terminal) node of one graph is surrounded

† These properties are discussed by Tsallis (1980).

by an elementary mesh of the other. In particular, if G is self-dual (see for example figures 1(b) and 4) its equivalent probability satisfies

$$G(p_1, p_2 \dots) + G(1 - p_1, 1 - p_2 \dots) = 1 \tag{A1.5}$$

which implies, if $p_i = p$ for all i , that the graphical representation of G against p admits the point $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ as a symmetry centre.

Appendix 2: 4-8 Lattice

In this Appendix we prove, for all the frontiers $\Gamma(b, b')$ associated with the 4-8 lattice, that $(dp/dq)_{p=q^*, q=1} = 0$.

Every probability polynomial $R_b(p, q)$ associated with a b -cluster of *and* lattice can be written as

$$R_b(p, q) = F_0^{(b)}(p)q^m + F_1^{(b)}(p)q^{m-1}(1 - q) + A^{(b)}(p, q)(1 - q)^2 \quad \forall b \tag{A2.1}$$

where m is the number of relevant q bonds. $F_0^{(b)}(p)$ and $F_1^{(b)}(p)$ stand for the probabilities that a b cluster, with respectively m and $(m - 1)$ unblocked q bonds (and any number of present p bonds), percolates.

From equation (A2.1) it follows that

$$(\partial R_b / \partial q)_{q=1} = mF_0^{(b)}(p) - F_1^{(b)}(p) \quad \forall b, p. \tag{A2.2}$$

Now it is easy to see that, due to the fact that the 'inhomogeneous' 4-8 lattice (as well as the clusters we have chosen for it) is constituted by q bond polygons linked among them by p bonds (the same topological property appears in the 3-12 lattice for instance), if a given configuration does (does not) percolate when *all* the q bonds are present, it continues (does not continue) percolating if we block *one* of them. As we have m such possibilities we conclude that

$$F_1^{(b)}(p) = mF_0^{(b)}(p) \quad \forall b, p. \tag{A2.3}$$

which substituted in equation (A2.2) leads to

$$(\partial R_b / \partial q)_{q=1} = 0 \quad \forall b, p. \tag{A2.4}$$

Furthermore, we know from equation (13) that, along the curve $\Gamma(b, b')$,

$$\left(\frac{dp}{dq}\right)_{(p^*, q^*)} = - \left\{ \left(\frac{\partial R_b}{\partial q} - \frac{\partial R_{b'}}{\partial q}\right) \left(\frac{\partial R_b}{\partial p} - \frac{\partial R_{b'}}{\partial p}\right)^{-1} \right\}_{(p^*, q^*)} \tag{A2.5}$$

Although we did not succeed in rigorously proving that, in general,

$$\left(\frac{\partial R_b}{\partial p}\right)_{q=1} \neq \left(\frac{\partial R_{b'}}{\partial p}\right)_{q=1}$$

it was so in all the cases we examined. Therefore we conclude that the expression (A2.5) evaluated at $q^* = 1$ is always zero for every (b, b') .

References

- Burkhardt T W and Southern B W 1978 *J. Phys. A: Math. Gen.* **11** L253-7
- Dasgupta C 1976 *Phys. Rev.* **B14** 1221-4
- Dean P 1963 *Proc. Camb. Phil. Soc.* **59** 397-410
- Dunn A G, Essam J W and Ritchie D S 1975 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8** 4219-35
- Essam J W 1980 *Rep. Prog. Phys.* **43** 833-912
- Fisher M E 1971 *Critical Phenomena: Proc. Int. School of Physics 'Enrico Fermi' Course 51* ed M S Green (New York: Academic Press)
- Harris A B, Lubensky T C, Holcomb W K and Dasgupta C 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 327-30
- Ikeda H 1979 *Prog. Theor. Phys.* **61** 842-9
- Kasteleyn P W and Fortuin C M 1969 *J. Phys. Soc. Japan Suppl.* **26** 11-4
- Kirkpatrick S 1977 *Phys. Rev.* **B15** 1533-8
- 1978 *Models of Disordered Materials* Research Report IBM RC 7296
- Kunz H and Wu F Y 1978 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11** L1-4
- Lage E J S 1979 *Physica* **96A** 645-8
- Magalhães A C N, Tsallis C and Schwachheim G 1980 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13** 321-30
- Marland L G and Stinchcombe R B 1977 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10** 2223-32
- Murase C and Yuge Y 1979 *J. Phys. A: Math. Gen.* **12** 1541-6
- Nakanishi H and Reynolds P J 1979 *Phys. Lett.* **71A** 252-4
- Nakanishi H, Reynolds P J and Redner S 1980 *Anisotropic bond percolation by position-space renormalisation group* preprint
- Neal D G 1972 *Proc. Camb. Phil. Soc.* **71** 97-106
- Niemeyer Th and van Leeuwen J M 1974 *Physica* **71**-40
- 1976 *Phase Transitions and Critical Phenomena* vol 6 ed C Domb and M S Green (New York: Academic Press) pp 425-505
- den Nijs M P M 1979 *J. Phys. A: Math. Gen.* **12** 1857-68
- Ottavi H 1979 *J. Physique* **40** 233-7
- Redner S and Stanley H E 1979 *J. Phys. A: Math. Gen.* **12** 1267-83
- Reynolds P J, Klein W and Stanley H E 1977 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10** L167-72
- Reynolds P J, Stanley H E and Klein W 1978 *J. Phys. A: Math. Gen.* **11** L199-207
- Shapiro B 1979 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12** 3185-95
- Stauffer D 1979 *Phys. Rep.* **54** 1-74
- Sur A, Lebowitz J L, Marro J, Kalos M H and Kirkpatrick S 1976 *J. Statist. Phys.* **15** 345-53
- Suzuki M 1977 *Prog. Theor. Phys.* **58** 1142-50
- Sykes M F and Essam J W 1963 *Phys. Rev. Lett.* **10** 3-4
- Tsallis C 1980 *Kinam* to be published
- Tsallis C and Schwachheim G 1979 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12** 9-15
- Turban L 1979a *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12** 1479-90
- 1979b *J. Phys. C: Solid State Phys.* **12** 4245-50
- Young A P and Stinchcombe R B 1975 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8** L535-40
- Zallen R 1978 *Annals of the Israel Physical Society: vol 2(1), Statistical Physics* ed D Cahib, C G Kuper and I Riess (Bristol: Adam Hilger)

Classification
 Physics Abstracts
 05.50 — 75.10H

Conjecture on the critical frontier of the Potts ferromagnet on planar lattices

C. Tsallis and A. C. N. de Magalhães

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq, Av. Wenceslau Braz, 71, Rio de Janeiro, Brazil

(Reçu le 6 février 1981, révisé le 26 mars, accepté le 7 avril 1981)

Résumé. — On propose une conjecture sur les frontières critiques approchées du modèle ferromagnétique de Potts à q états sur des réseaux plans. Cette conjecture est vérifiée avec une précision satisfaisante pour une variété de réseaux plans (et aussi pour le réseau carré avec premiers et seconds voisins), et permet de prédire un nombre considérable de résultats nouveaux (29 points critiques indépendants et quelques lignes critiques).

Abstract. — A conjecture is proposed for the approximate critical frontiers of the q -state Potts ferromagnets on planar lattices. This conjecture is verified, within a satisfactory degree of accuracy, for a variety of planar lattices (as well as for the first and second neighbour square one), and enables the prediction of a considerable number of new results (29 independent critical points and a few critical lines).

It is well known that the ferromagnetic q -state Potts model presents a second-order (first-order) phase transition for all dimensionalities $d > 1$ and number of states $q \leq q_c(d)$ ($q > q_c(d)$); in particular $q_c(2) = 4$. Note that $q = 2$ corresponds to the 1/2-spin Ising model, and the $q \rightarrow 1$ and $q \rightarrow 0$ limits correspond respectively to the standard and tree-like bond percolations [1, 2]. The critical frontiers associated with the anisotropic square, triangular and honeycomb lattices are at present, as far as we know, the only ones which are exactly known [3] for all q , while, of course, several other planar lattices have been solved for $q = 2$ [4]. In the present work we make a conjecture which essentially states that knowledge, for a particular value of q ($1 \leq q \leq 4$), of the simple [5] paramagnetic-ferromagnetic critical frontier (CF) associated with any given planar lattice (isotropic or not, homogeneous or not) enables one to calculate, at least approximately, the critical frontier associated with the same lattice for the other values of q ($1 \leq q \leq 4$).

Let us consider a single Potts bond (coupling constant J); it is convenient to introduce a variable $t^{(q)}$ (referred hereafter as *thermal transmissivity*, see references [6-8] and references therein) defined as follows

$$t^{(q)} \equiv \frac{1 - e^{-qJ/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ/k_B T}} \quad (J > 0). \quad (1)$$

It is interesting to remark that the $t^{(q)}$ -variable precisely coincides, for all q , with the p -variable Stephen [2] found useful to work with. Let us stress that $t^{(1)} = 1 - e^{-J/k_B T}$ is precisely the variable isomorphic [1] to the occupation probability of the standard bond percolation problem. It is straightforward to verify [8] that the equivalent transmissivity $t_s^{(q)}$ of a series array of two bonds with transmissivities $t_1^{(q)}$ and $t_2^{(q)}$ is given by

$$t_s^{(q)} = t_1^{(q)} t_2^{(q)} \quad (2)$$

whereas for a parallel array it is

$$t_p^{(q)D} = t_1^{(q)D} t_2^{(q)D} \quad (3)$$

where we have introduced [8] the dual [9] transmissivity

$$t_i^{(q)D} \equiv \frac{1 - t_i^{(q)}}{1 + (q-1)t_i^{(q)}} \quad \forall i. \quad (4)$$

Let us now introduce [7] a new variable $s^{(q)}$ through the relation

$$s^{(q)} \equiv \frac{\ln [1 + (q-1)t^{(q)}]}{\ln q}. \quad (5)$$

We verify a remarkable property, namely,

$$s^{(q)} \{ t^{(q)D} \} = 1 - s^{(q)} \{ t^{(q)} \} \quad (6)$$

i.e. the s -variable transforms, under duality, like a probability. We verify as well that, in the limit $q \rightarrow 1$, $s^{(1)} = t^{(1)}$. We are now prepared to state our conjecture. We shall assume known, for a certain planar lattice, the CF for a fixed value q_0 ($1 \leq q_0 \leq q_c(2)$), namely, the equation

$$\varphi \{ s_1^{(q_0)}, s_2^{(q_0)}, \dots, s_n^{(q_0)} \} = 0 \quad (7)$$

where $s_1^{(q_0)}, s_2^{(q_0)}, \dots, s_n^{(q_0)}$ are associated with the independent coupling constants J_1, J_2, \dots, J_n of the system under consideration. Our conjectural statement will be that the equation

$$\varphi \{ s_1^{(q)}, s_2^{(q)}, \dots, s_n^{(q)} \} = 0 \quad (8)$$

represents also, either exactly or within great accuracy, the CF of the corresponding q -state Potts model for the other values of q ($1 \leq q \leq q_c(2)$).

1. Anisotropic square lattice. — The bond percolation CF for this lattice is given by [10]

$$p_1 + p_2 = 1 \quad (9)$$

which, within the present framework, will be generalized into

$$s_1^{(q)} + s_2^{(q)} = 1 \quad (10)$$

which reproduces the exact [3] critical temperature for any value of q . We see, therefore, that for this system the present conjecture is rigorously true ($0 \leq q \leq 4$). Moreover, this might happen only for this lattice, as a consequence of its self-duality.

2. Anisotropic triangular and honeycomb lattices. — The bond percolation CF frontier for the anisotropic triangular lattice is given by [10]

$$1 - p_1 - p_2 - p_3 + p_1 p_2 p_3 = 0 \quad (11)$$

(for the honeycomb lattice -ditto with $p_i \rightarrow 1 - p_i \forall i$). Therefore, within the present framework, the CF for any value of q ($1 \leq q \leq 4$) is approached by

$$1 - s_1^{(q)} - s_2^{(q)} - s_3^{(q)} + s_1^{(q)} s_2^{(q)} s_3^{(q)} = 0. \quad (11')$$

Let us now compare this equation with the exact [3] one. We immediately verify that they coincide whenever one of the three coupling constants vanishes (anisotropic square lattice limit). Next we perform the comparison for the maximal error case, namely, the isotropic limit. Our conjecture leads to

$$s^{(q)} = 2 \sin \frac{\pi}{18}$$

for this lattice, whereas the exact answer is given by

$$\frac{t^{(q)}}{1 - t^{(q)}} = \frac{2}{q} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{q}{2} - 1 \right) \right] - \frac{1}{q} \quad (q \leq 4). \quad (12)$$

The results are presented in figure 1. We note that the error is smaller than 2.4 % for $1 \leq q \leq 4$. It is straightforward to verify [11] that, in the $q \rightarrow 0$ limit, $t^{(q)} \sim 1 - L \sqrt{q}$, hence $s^{(q)} \sim \frac{1}{2} + \frac{\ln L}{\ln q}$, where L is a lattice-dependent pure number ($L = 1, \sqrt{3}, 1/\sqrt{3}$ for the square, triangular and honeycomb lattices respectively; as a matter of fact for any pair of dual lattices it holds $L^D = 1/L$). The non-vanishing error comes from the tendency of $s^{(q)}$ to approach $1/2$, and its small size from the infinite slope at $q = 0$.

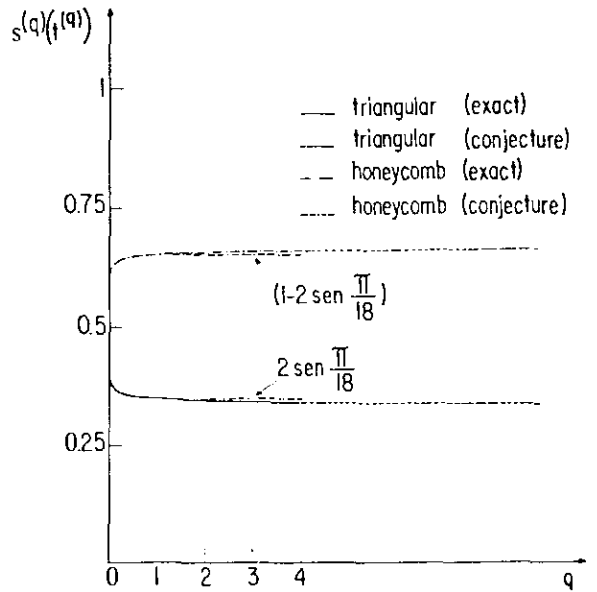


Fig. 1. — Comparison between the exact and conjectural critical points for the isotropic triangular and honeycomb lattices (the analytic extension for $q > 4$ is also shown).

3. « Inhomogeneous » 4-8 lattice and its dual. — The exact CF's associated with the Ising model in the « inhomogeneous » 4-8 lattice (Fig. 10 of reference [4]) and its dual (square lattice with non-crossing diagonal bonds) are known [4]. Since there is a straightforward relation between the CF's of any pair of dual lattices, we shall restrict our discussion here to the 4-8 lattice (we note that J_1 and J_2 , the coupling constants associated with the different bonds are in a 2 : 1 ratio). The exact CF in the $s_1^{(2)} - s_2^{(2)}$ space is represented in figure 2. We may verify that

$$s_1^{(2)} = s_2^{(2)} \simeq 0.6792,$$

$$\left. \frac{ds_1^{(2)}}{ds_2^{(2)}} \right|_{s_1^{(2)}=1} \simeq -0.414$$

and

$$\left(s_2^{(2)} - \frac{1}{2} \right) \sim A \left(s_1^{(2)} - 1 \right)^2 \quad (A \simeq 1.39).$$

In the present framework, this CF should, within satisfactory accuracy, be the same for $q \neq 2$; let us

Table I. — Critical points for isotropic and homogeneous q -state Potts ferromagnets in a set of lattices. $t^{(q)}$ and $s^{(q)}$ are related to $k_B T_c/J$ through equations (1) and (5); (...) denotes an exact value. For the triangular and honeycomb lattices the exact, rather than the conjectural, values are indicated. The region delimited by a heavy line contains results that, as far as we know, have not yet been checked by any other procedure. * This central value has been adopted after consideration of the Ising critical lines associated with the case where the first and second coupling constants are not necessarily equal.

Lattices	$q = 1$	$q = 2$		$q = 3$		$q = 4$	
	$s^{(1)} = t^{(1)}$	$s^{(2)}$	$t^{(2)}$	$s^{(3)}$	$t^{(3)}$	$s^{(4)}$	$t^{(4)}$
Square	1/2 [10]	1/2	0.414... [4]	1/2	0.366... [3]	1/2	1/3 [3]
Triangular	0.347... [10]	0.342...	0.268... [4]	0.340...	0.227... [3]	0.339...	1/5 [3]
Honeycomb	0.653... [10]	0.658...	0.577... [4]	0.660...	0.532... [3]	0.661...	1/2 [3]
4-8	0.679 ± 0.006 0.680 ± 0.005 [12] 0.675 ± 0.027 [13] 0.684 [14] [0.645, 0.707] [15]	0.679...	0.601... [4]	0.679 ± 0.003	0.554 ± 0.003	0.679 ± 0.005	0.521 ± 0.006
Non-crossing diagonal square-lattice	0.321 ± 0.006	0.321...	0.249... [4]	0.321 ± 0.003	0.211 ± 0.002	0.321 ± 0.005	0.187 ± 0.004
Kagomé	0.521 ± 0.006 0.526 [14] [0.522, 0.529] [15]	0.521...	0.435... [4]	0.521 ± 0.003	0.387 ± 0.003	0.521 ± 0.005	0.354 ± 0.005
Diced	0.479 ± 0.006	0.479...	0.393... [4]	0.479 ± 0.003	0.346 ± 0.003	0.479 ± 0.005	0.314 ± 0.004
3-12	0.740 ± 0.011 0.751 [14]	0.740...	0.671... [4]	0.740 ± 0.005	0.628 ± 0.006	0.740 ± 0.008	0.597 ± 0.010
Asanoha	0.260 ± 0.011	0.260...	0.197... [4]	0.260 ± 0.005	0.165 ± 0.004	0.260 ± 0.008	0.144 ± 0.005
(4, 6, 12)	0.693 [14]	0.693 ± 0.012	0.617 ± 0.013	0.693 ± 0.017	0.571 ± 0.020	0.693 ± 0.021	0.538 ± 0.025
(3, 4, 6, 4)	0.525 [14]	0.525 ± 0.012	0.439 ± 0.012	0.525 ± 0.017	0.390 ± 0.017	0.525 ± 0.021	0.357 ± 0.020
(3, 3, 3, 3, 6)	0.439 [14]	0.439 ± 0.012	0.356 ± 0.011	0.439 ± 0.017	0.310 ± 0.015	0.439 ± 0.021	0.279 ± 0.018
(3, 3, 3, 4, 4) and (3, 3, 4, 3, 4)	0.422 [14]	0.422 ± 0.012	0.340 ± 0.011	0.422 ± 0.017	0.295 ± 0.015	0.422 ± 0.021	0.265 ± 0.017
1st and 2nd Neighbour square lattice	0.249 ± 0.011 0.250 ± 0.003 [12]	0.249 ± 0.007	0.188 ± 0.006 * 0.189 [16] 0.188 [17] 0.184 [18] 0.199 [19]	0.249 ± 0.008	0.157 ± 0.006	0.249 ± 0.009	0.137 ± 0.006
1st and 2nd Neighbour triangular lattice	0.155 ± 0.004	0.155 ± 0.001	0.113 5 ± 0.001 0 0.113 5 [17] 0.113 1 [23]	0.155 ± 0.002	0.093 ± 0.001	0.155 ± 0.003	0.080 ± 0.002
1st, 2nd and 3rd Neighbour square lattice	0.154 ± 0.004	0.154 ± 0.001	0.113 0 ± 0.001 0 0.113 0 [23]	0.154 ± 0.002	0.092 ± 0.001	0.154 ± 0.003	0.080 ± 0.002
1st, 2nd and 3rd Neighbour triangular lattice	0.099 ± 0.003	0.099 ± 0.001	0.071 1 ± 0.001 0 0.071 1 [23]	0.099 ± 0.002	0.057 ± 0.001	0.099 ± 0.002	0.049 ± 0.001

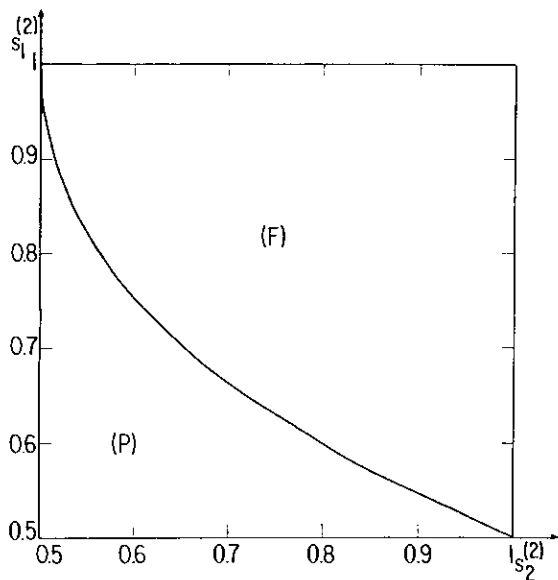


Fig. 2. — The exact para (P) — ferro (F) — magnetic critical frontier of the 4-8 lattice Ising model (as a matter of fact the proposed [12] $q = 1$ critical line is indistinguishable from the $q = 2$ one, within the present scale).

compare it with a recent conjecture [12] (completely unrelated to the present one) for bond percolation in the same system, namely

$$3(s_2^{(1)} - 1/2) - 4[(1 - s_1^{(1)})^2 + (1 - s_1^{(1)})^3] = 0. \tag{13}$$

From this equation it results that $s_1^{(1)} = s_2^{(1)} \approx 0.680$ 1 (which compares well with 0.675 ± 0.027 [13] and 0.684 [14], lies within the conjectural interval $0.645 - 0.707$ [15], and which differs from the value 0.679 2 by only 0.13 %),

$$ds_1^{(1)}/ds_2^{(1)} \Big|_{s_2^{(1)}=1} = -3/7 \approx -0.429$$

(the discrepancy with the value -0.414 is 3.5 %), and the same asymptotic behaviour mentioned previously for $q = 2$ is satisfied with $A = 4/3$ (which differs by 4.2 % from 1.39). As we see, the CF's associated with $q = 1$ and $q = 2$ are satisfactorily coincident, and therefore we conjecture that equation (13) or the one corresponding to figure 2 can be used for *all* values of q ($1 \leq q \leq 4$).

4. Some other planar lattices. — The exact critical points for the isotropic Kagomé, Diced, 3-12

and Asanoha (Hemp-Leaf) lattices (see Figs. 14, 15 and 19 of reference [4]) are known [4] only for $q = 2$. Thus by imposing the exact critical value $s^{(2)}$ to be equal to $s^{(q)}$ we have obtained the critical points indicated in the table I which compare well with previous $q = 1$ results [14, 15]. For the Archimedean [14] lattices we used Neal's [14] estimates for $p_c = s^{(1)}$ to predict the critical points for $q \neq 1$ shown in the table.

5. Some first and higher neighbour lattices. — The present conjecture, mainly supported by the probability-like transformation of the s -variable under duality, is not expected to *necessarily* lead to satisfactory approximate CF's for non-planar lattices. For example, for the sc lattice (fcc, bcc) $t^{(2)} \approx 0.218$ 1 [20] (0.101 7 [20], 0.156 1 [20]) hence $s^{(2)} \approx 0.284$ 6 (0.139 8, 0.209 3), whereas

$$t^{(1)} = s^{(1)} \approx 0.252$$
 6 \pm 0.001 3

[21] (0.119 ± 0.001 [22], 0.178 5 \pm 0.002 0 [22]); therefore there is a discrepancy of about 13 % (17 %, 17 %). Although the first and second as well as the first, second and third neighbour square and triangular lattices are not strictly planar (in the sense that they cannot be embedded in the plane; note however that their three-dimensional extension is a *finite* one), we have also considered them in this work since our conjecture is well verified ($s^{(1)}$ equals $s^{(2)}$ within a 0.4 % error) for the first and second neighbour square lattice (see the table). Therefore, we have used the Ising critical temperature [17, 23] to predict the $q \neq 2$ critical points for the three last lattices in the table.

In the table we present the critical points for several isotropic and homogeneous lattices and values of q . The estimated error bars simultaneously take into account the values available in the literature as well as the error (exactly known for the triangular and honeycomb lattices) introduced by the present conjecture. Cross-checking, by other procedures, of the critical points appearing in this table, as well as of the critical lines associated with the 4-8 lattice would be very welcome.

Acknowledgments. — We are indebted to G. Schwachheim, S. V. F. Levy and E. M. F. Curado for useful remarks.

References

[1] KASTELEYN, P. W. and FORTUIN, C. M., *J. Phys. Soc. Japan* (suppl.) 26 (1969) 11.
 [2] STEPHEN, M. J., *Phys. Lett.* 56A (1976) 149.
 [3] BURKHARDT, T. W. and SOUTHERN, B. W., *J. Phys. A* 11 (1978) L-247;
 BAXTER, R. J., TEMPERLEY, H. N. V. and ASHLEY, S. E., *Proc. R. Soc. A* 358 (1978) 535 and references therein.
 [4] SYOZI, I., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 1, (edited by C. Domb and M. S. Green) 1972, p. 270 and references therein.
 [5] By « simple » we mean that *all* the coupling constants are of the ferromagnetic type.
 [6] TSALLIS, C. and LEVY, S. V. F., *J. Phys. C* 13 (1980) 465;
 CURADO, E. M. F., TSALLIS, C., LEVY, S. V. F. and DE OLIVEIRA, M. J., *Phys. Rev. B* 23 (1981).

- [7] LEVY, S. V. F., TSALLIS, C. and CURADO, E. M. F., *Phys. Rev. B* **21** (1980) 2991 ;
 TSALLIS, C., *J. Phys. C* **14** (1981) L-85.
- [8] TSALLIS, C. and LEVY, S. V. F., (1980), to be published.
- [9] «Dual» stands for the fact that this transformation unifies the series and parallel algorithms (2) and (3); see also reference [4].
- [10] SYKES, M. F. and ESSAM, J. W., *Phys. Rev. Lett.* **10** (1963) 3.
- [11] Though we cannot prove it, we believe that $s^{(q)} \sim 1 - L\sqrt{q}$ holds for *all* planar lattices, i.e. they all become, for $q \rightarrow 0$, self-dual in the sense that $s^{(q)} \rightarrow 1/2$.
- [12] DE MAGALHÃES, A. C. N., TSALLIS, C. and SCHWACHHEIM, G., *J. Phys. C* **14** (1981).
- [13] DEAN, P., *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **59** (1963) 397.
- [14] NEAL, D. G., *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **71** (1972) 97; the present Archimedean lattices are described by TÓTH, L. F., *Regular Figures* (Pergamon Press) 1964.
- [15] OTTAVI, H., *J. Physique* **40** (1979) 233.
- [16] DOMB, C. and POTTS, R. B., *Proc. Roy. Soc. A* **210** (1951) 125.
- [17] DALTON, N. W. and WOOD, D. W., *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1271 ;
 NAUENBERG, M. and NIENHUIS, B., *Phys. Rev. Lett.* **33** (1974) 944.
- [18] FAN, C. and WU, F. Y., *Phys. Rev.* **179** (1969) 560.
- [19] GIBBERD, R. W., *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1026.
- [20] ZINN-JUSTIN, J., *J. Physique* **40** (1979) 969.
- [21] DE MAGALHÃES, A. C. N., TSALLIS, C. and SCHWACHHEIM, G., *J. Phys. C* **13** (1980) 321 and references therein.
- [22] SYKES, M. F., GAUNT, D. S. and GLEN, M., *J. Phys. A : Math. Gen.* **9** (1976) 1705.
- [23] DOMB, C. and DALTON, N. W., *Proc. Phys. Soc.* **89** (1966) 859.

APÉNDICE D

Classification
 Physics Abstracts
 05.50 — 75.10 — 64.60 — 64.90

On the critical frontiers of Potts ferromagnets

A. C. N. de Magalhães and C. Tsallis

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas/CNPq, Av. Wenceslau Braz 71, 22290, Rio de Janeiro, Brazil

(Reçu le 19 juin 1981, accepté le 8 juillet 1981)

Résumé. — Nous formulons une conjecture sur les frontières critiques du modèle de Potts à q états ferromagnétiques sur des réseaux d -dimensionnels ($d > 1$) qui généralise une proposition récente pour des réseaux plans. La conjecture présente est vérifiée de façon satisfaisante (exacte dans certains cas) pour tous les réseaux dont les points critiques sont connus. Son utilisation nous permet de prédire : *a*) un nombre considérable de points critiques approchés (26 sur des réseaux réguliers non planaires, quelques-uns sur des arbres de Husimi et des cacti); *b*) les frontières critiques approchées pour quelques réseaux tridimensionnels; *c*) le comportement asymptotique probablement exact du point critique pour des réseaux réguliers dans la limite $d \rightarrow \infty$ pour tout $q \geq 1$; *d*) la frontière critique probablement exacte pour le modèle de Potts pure sur des réseaux de Bethe complètement anisotropes; *e*) la frontière critique probablement exacte pour le modèle trempé ferromagnétique de Potts à liaisons aléatoires distribuées selon une loi quelconque ($P(J)$) sur des réseaux de Bethe isotropes.

Abstract. — We formulate a conjecture concerning the critical frontiers of q -state Potts ferromagnets on d -dimensional lattices ($d > 1$) which generalize a recent one stated for planar lattices. The present conjecture is verified within satisfactory accuracy (exactly in some cases) for all the lattices or arrays whose critical points are known. Its use leads to the prediction of : *a*) a considerable amount of new approximate critical points (26 on non-planar regular lattices, some others on Husimi trees and cacti); *b*) approximate critical frontiers for some 3-dimensional lattices; *c*) the possibly asymptotically exact critical point on regular lattices in the limit $d \rightarrow \infty$ for all $q \geq 1$; *d*) the possibly exact critical frontier for the pure Potts model on fully anisotropic Bethe lattices; *e*) the possibly exact critical frontier for the general quenched random-bond Potts ferromagnet (any $P(J)$) on isotropic Bethe lattices.

1. **Introduction.** — Many efforts are presently being dedicated to the discussion of the critical properties of pure (as well as random) q -state Potts ferromagnets (whose Hamiltonian, for the particular case of first-neighbour interactions, is

$$\mathcal{K} = -qJ \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j};$$

$\sigma_i = 1, 2, \dots, q \forall i; J > 0$). We have recently presented [1, 2] a transformation which leads to a new type of quasi-universality for planar lattices, in the sense that the critical point depends on the particular lattice but, either exactly or within good accuracy, not on the number of states q ($1 \leq q \leq 4$). The purpose of the present paper is to exhibit how such transformation can be extended, on conjectural grounds, to non-planar lattices. Before going on, let us recall that the limits $q \rightarrow 0$ and $q \rightarrow 1$ respectively correspond to tree-like [3, 4] and standard [5] bond percolations, that $q = 2$ corresponds to the spin 1/2 Ising model, and that physical interpretations for $q = 3, 4$ are discussed in references [6, 7]. Furthermore the phase

transition is commonly believed to be a first order (continuous) one for $q > q_c(d)$ ($q \leq q_c(d)$), where $q_c(d)$ depends on the dimensionality d of the lattice; in particular, it has recently been proved [8] that, for $d \geq 2$, the transition is a first order one in the limit $q \rightarrow \infty$ (thus confirming the conjecture by Mittag and Stephen [9]). In what concerns $d = 2$, it is by now well established [10, 11, 12] that $q_c(2) = 4$, whereas for $d = 3$ the situation is less clear in the sense that although quite an amount of evidence already exists (see Refs. [13, 14]) in favour of $q_c(3) \simeq 3$ (let us however mention that Jensen and Mouritsen's recent work [13] quite convincingly suggests that $q_c(3)$ is slightly smaller than 3); in what concerns $d = 4$, $q_c(4)$ presumably satisfies [14] $2 \leq q_c(4) < 3$ (as a matter of fact it might well be that $q_c(d)$ monotonically and continuously decreases for d varying in the interval [1, 4], and equals 2 for all finite $d \geq 4$; in any case, in references [6, 14] it is stated quite firmly that the ($q = 3; d = 4$) case corresponds to a first order transition). A more delicate ambiguity appears in the limit $d \rightarrow \infty$: on one hand one could expect

that the Landau theory prediction [9, 11] (namely, *first order* phase transition for all $q > 2$ and all dimensionalities) becomes true for sufficiently high dimensionality, but on the other hand Southern and Thorpe [15] obtain, for a z -coordinated Bethe lattice (whose effective dimensionality on topological grounds can be considered, for $z > 2$, as being infinite [16]), a *continuous* phase transition for all values of q ; as a possible solution of the paradox, one could speculate that the latent heat associated to $q > 2$ and $0 < d^{-1} \ll 1$ continuously vanishes at $d^{-1} = 0$ (thus becoming oncemore the transition a continuous one). The present work mainly concerns the region of the (q, d) space where the transition is a *continuous* one, or slightly first order (in the sense that the discrepancy between the two associated metastability points is small compared with the transition point itself).

2. Formulation of the conjecture. — We have used [2], for planar lattices, the variable [1]

$$s^{(q)} \equiv \frac{\ln [1 + (q - 1) t^{(q)}]}{\ln q} \quad (1)$$

where

$$t^{(q)} \equiv \frac{1 - e^{-qJ/k_B T}}{1 + (q - 1) e^{-qJ/k_B T}} \quad (2)$$

and verified, for a large set of lattices, that the ferromagnetic critical point $s_c [\equiv s(t_c) = s(t(T_c))]$, or critical frontier in more general cases, depends on the lattice but *practically not on the value of q* ($1 \leq q \leq 4$). We intend here to generalize this to all dimensionalities (at least for $d > 1$), by heuristically extending the variable s . Furthermore, because of the isomorphism [5] existing between the $q \rightarrow 1$ Potts model and bond percolation (see also Ref. [1]) and by taking into account that $t^{(1)}$ corresponds to a probability, we impose that

$$s^{(1)} = t^{(1)} \quad \forall d \quad \forall t^{(1)}. \quad (3)$$

We also impose, for all values of q , that

$$s(d \rightarrow \infty) = t^{(q)} \quad \forall q \quad \forall t^{(q)}. \quad (4)$$

(We shall see later on that this restriction enables exact results concerning Bethe lattices and the asymptotically exact behaviour on regular lattices.) These hypothesis and the demand to contain expression (1) as a particular case can be simultaneously satisfied through the definition

$$s(q, h(d); t^{(q)}) \equiv \frac{\ln [1 + (q - 1) h(d) t^{(q)}]}{\ln [1 + (q - 1) h(d)]} \quad (5)$$

where $h(d)$ is a number which depends on the parti-

cular d -dimensional ($d > 1$) lattice we are dealing with; restriction (4) implies that

$$\lim_{d \rightarrow \infty} h(d) = 0. \quad (6)$$

Remark that the previous results obtained for planar lattices [2] can be recovered by making $h(2) = 1$ for any planar lattice. By the way let us notice that

$$s\left(q, h(d); \frac{1 - t^{(q)}}{1 + (q - 1) h(d) t^{(q)}}\right) = 1 - s(q, h(d); t^{(q)}) \quad (7)$$

which, for $d = 2$ and $h(2) = 1$, expresses a duality transformation [1, 2, 17].

At this level we may state our conjecture : *for any d -dimensional lattice ($d > 1$) exists a number (namely $h(d)$) such that the (ferromagnetic) critical point $s_c \equiv s(q, h(d); t_c)$ depends on the lattice but practically not on q ($1 \leq q \leq q_c(d)$; q is not necessarily integer). By imposing, for example,*

$$s(1, h; t_c^{(1)}) = s(2, h; t_c^{(2)})$$

we obtain, for a given lattice, the corresponding value of h . The use of tables Ia and Ib and references [2, 18] provides the values indicated in table II (see also Fig. 1), where we remark that, for a given dimensio-

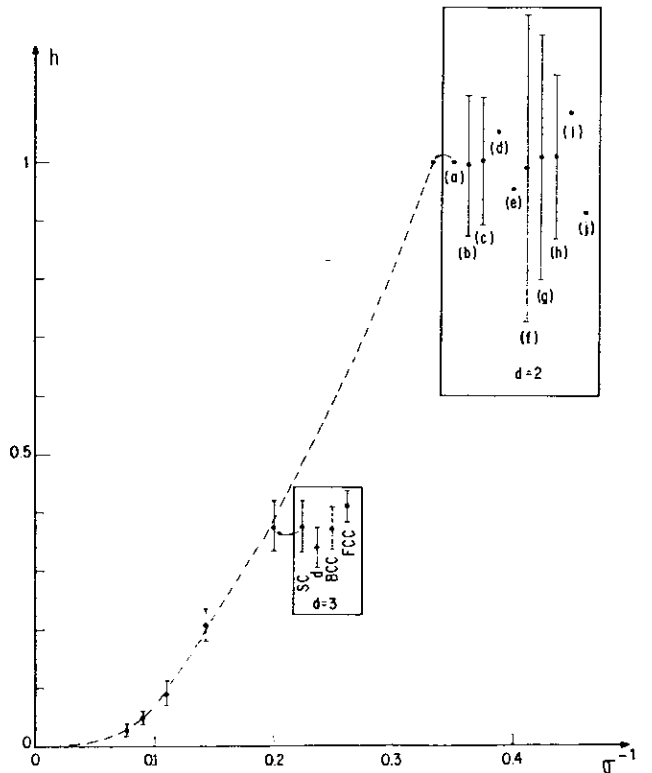


Fig. 1. — Parameter h as a function of σ^{-1} ($\sigma = 2d - 1$) for the hypercubic lattices. The broken line is a guide-to-eye curve which has the correct asymptotic behaviour in the $\sigma \rightarrow \infty$ limit. Values of h corresponding to other $d = 2, 3$ lattices are also indicated. (a) square; (b) 4-8; (c) non-crossing diagonal square lattice; (d) Kagomé; (e) diced; (f) 3-12; (g) Asanoha; (h) first- and second-neighbour square lattice; (i) triangular; (j) honeycomb. See table II for the references that have been used.

Table I.— Critical points for isotropic and homogeneous q -state Potts ferromagnets in a set of d -dimensional lattices. In the indicated references appear either the numbers we have quoted or others which immediately imply them. The region delimited by a heavy line contains results that, as far as we know, have not yet been calculated by any other procedure; (...) denotes an exact value. (a) $d = 3$ lattices; (b) $d \geq 4$ lattices.

Table Ia

Lattice $d = 3$	$q = 1$		$q = 2$			$q = 3$		
	$s_c = t_c = p_c$	$\frac{k_B T_c}{J}$	s_c	t_c	$\frac{k_B T_c}{J}$	s_c	t_c	$\frac{k_B T_c}{J}$
1st - neighbour SC	0.247 ± 0.003 [19, 34] 0.246 5 ± 0.000 2 [28] 0.249 5 ± 0.000 5 [29] 0.252 6 ± 0.001 3 [30]	3.52 ± 0.05 3.533 ± 0.003 3.484 ± 0.008 3.435 ± 0.021	0.247 ± 0.003 0.247 ± 0.003 0.247 ± 0.003 0.247 ± 0.003	0.218 11 [31] 0.218 14 ± 0.000 01 [32] 0.218 15 [20] 0.218 13 [33]	4.511 2 4.510 6 ± 0.000 2 4.510 3 4.510 8	0.247 ± 0.003 0.246 ± 0.005 0.246 ± 0.005	0.197 ± 0.007 0.196 4 0.196 56	5.44 ± 0.18 5.45 [6] 5.450 6 [13]
1st - neighbour FCC	0.119 ± 0.001 [34] 0.119 0 ± 0.000 5 [35]	7.89 ± 0.07 7.893 ± 0.035	0.119 ± 0.001 5 0.119 ± 0.001 0.119 ± 0.001 0.119 ± 0.001	0.101 727 [31] 0.101 722 ± 0.000 001 0.101 716 [37] 0.101 740 [33]	9.796 2 9.796 7 ± 0.000 1 [36] 9.797 3 9.795 0	0.119 ± 0.001 5 0.117 8 ± 0.001 5 0.117 5 ± 0.001 5	0.090 ± 0.002 0.089 0 0.088 8	11.55 ± 0.25 11.67 [12] 11.70 [38]
1st - neighbour BCC	0.178 5 ± 0.002 0 [34]	5.086 ± 0.063	0.178 5 ± 0.002 0 0.178 5 ± 0.002 0	0.156 099 [31] 0.156 116 [33]	6.353 8 6.353 1	0.178 5 ± 0.002 0	0.140 ± 0.005	7.54 ± 0.26
diamond (d)	0.388 ± 0.005 [34]	2.037 ± 0.034	0.388 ± 0.005 0.388 ± 0.003	0.353 74 [31] 0.353 806 ± 0.000 013 [39]	2.704 8 2.704 25 ± 0.000 10	0.388 ± 0.005	0.328 ± 0.009	3.33 ± 0.09
HCP	0.124 ± 0.005 [40]	7.55 ± 0.33	0.124 ± 0.005	0.107 ± 0.006	9.31 ± 0.53	0.124 ± 0.005	0.096 ± 0.006	10.8 ± 0.7
tetrahedron (eristobalite)	0.263 ± 0.003	3.28 ± 0.04	0.263 ± 0.003	0.233 00 ± 0.000 01 [41]	4.213 0 ± 0.000 2	0.263 ± 0.003	0.211 ± 0.007	5.09 ± 0.16
hydrogen per- oxide	0.558 ± 0.007	1.225 ± 0.024	0.558 ± 0.007	0.518 140 [42]	1.742 79	0.558 ± 0.007	0.488 ± 0.013	2.22 ± 0.06
hyper- triangular	0.251 ± 0.003	3.46 ± 0.05	0.251 ± 0.003	0.222 087 [42]	4.427 71	0.251 ± 0.003	0.201 ± 0.007	5.34 ± 0.18
hyper Kagomé	0.433 ± 0.006	1.76 ± 0.03	0.433 ± 0.006	0.394 384 [42]	2.398 19	0.433 ± 0.006	0.365 ± 0.012	2.99 ± 0.10
1st - and 2nd neighbour SC	0.075 ± 0.001	12.83 ± 0.18	0.075 ± 0.001 0.075 ± 0.001	0.064 43 0.064 41 [43]	15.499 [24] 15.504	0.075 ± 0.001	0.057 ± 0.002	18.0 ± 0.6
1st - and 2nd - neighbour FCC	0.076 ± 0.001	12.65 ± 0.17	0.076 ± 0.001 0.076 ± 0.001 0.076 ± 0.001	0.064 44 0.064 36 [43] 0.064 3	15.497 [24] 15.516 15.53 [25]	0.076 ± 0.001	0.057 ± 0.002	18.0 ± 0.6
1st - and 2nd - neighbour BCC	0.099 ± 0.001	9.59 ± 0.10	0.099 ± 0.001 0.099 ± 0.001	0.085 78 0.085 71 [43]	11.629 [24] 11.639	0.099 ± 0.001	0.076 ± 0.002	13.6 ± 0.4
1st -, 2nd - and 3rd - neighbour SC	0.050 5 ± 0.000 8	19.30 ± 0.31	0.050 5 ± 0.000 8	0.043 2 [43]	23.1	0.050 5 ± 0.000 8	0.038 2 ± 0.001 6	26.6 ± 1.1
1st -, 2nd - and 3rd - neigh- bour FCC	0.030 5 ± 0.000 4	32.28 ± 0.43	0.030 5 ± 0.000 4 0.030 2 ± 0.000 3	0.025 7 [43] 0.025 39	38.9 39.37 [25]	0.030 5 ± 0.000 4	0.022 5 ± 0.000 8	44.9 ± 1.6
1st -, 2nd - and 3rd - neigh- bour BCC	0.050 1 ± 0.000 7	19.46 ± 0.28	0.050 1 ± 0.000 7	0.042 9 [43]	23.3	0.050 1 ± 0.000 7	0.038 0 ± 0.001 4	26.8 ± 1.0

Table Ib

Lattice		q = 1		q = 2		
		s _c = t _c = p _c	$\frac{k_B T_c}{J}$	s _c	t _c	$\frac{k_B T_c}{J}$
d = 4	HSC	0.161 ± 0.001 5 [19] 0.160 0 ± 0.000 2 [28]	5.697 ± 0.058 5.735 ± 0.008	0.161 ± 0.002 0.161 ± 0.002 0.161 ± 0.002	0.148 56 ± 0.000 03 [44] 0.148 7 [45] 0.148 77 ± 0.000 03 [20]	6.681 5 ± 0.001 4 6.675 6.671 9 ± 0.001 4
	HFCC	0.049 8 ± 0.000 6	19.58 ± 0.24	0.049 8 ± 0.000 6 0.049 8 ± 0.000 6	0.045 48 ± 0.000 02 [46] 0.045 49 [45]	21.97 ± 0.01 21.97
	HBCC	0.075 ± 0.001	12.83 ± 0.18	0.075 ± 0.001 0.075 ± 0.001	0.068 89 ± 0.000 05 [46] 0.068 92 [45]	14.49 ± 0.01 14.487
d = 5	HSC	0.118 ± 0.001 [19] 0.118 1 ± 0.000 2 [28]	7.96 ± 0.07 7.957 ± 0.014	0.118 ± 0.001 5 0.118 ± 0.001	0.113 54 ± 0.000 02 [47] 0.113 54 ± 0.000 01 [20]	8.769 5 ± 0.001 6 8.769 5 ± 0.000 8
d = 6	HSC	0.094 1 ± 0.000 5 [19] 0.094 3 ± 0.000 2 [28]	10.12 ± 0.06 10.10 ± 0.02	0.094 1 ± 0.001	0.092 10 ± 0.000 01 [20]	10.827 ± 0.001
d = 7	HSC	0.078 6 ± 0.000 2 [19] 0.078 8 ± 0.000 2 [28]	12.22 ± 0.03 12.18 ± 0.03	0.078 6 ± 0.001	0.077 6 [20]	12.86
d → ∞	(σ + 1)-coordinated regular lattice	~ 1/σ [19]	~ σ	~ 1/σ	~ 1/σ [20]	~ σ
d _{crit} ⁻¹ = 0	z-coordinated Bethe Lattice	1/(z-1) [15, 16]	1/ln((z-1)/(z-2))	1/(z-1)	1/(z-1) [15]	2/ln((z-1)/(z-2)) [21]
z-coordinated Square Husimi tree	z = 4	0.353 933... [16]	2.289 10...	0.353 933...	0.346 0... [23]	2.771...
z-coordinated triangular cactus	z = 4	0.403 0... [16, 22, 48]	1.938...	0.403 0...	0.382 0... [48]	2.485 3... [22]
	z = 6	0.214 0... [22]	4.152...	0.214 0...	0.208 7...	4.720 9... [22]
	z = 8	0.148 0... [22]	6.243...	0.148 0...	0.145 9...	6.805 2... [22]
	z = 12	0.092 3... [22]	10.32...	0.092 3...	0.091 67...	10.877 7... [22]

nality d , h does not vary very much ($h(2) \simeq 1$, $h(3) \simeq 0.38$ within about 10% error). Therefore, for lattices where variations of independent coupling constants J_1, J_2, \dots, J_n do not change d , we can extend this conjecture to the entire critical frontier (CF) similarly to our previous work [2], namely :

$$\text{if } \varphi \{ s(q_0, h; t_1^{(q_0)}), \dots, s(q_0, h; t_n^{(q_0)}) \} = 0$$

is the CF for a fixed value $q_0 (1 \leq q_0 \leq q_c(d))$ then

$$\varphi \{ s(q, h; t_1^{(q)}), \dots, s(q, h; t_n^{(q)}) \} = 0 \quad (8)$$

represents, within good accuracy, the CF for other values of q as well ($1 \leq q \leq q_c(d)$); $t_i^{(q)}$ is related to J_i through equation (2).

3. Application to critical points of pure ferromagnets. — 3.1 GENERAL REMARKS AND FINITE DIMENSIONAL REGULAR LATTICES. — This conjecture has been verified [2] on a large set of planar lattices using the value $h(2) = 1$ which leads to the exact frontier only for the square lattice. However, if we use the values of h indicated in table II, the accuracy of the con-

jecture is expected to increase. For example, for the anisotropic triangular lattice the maximal error in the s -variable (which occurs in the isotropic limit [2]) introduced by this conjecture reduces from 2% [2] (with $h = 1$) to 0.17% (with $h = 1.084 48$) for $q = 3$ and from 2.4% [2] (with $h = 1$) to 0.32% (with $h = 1.084 48$) for $q = 4$. Similarly, for the isotropic diced lattice [18], the error in the s -variable introduced by this conjecture reduces from 1% (with $h = 1$) to 0.22% (with $h = 0.953$) for $q = 3$ and from 1.3% (with $h = 1$) to 0.43% (with $h = 0.953$) for $q = 4$. For their dual lattices (honeycomb and kagomé respectively) their percentual errors are even smaller. For the SC and FCC lattices our estimates for the $q = 3$ critical points agree quite well (the discrepancy in s being about 0.4% and 1% respectively) with previous ones (see Table Ia).

Tables Ia and Ib have been calculated by using :

i) the values of h indicated in table II whenever the critical points are known for two or more values of q ;

ii) the value of $h(d)$ corresponding to the d -dimensional hypercubic lattice for all the first-neighbour lattice where only one critical point is known ;

Table II. — Estimates for the values of h in a set of d -dimensional lattices ($d \geq 2$). For $d \geq 3$ we have used the $q = 1$ and $q = 2$ results appearing in tables Ia and Ib. For the cacti and Bethe lattices an effective dimensionality is indicated; (...) denotes an exact value. Although not strictly two-dimensional the first- and second-neighbour square lattice clearly belongs to the $d = 2$ class [2].

LATTICE		h
$d = 2$	Square [2]	1
	Triangular [2]	1.084...
	Honeycomb [2]	0.913...
	Kagomé [18]	1.049...
	Diced [18]	0.953...
	4-8 [2]	0.996 ± 0.121
	Non-crossing diagonal square lattice [2]	1.003 ± 0.109
	3-12 [2]	0.990 ± 0.264
	Asanoha [2]	1.009 ± 0.211
	1 st - and 2 nd - neighbour square lattice [2]	1.010 ± 0.140
$d = 3$	SC	0.377 ± 0.044
	FCC	0.412 ± 0.026
	BCC	0.372 ± 0.037
	Diamond (d)	0.339 ± 0.034
$d = 4$	HSC	0.207 ± 0.029
$d = 5$	HSC	0.0905 ± 0.022
$d = 6$	HSC	0.0484 ± 0.0127
$d = 7$	HSC	0.0281 ± 0.0114
$\sigma = 2d - 1 \rightarrow \infty$	HSC	$\sim \frac{3}{\sigma^2} + \frac{12}{\sigma^3}$
$d_{ct} \rightarrow \infty$	Bethe lattice	0
$d_{ct} = 5.5 \pm 0.3$	$z = 4$ square Husimi tree	0.072 1...
$d_{ct} = 4.0 \pm 0.2$	$z = 4$ triangular cactus	0.193...
$d_{ct} = 5.6 \pm 0.4$	$z = 6$ triangular cactus	0.065 3...
$d_{ct} = 6.7 \pm 0.7$	$z = 8$ triangular cactus	0.034 0...
$d_{ct} = 8.5 \pm 1.1$	$z = 12$ triangular cactus	0.015 1...

iii) the first-neighbour lattice h value for associated first- and higher-neighbour lattices (this choice has proved to be a good one for the first- and second-neighbour square lattice : the discrepancy in h is about 1 %; see Table II).

Through this procedure, the present conjecture has provided 26 new independent critical points which are presented in tables Ia and Ib (region delimited by heavy lines). The central values of the s -variable indicated in these tables have been obtained by using the central values of $t_c^{(2)}$ and/or $t_c^{(1)} \equiv p_c$ reproduced in the same line (top value). The error bars were estimated by taking into account the error and/or dispersion existent in the literature, the error coming from the uncertainty in the determination of h and finally the intrinsic error of the conjecture itself (the

latter has proved to be neglectable whenever check was possible). We may remark in these tables that the overall uncertainty in the values of $t_c^{(q)}/q$ and $k_B T_c/qJ$ is about 1 % for all the cases but the HCP lattice (for which no recent estimation of p_c is available as far as we know).

For the three-dimensional lattices (Table Ia) we have restricted ourselves to $1 \leq q \leq 3$ in order to be sure that the transition is either a continuous or a slightly first order one. For higher finite dimensionalities (Table Ib) the transition is a second order one if $q \leq 2$; it is however interesting to remark that for the $d = 4$ HSC lattice and $q = 3$ the present conjecture still holds ($3J/k_B T_c = 0.3875 \pm 0.0010$ [6] hence $s_c = 0.158 \pm 0.004$ to be compared with 0.161 ± 0.002 from Table Ib).

3.2 REGULAR LATTICES IN THE $d \rightarrow \infty$ LIMIT. — Gaunt and Ruskin [19] have derived the following (probably asymptotic) expansion for the critical bond probability p_c on d -dimensional simple hypercubic lattice :

$$p_c \equiv s(1, h; t_c^{(1)}) = \frac{1}{\sigma} + \frac{5}{2\sigma^3} + \frac{15}{2\sigma^4} + \frac{57}{\sigma^5} + \dots \quad (9)$$

where $\sigma \equiv z - 1 = 2d - 1$, z being the coordination number.

Furthermore Fisher and Gaunt [20] have obtained a (probably asymptotic) expansion for the Ising critical point. From their results it immediately follows

$$t_c^{(2)} = \frac{1}{\sigma} + \frac{1}{\sigma^3} + \frac{3}{\sigma^4} + \frac{15}{\sigma^5} + \frac{256}{3\sigma^6} + \dots \quad (10)$$

It is more convenient to work herein with expansions in σ rather than in z because of the better numerical results which are obtained for d varying from 2 to 7 (possibly for $d > 7$ as well); consequently we have chosen σ^{-1} for abscissa in figure 1.

Through the imposition $s(1, h; t_c^{(1)}) = s(2, h; t_c^{(2)})$, we get the following (probably asymptotic) expansion for h

$$h(\sigma) = \frac{3}{\sigma^2} + \frac{12}{\sigma^3} + \dots \quad (11)$$

Observe that the term σ^{-1} appearing in expansions (9) and (10) corresponds to the Bethe approximation (see Refs. [19, 20]) which is expected to be asymptotically exact in the limit $d \rightarrow \infty$ for all regular lattices. We immediately verify condition (6), which ensures the validity of the conjecture within the dominant asymptotic term for all regular lattices. The cases $q > 2$ have not been included in table Ib, however, for all values of q and $d \geq 1$ for which the transition is only slightly first order, we expect

$$s(q, h(d \rightarrow \infty); t_c^{(q)}) \sim t_c^{(q)} \sim \frac{1}{\sigma} \quad (q \geq 1). \quad (12)$$

3.3 BETHE LATTICE ($d_{cr}^{-1} = 0$). — The critical point of a z -coordinated Bethe lattice (whose effective dimensionality can be considered as infinite [16]) is given (through notation changes) for all values of q by [15, 16, 21]

$$s(q, 0; t^{(q)}) = t^{(q)} = \frac{1}{z-1} \quad (\forall q). \quad (13)$$

Therefore the conjecture is strictly verified for all values of z .

3.4 HUSIMI TREES. — We consider here the z -coordinated triangular cactus ($z/2$ triangles coming together at each site) and square Husimi tree ($z/2$ squares coming together at each site) whose exact critical points are known for $q = 1, 2$. Through notation changes, the $q = 1$ critical value p_c of the triangular cactus is given by [16, 22]

$$p_c + p_c^2 - p_c^3 = \frac{1}{\sigma - 1} \quad (14)$$

where $\sigma \equiv z - 1$; see table Ib for the values corresponding to $z = 4, 6, 8, 12$; $\sigma \rightarrow \infty$ leads to $p_c \sim 1/\sigma$, i.e., the Bethe lattice limit (13). The $q = 2$ critical value leads to [22]

$$t_c^{(2)} = \frac{1}{2} [\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 4}] \quad (15)$$

see table Ib for the values corresponding to $z = 4, 6, 8, 12$; $\sigma \rightarrow \infty$ leads to $t_c^{(2)} \sim 1/\sigma$, i.e. the Bethe lattice approximation [20]. Analogously we have, for the $z = 4$ square Husimi tree, that $q = 1$ leads to [16]

$$1 - 2p_c - 2p_c^2 - 2p_c^3 + 3p_c^4 = 0 \quad (16)$$

(see Table Ib for the value p_c) and $q = 2$ leads to [23]

$$1 - 2t_c^{(2)} - 2(t_c^{(2)})^2 - 2(t_c^{(2)})^3 + (t_c^{(2)})^4 = 0 \quad (17)$$

(see Table Ib for the value $t_c^{(2)}$).

In the present situation, no check can be performed in what concerns our conjecture, but we can use it ($p_c = s(2, h(d_{cr}); t_c^{(2)})$) to calculate the associated values of h (see Table II) and, through figure 1, to estimate the effective dimensionalities d_{cr} (Table II). Since these values are finite and bigger than 4, it seems plausible that in the Husimi trees (including the cactus) the transitions, for $q \geq 3$, are of the first order. We have seen before ($d = 4$ HSC and $q = 3$) that the conjecture provides reasonable estimates even for first order phase transitions. If this is still true for the Husimi trees then we should expect, for $q = 3$, $t_c^{(3)} \simeq 0.339$ for the $z = 4$ square Husimi tree and $t_c^{(3)} \simeq 0.364, 0.204, 0.144, 0.0911$ for the triangular cacti with coordination numbers 4, 6, 8 and 12 respectively.

4. Application to critical frontiers of pure ferromagnets. — Let us now apply our conjecture to calculate entire critical frontiers as formulated in equation (8).

4.1 FIRST- AND SECOND-NEIGHBOUR CUBIC LATTICE.

— Let us note J_1 and J_2 the independent ferromagnetic coupling constants respectively associated to the first- and second-neighbour interactions in the cubic lattice. Since in both extreme cases $J_2/J_1 = 0$ (first-neighbour SC) and $J_1/J_2 = 0$ (two independent first-neighbour FCC lattices) there is no change of dimensionality, we can apply our conjecture.

As far as we know, no results concerning the entire critical frontier have been proposed for $q \neq 2$. The approximate $q = 2$ critical temperatures have been calculated, through series expansions, for

$$0 \leq J_2/J_1 \leq 1,$$

by Dalton and Wood [24]. Their results lead (by using $h = h^{SC} = 0.377$), in the $s_1^{(2)} - s_2^{(2)}$ space, to the curve in heavy line shown in figure 2. The uncertainty in the h^{SC} value leads to the two broken lines; the superior one coincides, within the scale of figure 2, with the Ising frontier obtained by using

$$h = h^{FCC} = 0.412.$$

We conjecture that the critical frontier, for every q (at least for $1 \leq q \leq 3$), is well approximated, for $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$, by the curve in heavy line whose extrapolation (dotted line) for higher values of J_2/J_1 must intersect the $s_2^{(q)}$ axis at the value

$$s_2^{(q)} = p_c^{FCC} = 0.119 \pm 0.001$$

(see Table Ia).

4.2 FIRST- AND SECOND-NEIGHBOUR BCC LATTICE. —

Let us consider a BCC lattice where J_1 and J_2 are

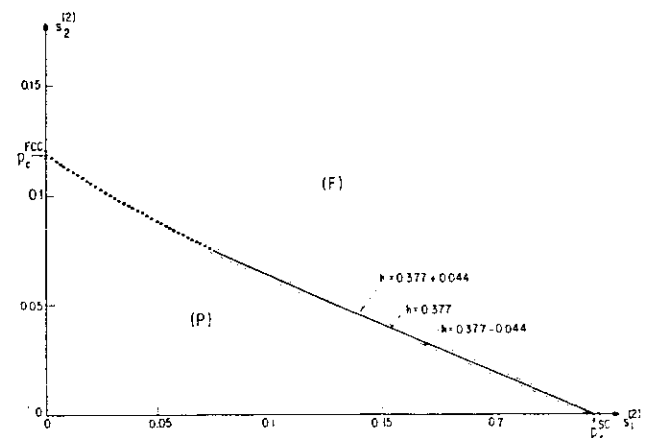


Fig. 2. — The approximate para (P)-ferro (F) magnetic critical frontier of the first- and second-neighbour SC lattice Ising model for $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ obtained by using Dalton and Wood's results [24] and $h = 0.377 \pm 0.044$. The dotted line is a guide-to-eye extrapolation which contains the correct limit for $J_2/J_1 \rightarrow \infty$ ($p_c^{FCC} = 0.119 \pm 0.001$).

respectively associated to the first- and second-neighbour ferromagnetic interactions. Analogously to the previous case, we can apply our conjecture since in both limit cases $J_2/J_1 = 0$ (first-neighbour BCC lattice) and $J_1/J_2 = 0$ (two independent first-neighbour SC lattices) we have three-dimensionality as well.

As far as we know, the entire critical frontier has been calculated only for $q = 2$. By using Dalton and Wood's [24] values for the Ising critical temperatures for $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ and $h = h^{\text{BCC}} = 0.372 \pm 0.037$ we obtain the $q = 2$ critical frontier (heavy line of figure 3), within some error (broken lines). Remark

neighbour FCC lattice: $z = 24$) have all the same dimensionality $d = 3$, thus allowing the application of our conjecture. As far as we know the critical surface for this lattice has been discussed only for $q = 2$. Philhours [25] has calculated the Ising transition temperatures for $0 \leq J_2/J_1 \leq 2$ and $0 \leq J_3/J_1 \leq 2$, while Dalton and Wood [24] have considered only the particular case of first- and second-neighbour FCC lattice where $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ ($J_3/J_1 = 0$). These results lead (for $h = h^{\text{FCC}} = 0.412 \pm 0.026$) to the critical surface shown in figure 4. The error introduced by the uncertainty on h cannot be seen within this scale. The same happens with the discrepancy (inferior to 0.3 % in the $s_i^{(2)}$ variables) between the results of references [24] (crosses in figure 4) and [25]. Once again we conjecture that this critical surface is valid

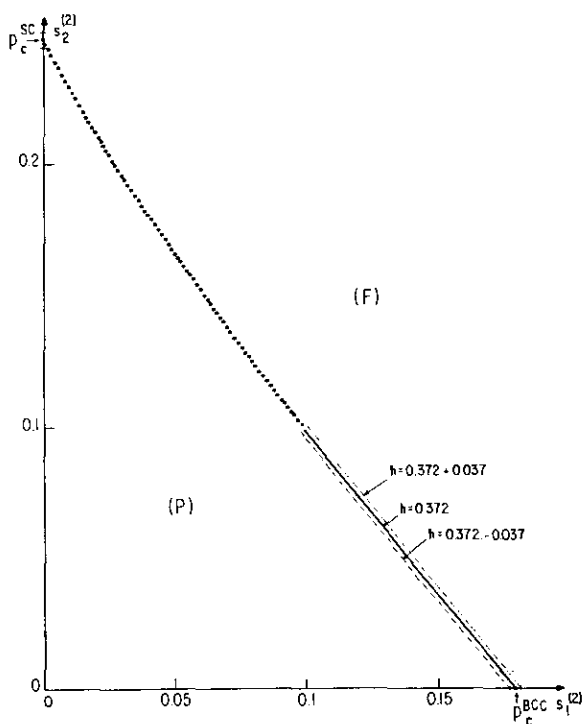


Fig. 3. — The approximate para (P)-ferro (F) magnetic critical frontier of the first- and second-neighbour BCC lattice Ising model for $0 \leq J_2/J_1 \leq 1$ obtained by using Dalton and Wood's results [24] and $h = 0.372 \pm 0.037$. The dotted line is a guide-to-eye extrapolation which contains the correct limit for $J_2/J_1 \rightarrow \infty$ ($p_c^{\text{SC}} = 0.247 \pm 0.003$).

that h^{BCC} and h^{SC} differ so little (see Table II) that if we had used h^{SC} we would have obtained a curve indistinguishable, within the scale of figure 3, from the previous one. According to our conjecture, the referred frontier holds as well for other values of q (at least for $1 \leq q \leq 3$). The extrapolation for $J_2/J_1 > 1$ (dotted line in figure 3) must intersect the $s_2^{(q)}$ axis at the value $p_c^{\text{SC}} = 0.247 \pm 0.003$ (see Table Ia).

4.3 FIRST-, SECOND- AND THIRD-NEIGHBOUR FCC LATTICE. — Let us respectively note J_1 , J_2 and J_3 the first-, second- and third-neighbour ferromagnetic interactions in the FCC lattice. Once more the limit cases $J_2/J_1 = J_3/J_1 = 0$ (first-neighbour FCC lattice), $J_1/J_2 = J_3/J_2 = 0$ (four independent first-neighbour SC lattices) and $J_1/J_3 = J_2/J_3 = 0$ (third-

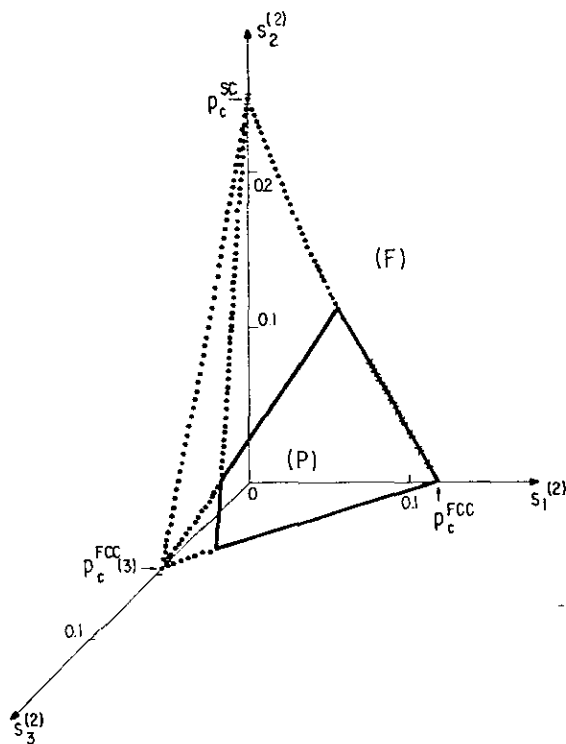


Fig. 4. — The approximate para (P)-ferro (F) magnetic critical surface (heavy line) of the first-, second- and third-neighbour FCC lattice Ising model for $0 \leq J_2/J_1 \leq 2$ and $0 \leq J_3/J_1 \leq 2$ which was obtained using Philhours' results [25] and $h = 0.412 \pm 0.026$ (we have also indicated Dalton and Wood's values [24] (\times)). The dotted line is a guide-to-eye extrapolation which contains the correct limits for $J_2/J_1 \rightarrow \infty$, $J_2/J_3 \rightarrow \infty$ ($p_c^{\text{SC}} = 0.247 \pm 0.003$) and for $J_3/J_1 \rightarrow \infty$, $J_3/J_2 \rightarrow \infty$ (we estimate $p_c^{\text{FCC}}(3) = 0.054 \pm 0.004$).

for, at least, $1 \leq q \leq 3$; its extrapolation must intersect the $s_2^{(q)}$ axis in $p_c^{\text{SC}} = 0.247 \pm 0.003$ (Table Ia) and the $s_3^{(q)}$ axis in $p_c^{\text{FCC}}(3) = 0.054 \pm 0.004$ (we have estimated this value by comparing extrapolations, in the $s_1^{(2)}-s_2^{(2)}-s_3^{(2)}$ space, of different iso- J_2/J_1 critical lines).

4.4 ANISOTROPIC BETHE LATTICE. — Turban [26] has obtained the exact bond percolation critical

frontier for a z -coordinated Bethe lattice with n_1 and $n_2 = z - n_1$ bonds with respective occupancy probabilities p_1 and p_2 (see Eq. (5.4) of Ref. [26]). Following his procedure [26], we generalize it for the case

of n_1, n_2, \dots and n_N bonds $\left(\sum_{i=1}^N n_i = z\right)$ with probabilities p_1, p_2, \dots and p_N respectively, and obtain the following critical equation

$$\begin{vmatrix} 1 - p_1(n_1 - 1) & -p_1 n_2 & \dots & -p_1 n_N \\ -p_2 n_1 & 1 - p_2(n_2 - 1) & \dots & -p_2 n_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -p_N n_1 & -p_N n_2 & \dots & 1 - p_N(n_N - 1) \end{vmatrix} = 0. \tag{18}$$

As we have seen that for the Bethe lattice $s(q, 0; t_i^{(q)}) = t_i^{(q)}$ we conjecture (according to Eq. (8)) that the exact critical frontier for every q is given by

$$\begin{vmatrix} 1 - t_1^{(q)}(n_1 - 1) & -t_1^{(q)} n_2 & \dots & -t_1^{(q)} n_N \\ -t_2^{(q)} n_1 & 1 - t_2^{(q)}(n_2 - 1) & \dots & -t_2^{(q)} n_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -t_N^{(q)} n_1 & -t_N^{(q)} n_2 & \dots & 1 - t_N^{(q)}(n_N - 1) \end{vmatrix} = 0. \tag{19}$$

5. General isotropic bond-mixed Potts ferromagnet on Bethe lattice. — Up to this point we have considered only pure Potts ferromagnets, but we can also apply our conjecture for the quenched random-bond Potts model on a z -coordinated Bethe lattice. The $q = 2$ critical frontier for the general bond mixed problem (where each bond strength J is an independent random variable with an arbitrary probability distribution $P(J)$, $J \geq 0$) is given, through notation changes, by [27]

$$\langle t_c^{(2)} \rangle_{P(J)} = \frac{1}{z - 1}. \tag{20}$$

We conjecture that the exact critical frontier for any q is

$$\langle t_c^{(q)} \rangle_{P(J)} = \frac{1}{z - 1} \quad (\forall q) \tag{21}$$

hence

$$\left\langle \frac{1 - e^{-qJ/k_B T_c}}{1 + (q - 1) e^{-qJ/k_B T_c}} \right\rangle_{P(J)} = \frac{1}{z - 1} \quad (\forall q) \tag{21'}$$

where $\langle \dots \rangle$ stands for the average associated to $P(J)$. We observe that in the dilute case

$$(P(J) = (1 - p) \delta(J) + p \delta(J - J_0); J_0 > 0)$$

we recover Southern and Thorpe's result [15] $pt_0^{(q)} = (z - 1)^{-1}$.

6. Conclusion. — We formulate a conjecture concerning the critical frontier of q -state Potts ferromagnets. This conjecture essentially states that, through a convenient variable, quasi-universality with respect to q can be exhibited. We have recently [2] provided a large number of verifications for planar lattices, to which we can presently add two more, namely, the anisotropic Kagomé and diced lattices whose exact critical frontiers for any q have been conjectured

by Wu [18]. We add herein a certain amount of verifications for non-planar lattices : SC, FCC, $d \rightarrow \infty$ regular lattices, isotropic Bethe lattice for the quenched bond-dilute ferromagnetic problem.

The present conjecture enables us to state a certain amount of predictions, namely :

- i) 26 new approximate critical points (see regions of tables Ia and Ib within heavy lines) for pure Potts ferromagnets on regular lattices;
- ii) the possibly exact critical point of the q -state Potts ferromagnet on any z -coordinated d -dimensional regular lattice is, in the limit $d \rightarrow \infty$, asymptotically given, for all $q \geq 1$, by equation (12), i.e.

$$\frac{k_B T_c}{J} \sim q / \ln \left(\frac{z + q - 2}{z - 2} \right);$$

- iii) the approximate critical points for pure Potts ferromagnets on a certain amount of Husimi trees (we expect the transition to be of the first order for $q > 2$);

iv) the approximate critical lines (or surface) for pure Potts ferromagnets on the first- and second-neighbour cubic and BCC as well as on the first-, second- and third-neighbour FCC lattices;

v) the possibly exact critical frontier for the pure Potts ferromagnet on fully anisotropic Bethe lattices (Eq. (19));

vi) the possibly exact critical frontier for the general isotropic quenched random-bond Potts ferromagnet on Bethe lattices (Eq. (21')).

Cross-checking, by other procedures, of the present predictions would be very welcome.

Note added in proof. — The behaviour of $q_c(d)$ which we propose in section I qualitatively coincides with that obtained recently by RIEDEL, E. K. (*Physica* 106A (1981) 110) within a renormalization-group description.

References

- [1] TSALLIS, C., *J. Phys. C* **14** (1981) L-85.
 [2] TSALLIS, C. and DE MAGALHÃES, A. C. N., *J. Physique Lett.* **42** (1981) L-227.
 [3] STEPHEN, M. J., *Phys. Lett.* **56A** (1976) 149.
 [4] LUBENSKY, T. C., *La Matière Mal Condensée*, Les Houches, ed. by Balian, R., Maynard, R. and Toulouse, G. (North Holland) 1978.
 [5] KASTELEYN, P. W. and FORTUIN, C. M., *J. Phys. Soc. Japan (Suppl.)* **26** (1969) 11.
 [6] BLÖTE, H. W. J. and SWENDSEN, R. H., *Phys. Rev. Lett.* **43** (1979) 799.
 [7] DOMANY, E., SCHICK, M. and WALKER, J. S., *Phys. Rev. Lett.* **38** (1977) 1148.
 [8] PEARCE, P. A. and GRIFFITHS, R. B., *J. Phys. A* **13** (1980) 2143.
 [9] MITTAG, L. and STEPHEN, M. J., *J. Phys. A* **7** (1974) L-109.
 [10] BAXTER, R. J., *J. Phys. C* **6** (1973) L-445.
 [11] STRALEY, J. P. and FISHER, M. E., *J. Phys. A* **6** (1973) 1310.
 [12] KIM, D. and JOSEPH, R. I., *J. Phys. A* **8** (1975) 891.
 [13] JENSEN, S. J. K. and MOURITSEN, O. G., *Phys. Rev. Lett.* **43** (1979) 1736.
 [14] PYTTE, E., *Phys. Rev. B* **22** (1980) 4450 and references therein.
 [15] SOUTHERN, B. W. and THORPE, M. F., *J. Phys. C* **12** (1979) 5351.
 [16] FISHER, M. E. and ESSAM, J. W., *J. Math. Phys.* **2** (1961) 609.
 [17] SOUTHERN, B. W., *J. Phys. C* **13** (1980) L-285.
 [18] WU, F. Y., *J. Phys. C* **12** (1979) L-645.
 [19] GAUNT, D. S. and RUSKIN, H., *J. Phys. A* **11** (1978) 1369.
 [20] FISHER, M. E. and GAUNT, D. S., *Phys. Rev.* **133** (1964) A224.
 [21] EGGARTER, T. P., *Phys. Rev. B* **9** (1974) 2989.
 [22] THORPE, M. F., *J. Phys. A* **11** (1978) 955.
 [23] ONO, I., *J. Phys. Soc. Japan Lett.* **44** (1978) 1033.
 [24] DALTON, N. W. and WOOD, D. W., *J. Math. Phys.* **10** (1969) 1271.
 [25] PHILHOURS, J., *Phys. Rev. B* **4** (1971) 929.
 [26] TURBAN, L., *J. Phys. C* **12** (1979) 1479.
 [27] HORIGUCHI, T. and MORITA, T., *J. Phys. A* **13** (1980) L-71.
 [28] FISCH, R., PhD Thesis. University of Pennsylvania, USA (1977).
 [29] KIRKPATRICK, S., *La Matière Mal Condensée*, Les Houches, ed. by Balian, R., Maynard, R. and Toulouse, G., (North Holland) 1978, p. 339.
 [30] DE MAGALHÃES, A. C. N., TSALLIS, C. and SCHWACHHEIM, G., *J. Phys. C* **13** (1980) 321.
 [31] ZINN-JUSTIN, J., *J. Physique* **40** (1979) 969.
 [32] GAUNT, D. S. and GUTTMAN, A. J., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 3, ed. Domb, C. and Green, M.S. (New York Academic) 1974, p. 181-243.
 [33] SYKES, M. F., GAUNT, D. S., ROBERTS, P. D. and WYLES, J. A., *J. Phys. A* **5** (1972) 640.
 [34] SYKES, M. F., GAUNT, D. S. and GLEN, M., *J. Phys. A* **9** (1976) 1705.
 [35] DUNN, A. G., ESSAM, J. W. and RITCHIE, D. S., *J. Phys. C* **8** (1975) 4219.
 [36] MCKENZIE, S., *J. Phys. A* **12** (1979) L-185.
 [37] GUTTMAN, A. J. and JOYCE, G. S., *J. Phys. A* **5** (1972) L-81.
 [38] LEVY, P. M. and SUDANO, J. J., *Phys. Rev. B* **18** (1978) 5087.
 [39] GAUNT, D. S. and SYKES, M. F., *J. Phys. A* **6** (1973) 1517.
 [40] VYSSOTSKY, V. A., GORDON, S. B., FRISCH, H. L. and HAMMERSLEY, J. M., *Phys. Rev.* **123** (1961) 1566.
 [41] HO-TING-HUN, J. and OITMAA, J., *J. Phys. A* **8** (1975) 1920.
 [42] LEU, J. A., BETTS, D. D. and ELLIOTT, C. J., *Can. J. Phys.* **47** (1969) 1671.
 [43] DOMB, C. and DALTON, N. W., *Proc. Phys. Soc.* **89** (1966) 859.
 [44] GAUNT, D. S., SYKES, M. F. and MCKENZIE, S., *J. Phys. A* **12** (1979) 871.
 [45] MOORE, M. A., *Phys. Rev. B* **1** (1970) 2238.
 [46] MCKENZIE, S. and GAUNT, D. S., *J. Phys. A* **13** (1980) 1015.
 [47] BAKER, G. A., *Phys. Rev. B* **9** (1974) 4908.
 [48] ONO, I., *J. Phys. Soc. Japan.* **48** (1980) 24.

TRIANGULAR AND HONEYCOMB LATTICES BOND-DILUTED
ISING FERROMAGNET: CRITICAL FRONTIER

by

Aglaē C.N. de MAGALHÃES,

Georges SCHWACHHEIM

and

Constantino TSALLIS

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CNPq)
Rua Xavier Sigaud, 150 - 22.290 - Rio de Janeiro
BRAZIL

ABSTRACT

Within a real space renormalization group framework (12 different procedures, all of them using star-triangle and duality-type transformations) we calculate accurate approximations for the critical frontiers associated with the quenched bond-diluted first-neighbour spin-1/2 Ising ferromagnet on triangular and honeycomb lattices. All of them provide, in both pure bond percolation and pure Ising limits, the exact critical points and exact or almost exact derivatives in the p - t space (p is the bond independent occupancy probability and $t \equiv \tanh J/k_B T$). Our best numerical proposals lead to the exact derivative in the pure percolation limit ($p = p_c$) and, in what concerns the pure Ising limit ($p = 1$) derivative, to a 0.15% error for the triangular lattice and to a 0.96% error for the honeycomb one; in the intermediate region ($p_c < p < 1$), where the exact critical frontiers are still unknown, the worst error in the t -variable (for fixed p) is estimated to be less than 0.27% for the triangular lattice and to a 0.14% for the honeycomb one. Furthermore we exhibit, on formal grounds, that the calculations of the exact critical points of the bond percolation and Ising models through the use of duality and star-triangle transformations can be unified within an appropriate graph framework.

I. INTRODUCTION

During the last few years, phase transitions in random magnetic systems have been studied by many authors. In particular, quite an effort has been dedicated to the discussion of the critical properties of the quenched bond-disordered Ising model using several approximate methods such as series expansions (Rappaport 1972, Harris 1974, Ditzian and Kadanoff 1979), Monte Carlo (Ono and Matsuoka 1976, Zobin 1978), variational method (Bidaux et al 1976), effective-interaction (Harris 1976, Turban 1980, Guilmin and Turban 1980) and effective-field (Tsallis et al 1982) approximations, duality and/or replica trick arguments (Lage 1977, Domany 1978, Oguchi and Ueno 1978, Sarbach 1980) and renormalization group (RG) techniques (Tatsumi and Kawasaki 1976, Jayaprakash et al 1978, Yeomans and Stinchcombe 1979, Tsallis and Levy 1980, Levy et al 1980, Chao et al 1981).

In the present work we shall consider the quenched bond-diluted first-neighbour spin-1/2 Ising ferromagnet on triangular and honeycomb lattices; the associated Hamiltonian is given by:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma_i = \pm 1 \forall i) \quad (1)$$

where $\langle i,j \rangle$ are nearest-neighbour sites and the bond strength J_{ij} is assumed to be an independent random variable with probability distribution.

$$P(J_{ij}) = (1-p)\delta(J_{ij}) + p\delta(J_{ij}-J) \quad (J>0) \quad (2)$$

Let us introduce the variable $t \equiv \tanh (J_{ij} / k_B T)$ (hereafter referred to as the thermal transmissivity of the bond) which appears naturally in spin-1/2 Ising problems (Domb 1960, Nelson and Fisher 1975, Young and Stinchcombe 1976, Yeomans and Stinchcombe 1979, Tsallis and Levy 1980 among others); the probability law (2) can be rewritten as follows:

$$P(t) \equiv P(t;p,t_0) = (1-p)\delta(t) + p\delta(t-t_0) \quad (3a)$$

$$\text{with } t_0 \equiv \tanh(J/k_B T) \quad (3b)$$

The exact para-ferromagnetic critical frontier (CF) for this model on triangular and honeycomb lattices is yet unknown; the only available exact results are the critical temperature for $p = 1$ (Wannier 1945), the critical probability p_c for $T = 0$ (Sykes and Essam 1963) and the derivatives $(dt_0/dp)_{p=1}$ and $(dt_0/dp)_{p=p_c}$ (Southern and Thorpe 1979) (upper and lower bounds on $t_0(p)$ (Bergstresser 1977) are known as well). As far as we know, all but one of the approximate CF's that have been proposed (Tatsumi and Kawasaki 1976, Oguchi and Ueno 1978, Yeomans and Stinchcombe 1979, Turban 1980, Guilmin and Turban 1980, Kinzel and Domany 1981) are not simultaneously exact at both pure limits; the unique exception is the three-bonds approximation of Guilmin and Turban (1980) (hereafter referred to as GT). They used a cluster extension of the effective interaction approximation where the effective medium was chosen to be that of a pure Ising model; this choice leads also to the exact derivative $(dt_0/dp)_{p=1}$. An accurate deter-

mination of the bond-diluted Ising CF on the triangular and honeycomb lattices constitutes the central aim of the present work. In section II we exhibit how the exact critical points in the pure limit cases can be recovered by using convenient graphs whose bonds are associated with transmissivities (for $p = 1$) or probabilities (for $t_0 = 1$). In section III we use these graphs (whose bonds are now associated with distribution laws) to construct 12 RG's which lead to accurate approximations for the bond-diluted Ising CF on the triangular lattice. We follow, in section IV, the same procedure to discuss the CF associated with the honeycomb lattice.

II. PURE MODELS EXACT RESULTS WITHIN AN UNIFIED GRAPH PROCEDURE

The star-triangle transformation (STT) (introduced by Onsager in 1944) and the duality transformation (DT) (introduced by Kramers and Wannier in 1941, interpreted geometrically by Onsager in 1944 and put in series-parallel terms by Tsallis and Levy 1980 and Alcaraz and Tsallis 1982) are the basic ingredients which, within different contexts, lead to the exact critical points $K_C^\Delta \equiv J/k_B T_C^\Delta$ and $K_C^Y \equiv J/k_B T_C^Y$ (Wannier 1945) of the pure Ising and p_C^Δ and p_C^Y (Sykes and Essam 1963) of the pure bond percolation models (Δ and Y respectively denote the triangular and honeycomb lattices). Let us briefly review the original arguments to obtain these points for let us say the triangular lattice. For the Ising model, Wannier (1945) established, through the STT (see Fig. 1), a connection between the partition function $Z_\Delta(K)$ of

the triangular lattice at a point K and the partition function $Z_Y(R)$ of the honeycomb lattice at the point $R = \arg \cosh [(1+e^{4K})/2]/2$. On the other hand, through the DT, he connected $Z_Y(R)$ to $Z_{\Delta}(K')$ where $K' = \arg \operatorname{coth} e^{2R} \equiv R^D$ (D stands for "dual"). In this way, Wannier derived a relation between the partition function Z_{Δ} of the triangular lattice at the points K and K' which, under the assumption of a single singularity in Z_{Δ} , leads to $K_C^{\Delta} = K = K' = (\ln 3)/4$. For the bond percolation problem, Sykes and Essam (1963) established, first, a relation (closely analogous to the above DT) between the high- and low-density series for the mean number of finite clusters per site; by assuming only one singular point they obtained $p_C^Y = (p_C^{\Delta})^D \equiv 1 - p_C^{\Delta}$. Then, they considered a single star-triangle (for example, ABCO in Fig. 1) where the bonds of the triangle and those of the star have probabilities p and $p^D \equiv 1 - p$ respectively. By equating the connectivity on the triangle with that on the star, they arrived to a unique non-trivial independent equation (equivalent to eq.(j) of Table 1). The root of this equation is the exact critical probability $p_C^{\Delta} = 2\sin(\pi/18)$ (corresponding to the appearance of an infinite cluster on the triangular lattice).

Now, let us see how these exact critical points can be obtained within a compact and unified procedure by using graphs (see Tsallis and Levy 1981 and references therein). For the pure Ising model, Wannier's results can be recovered by considering the pair of two-terminal clusters shown in Fig. (a) of Table 1 ($i=2$) (or alternatively the pair of two-terminal graphs shown in Fig (b) of Table 1 ($i=2D$)) where we have introduced the

transmissivities $t_0 \equiv \tanh K$ and $r_0 \equiv \tanh R$. To be more precise, we associate $t_0(r_0)$ with each bond of the triangle (star) cluster of Fig (a) of Table 1 and obtain (see for example, Yeomans and Stinchcombe 1979, Tsallis and Levy 1981) the equivalent transmissivity $G_{\Delta}^{(2)}(t_0)$ ($G_Y^{(2)}(r_0)$) between the two terminal sites (see item (d) of Table 1). The standard STT (which involves a traceover the possible configurations of the central spin on the Y -cluster) leads to

$$\frac{t_0 + t_0^2}{1 + t_0^3} = r_0^2 \quad (4)$$

If we consider now that, on the critical point, $r_0 = t_0^D \equiv (1-t_0)/(1+t_0)$ we obtain the equation indicated in item (d) of Table 1. The procedure we have just outlined for the clusters appearing in Fig (a) of Table 1 can be also applied to those appearing in Fig (b) of Table 1 (these clusters are in fact the dual (Tsallis and Levy 1981) of the preceding ones) thus obtaining the equation indicated in item (e) of Table 1. For the pure bond percolation model, we can recover Sykes and Essam's results by considering the three-terminal ($i=3$) graphs shown in Fig (c) of Table 1, where p and p^D are the bond occupancy probabilities of the triangle and star clusters respectively. By equating the equivalent probabilities $G_{\Delta}^{(3)}(p)$ and $G_Y^{(3)}(p^D)$ between the terminals (i.e., the probabilities of the three terminals being connected) in both clusters, we obtain eq(j) of Table 1, whose root is the exact value p_C^{Δ} .

In other words, we have seen that the usual STT defined at the pure Ising critical point can be written in terms of

two-terminal graph pairs ($i=2$ or $2D$), while the usual STT defined at the pure bond percolation critical point can be written in terms of a three-terminal graph pair ($i=3$). Now, a natural question arises: could we obtain both exact critical points using the same pair of graphs? The answer is positive and we can verify that this is so for each graph pair ($i=2, 2D, 3$) we have considered in Table 1 (to obtain the equation indicated in item (f) of Table 1 we have used the Break-Collapse Method (Tsallis and Levy 1981)). More generally, it is easy to verify that this happens also for the pure anisotropic case even for $i = 2$ or $2D$ (where there is a break of permutation symmetry in the graphs). As a matter of fact, for the general anisotropic quenched random-bond Potts ferromagnetic model, the three-terminal graph pair ($i=3$) is the only one (among the three pairs herein considered) which leads to critical frontiers which do not violate (Tsallis 1982) the isomorphism (Kasteleyn and Fortuin 1969) existing between the $q \rightarrow 1$ Potts model and bond percolation. Therefore, for more general problems, the three-terminal star-triangle graph pair ($i=3$) is superior to any of the two-terminal graph pairs ($i=2, 2D$).

Up to this point we have considered only the triangular lattice; the exact critical points for its dual lattice ($t_C^Y = (t_C^\Delta)^D = 1/\sqrt{3}$ and $p_C^Y = (p_C^\Delta)^D = 1 - 2\sin(\pi/18)$) can be derived similarly ditto with $\tau \leftrightarrow \tau^D$ ($\tau = t_0, p$).

III. TRIANGULAR LATTICE BOND-DILUTED ISING MODEL

III.1. Graph Method

The fact that the combined STT-DT defined at both pure limit cases $p = 1$ (eqs. appearing in items (d), (e) and (f) of Table 1) and $t_0 = 1$ (eqs. appearing in items (g), (h) and (j) of Table 1) can be expressed by the same graph pairs, allow us to generalize these results for any p and t_0 , thus obtaining approximations for the CF associated with the triangular lattice. To perform this we associate, with each bond of the graphs appearing in Table 1, the distributions $P(t)$ (eq.(3)) and $P^D(t)$ instead of τ and τ^D respectively, where the dual distribution $P^D(t)$ is given (Tsallis and Levy 1980) by

$$P^D(t) \equiv P^D(t;p,t_0) = \frac{2}{(1+t)^2} P(t^D;p,t_0) = (1-p)\delta(t-1) + p\delta(t-t_0^D) \quad (5)$$

The overall transmissivity distributions associated with the graphs shown in Figs (a), (b) and (c) of Table 1 are, respectively

$$P_{\Delta}^{(2)}(t) \equiv P_{\Delta}^{(2)}[P(t;p,t_0)] = p^3\delta\left(t - \frac{t_0 + t_0^2}{1+t_0^3}\right) + p^2(1-p)\delta(t-t_0^2) \\ + [2p^2(1-p) + p(1-p)^2]\delta(t-t_0) + \left\{1 - [p^3 + 3p^2(1-p) + p(1-p)^2]\right\}\delta(t) \quad (6a)$$

$$P_Y^{(2)}(t) \equiv P_Y^{(2)}[P^D(t;p,t_0)] = p^2\delta[t - (t_0^D)^2] + 2p(1-p)\delta(t-t_0^D) + (1-p)^2\delta(t-1) \quad (6b)$$

$$\begin{aligned}
 P_Y^{(2D)}(t) &\equiv P_Y^{(2D)} [P^D(t;p,t_0)] = [P_{\Delta}^{(2)}(t)]^D = p^3 \delta \left[t - \frac{2(t_0^D)^2}{1+(t_0^D)^2} \right] \\
 &+ p^2(1-p) \delta \left(t - \frac{2t_0^D}{1+(t_0^D)^2} \right) + [2p^2(1-p) + p(1-p)^2] \delta(t-t_0^D) \\
 &+ [2p(1-p)^2 + (1-p)^3] \delta(t-1) \tag{6c}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{\Delta}^{(2D)}(t) &\equiv P_{\Delta}^{(2D)} [P(t;p,t_0)] = [P_Y^{(2)}(t)]^D = p^2 \delta \left(t - \frac{2t_0}{1+t_0^2} \right) + 2p(1-p) \delta(t-t_0) \\
 &+ (1-p)^2 \delta(t) \tag{6d}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_{\Delta}^{(3)}(t) &\equiv P_{\Delta}^{(3)} [P(t;p,t_0)] = p^3 \delta \left(t - \frac{3t_0^2 - t_0^3}{1+t_0^3} \right) + 3p^2(1-p) \delta(t-t_0^2) \\
 &+ \left\{ 1 - [p^3 + 3p^2(1-p)] \right\} \delta(t) \tag{6e}
 \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}
 P_Y^{(3)}(t) &\equiv P_Y^{(3)} [P^D(t;p,t_0)] = p^3 \delta [t - (t_0^D)^3] + 3p^2(1-p) \delta [t - (t_0^D)^2] \\
 &+ 3p(1-p)^2 \delta(t-t_0^D) + (1-p)^3 \delta(t-1) \tag{6f}
 \end{aligned}$$

At this point, we use procedures similar to the second approach ("dual-type RG", which includes RG3 to RG6) introduced by Tsallis and Levy (1980) in the case of the square lattice bond-diluted Ising model. It consists in constructing RG's which renormalize $P_{\Delta}^{(i)}(t)$ into $P_Y^{(i)}(t) \equiv P_Y^{(i)} [P^D(t;p',t'_0)]$ ($i=2,2D$ or 3). Two different RG schemes are introduced herein, namely the dual-type canonical RG (CRG) and the dual-type parametric RG (PRG).

III.2. Dual-type Canonical Renormalization Groups (CRG)

The CRG treatment is similar to RG 4 of Tsallis and Levy (1980) and involves the calculation of flow lines and fixed points by the standard procedure (see, for example, Yeomans and Stinchcombe 1979). We construct six different CRG's which we denote by (r,i) -CRG ($r=t$ or s ; $i=2, 2D$ or 3), where s is defined below, r is the variable which is averaged and i refers to the corresponding star-triangle graph pair (see Table 1). Each (r,i) -CRG is defined through the following pair of equations:

$$\langle r \rangle_{P_{\Delta}^{(i)}} \equiv h_r^{(i)}(p, t_0) = \langle r \rangle_{P_Y^{(i)}} \equiv f_r^{(i)}(p', t_0^D) \quad (7a)$$

$$\langle r^2 \rangle_{P_{\Delta}^{(i)}} \equiv k_r^{(i)}(p, t_0) = \langle r^2 \rangle_{P_Y^{(i)}} \equiv g_r^{(i)}(p', t_0^D) \quad (7b)$$

$$(r = t, s; i = 2, 2D, 3)$$

where

$$s \equiv \frac{\ln(1+t)}{\ln 2} \quad (8)$$

and $\langle \dots \rangle_P$ denotes the average over a distribution P .

The variable s (Levy et al 1980, Tsallis 1981 a, Tsallis and de Magalhães 1981, de Magalhães and Tsallis 1981) is used here with the aim of obtaining the exact value of $(dt_0/dp)_{p=p_c^{\Delta}}$, as it was the case for the square lattice bond-diluted Ising model (Levy et al 1980). Observe that Eqs. (7) could be written as well in terms of the first - $(\kappa_1^{(r)}(P^{(i)})) \equiv \langle r \rangle_{P^{(i)}}$ and second-order

$(\kappa_2^{(r)}(p^{(i)}) \equiv \langle r^2 \rangle_{p^{(i)}} - (\langle r \rangle_{p^{(i)}})^2)$ cumulants associated with $p^{(i)}$ ($p^{(i)} = p_{\Delta}^{(i)}$ or $p_Y^{(i)}$), i.e., eqs. (7) are equivalent to $\kappa_1^{(r)}(p_{\Delta}^{(i)}) = \kappa_1^{(r)}(p_Y^{(i)})$ and $\kappa_2^{(r)}(p_{\Delta}^{(i)}) = \kappa_2^{(r)}(p_Y^{(i)})$.

Notice also that the eqs. which appear in Table I are particular cases ($p=p'=1$, $t_0=t'_0$ and $t_0=t'_0=1$, $p=p'$) of the system of eqs. (7). Therefore, all the CRG's contain the exact pure Ising point $(1, t_c^{\Delta})$ and the exact pure percolation point $(p_c^{\Delta}, 1)$ as fixed points. The flow-line joining these points provides, for each (r,i) -CRG, an approximation for the CF we are looking for (see Tables 2a and 3a). The $(s,2)$ and $(s,2D)$ -CRG's lead to the same CF due to special properties[†] of the s -variable and to the fact that $p_{\Delta}^{(2D)}(t) = [p_Y^{(2)}(t)]^D$ and $p_Y^{(2D)}(t) = [p_{\Delta}^{(2)}(t)]^D$. All these five distinct CF's are well represented by the curve (T) shown in Fig. 2a (or 2b) since their discrepancies (less than 1.1% in the t_0 -variable) are invisible within the scale of the figures.

Let us now discuss with more detail how the transformation equations (7) provide several critical properties of the present model, in particular the exact value of the derivative $(dt_0/dp)_{p=p_c^{\Delta}}$ in the (s,i) -CRG approximations. First of all, let us notice that the transmissivity distributions $p_{\Delta}^{(i)}(t)$ and $p_Y^{(i)}(t)$ ($i = 2, 2D, 3$) (see eqs. (6)) have the following general forms:

[†] These properties are $\kappa_1^{(s)}(P) = 1 - \kappa_1^{(s)}(P^D)$ and $\kappa_2^{(s)}(P) = \kappa_2^{(s)}(P^D)$ where P is an arbitrary distribution.

$$P_{\Delta}^{(i)}(t) = \alpha_0^{(i)}(p)\delta(t) + \sum_{\ell=1,2,\dots} \alpha_{\ell}^{(i)}(p)\delta[t - A_{\ell}^{(i)}(t_0)] \quad (9a)$$

(i = 2, 2D, 3)

$$P_{\gamma}^{(i)}(t) = \beta_0^{(i)}(p')\delta(t-1) + \sum_{\ell=1,2,\dots} \beta_{\ell}^{(i)}(p')\delta[t - B_{\ell}^{(i)}(t_0^D)] \quad (9b)$$

where $\alpha_{\ell}^{(i)}(p) = p^n$ (where n is the number of relevant bonds of the graph, hence n = 2 for eq.(6d) and n = 3 for eqs.(6a) and (6e)). The functions we have just defined have the following properties

$$\alpha_{\ell}^{(i)}(p=1) = \beta_{\ell}^{(i)}(p'=1) = \delta_{\ell,1} \quad (\text{Kronecker-delta}) \quad \ell = 0, 1, \dots \quad (i = 2, 2D, 3) \quad (10a)$$

$$A_{\ell}^{(i)}(t_0=1) = 1 \quad \ell = 1, 2, \dots \quad (i = 2, 2D, 3) \quad (10b)$$

$$B_{\ell}^{(i)}(t_0^D=0) = 0 \quad \ell = 1, 2, \dots \quad (i = 2, 2D, 3) \quad (10c)$$

$$\sum_{\ell \geq 0} \alpha_{\ell}^{(i)}(p) = \sum_{\ell \geq 0} \beta_{\ell}^{(i)}(p) = 1 \quad \forall p \quad (i = 2, 2D, 3) \quad (10d)$$

These properties are of fundamental importance since they lead to many special results which we shall mention below.

From the transformation equations (7) we find, for each (r,i)-CRG (r = t,s; i = 2,2D,3), only two fixed points ($p' = p = p^*$, $t_0 = t_0^D = t_0^*$) corresponding precisely to the already mentioned exact pure points. Linearizing these equations, for each (r,i)-CRG, around the percolation fixed point we obtain the Jacobian matrix $\left. \frac{\partial(p', t_0^D)}{\partial(p, t_0)} \right|_{p^* = p_c^{\Delta}}$; its element $(\partial t_0^D / \partial p)_{p^* = p_c^{\Delta}}^{(r,i)}$

vanishes due to the properties (10b) and (10c). Consequently, its eigenvalues are $(\partial p' / \partial p)_{p^*=p_c^\Delta}^{(r,i)} \equiv \lambda_p^{(r,i)}$ and $(\partial t'_0 / \partial t_0)_{p^*=p_c^\Delta}^{(r,i)}$; the eigenvectors are respectively horizontal and tangent to the CF (at the point $(p_c^\Delta, 1)$). To say it in other words, we have proved that the present recursive relations (eqs.(7)) provide along the p-axis the same eigenvalue the pure perco-

lation problem yields, i.e. $\lambda_p^{(r,i)} = \left(\frac{dh_r^{(i)}(p,1)}{dp} / \frac{df_r^{(i)}(p',0)}{dp'} \right)_{p^*=p_c^\Delta}$.

Furthermore it is easy to see that $\lambda_p^{(t,i)} = \lambda_p^{(s,i)} \equiv \lambda_p^{(i)}$ (for numerical values see Table 4). The slope of the CF at the percolation fixed point is given by

$$\left. \frac{dt_0}{dp} \right|_{p^*=p_c^\Delta}^{(r,i)} = \left[\left(\frac{\partial t'_0}{\partial t_0} - \lambda_p^{(i)} \right) / \frac{\partial p'}{\partial t_0} \right]_{p^*=p_c^\Delta}^{(r,i)} \quad \text{which,}$$

for $r = t$, takes the particular value $(dt_0/dp)_{p^*=p_c^\Delta}^{(t,i)} = -3/2p_c^\Delta$ (see Table 2a). For the case $r = s$, it follows from (10b) and (10c) that

$$\left. \frac{dt_0}{dp} \right|_{p^*=p_c^\Delta}^{(s,i)} = (\ln 2) \left[\left(\frac{\partial t'_0}{\partial t_0} - 2\lambda_p^{(i)} \right) / \frac{\partial p'}{\partial t_0} \right]_{p^*=p_c^\Delta}^{(s,i)} = -\frac{2\ln 2}{p_c^\Delta},$$

which coincides with the exact result (Southern and Thorpe 1979).

At the Ising fixed point we can show, using property (10a), that $(\partial p' / \partial t_0)_{t^*=t_c^\Delta}^{(r,i)} = 0$. Therefore, the Jacobian matrix evaluated at this fixed point has eigenvalues $(\partial t'_0 / \partial t_0)_{t^*=t_c^\Delta}^{(r,i)} \equiv \lambda_t^{(r,i)}$ and $(\partial p' / \partial p)_{p^*=t_c^\Delta}^{(r,i)}$ associated respectively with the vertical eigenvector and with the eigenvector tangent to the CF

(at the point $(1, t_c^\Delta)$). Here again, the eigenvalue $\lambda_t^{(r,i)}$ is that of the

$$\text{pure case i.e., } \lambda_t^{(r,i)} = \left(\frac{dh_r^{(i)}(1, t_0)}{dt_0} \bigg/ \frac{df_r^{(i)}(1, t_0^{1D})}{dt_0'} \right)_{t^* = t_c^\Delta}$$

We verify also that $\lambda_t^{(t,i)} = \lambda_t^{(s,i)} \equiv \lambda_t^{(i)}$ (for numerical values see Table 4). The slope of the CF at the Ising fixed point, obtained through the (r,i) -CRG, is given by (Yeomans and Stinchcombe 1979)

$$\left. \frac{dt_0^{(r,i)}}{dp} \right|_{t^* = t_c^\Delta} = \left[\frac{\partial t_0^{(r,i)}}{\partial p} \bigg/ \left(\frac{\partial p^{(r,i)}}{\partial p} - \frac{\partial t_0^{(r,i)}}{\partial t_0} \right) \right]_{t^* = t_c^\Delta} \quad (\text{see Table$$

2a for specific numerical values).

Let us notice that, within the dual-type RG framework, it is not possible to calculate approximations for the critical correlation length exponents $\nu_p^{(i)} = \ln b / \ln |\lambda_p^{(i)}|$ and $\nu_t^{(i)} = \ln b / \ln |\lambda_t^{(i)}|$ since, by construction, there is no expansion of the original cluster (linear expansion factor $b = B/B' = 1$, where B and B' are, respectively, the linear sizes of the Δ and Y - clusters) for all (r,i) -CRG.

We can see from Table 4 that $|\lambda_p^{(i)}(B=1)| \approx 1$ and $|\lambda_t^{(i)}(B=1)| \approx 1$ (within an error inferior to 6.5%), in particular, $|\lambda_t^{(2)}(B=1)| = |\lambda_t^{(2D)}(B=1)| = 1$.

The calculation of $|\lambda_p^{(i)}(B)|$ and $|\lambda_t^{(i)}(B)|$ in larger pairs (de Magalhães et al 1982) of Y - Δ clusters ($B = 2, 3$; a cluster with $B = 2$ is represented in Fig. 1) with i terminals ($i = 2$ to 6 for $B = 2$ and $i = 2$ to 10 for $B = 3$) shows that: i) for any cluster

such that $(B,i) \neq (1,3)$, $|\lambda_p^{(i)}(B)| < |\lambda_p^{(3)}(1)|$ and

$|\lambda_t^{(i)}(B)| < |\lambda_t^{(3)}(1)|$; ii) $|\lambda_t^{(2)}(B)| = 1$ for all values of B ;

iii) the averages $|\lambda_p^{(i)}(B)|$ and $|\lambda_t^{(i)}(B)|$, taken over all clusters with the same number i of terminals and the same value for B , increase with increasing i (at fixed B) and decrease

with increasing B (at fixed i); iV) the averages $|\overline{\lambda_p^{(i)}(B)}|$ and $|\overline{\lambda_t^{(i)}(B)}|$, taken now over all clusters having the same B , approach to unity as B increases. All these tendencies strongly suggest that $|\lambda_p^{(i)}(B)| \rightarrow 1$ and $|\lambda_t^{(i)}(B)| \rightarrow 1$ as $B \rightarrow \infty$ ($\forall i$) leading consistently, as expected, to an indeterminacy in v_p and v_t , as it happened in the dual-type RG of Tsallis and Levy (1980).

The fact that there is no expansion of the lattice ($b = 1$) in all the (r,i) -CRG approximations, makes that no physical meaning can be associated with the senses of the dual-type RG flows.

III.3. Dual-type Parametric Renormalization Groups (PRG)

The parametric RG procedure (PRG) (RG 3 of Tsallis and Levy 198D, de Magalhães et al 1981, Chao et al 1981) provides, for CF's, results which are similar to the CRG ones and is considerably less harder to work out. It consists in solving equation (7a) for each (r,i) -PRG ($r = t,s; i = 2,2D,3$) by holding, during the considered renormalization transformation, a fixed parameter (e.g, $p, t_0, t_0/p$, etc), thus reducing the two-dimensional RG space to a one-dimensional one. In this way, each (r,i) -PRG approximation for the CF depends on the choice of the parameter and all of its points are fixed points (see de Magalhães et al 1981 for details).

The main results obtained through the present six (r,i) -PRG ($r = t,s; i = 2,2D,3$) are indicated in Tables (2a) and (3a). Let us stress that all (s,i) -PRG ($i = 2,2D,3$) lead to one and the same approximation for the CF, namely

$$3p \ln(1+t_0) - p^3 \ln(1+t_0^3) - \ln 2 = 0 \quad (11)$$

whose slope at the percolation fixed point is exact (Eq. (11) provides in fact an excellent and simple analytic approximation for the CF). The PRG approximations for the CF differ very little among them (the maximum discrepancy in t_0 occurs in $p \approx 0.45$ and is about 0.65%) and are, as it was the case of the CRG approximations, well represented by the curve (T) drawn in Fig. (2a) (or 2b).

III.4. Comparisons

Guilmin and Turban (1980) derived, within their "three-bonds" approximation (GT), a CF which contains both exact pure points and the exact derivative $(dt_0/dp)_{p=1}$. We have calculated, in the GT approximation, the other derivative and have obtained that $(-dt_0/dp)_{p=p_c^\Delta} = 12(1+p_c^\Delta)/[p_c^\Delta(9+7p_c^\Delta)] \approx 4.0725$ (see Table 2a). For comparison, we have calculated (Table 3a) a few points of their CF.

All the approximate CF's we have considered up to now ((r,i)-CRG, (r,i)-PRG and GT; $r = t,s$; $i = 2,2D,3$) are very close among them (the difference in t_0 being about 2% in the most unfavourable case); they are represented by the same curve within the scales of Figs. (2a) and (2b). All the s-RG's lead to the exact value of $(dt_0/dp)_{p=p_c^\Delta}$ (cf Table 2a). Notice that the PRG CF's are, in the p - t_0 space, a little above the CRG ones, as it was the case for the square (Tsallis and Levy 1980) and SC (Chao et al 1981) lattices. Since the exact CF $t_0(p)$ is a monotonically

function of p (Bergstresser 1977), and presumably the derivative dt_c/dp also, the analysis of the pure cases derivatives suggests that the unknown exact CF lies between the GT approximation (lower bound for t_0 ; 2% error in $(dt_0/dt)_{p=p_c}$) and our (s,3)-CRG one (upper bound for t_0 ; 0.15% error in $(dt_0/dp)_{p=1}$); see the numbers within the heavy line in Table 3a. The maximum discrepancy (in t_0) between the GT and (s,3)-CRG curves occurs at $p \approx 0.45$ and is close to 0.002 (which implies in a percentual discrepancy of 0.27%)

IV. HONEYCOMB LATTICE BOND-DILUTED ISING MODEL

IV.1. Graph Method

For the honeycomb lattice, the distribution law $P(t)$ (eqs.3) is now associated with each bond of the i -terminal Y -clusters ($i = 2, 2D$ or 3) and its dual $P^D(t)$ is associated with each bond of the corresponding Δ -clusters (i.e., substitute τ^D by $P(t)$ and τ by $P^D(t)$ in Figs (a), (b) and (c) of Table 1). Following the same procedure and notation of sub-section III-1, we obtain the equivalent transmissivity distributions associated with the graphs shown in Figs. (a), (b) and (c) of Table 1:

$$P_{\Delta}^{(2)}(t) \equiv P_{\Delta}^{(2)} [P^D(t;p,t_0)] = p^3 \delta \left[t - \frac{t_0^D + t_0^{D^2}}{1 + (t_0^D)^3} \right] + 2p^2(1-p) \delta \left[t - \frac{2t_0^D}{1 + (t_0^D)^2} \right] +$$

$$+ \left\{ 1 - [p^3 + 2p^2(1-p)] \right\} \delta(t-1) \quad (12a)$$

$$P_Y^{(2)}(t) \equiv P_Y^{(2)} [P(t;p,t_0)] = p^2 \delta(t-t_0^2) + (1-p^2) \delta(t) \quad (12b)$$

$$P_Y^{(2D)}(t) \equiv P_Y^{(2D)} [P(t;p,t_0)] = [P_\Delta^{(2)}(t)]^D = p^3 \delta \left[t - \frac{2t_0^2}{1+t_0^2} \right] + 2p^2(1-p) \delta(t-t_0^2) \\ + \left\{ 1 - [p^3 + 2p^2(1-p)] \right\} \delta(t) \quad (12c)$$

$$P_\Delta^{(2D)}(t) \equiv P_\Delta^{(2D)} [P^D(t;p,t_0)] = [P_Y^{(2)}(t)]^D = p^2 \delta \left[t - \frac{2t_0^D}{1+(t_0^D)^2} \right] \\ + [2p(1-p) + (1-p)^2] \delta(t-1) \quad (12d)$$

$$P_\Delta^{(3)}(t) \equiv P_\Delta^{(3)} [P^D(t;p,t_0)] = p^3 \delta \left[t - \frac{3(t_0^D)^2 - (t_0^D)^3}{1+(t_0^D)^3} \right] + 3p^2(1-p) \delta \left[t - \frac{2t_0^D}{1+(t_0^D)^2} \right] \\ + \left\{ 1 - [p^3 + 3p^2(1-p)] \right\} \delta(t-1) \quad (12e)$$

$$P_Y^{(3)}(t) \equiv P_Y^{(3)} [P(t;p,t_0)] = p^3 \delta(t-t_0^3) + (1-p^3) \delta(t) \quad (12f)$$

Using these distributions we construct, similarly to the previous section, twelve RG's which renormalize $P_Y^{(i)}(t)$ into $P_\Delta^{(i)}(t) \equiv P_\Delta^{(i)} [P^D(t;p',t_0^D)]$ ($i = 2, 2D$ or 3).

IV.2. Dual-type Canonical Renormalization Groups (CRG)

Similarly to subsection (III-2), each (r,i) -CRG ($r = t,s$; $i = 2, 2D, 3$) is defined by the following system of equations:

$$\langle r \rangle_{P_Y^{(i)}} \equiv \bar{h}_r^{(i)}(p,t_0) = \langle r \rangle_{P_\Delta^{(i)}} \equiv \bar{f}_r^{(i)}(p',t_0^D) \quad (13a)$$

$$\langle r^2 \rangle_{p_Y(i)} \equiv \bar{k}_r^{(i)}(p, t_0) = \langle r^2 \rangle_{p'_\Delta(i)} \equiv \bar{g}_r^{(i)}(p', t_0^D) \quad (13b)$$

(r = t, s; i = 2, 2D, 3)

The flow lines associated with these equations lead to five distinct CF's (since the (s,2) and (s,2D) ones are numerically identical as it was the case for the triangular lattice) which differ so little among them (less than 0.8% in the t_0 -variable) that they are represented, within the scale of Fig. (2a) (or (2b)), by one and the same curve (H); their derivatives at the exact pure points $(1, t_c^Y)$ and $(p_c^Y, 1)$ and a few points of the approximate CF's are respectively reported in Tables (2b) and (3b).

Since relations (9) and (10) are still valid ditto with $\Delta \not\approx Y$, all their consequences (mentioned in subsection (III-2)) still hold. Taking into account that the pure case equations for the honeycomb lattice can be obtained from the corresponding ones for the triangular lattice by simply replacing $\tau \not\approx \tau^D$ ($\tau=p, t_0$), one can easily show that $\lambda_p^{(i)\Delta} \lambda_p^{(i)Y} = \lambda_t^{(i)\Delta} \lambda_t^{(i)Y} = 1$ ($i = 2, 2D, 3$) (see Table 4 for numerical values of the λ 's). The senses of flow along each (r,i)-CRG approximation for the CF, as well as the spurious fixed points (see Table 2b) which appear in the three (s,i)-CRG's ($i = 2, 2D, 3$) are physically meaningless (due to the fact that $b = 1$). At first glance, it might strike the fact that the topology of the set of CF's (e.g., the number of intersections among them and the number of fixed points) associated to the honeycomb lattice is different from that of the triangular lattice (compare Tables 3a and 3b). This is due to the fact that we are considering a restricted problem (bond-di-

luted instead of bond-mixed): the overall symmetry should appear if we had assumed $P(t) = (1-p)\delta(t-t_1) + p\delta(t-t_0)$ instead of eq. (3a).

IV.3. Dual-type Parametric Renormalization Groups (PRG)

Similarly to sub-section (III-3), we obtain the (r,i) -PRG ($r = t,s; i = 2,2D,3$) CF's through the line of fixed points associated with transformation (13a). In the case of $r = s$, it leads, as before, to the same equation for all three (s,i) -PRG ($i = 2,2D,3$) CF's, namely

$$3p^2(1-p)\ln(1+t_0^2) + p^3\ln(1+3t_0^2) - \ln 2 = 0 \quad (14)$$

which provides the exact derivative $(dt_0/dp)_{p=p_c}$ (eqs. (14) is an excellent and simple analytic approximation for the CF). The PRG approximate CF's are very close among them (the discrepancy in t_0 being inferior to 0.41%) and are represented by the curve (H) shown in Fig. (2a) (or (2b)); the main results and some intermediate points are respectively reported in Tables 2b and 3b.

IV.4. Comparisons

In the GT approximation for the CF, the extreme points and the derivative $(dt_0/dp)_{p=1}$ are exact. We have calculated, in

the GT approximation, the other derivative and have obtained $-(dt_0/dp)_{p=p_c^Y} = 6(2-p_c^Y)/[p_c^Y(9-5p_c^Y)] \approx 2.1590$ (see Table 2b). For comparison, we have also calculated (Table 3b) a few points of their CF.

Similarly to the triangular case, all the CF's (CRG's, PRG's and GT approximations) differ very little one from the other (less than 1.3% in the t_0 variable) and their graphical representations reduce to one and the same curve (H) within the scales of Figs. (2a) and (2b). In all s-RG's, the value of $(dt_0/dp)_{p=p_c^Y}$ is the exact one (see Table 2b). Here again (as in section III), the values of t_0 , for any fixed p , along the PRG CF's are a little higher than along the CRG ones. The analysis of the extreme derivatives (Table 2b) suggests that the unknown exact CF lies between the (s,2)-CRG curve (upper bound for t_0 ; 0.96% error in $(dt_0/dp)_{p=1}$) and a curve (lower bound for t_0 ; no error in the pure cases derivatives) which is made, for $p_c^Y \leq p \lesssim 0.90$, by the (s,3)-CRG one and, for $0.90 \lesssim p < 1$, by the GT one (see the region of Table 3b delimited by a heavy line). The maximum discrepancy in t_0 between the upper and lower bounds occurs at $p \approx 0.90$ and its value is close to 0.001 (which implies a percentual discrepancy of 0.14%).

V. CONCLUSION

We exhibit that the duality and star-triangle transformations, which enable the calculation of the exact pure Ising and bond percolation critical points, can be formulated within an unified

graph framework (it is possible to simultaneously obtain both exact critical points by using a single star-triangle pair of graphs, and we have herein illustrated this statement through 3 different such pairs). This fact allowed us to construct, within a real space renormalization group framework, 12 different procedures to calculate the critical frontiers associated with the quenched bond-diluted spin-1/2 first-neighbour interaction ferromagnetic Ising model on triangular and honeycomb lattices. We obtained 9 different accurate approximate critical frontiers (which differ, in the t_0 variable, by less than 2%) for the triangular lattice, and another 9 different approximate critical frontiers (which differ, in the t_0 variable, by less than 1.3%) for the honeycomb lattice. All these critical frontiers contain the exact pure Ising and bond percolation critical points as well as the exact or almost exact derivatives (in the p - t_0 space) at both pure limits.

On analytical grounds we propose for both lattices excellent and simple approximate critical frontiers, both exact in what concerns the derivative $(dt_0/dp)_{p=p_c}$. The triangular lattice proposal (eq. 11) provides a 0.40% error in the derivative $(dt_0/dp)_{p=1}$ and a maximum error (in $p \approx 0.45$) estimated to be about 0.31% in the t_0 variable. The honeycomb lattice proposal (Eq. 14) provides a 1.4% error in the derivative $(dt_0/dp)_{p=1}$, and a maximum error (in $p \approx 0.90$) estimated to be about 0.14% in the t_0 -variable.

On numerical grounds, it has been possible to obtain even more precise approximations. The unknown exact critical frontier for the triangular lattice very probably lies between the pre

sent (s,3)-CRG approximation (exact $(dt_0/dp)_{p=p_c^\Delta}$ and 0.15% error in $(dt_0/dp)_{p=1}$) and Guilmin and Turban (1980) "three-bonds" approximation (exact $(dt_0/dp)_{p=1}$ and 2% error in $(dt_0/dp)_{p=p_c^\Delta}$); their highest discrepancy achieves 0.27% at $p \approx 0.45$. The bounds for the honeycomb lattice critical frontier are the present (s,2)-CRG approximation (exact $(dt_0/dp)_{p=p_c^Y}$ and 0.96% error in $(dt_0/dp)_{p=1}$) and a curve which, for $p_c^Y \leq p \leq 0.90$, coincides with the present (s,3)-CRG approximation (exact $(dt_0/dp)_{p=p_c^Y}$) and, for $0.90 \leq p \leq 1$, coincides with Guilmin and Turban (1980) "three-bonds" approximation (exact $(dt_0/dp)_{p=1}$); their biggest discrepancy achieves 0.14% at $p \approx 0.90$. To the best of our knowledge, the present bounds for the unknown exact critical frontiers for the triangular and honeycomb lattices are the tightest available in the literature; therefore the real space renormalization group methods can be extremely efficient in what concerns critical frontiers whenever convenient lattice symmetries (and transformations) can be introduced.

ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge L. Turban for communicating to us unpublished details concerning the paper Guilmin and Turban 1980.

REFERENCES

- Alcaraz FC and Tsallis C, 1982, J. Phys. A: Math. Gen. 15, 587-98
- Bergstresser TK, 1977, J. Phys. C: Solid St. Phys. 10, 3B31-49
- Bidaux R, Carton JP and Sarma G, 1976, J. Phys. A: Math. Gen 9, L87-91
- Chao NC, Schwachheim G and Tsallis C, 1981, Z. Phys. B43, 305-13
- Ditzian RV and Kadanoff LP, 1979, Phys. Rev. B19, 4631-45
- Domany E, 1978, J. Phys. C: Solid St. Phys. 11, L337-42
- Domb C, 1960, Adv. Phys. 9, 149-361
- Guilmin P and Turban L, 1980, J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, 4077-89
- Harris AB, 1974, J. Phys. C: Solid St. Phys. 7, 1671-92
- Harris AB, 1976, J. Phys. C: Solid St. Phys. 9, 2515-B
- Jayaprakash C, Riedel EK and Wortis M, 1978, Phys. Rev. B18, 2244-55
- Kasteleyn PW and Fortuin CM, 1969, J. Phys. Soc. Japan Suppl. 26, 11-4
- Kinzel W and Domany E, 1981, Phys. Rev. B23, 3421-34
- Kramers HA and Wannier GH, 1941, Phys. Rev. 60, 252-62
- Lage EJS, 1977, J. Phys. C: Solid St. Phys. 10, 701-18
- Levy SVF, Tsallis C and Curado EMF, 1980, Phys. Rev. B21, 2991-B
- Magalhães ACN de, Tsallis C and Schwachheim G, 1981, J. Phys. C: Solid St. Phys. 14, 1393-408
- Magalhães ACN de and Tsallis C, 1981, J. Physique 42, 1515-23
- Magalhães ACN de, Tsallis C. and Schwachheim G, 1982, to be published
- Nelson DR and Fisher ME, 1975, Ann. Phys. 91, 226-74
- Oguchi T and Ueno Y, 1978, J. Phys. Soc. Japan 44, 1449-54
- Ono I and Matsuoka Y, 1976, J. Phys. Soc. Japan 41, 1425-6
- Onsager L, 1944, Phys. Rev. 65, 117-49
- Rappaport DC, 1972, J. Phys. C: Solid St. Phys. 5, 1830-58; J. Phys. C: Solid St. Phys. 5, 2B13-26
- Sarbach S, 1980, J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, 5033-57; J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, 5059-70

- Southern BW and Thorpe Mf, 1979, J. Phys. C: Solid St. Phys. 12, 5351-60
- Sykes MF and Essam JW, 1963, Phys. Rev. Lett. 10, 3-4
- Tatsumi T and Kawasaki K, 1976, Prog. Theor. Phys. 55, 612-5
- Tsallis C, 1981 a, J. Phys. C: Solid St. Phys. 14, L85-91
- 1981b, Kinam/Revista de Física (Mexico) 3, 79-118
- 1982, to be published
- Tsallis C, Fittipaldi IP and Sarmento EF, 1982, to be published
- Tsallis C and Levy SVF, 1980, J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, 465-70
- 1981, Phys. Rev. Lett. 47, 950-3
- Tsallis C and Magalhães ACN de, 1981, J. Physique Lett. 42, L227-31
- Turban L, 1980, Phys. Lett. 75A, 307-10
- Wannier GH, 1945, Rev. Mod. Phys. 17, 50-60
- Yeomans JM and Stinchcombe RB, 1979, J. Phys. C: Solid St. Phys. 12, 347-60
- Young AP and Stinchcombe RB, 1976, J. Phys. C: Solid St. Phys. 9, 4419-31
- Zobin D, 1978, Phys. Rev. B18, 2387-90

CAPTIONS FOR FIGURES AND TABLES

Fig. 1 Illustration of the star-triangle overlapping of the triangular and honeycomb lattices in a cluster of linear size $B = 2$.

Fig. 2 Full curves represent the para (P) - ferro (F) magnetic critical frontiers for the bond-diluted Ising model on the triangular (T) and the honeycomb (H) lattices obtained through (r,i) -CRG or (r,i) -PRG ($r=t,s; i=2,2D,3$) or through the three-bonds approximation of Guilmin and Turban (1980) (all these curves are indistinguishable within the present scales); broken curves represent rigorous upper and lower bounds (Bergstresser 1977). (a) $p - t_0$ space; (b) $p - T$ space.

TABLE 1 Three graph representations of the star-triangle (ST) and duality (D) transformations for the pure Ising and pure bond percolation models on the triangular lattice. The solid (open) circles denote the internal sites (terminal sites) (see, for example, Tsallis and Levy 1981). (a) pair of two-terminal ($i=2$) clusters and their corresponding graphs; (b) two-terminal graphs ($i=2D$) obtained by application of duality on the graphs shown in item (a); (c) three-terminal graphs (or clusters) ($i=3$). $G_{\tau}^{(i)}(\tau)$ and $G_Y^{(i)}(\tau)$ ($\tau=t_0$ or $p; i=2,2D$ or 3) stand for the equivalent transmissivities ($\tau=t_0$) or probabilities ($\tau=p$) between the terminal sites of the corresponding i -terminal ($i=2,2D$ or 3) graphs. The exact

critical points of the pure Ising ($t_0^\Delta = 2 - \sqrt{3}$) and the pure bond percolation ($p^\Delta = 2\sin\pi/18$) models on the triangular lattice are roots of Eqs. (d)-(j). Eq. (j) also appears in Tsallis 1981b; eqs. (j) and (f) are particular cases ($q=1,2; t_1=t_2=t_3$) of the anisotropic Potts critical frontier considered by Tsallis and Levy (1981). A similar table holds for the honeycomb lattice ditto with $\tau \rightleftharpoons \tau^D$ ($\tau=p, t_0$) and $\Delta \rightleftharpoons Y$; therefore, the exact critical points of the pure Ising ($t_c^Y = (t_0^\Delta)^D = 1/\sqrt{3}$) and the pure bond percolation ($p^Y = (p^\Delta)^D = 1 - 2\sin\pi/18$) models on the honeycomb lattice are roots of the corresponding equations of the referred table.

TABLE 2 Main derivatives associated with the present RG's and with the three-bonds approximations of Guilmin and Turban (1980) (GT), as well as the exact ones (Southern and Thorpe 1979) for the Ising model on the triangular (a) and honeycomb (b) lattices. All of these approximations contain the exact critical points in the pure Ising and bond percolation limits. The numerical values for $-(dt_0/dp)_{p=p_c}$ decrease monotonically from the top to the last row. (*) indicates that the sense of the flow is from the percolation fixed point to the Ising fixed point while (**) indicates that the flow has a reserved sense; in the case of the honeycomb lattices appears a spurious fixed point ($(p, t_0) \approx (0.705, 0.900)$)

in the (s,2) and (s,2D)-CRG's and (0.707, 0.897) in the (s,3)-CRG) in the mid-region of the critical line which is unstable (+) or stable (++) along the critical line.

TABLE 3 Critical transmissivities (t_0) (for selected values of p) obtained through the present RG's and through the three-bonds approximation of Guilmin and Turban(1980) (GT) associated with the triangular (a) and honeycomb (b) lattices. Some of these approximations present intersections (p_{int}) in the mid-region: in (a) there is only one such point $p_{int} \approx 0.45$ originated from the last two PRG's, while in (b) there are six intersection points, for example, the (s,3)-CRG curve intersects both GT and (t,2D)-CRG curves in $p_{int} \approx 0.90$ and 0.94. respectively. The sequence of approximations are ordered, from the top to the bottom, according to the increasing values of t_0 for a fixed $p \in [p_c, p_{int}]$; (...) denotes an exact value. The values of t_0 , for fixed p , corresponding to the unknown exact critical frontier very probably lie between the ones enclosed by a heavy line.

TABLE 4 Approximate eigenvalues of the Jacobian matrix calculated in the (t or s,i)-CRG approximations (i=2,2D,3) for the triangular (Δ) and honeycomb (Y) lattices. $\lambda_p^{(i)}$ and $\lambda_t^{(i)}$ are respectively associated with the horizontal eigenvector at $(p_c, 1)$ and with the vertical

eigenvector at $(1, t_c)$. Observe that $\lambda_p^{(2D)} = [\lambda_p^{(2)}]^{-1}$ and $\lambda_t^{(2D)} = [\lambda_t^{(2)}]^{-1}$ for both lattices (these facts follow from the property $\langle s \rangle_p = 1 - \langle s \rangle_{pD}$).

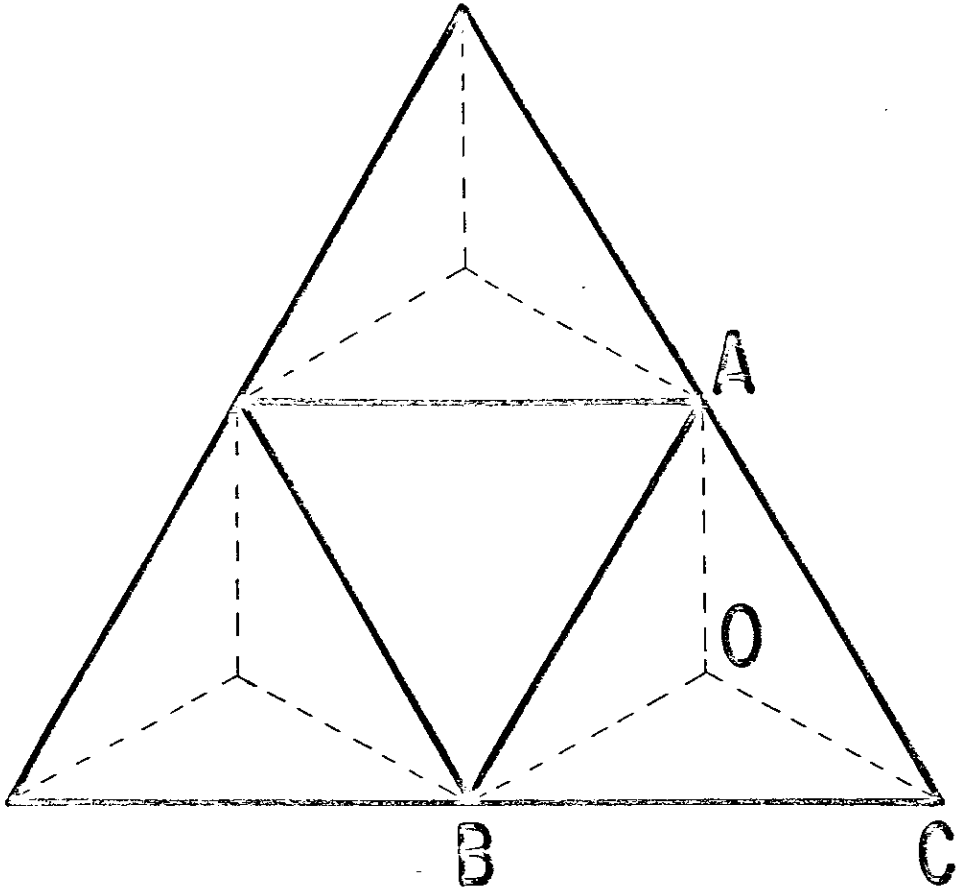


FIG.1

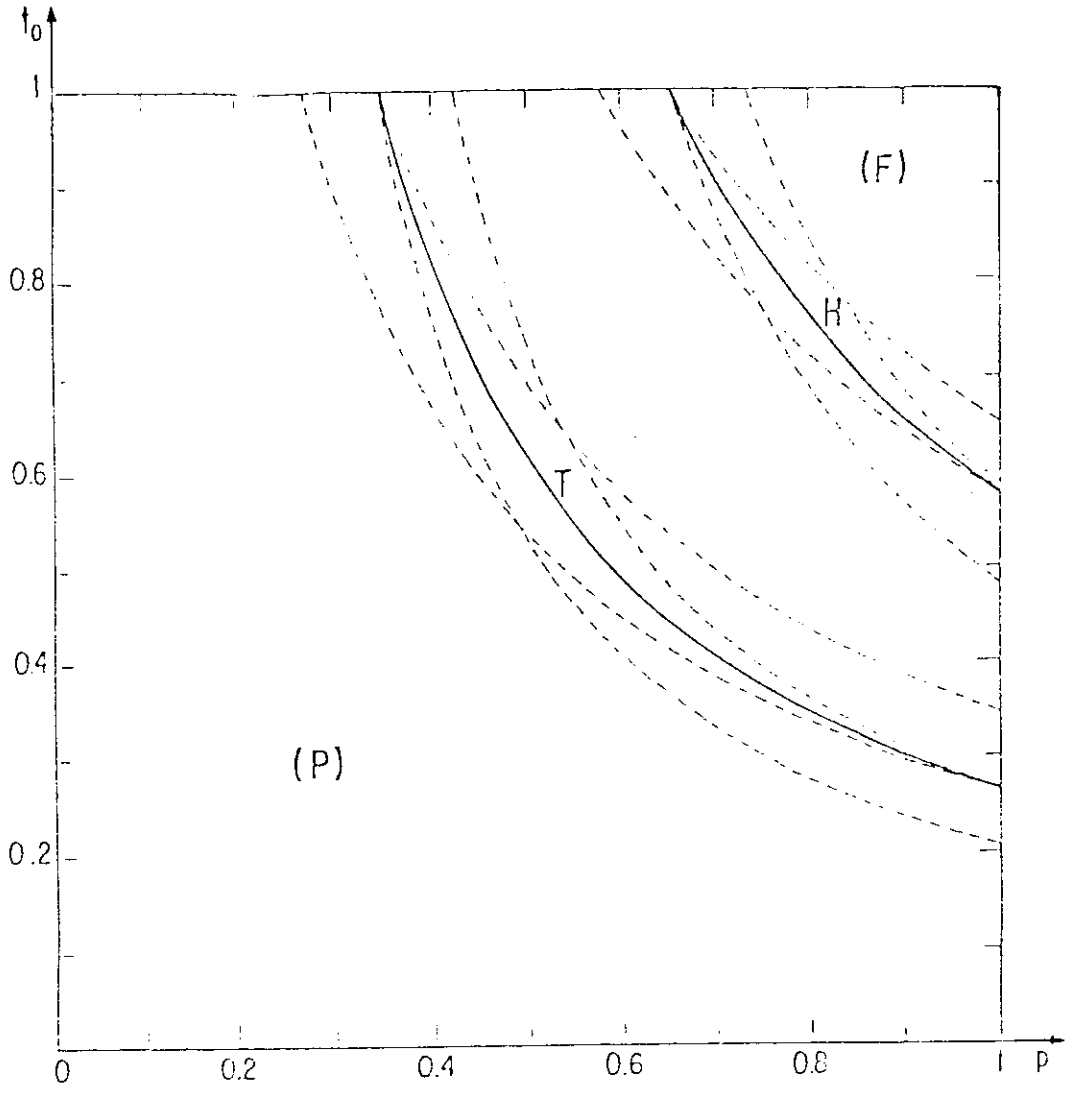


FIG. 2a

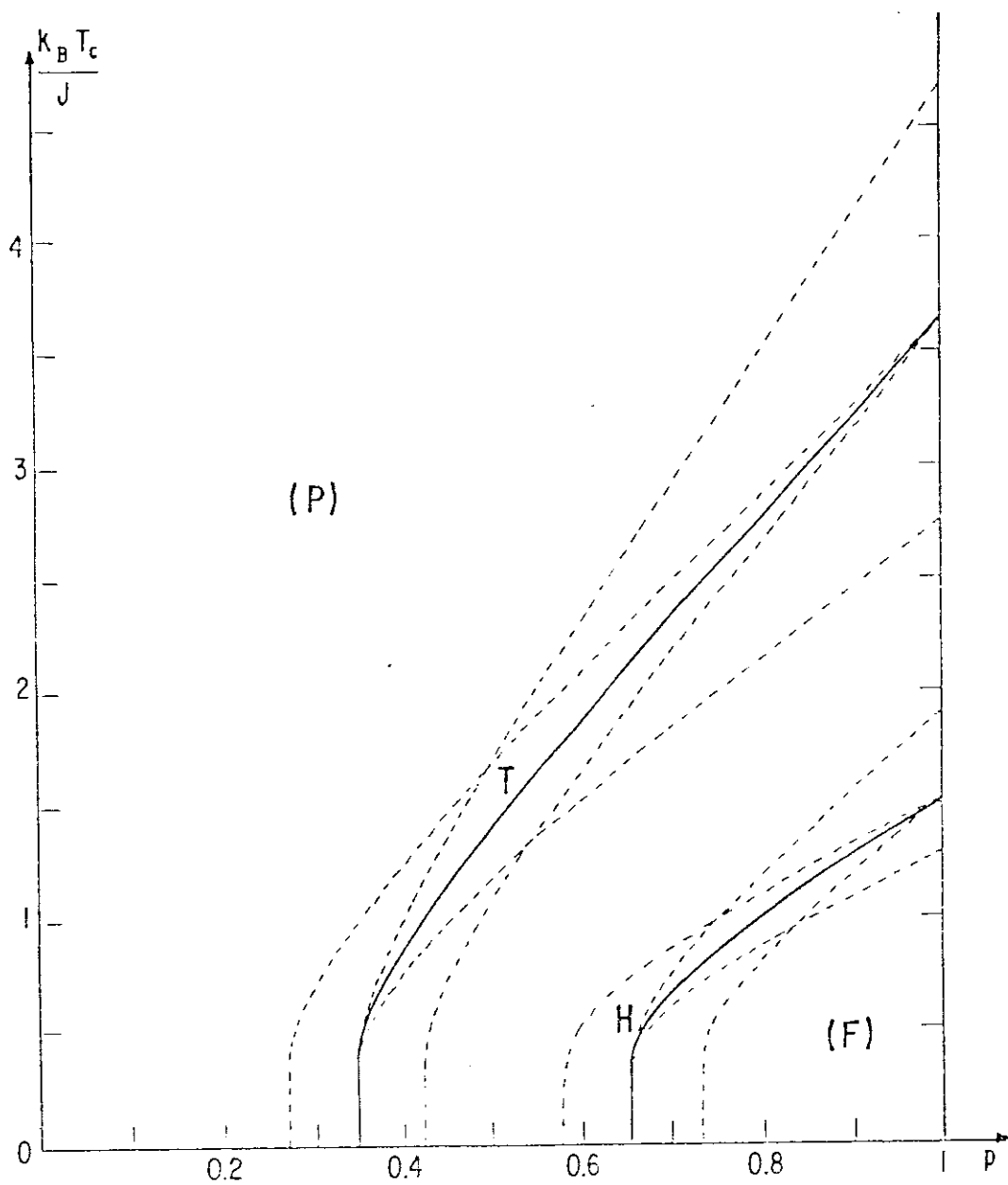


FIG. 2b

TABLE 1

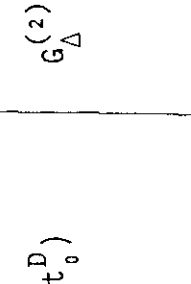
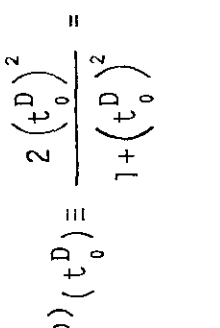
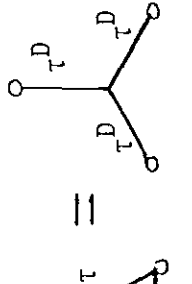
i	ST-D graph transformations	$\tau = t_0$	$\tau = p$
2	 <p>(a)</p>	$G_{\Delta}^{(2)}(t_0) \equiv \frac{t + t_0}{1 + t_0^3} = (t_0^D)^2 \equiv G_{\Delta}^{(2)}(t_0^D)$ <p>(d)</p>	$G_{\Delta}^{(2)}(p) \equiv p + p^2 - p^3 = (p^D)^2 \equiv G_{\Delta}^{(2)}(p^D)$ <p>(g)</p>
2D	 <p>(b)</p>	$G_{\Delta}^{(2D)}(t_0^D) \equiv \frac{2(t_0^D)^2}{1 + (t_0^D)^2} = \frac{2t_0 \equiv G_{\Delta}^{(2D)}(t_0)}{1 + t_0^2}$ <p>(e)</p>	$G_{\Delta}^{(2D)}(p^D) \equiv 2(p^D)^2 - (p^D)^3 = 2p - p^2 \equiv G_{\Delta}^{(2D)}(p)$ <p>(h)</p>
3	 <p>(c)</p>	$G_{\Delta}^{(3)}(t_0) \equiv \frac{3t_0^2 - t_0^3}{1 + t_0^3} = (t_0^D)^3 \equiv G_{\Delta}^{(3)}(t_0^D)$ <p>(f)</p>	$G_{\Delta}^{(3)}(p) \equiv 3p^2 - 2p^3 = (p^D)^3 \equiv G_{\Delta}^{(3)}(p^D)$ <p>(j)</p>

TABLE 2a

method	$-\frac{dt_0}{dp} \Big _{p=p_c^\Delta} = 2 \frac{d}{dp} e^{-2\beta J} \Big _{p=p_c^\Delta}$	$-\frac{dt_0}{dp} \Big _{p=1}$	$\frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \Big _{p=1}$
(t,2)-CRG(*)	4.3191	0.2993	1.1739
(t,3)-CRG(*)	4.3191	0.3003	1.1779
(t,2D)-CRG(*)	4.3191	0.3021	1.1849
GT	4.0725	$6(30-17\sqrt{3})/11 \approx 0.3028$	$12(3\sqrt{3}-4)/11 \ln 3 \approx 1.1878$
exact	$2 \ln 2 / p_c^\Delta \approx 3.9917$	$6(30-17\sqrt{3})/11 \approx 0.3028$	$12(3\sqrt{3}-4)/11 \ln 3 \approx 1.1878$
(s,3)-CRG(*)	$2 \ln 2 / p_c^\Delta \approx 3.9917$	0.3032	1.1895
{ (s,2)-CRG(*) (s,2D)-CRG(**)	$2 \ln 2 / p_c^\Delta \approx 3.9917$	0.3037	1.1914
(s,i)-PRG (i = 2,2D,3)	$2 \ln 2 / p_c^\Delta \approx 3.9917$	0.3040	1.1925
(t,2D)-PRG	3.8525	0.3047	1.1952
(t,2)-PRG	3.8260	0.3064	1.2020
(t,3)-PRG	3.7998	0.3054	1.1978

TABLE 2b

method	$-\frac{dt_0}{dp} \Big _{p=p_c^Y} = 2 \frac{d}{dp} e^{-2\beta J} \Big _{p=p_c^Y}$	$-\frac{dt_0}{dp} \Big _{p=1}$	$\frac{1}{T_c} \frac{dT_c}{dp} \Big _{p=1}$
(t,2)-CRG(*)	2.2981	0.6662	1.5175
(t,3)-CRG(*)	2.2981	0.6623	1.5088
(t,2D)-CRG(*)	2.2981	0.6902	1.5722
GT	2.1590	$2\sqrt{3}/5 \approx 0.6928$	$6\sqrt{3}/[5 \ln(2+\sqrt{3})] \approx 1.5782$
(s,3)-CRG(†)	$2 \ln 2/p_c^Y \approx 2.1239$	0.6839	1.5579
exact	$2 \ln 2/p_c^Y \approx 2.1239$	$2\sqrt{3}/5 \approx 0.6928$	$6\sqrt{3}/[5 \ln(2+\sqrt{3})] \approx 1.5782$
$\left\{ \begin{array}{l} (s,2)-CRG(†) \\ (s,2D)-CRG(††) \end{array} \right.$	$2 \ln 2/p_c^Y \approx 2.1239$	0.6995	1.5934
(s,i)-PRG (i = 2,2D,3)	$2 \ln 2/p_c^Y \approx 2.1239$	0.7023	1.5992
(t,3)-PRG	2.0642	0.7263	1.6544
(t,2)-PRG	2.0499	0.7217	1.6440
(t,2D)-PRG	2.0358	0.7057	1.6075

TABLE 3a

method \ p	0.3473...	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
(t,2)-CRG	1	0.8160	0.6075	0.4845	0.4030	0.3450	0.3016	0.2679...
(t,3)-CRG	1	0.8161	0.6082	0.4853	0.4035	0.3453	0.3018	0.2679...
(t,2D)-CRG	1	0.8170	0.6100	0.4867	0.4046	0.3459	0.3020	0.2679...
GT	1	0.8225	0.6135	0.4883	0.4052	0.3461	0.3021	0.2679...
(s,3)-CRG	1	0.8245	0.6150	0.4891	0.4056	0.3463	0.3021	0.2679...
(s,i)-CRG (i = 2,2D)	1	0.8246	0.6152	0.4893	0.4057	0.3464	0.3021	0.2679...
(s,i)-PRG (i = 2,2D,3)	1	0.8246	0.6154	0.4894	0.4058	0.3465	0.3022	0.2679...
(t,2D)-PRG	1	0.8230	0.6180	0.4908	0.4065	0.3468	0.3023	0.2679...
(t,2)-PRG	1	0.8239	0.6192	0.4918	0.4072	0.3472	0.3025	0.2679...
(t,3)-PRG	1	0.8233	0.6188	0.4912	0.4068	0.3469	0.3024	0.2679...

TABLE 3b

method \ p		0.6527...	0.70	0.75	0.80	0.85	0.90	0.95	1.0
(t,2)-CRG	1	0.9035	0.8226	0.7563	0.7007	0.6536	0.6128	0.5773...	
(t,3)-CRG	1	0.9040	0.8231	0.7567	0.7010	0.6535	0.6126	0.5773...	
(t,2D)-CRG	1	0.9042	0.8241	0.7586	0.7033	0.6556	0.6140	0.5773...	
GT	1	0.9078	0.8278	0.7612	0.7048	0.6563	0.6143	0.5773...	
(s,3)-CRG	1	0.9088	0.8292	0.7622	0.7052	0.6562	0.6140	0.5773...	
(s,i)-CRG (i = 2,2D)	1	0.9089	0.8293	0.7626	0.7058	0.6571	0.6146	0.5773...	
(s,i)-PRG (i = 2,2D,3)	1	0.9089	0.8294	0.7627	0.7061	0.6572	0.6147	0.5773...	
(t,3)-PRG	1	0.9109	0.8322	0.7658	0.7088	0.6593	0.6158	0.5773...	
(t,2)-PRG	1	0.9113	0.8325	0.7659	0.7087	0.6591	0.6157	0.5773...	
(t,2D)-PRG	1	0.9113	0.8320	0.7648	0.7074	0.6579	0.6150	0.5773	

TABLE 4

method	$\lambda_p^{(i)\Delta} = [\lambda_p^{(i)Y}]^{-1} (t_0=1)$	$\lambda_t^{(i)\Delta} = [\lambda_t^{(i)Y}]^{-1} (p=1)$
(r,2)-CRG (r = t,s)	-1.021	-1
(r,2D)-CRG (r = t,s)	$(-1.021)^{-1} \approx -0.979$	-1
(r,3)-CRG (r = t,s)	-1.064	-1.065

APÊNDICE F

GENERALIZAÇÃO DA TRANSFORMAÇÃO TRIÂNGULO-ESTRELA PARA FERROMAGNETOS DE POTTS PUROS NUM CONTEXTO DE GRAFOS

A generalização dos procedimentos utilizados no Capítulo 6 para ferromagnetos de Potts com q estados na rede triangular consiste, no caso particular de modelos puros ($p=1$), em:

- i) associar a cada ligação do "cluster" de tamanho linear b do tipo $\Delta^{(i)}$ com i terminais a transmissividade $t_0^{(q)}$ (vide eq. (5.2.1));
- ii) associar a cada ligação do "cluster" correspondente do tipo $\Upsilon^{(i)}$ a transmissividade dual $[t_0^{(q)}]^{-D}$ (vide eq. (5.2.4));
- iii) calcular as transmissividades equivalentes (através do método corte-colapso⁽²⁶⁶⁾) $G_{\Delta}^{(i)} [t_0^{(q)}]$ e $G_{\Upsilon}^{(i)} \{ [t_0^{(q)}]^{-D} \}$ dos grafos do tipo $\Delta^{(i)}$ e $\Upsilon^{(i)}$ respectivamente;
- iv) construir um grupo de renormalização do tipo dual que renormaliza um "cluster" do tipo $\Delta^{(i)}$ no "cluster" correspondente do tipo $\Upsilon^{(i)}$, ou seja

$$G_{\Upsilon}^{(i)} \left\{ [t_0^{(q)}]^{-D} \right\} = G_{\Delta}^{(i)} \left\{ t_0^{(q)} \right\} \quad . \quad (F.1)$$

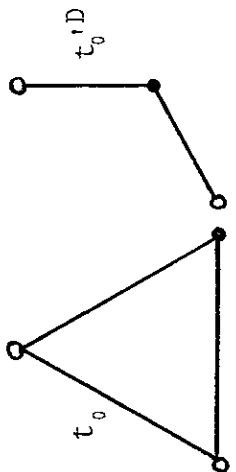
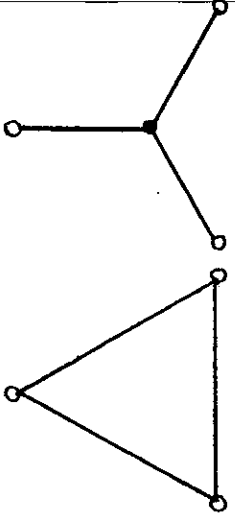
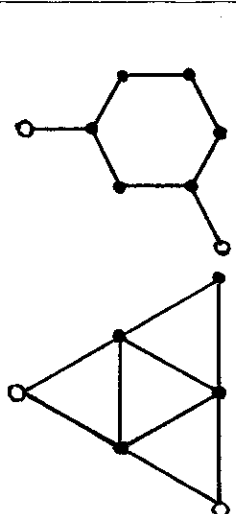
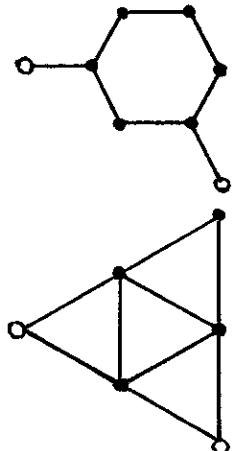
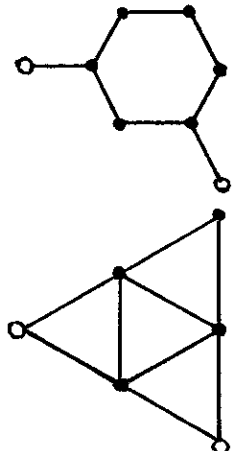
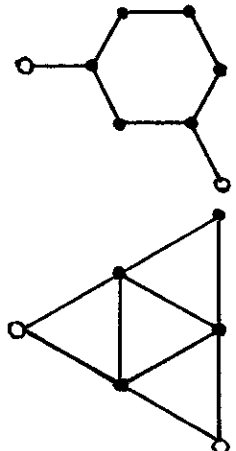
Verificamos que o ponto fixo $t_0^{*(q)}$ da transformação (F.1), *qualquer* que seja o par de grafos do tipo $\Delta^{(i)} - \Upsilon^{(i)}$

e para todos valores de q ($q \leq 4$), coincide com o resultado exato (ou pretendido como exato) $t_c^{\Delta(q)}$ dado pela expressão (5.3.3.2.4). Conseqüentemente, os valores das transmissividades $G_{\Delta}^{(i)}\{t_0(q)\}$ e $G'_{\Upsilon}^{(i)}\{[t_0'(q)]^D\}$ calculados no ponto fixo $t_0^*(q) = t_c^{\Delta(q)}$ são iguais para cada valor de $q \leq 4$ para um dado par de grafos $\Delta^{(i)} - \Upsilon^{(i)}$ (cf. Tab. F.1). Uma análise da Tabela F.1 mostra que esses valores das transmissividades são diferentes para dois pares quaisquer $\Delta^{(i)} - \Upsilon^{(i)}$ distintos (pelo menos para os 21 pares considerados). Portanto não é possível, para os "clusters" examinados, construirmos um grupo de renormalização do tipo dual com um fator de expansão linear b/b' maior do que 1, e conseqüentemente, não podemos calcular expoentes críticos (tal como ocorreu no Capítulo 6). Coerentemente com este fato esperamos, similarmente aos casos $q=1$ e $q=2$, que $\lambda^{(i)}(q)$ definido por

$$\lambda^{(i)}(q) \equiv \left. \frac{dt_0'}{dt_0} \right|_{t_0^* = t_c^{\Delta(q)}} = \frac{\left. \frac{dG_{\Delta}^{(i)}}{dt_0} \right|_{t_0^* = t_c^{\Delta(q)}}}{\left. \frac{dG'_{\Upsilon}^{(i)}}{dt_0'} \right|_{t_0^* = t_c^{\Delta(q)}}} \quad (F.2)$$

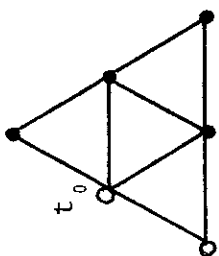
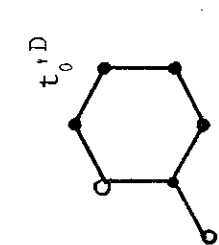
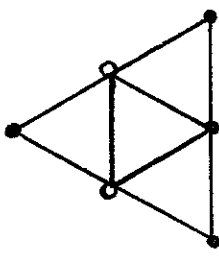
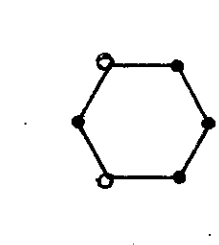
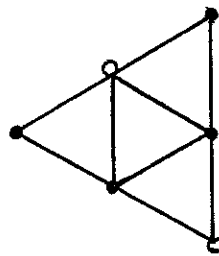
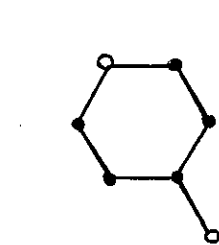
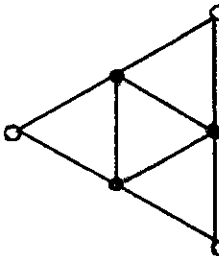
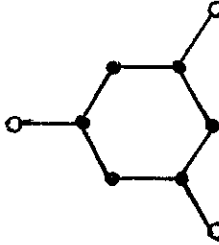
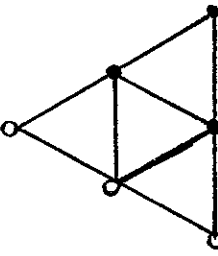
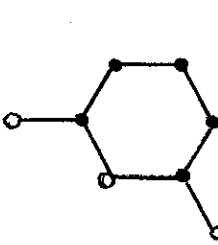
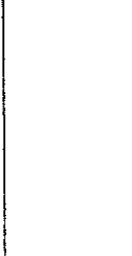

convirja em módulo para o valor 1 no limite $b \rightarrow \infty$ ($\forall i; \forall q \leq 4$) (observe que $\lambda^{(i)}(1) = \lambda_p^{(i)}$ e $\lambda^{(i)}(2) = \lambda_t^{(i)}$; vide Capítulo 6). Efetivamente podemos ver da Tab. F.1 que as tendências (i), (iii) e (iv) mencionadas na Subseção 6.3.2 continuam válidas para $q = 3$ e 4, corroborando com as nossas expectativas.

Tabela F.1 - Valores de $\lambda^{(i)}(q)$ (definido em (F.2)) (parte inferior de cada linha) e das transmissividades equivalentes $G^{(i)}(t_c^{\Delta}(q))$ (parte superior de cada linha) calculadas nos pontos críticos exatos $t_c^{\Delta}(q)$ do modelo de Potts ferromagnético puro para rede triangular, valores estes associados a vários pares de grafos do tipo $\Delta^{(i)} - \Upsilon^{(i)}$ (b caracteriza a dimensão linear da célula correspondente; i representa o número de terminais do grafo).

b	i	Pares de grafos do tipo $\Delta^{(i)} - \Upsilon^{(i)}$	$G^{(i)}(t_c^{\Delta}(1))$ $-\lambda^{(i)}(1)$	$G^{(i)}(t_c^{\Delta}(2))$ $-\lambda^{(i)}(2)$	$G^{(i)}(t_c^{\Delta}(3))$ $-\lambda^{(i)}(3)$	$G^{(i)}(t_c^{\Delta}(4))$ $-\lambda^{(i)}(4)$
1	2		0.4260	0.3333	0.2831	0.2500
2	1		1.0209	1	0.9829	0.9687
1	3		0.2781	0.1924	0.1506	0.1250
2	2		1.0642	1.0654	1.0642	1.0625
2	2		0.2259	0.1429	0.1045	0.08209
	2		1.0117	1	0.9895	0.9802

(continua)

Tab. F.1 (continuação)

2			0.4529	0.3571	0.3041	0.2687
2			1.0141	1	0.9871	0.9758
2			0.5302	0.4286	0.3692	0.3284
2			1.0209	1	0.9829	0.9688
2			0.3125	0.2143	0.1649	0.1343
2			1.0150	1	0.9873	0.9764
2			0.1084	0.05499	0.03465	0.02425
3			1.0253	1.0225	1.0191	1.0159
2			0.2165	0.1365	0.09978	0.07836
3			1.0165	1.0058	0.9917	0.9866

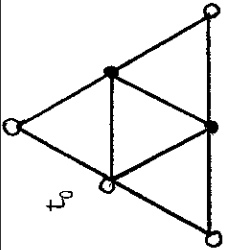
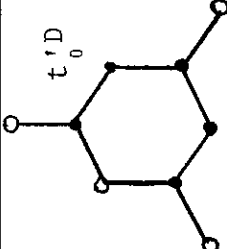
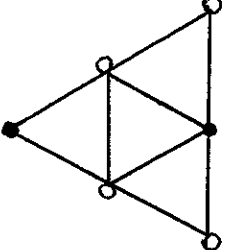
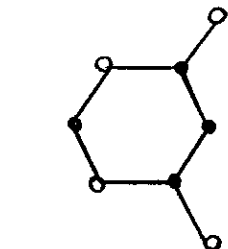
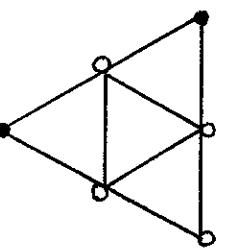
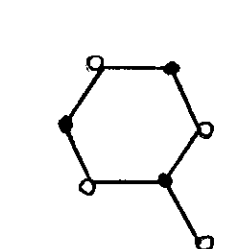
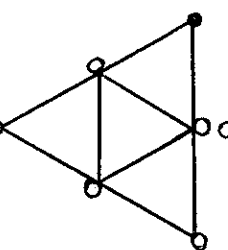
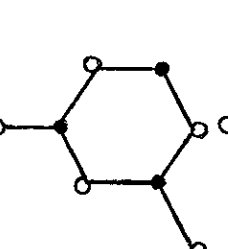
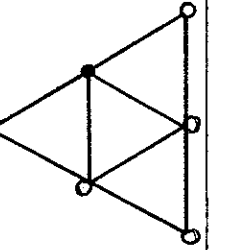
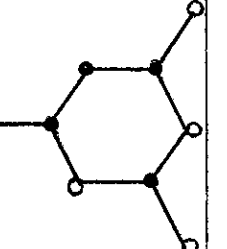


(continua)

Tab. F.1 (continuação)

2		0.2763	0.1841	0.1392	0.1119
3		1.0231	0.0105	0.9994	0.9897
2		0.1804	0.1063	0.07406	0.05597
3		1.0264	1.0209	1.0152	1.0099
2		0.3318	0.2364	0.1875	0.1567
3		1.0427	1.0409	1.0375	1.0339
2		0.3898	0.2857	0.2300	0.1940
3		1.0209	1	0.9829	0.9688
2		0.1710	0.09991	0.06930	0.05224
4		1.0318	1.0281	1.0235	1.0191

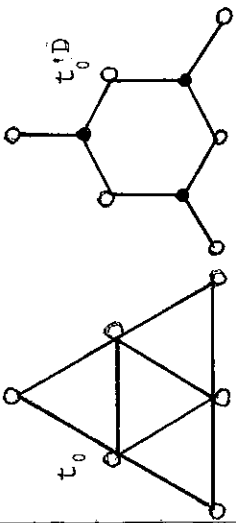
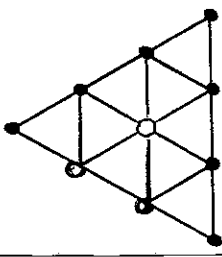
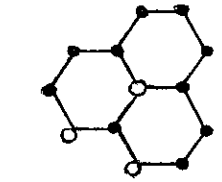
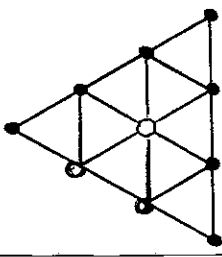
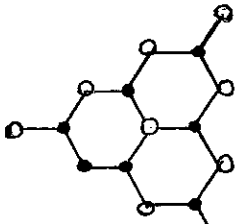
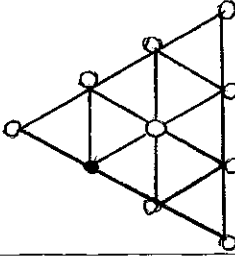
(continua)

Tab. F.1 (continuação)

2			0.1023	0.05130	0.03212	0.02239
4			1.0287	1.0271	1.0245	1.0218
2			0.1567	0.08886	0.06037	0.04478
4			1.0298	1.0251	1.0199	1.0151
2			0.2402	0.1539	0.1135	0.08955
4			1.0315	1.0223	1.0135	1.0058
2			0.1474	0.08248	0.05562	0.04104
5			1.0356	1.0331	1.0294	1.0258
2			0.09623	0.04762	0.02959	0.02052
5			1.0324	1.0321	1.0304	1.0285

(continua)

Tab. F.1 (continuação)

2		0.09014	0.04394	0.02707	0.01866
6		1.0363	1.0376	1.0370	1.0360
3		0.3979	0.2938	0.2373	0.2003
3		1.0288	1.0250	1.0201	1.0154
3		0.03272	0.01152	0.005659	0.003268
9		1.0264	1.0268	1.0258	1.0245

B I B L I O G R A F I A

- (1) Stanley H.E., "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena" (Clarendon Press, Oxford) (1971).
- (2) Vários autores, "Phase Transition and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S.Green (Academic Press, London, New York) vols. 1 a 6, (1972).
- (3) Curie P., "Propriétés Magnétiques des Corps à Diverses Températures", Ann. Chim. Phys. 5 (1895)289.
- (4) Langevin P., "Sur la Théorie du Magnétisme", J. Physique Theo.Appl., 4, (1905)678.
- (5) Weiss P., "La Variation du Ferromagnétisme avec la Température", Comptes Rendus 143(1906)1136; "L'Hypothèse du Champ Moléculaire et la Propriété Ferromagnétique", J. Physique Theo. Appl. 6(1907)661.
- (6) Lenz W., "Beitrag zum Verständnis der Magnetischen Erscheinungen in Festen Körpern" (Contribuição à Compreensão do Aparecimento do Magnetismo nos Corpos Sólidos), Physik Z 21(1920)613.
- (7) Ising E., "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus" (Uma Contribuição à Teoria do Ferromagnetismo), Z. Physik 31(1925)253.
- (8) Peierls R., "On Ising's Model of Ferromagnetism", Proc. Cambridge Phil. Soc. 32(1936)477.
- (9) Onsager L., "Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition", Phys. Rev. 65(1944)117.
- (10) Yang C.N., "The Spontaneous Magnetization of the Two-Dimensional Ising Model", Phys. Rev. 85(1952)808.
- (11) Fisher M., "The susceptibility of the Plane Ising Model", Physica 25(1959)521.
- (12) Essam J.W. e Fisher E.R., "Padé Approximant Studies of the Lattice Gas and Ising Ferromagnet below the Critical Point", J. Chem. Phys. 38 (1963)802.
- (13) Widom B., "Equation of State in the Neighborhood of the Critical Point", J. Chem. Phys. 43(1965)3898.
- (14) Kadanoff L.P., "Scaling law for Ising models near T_c ", Physics 2 (1966)263.
- (15) Wilson K.G., "Feynman-Graph Expansion for Critical Exponents", Phys. Rev. Lett. 28(1972)548.

- (16) Ma S.K., "Introduction to the Renormalization Group", Rev. Mod. Phys. 45(1973)589.
- (17) Fisher M.E., "The Renormalization Group in the Theory of Critical Behavior", Rev. Mod. Phys. 46(1974)597.
- (18) Wilson K.G. e Kogut J., "The Renormalization Group and the ϵ Expansion", Phys. Rep. 12(1974)75.
- (19) Wallace D.J. e Zia R.K.P., "The Renormalization Group Approach to Scaling in Physics", Rep. Prog. Phys. 41(1978)1.
- (20) Domb C, "On the Theory of Cooperative Phenomena in Crystals", Adv. Phys. 9(1960)149.
- (21) McCoy B.M. e Wu T.T., "The Two-dimensional Ising Model" (Harvard Univ. Press; Cambridge, Massachusetts)(1973).
- (22) Lee T.D. e Yang C.N., "Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model", Phys. Rev. 87 (1952)410.
- (23) Kasteleyn P.W., "Dimer Statistics and Phase Transitions", J.Math.Phys. 4(1963)287.
- (24) De Jongh L.J. e Miedema A.R., "Experiments on Simple Magnetic Model Systems". Adv. Phys: 23(1974)1.
- (25) Domany E. e Schick M., "Classification of continuous Order-disorder Transitions in Adsorbed Monolayers. II", Phys. Rev. B20(1979)3828.
- (26) Tejwani M.J., Ferreira O. e Vilches O.E., "Possible Ising Transition in a ⁴He Monolayer adsorbed on Kr-Plated Graphite", Phys. Rev. Lett. 44(1980)152.
- (27) Potts R.B., "Some Generalized Order-Disorder Transformations", Proc. Camb. Phil. Soc. 48(1952)106.
- (28) Wu F.Y., "The Potts Model", Rev. Mod. Phys. 54(1982)235.
- (29) Wu F.Y. e Wang Y.K., "Duality Transformation in a Many-component Spin

- Model", J. Math. Phys. 17(1976)439.
- (30) Savit R., "Duality in Field Theory and Statistical Systems", Rev.Mod. Phys. 52(1980)453.
- (31) Kasteleyn P.W. e Fortuin C.M., "Phase Transitions in Lattice Systems with Random Local Properties", J. Phys. Soc. Jap. (suppl.) 26(1969) 11.
- (32) Giri M.R., Stephen M.J. e Grest G.S., "Spin Models and Cluster Distributions for Bond and Site Percolation Models", Phys. Rev. B16(1977) 4971.
- (33) Kunz H. e Wu F.Y., "Site Percolation as a Potts Model", J. Phys. C11 (1978)L1.
- (34) Aharony A., "Low-temperature Phase Diagram and Critical Properties of a Dilute Spin Glass", J. Phys. C11(1978)L457.
- (35) Aharony A. e Pfeuty P., "Dilute Spin Glasses at Zero Temperature and the 1/2-state Potts Model", J. Phys. C12(1979)L125.
- (36) Domany E., Schick M., Walker J.S. e Griffiths R.B., "Classification of continuous order-disorder transitions in adsorbed monolayers", Phys. Rev. B18(1978)2209.
- (37) Domany E. e Riedel E.K., "Phase Transitions in Two-Dimensional Systems", J. Appl. Phys. 49(1978)1315.
- (38) Bretz M., "Ordered Helium Films on Highly Uniform Graphite-Finite-Size Effects, Critical Parameters, and the three-State Potts Model", Phys. Rev. Lett. 38(1977)501.
- (39) Park R.L., Einstein T.L., Kortan A.R. e Roelofs L.D., "Ordering in Two Dimensions", ed. Sinha SK(North Holland, New York)(1980)pg.17.
- (40) Barbara B., Rossignol M.F. e Per Balk, "First-order Transitions and tricritical points in Dy Al₂: A realisation of the three-state Potts model", J. Phys. C11(1978)L183.

- (41) Aharony A., Müller K.A. e Berlinger W., "Trigonal-to-Tetragonal Transition in Stressed Sr TiO₃: A Realization of the Three-State Potts Model", Phys. Rev. Lett. 38(1977)33.
- (42) Harris A.B. e Lubensky T.C., "Renormalization-Group Approach to the Critical Behavior of Random-Spin Models", Phys. Rev. Lett. 33(1974)1540.
- (43) Young AP e Stinchcombe R.B., "Real-space renormalization Group Calculations for spin glasses and dilute magnets". J. Phys. C9(1976)4419.
- (44) Jayaprakash C., Riedel E.K. e Wortis M., "Critical and Thermodynamic Properties of the Randomly Dilute Ising Model", Phys. Rev. B18 (1978)2244.
- (45) Kirkpatrick S., "Models of disordered materials", - La Matière Mal Condensée", Les Houches Summer School, ed. R. Balian, R. Maynard e G. Toulouse (North Holland, Amsterdam) (1978)321.
- (46) Broadbent S.R. e Hammersley J.M., "Percolation Processes. I. Crystals and Mazes", Proc. Cambridge Philos. Soc. 53(1957)629.
- (47) Frisch H.L. e Hammersley J.M., "Percolation Processes and Related Topics", J. Soc. Indust. Appl. Math. 11(1963)894.
- (48) de Gennes P.G., "La percolation: un concept unificateur", La Recherche 72(1976)919.
- (49) Thouless D.J., "Percolation and Localization", - La Matière Mal Condensée", Les Houches Summer School, ed. R. Balian, R. Maynard e Toulouse G. (North Holland, Amsterdam)(1978)1.
- (50) Stauffer D, "Scaling Theory of Percolation Clusters", Phys. Rep. 54 (1979)1.
- (51) Essam J.W., "Percolation Theory", Rep. Prog. Phys. 43(1980)833.
- (52) Sykes e Essam, "Some Exact Critical Percolation Probabilities for Bond and Site Problems in Two Dimensions", Phys. Rev. Lett. 10(1963)3

- "Exact Critical Percolation Probabilities for Site and Bond Problems in Two Dimensions", J. Math. Phys. 5(1964)1117.
- (53) Newman C.M. e Schulman L.S., "Number and Density of Percolating Clusters", J. Phys. A14(1981)1735.
- (54) Harris T.E., "A Lower Bound for the Critical Probability in a Certain Percolation Process", Proc. Camb. Phil. Soc. 56(1960)13.
- (55) Fisher M.E., "Critical Probabilities for Cluster Size and Percolation Problems", J. Math. Phys. 2(1961)620.
- (56) Schulman L.S. e Seiden P.E., "Percolation Analysis of Stochastic Models of Galactic Evolution", J. Stat. Phys. 27(1982)83.
- (57) Essam J.W., "Percolation and Cluster Size", do livro "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S. Green (Academic Press, London. New York) vol. 2(1972)197.
- (58) Klein W. e Coniglio A. "Thermal Phase Transitions at the Percolation Threshold" Phys. Lett. 84A(1981)83.
- (59) Nakanishi H. e Reynolds P.J., "Site-Bond Percolation by Position-Space Renormalization Group", Phys. Lett. 71A(1979)252.
- (60) Agrawal P., Redner S., Reynolds P.J. e Stanley H.E., "Site-bond Percolation: a low-density series study of the uncorrelated limit", J. Phys. A12(1979)2073.
- (61) Shapiro B., "Real-space renormalisation in the Percolation Problem", J. Phys. C12(1979)3185.
- (62) Redner S. e Stanley H.E., "Anisotropic Bond Percolation", J. Phys. A12(1979)1267.
- (63) de Magalhães A.C.N., Tsallis C. e Schwachheim G., "Renormalisation Group Treatment of Bond Percolation in Anisotropic and 'Inhomogeneous' planar lattices", J. Phys. C14(1981)1393.
- (64) Nakanishi H., Reynolds P.J. e Redner S., "Anisotropic Bond Percolation by Position-Space Renormalization Group", J. Phys. A14(1981)855.

- (65) Oliveira P.M.C., "Anisotropic Bond Percolation by Position-Space Renormalization Group", Phys. Rev. B25(1982)2034.
- (66) Turban L., "Correlated Site Percolation on the Bethe Lattice: II. Mean Cluster Size", J. Phys. C12(1979)5009.
- (67) Chakrabarti B.K., Kaski K. e Kertész J., "A Real-Space Renormalization Group Study of Correlated Percolation", Phys. Lett. 82A(1981)97.
- (68) Blease J., "Series Expansions for the Directed-bond Percolation Problem", J. Phys. C10(1977)917; "Directed-bond Percolation on Hypercubic Lattices", J. Phys. C10(1977)925; "Pair-connectedness for Directed Bond Percolation on some two dimensional lattices by series methods", J. Phys. C10(1977)3461.
- (69) Kinzel W. e Yeomans J.M., "Directed Percolation: A Finite-size Renormalization Group Approach", J. Phys. A14(1981)L163.
- (70) Dhar D., Barma M. e Phani M.K., "Duality Transformations for Two-Dimensional Directed Percolation and Resistance Problems", Phys. Rev. Lett. 47(1981)1238.
- (71) Zallen R., "Polychromatic Percolation: Coexistence of Percolating Species in Highly Connected Lattices", Phys. Rev. B16(1977)1426.
- (72) Halley J.W. e Holcomb W.K., "Conductivity of a Three-Component "Reactive" Percolation Model", Phys. Rev. Lett. 40(1978)1670.
- (73) Chalupa J, Leath P.J. e Reich G.R., "Bootstrap Percolation on a Bethe Lattice", J. Phys. C12(1979)L31.
- (74) Domb C. e Dalton N.W., "Crystal Statistics with Long-range Forces I. The Equivalent Neighbour Model", Proc. Phys. Soc. 89(1966)859.
- (75) Quinn G.D., Bishop G.H. e Harrison R.J., "On the Cluster Size Distribution for Critical Percolation", J. Phys. A9(1976)L9.
- (76) Stephen M.J. e Aharony A., "Percolation with Long-range Interactions", J. Phys. C14(1981)1665.

- (77) Fisher M.E. e Essam J.W., "Some Cluster Size and Percolation Problems", J. Math. Phys. 2(1961) 609.
- (78) Stephen M.J., "Percolation Problems and the Potts Model", Phys.Lett. 56A(1976)149.
- (79) Turban L. "Anisotropic Percolation on the Bethe Lattice", J.Phys.C12 (1979)1479.
- (80) Webman I, Jortner J. e Cohen M., "Critical Exponents for Percolation Conductivity in resistor networks", Phys. Rev. B16(1977)2593.
- (81) Welsh, D.J.A, "Percolation and Related Topics", Sci. Prog. Oxf. 64 (1977) 65.
- (82) Coniglio A. Stanley H.E. e Klein W., "Site-bond Correlated-Percolation Problem: A Statistical Mechanical Model of Polymer Gelation", Phys. Rev. Lett. 42(1979)518.
- (83) Stauffer D, "Monte-Carlo Simulation of Ising Droplets in Correlated Site-Bond Percolation", J. Physique Lett. 42(1981)L99.
- (84) Heermann D.W. e Stauffer D., "Phase Diagram for three-Dimensional Correlated Site-bond Percolation", Z. Phys. B44(1981)339.
- (85) Stanley H.E., "A Polychromatic Correlated-site Percolation Problem with Possible Relevance to the Unusual Behaviour of Supercooled H₂O and D₂O", J. Phys. A12(1979)L329.
- (86) Martin H.O. e Tsallis C., "Renormalization-group Specific Heat of the Square Lattice Potts Ferromagnet", pré-publicação (1982).
- (87) Essam J.W., "Linked-cluster Expansions for the Correlation Functions of Lattice Systems", Proc. Camb. Phil. Soc. 67(1970)523.
- (88) Hintermann A., Kunz H. e Wu F.Y., "Exact Results for the Potts Model in Two Dimensions", J. Stat. Phys. 19(1978)623.
- (89) Shlifer G., Klein W., Reynolds P.J. e Stanley H.E., "Large-cell Renormalisation Group for the Backbone Problem in percolation", J.Phys. A12(1979)L169.
- (90) Zallen R., "Overview and Applications of Percolation Theory", Annals of the Israel Phys. Soc. "Statphys 13", ed. D. Cabib, C.G. Kuper e I. Riess (Bristol:Adam Hilger) (1978)309.
- (91) Wu F.Y., "Percolation and the Potts Model", J. Stat. Phys. 18(1978) 115.
- (92) Kondor I., "Phase Boundary for Planar Site-bond Percolation Problems from a generalized star-triangle transformation", J. Phys. C13 (1980)L531.
- (93) Wu F.Y., "Dilute Potts Model, Duality and Site-bond Percolation", J.

- Phys. A14(1981)L39.
- (94) Griffiths R.B., "Correlations in Ising Ferromagnets. II. External Magnetic Fields", J. Math. Phys. 8(1967)484.
- (95) Reynolds P.J., Stanley H.E. e Klein W., "Ghost fields, pair Connectedness, and Scaling: Exact Results in One-dimensional Percolation", J. Phys. A10(1977)L203
- (96) Pfeuty P. e Toulouse G., "Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena" (Wiley-Interscience Publ.)(1977).
- (97) Nakanishi H. e Stanley H.E., "A Test of Scaling Near the Bond Percolation threshold", J. Phys. A11(1978)L189.
- (98) Betts D.D., Guttman e Joyce G.S., "Lattice-lattice Scaling and the Generalized law of corresponding states", J. Phys. C4(1971)1994.
- (99) Dunn A.G., Essam J.W. e Ritchie D.S., "Series Expansion Study of the Pair Connectedness in Bond Percolation Models", J. Phys. C8(1975)4219.
- (100) Cox M.A.A. e Essam J.W., "Series Expansion Study of the Pair Connectedness in site percolation models", J. Phys. C9(1976)3985.
- (101) Birgeneau R.J., Cowley R.A., Shirane G. e Guggenheim H.J., "Spin Correlations near the Percolation Concentration in Two Dimensions", Phys. Rev. Lett. 37(1976)940.
- (102) Essam J.W. e Gwilym K.M., "The Scaling Laws for Percolation Processes", J. Phys. C4(1971)L228.
- (103) Toulouse G., "Perspectives from the Theory of Phase Transitions", Nuovo Cim. B23(1974)234.
- (104) Harris A.B., Lubensky T.C., Holcomb W.K. e Dasgupta C, "Renormalization-Group Approach to Percolation Problems", Phys. Rev. Lett. 35(1975)327.
- (105) Kirkpatrick S. "Percolation Phenomena in Higher Dimensions: Approach to the Mean-Field Limit", Phys. Rev. Lett. 36(1976)69.
- (106) Gaunt D.S., Sykes M.F. e Ruskin H., "Percolation Processes in d-dimensions", J. Phys. A9(1976)1899.
- (107) Gaunt D.S. e Ruskin H., "Bond Percolation Processes in d-dimensions", J. Phys. A11(1978)1369.
- (108) de Gennes P.G., Lafore P. e Millot J.P., "Amas Accidentels dans les Solutions Solides Désordonnées", J. Phys. Chem. Solids 11(1959)105
- (109) Sykes M.F. e Glen M., "Percolation Processes in Two Dimensions I. Low-density Series Expansions", J. Phys. A9(1976)87.
- (110) Sykes M.F., Gaunt D.S. e Glen M., "Percolation Processes in Three Dimensions", J. Phys. A9(1976)1705.

- (111) Flammang A., "Percolation Cluster Sizes and Perimeters in Three Dimensions", Z. Physik B28(1977)47.
- (112) Stauffer D., "Exact Distributions of Cluster Size and Perimeter for Two-Dimensional Percolation", Z. Physik B25(1976)391.
- (113) Wolff W.F. e Stauffer D., "Scaling Function for Cluster Size Distribution in Two-Dimensional Site Percolation", Z. Physik B29(1978)67.
- (114) Sykes M.F. e Essam J.W., "Critical Percolation Probabilities by Series Methods", Phys. Rev. 133(1964)A310.
- (115) Sykes M.F., Martin J.L. e Essam J.W., "A Note on the Convergence of the Series Expansion for the Mean Cluster Size in Random Mixtures", J.Phys.A6(1973)1306.
- (116) Sykes M.F., Gaunt D.S. e Glen M., "Percolation Processes in Two Dimensions II. Critical Concentrations and the Mean Size Index", J. Phys. A9(1976)97.
- (117) Gaunt D.S., Whittington S.G. e Sykes M.F., "Series Estimate of the Exponent β for Bond Percolation on a Simple Cubic Lattice", J.Phys. A14(1981)L247.
- (118) Domb C. e Pearce C.J., "Mean Number of Clusters for Percolation Processes in Two Dimensions", J. Phys.A9(1976)L137.
- (119) Hammersley J.M. e Handscomb D.C., "Monte Carlo Methods" (Methuen, London)(1964).
- (120) Binder K., "Monte Carlo Methods in Statistical Physics" (Topics in Current Physics, vol. 7), ed. Binder K(Springer, New York)(1978).
- (121) Vyssotsky V.A., Gordon S.B. e Frisch H.L., "Critical Percolation Probabilities (Bond Problem)", Phys. Rev. 123(1961)1566.
- (122) Sur A, Lebowitz J.L, Marro J., Kalos M.H. e Kirkpatrick S., "Monte Carlo Studies of Percolation Phenomena for a Simple Cubic Lattice", J. Stat. Phys. 15(1976)345.
- (123) Hosken J. e Kopelman R., "Percolation and Cluster Distribution. I. Cluster Multiple Labeling Technique and Critical Concentration Algorithm", Phys. Rev. B14(1976)3438.
- (124) Reynolds P.J., Stanley H.E. e Klein W., "Percolation by Position-Space Renormalisation Group with Large Cells", J.Phys. A11(1978) L199.
- (125) Hosken J. Stauffer D., Bishop G.H., Harrison R.J. e Quinn G.D., "Monte Carlo Experiments on Cluster Size Distribution in Percolation", J.Phys.A12(1979)1285.

- (126) de Magalhães A.C.N, Tsallis C. e Schwahheim G., "Probability Renormalisation Group Treatment of Bond Percolation in Square, Cubic and Hypercubic Lattices", J. Phys. C13(1980)321.
- (127) Dean P, "A New Monte Carlo Method for Percolation Problems on a Lattice", Proc. Camb. Phil.Soc. 59(1963)397.
- (128) Leath P.L., "Cluster Shape and Critical Exponents near Percolation Threshold", Phys. Rev. Lett. 36(1976)921.
- (129) Leath P.L. e Reich G.R., "Scaling Form for Percolation Cluster Sizes and Perimeters", J. Phys. C11(1978)4017.
- (130) Stauffer D, "Monte Carlo Study of Density Profile, Radius, and Perimeter for Percolation Clusters and Lattice Animals", Phys.Rev. Lett. 41(1978)1333.
- (131) Herrmann H.J., "Similarity Laws for the Density Profile of Percolation Clusters and Lattice Animals", Z. Physik B32(1979)335.
- (132) Peters H.P., Stauffer D., Hölters H.P. e Loewenich K., "Radius, Perimeter and Density Profile for Percolation Clusters and Lattice Animals", Z. Physik B34(1979)399.
- (133) Young A.P. e Stinchcombe R.B., "A Renormalization Group Theory for Percolation Problems", J. Phys. C8(1975)L535.
- (134) Stinchcombe R.B. e Watson B.P., "Renormalization Group Approach for Percolation Conductivity", J. Phys. C9(1976)3221.
- (135) Marland L.G. e Stinchcombe R.P., "Renormalization Group Approach for Percolation-Magnetic Indices", J. Phys. C10(1977)2223.
- (136) Kirkpatrick S., "Percolation Thresholds in Ising Magnets and conducting Mixtures", Phys. Rev. B15(1977)1533.
- (137) Chalupa J., "Percolation in Bounded Geometries", J. Phys. C12 (1979) L665.
- (138) Turban L., "Anisotropic Critical Line from Anisotropic Scaling", J. Phys. C12(1979)4245.
- (139) Yuge Y. e Murase C., "A Renormalization Group Approach for Two-dimensional Site Percolating System", J. Phys. A11(1978)L83.
- (140) Yuge Y., "Renormalization-Group Approach for Critical Percolation Behaviour in Two Dimensions", Phys. Rev. B18(1978)1514.
- (141) Murase C. e Yuge Y., "A Renormalization Group Approach for Two-dimensional Percolating Systems: Honeycomb Bond Lattice and Kagomé Lattice" J. Phys. A12(1979)1541.
- (142) Reynolds P.J., Klein W. e Stanley H.E., "A Real-space Renormalization

- Group for Site and Bond Percolation", J. Phys. C10(1977)L167.
- (143) Bernasconi J, "Real-Space Renormalization of Bond-Disordered conductance Lattices", Phys. Rev. B18(1978)2185.
- (144) Tsallis C. e Schwachheim G., "Real-Space Renormalization Group: Applications to site percolation in Square Lattices", J. Phys. C12(1979)9.
- (145) Chaves C.M., Oliveira P.M., Queiroz S.L.A. e Riera R., "Remarks on the Percolation Problem in Anisotropic Systems", Prog. Theor.Phys. 62(1979)1550.
- (146) Reynolds P.J., Stanley H.E. e Klein W., "Large-Cell Monte Carlo Renormalization Group for Percolation", Phys. Rev. B21(1980)1223.
- (147) Zia R.K.P. e Wallace D., "Critical Behavior of the Continuous n-component Potts Models", J. Phys. A8(1975)1495.
- (148) Amit D.J., "Renormalization of the Potts Model", J. Phys. A9(1976) 1441.
- (149) Priest R.G. e Lubensky T.C., "Critical Properties of Two Tensor Models with Applications to the Percolation Problem", Phys. Rev. B13 (1976)4159.
- (150) Stephen M.J., "Site-Cluster Distributions and Equation of State for the Bond Percolation Model", Phys. Rev. B15(1977)5674.
- (151) Kramers H.A. e Wannier G.H., "Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part. I.", Phys. Rev. 60(1941)252; "Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part II.", Phys. Rev. 60(1941)263.
- (152) Temperley HNV, "Two-Dimensional Ising Models" do livro "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S. Green (Academic Press, London, New York) vol.I(1972)227.
- (153) Syozi I., "Transformation of Ising Models" do livro "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S. Green (Academic Press, London, New York) vol. I(1972)270.
- (154) Fisher M.E., "Simple Ising Models Still Thrive! A review of Some Recent Progress", Physica 106A(1981)28.
- (155) Griffiths R.B., "Rigorous Results and Theorems", do livro "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S. Green (Academic Press, London, New York) vol. 1(1972)7.
- (156) Wannier G.H., "The Statistical Problem in Cooperative Phenomena", Rev. Mod. Phys. 17(1945)50.
- (157) Syozi I, "Statistics of Kagomé Lattice", Prog. Theor. Phys. 6(1951)

306.

- (158) Le Guillou J.C. e Zinn-Justin J., "Critical Exponents from Field Theory", Phys. Rev. B21(1980)3976.
- (159) Fisher M.E. e Gaunt D.S., "Ising Model and Self-Avoiding Walks on Hypercubical Lattices and "High-Density" "Expansion" Phys. Rev. 133 (1964)A224.
- (160) Moore M.A., "Critical Behaviour of the Four-Dimensional Ising Ferromagnet and the Breakdown of Scaling", Phys. Rev. B1(1970)2238.
- (161) Ashkin J. e Teller E., "Statistics of Two-Dimensional Lattices with Four Components", Phys. Rev. 64(1943)178.
- (162) Temperley H.N.V. e Lieb E.H., "Relations between the 'Percolation' and 'Colouring' problem and other graph-theoretical problems associated with regular planar lattices: some exact results for the 'Percolation' Problem", Proc. R. Soc. London A322(1971)251.
- (163) Baxter R.J., Kelland S.B. e Wu F.Y., "Equivalence of the Potts model or Whitney Polynomial with an Ice-Type Model", J. Phys. A9(1976) 397.
- (164) Baxter R.J., Temperley H.N.V. e Ashley S.E., "Triangular Potts Model at its Transition Temperature, and Related Models", Proc. R. Soc. London A358(1978)535.
- (165) Alcaraz F.C. e Tsallis C., "Pure and Dilute $Z(N)$ Spin and generalised Gauge Lattice Systems: Duality and Criticality", J.Phys. A15 (1982)587.
- (166) Fortuin C.M. e Kasteleyn P.W., "On the Random-Cluster Model.I. Introduction and Relation to other Models", Physica 57(1972)536.
- (167) Stephen M.J. "Percolation Problems and the Potts Model", Phys.Lett. A56(1976)149.
- (168) Wu F.Y., "Number of Spanning Trees on a Lattice", J. Phys. A10(1977) L113.
- (169) Das B.K. e Griffiths R.B., "A Search for Multicritical Points in liquid mixtures: The Shield Region and the Three-State Potts point", J. Chem. Phys. 70(1979)5555.
- (170) Robinson D.S. e Salamon M.B., "Universality, Tricriticality, and the Potts Transition in First-Stage Lithium-Intercalated Graphite", Phys. Rev. Lett. 48(1982)156.
- (171) Domany E., Shnidman Y. e Mukamel D., "Type I FCC Antiferromagnets in a Magnetic Field: a Realisation of the $q=3$ - and $q=4$ - state

- Potts models", J. Phys. C15(1982)L495.
- (172) Lubensky T.C. e Isaacson J., "Field Theory for the Statistics of Branched Polymers, Gelation and Vulcanization", Phys. Rev. Lett. 41(1978)829.
- (173) Pearce P.A. e Griffiths R.B., "Potts Model in the many-Component limit", J. Phys. A13(1980)2143.
- (174) Mittag L. e Stephen M.J., "Mean-field theory of the many component Potts Model", J. Phys. A7(1974)L109.
- (175) Kihara T., Midzuno Y. e Shizume J., "Statistics of Two-Dimensional Lattices with many Components", J. Phys. Soc. Jap. 9(1954)681.
- (176) Straley J.P. e Fisher M.E., "Three-State Potts Model and Anomalous Tricritical Points", J. Phys. A6(1973)1310.
- (177) Andelman D. e Berker A.N., "q-state Potts Models in d Dimensions : Migdal-Kadanoff Approximation", J. Phys. A14(1981)L91.
- (178) Nienhuis B., Riedel E.K. e Schick M., "q-state Potts Model in General Dimension", Phys. Rev. B23(1981)6055.
- (179) Baxter R.J., "Potts Model at the Critical Temperature", J. Phys. C6(1973)L445.
- (180) Kim D. e Joseph J., "High-Temperature Series Study of the q-component Potts Model in two and three Dimensions", J. Phys. A8(1975)891.
- (181) Rudnick J., "ε-Expansions for the Free Energy of the Continuous Three-State Potts Models: Evidence for a First-Order Transition" J. Phys. A8(1975)1125.
- (182) Burkhardt T.W., Knops H.J.F. e den Nijs M., "Renormalization-Group Results for the Three-State Potts Model", J. Phys. A9(1976)L179.
- (183) Miyashita S., Betts D.D. e Elliot C.J., "High-Field Series Expansions and Critical Properties for the Three-State Potts Model", J. Phys. A12(1979)1605.
- (184) Herrmann H.J., "Monte Carlo Simulation of the Three-Dimensional Potts Model", Z. Phys. B35(1979)171.
- (185) Jensen S.J.K. e Mouritsen O.G., "Is the Phase Transition of the Three-State Potts Model Continuous in Three Dimensions?", Phys. Rev. Lett. 43(1979)1736.
- (186) Blöte H.W. e Swendsen R.H., "First-Order Phase Transitions and the Three-State Potts Model", Phys. Rev. Lett. 43(1979)799.
- (187) Levy P.M. e Sudano J.J., "Thermodynamic Behavior of the Discrete-Spin Three-State Potts Model", Phys. Rev. B18(1978)5087.
- (188) Aharony A. e Pytte E., "First- and Second- Order Transitions in the

- Potts Model Near Four Dimensions", Phys. Rev. B23(1981)362.
- (189) Ditzian R.V. e Kadanoff L.P., "Series Studies of the four-state Potts Model", J. Phys. A12(1979)L229.
- (190) Riedel E.K., "The Potts and Cubic Models in Two Dimensions: A Renormalization-Group Description", Physica 106A(1981)110.
- (191) Wang Y.K. e Wu F.Y., "Multi-Component Spin Model on a Cayley Tree", J. Phys. A9(1976)593.
- (192) Houtappel R.M.F., "Order-Disorder in Hexagonal Lattices", Physica 16(1950)425.
- (193) Kim D. e Joseph R.I., "Exact Transition Temperature of the Potts Model with q States per Site for the Triangular and Honeycomb lattices", J. Phys. C7(1974)L167.
- (194) Burkhardt T.W. e Southern B.W., "Exact Critical Surface of the s -State Potts model with Anisotropic Interactions on the Triangular and Honeycomb Lattices", J. Phys. A11(1978)L247.
- (195) den Nijs M.P.M., "A Relation Between the Temperature Exponents of the Eight-Vertex and q -State Potts Model", J. Phys. A12(1979)1857.
- (196) Nienhuis B., Riedel E.K. e Schick M., "Magnetic Exponents of the Two-Dimensional q -State Potts Model", J. Phys. A13(1980)L189
- (197) Pearson R.B., "Conjecture for The Extended Potts Model Magnetic eigen-value", Phys. Rev. B22(1980)2579.
- (198) Vários autores, "La Matière Mal Condensée", Les Houches Summer School, ed. R. Balian, R. Maynard e G. Toulouse (North Holland, Amsterdam)(1978).
- (199) Tsallis C., "Random Magnetism", VI Brazilian Symposium on Theoretical Physics, ed. E. Ferreira, B. Koller (CNPq) vol. i(1981)199.
- (200) Sarbach S. e Wu F.Y., "Exact Results on the Random Potts Model", Z. Phys. B44(1981)309.
- (201) Okuda Y., Tohi Y., Yamada I. e Haseda T., "Critical Temperatures of Randomly Diluted Two-Dimensional Heisenberg Ferromagnet, $K_2Cu_xZn_{1-x}F_4$ ", J. Phys, Soc. Jap. 49(1980)936.
- (202) Ikeda H., Sharp Phase Transition in Two-Dimensional Dilute Antiferromagnets $Rb_2Co_pMg_{1-p}F_4$ ", J. Phys. Soc. Jap. 50(1981)3215.
- (203) Meyer G.M. e Dietrich O.W., "Critical Scattering from a Disordered Antiferromagnet: Mn/ZnF_2 ", J. Phys. C11(1978)1451.
- (204) Cowley R.A. e Carneiro K., "Critical Properties of Pure and Random Antiferromagnets: CoF_2 , Co/ZnF_2 and KMn/NiF_3 ", J Phys.C13(1980)3281.

- (205) Adachi K., Sato K., Matsuura M. e Ohashi M., "New Type Metamagnetism in $\text{Co}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_2$: Exchange-Compensated Paramagnetism", J. Phys. Soc. Jap. 29(1970)323.
- (206) Stauffer D., "Crossover Scaling, Correlation Function and Connectivity in Dilute Low Temperature Ferromagnets", Z. Phys. B22(1975)161.
- (207) Stanley H.E., Birgeneau R.J., Reynolds P.J. e Nicoll J.F., "Thermally Driven Phase Transitions Near the Percolation Threshold in Two Dimensions", J. Phys. C9(1976)L553.
- (208) Lubensky T.C., "Scaling Theory of Phase Transitions in Diluted Systems near the Percolation Threshold", Phys. Rev. B15(1977)311.
- (209) Wallace D.J. e Young A.P., "Spin Anisotropy and Crossover in the Potts Model", Phys. Rev. B17(1978)2384.
- (210) Harris A.B., "Effect of Random Defects on the Critical Behaviour of Ising Models", J. Phys. C7(1974)1671.
- (211) Kinzel W. e Domany E., "Critical Properties of Random Potts Models", Phys. Rev. B23(1981)3421.
- (212) Emery V.J., "Critical Properties of Many-Component Systems", Phys. Rev. B11(1975)239.
- (213) Zobin D., "Critical Behavior of the Bond-Dilute Two-Dimensional Ising Model", Phys. Rev. B18(1978)2387.
- (214) Ching W.Y. e Huber D.L., "Monte Carlo Studies of the Critical Behavior of Site-Dilute Two-Dimensional Ising Models", Phys. Rev. B13(1976)2962.
- (215) Stoll E. e Schneider T., "Ising Ferromagnet with Quenched Impurities", J. Phys. A9(1976)L67.
- (216) Fisch R. e Harris A.B., "Randomly Dilute Two Dimensional Ising Models", AIP Conf. Proc. 29(1976)488.
- (217) Matsubara F., "Magnetic Properties of Random Mixture of the One-Dimensional Ising Chain", Prog. Theo. Phys. 51(1974)378.
- (218) Ono I., "Statistical Theory of Bond-Random Ising Model on a Triangular Cactus Tree", J. Phys. Soc. Jap. 48(1980)24.
- (219) Ono I., "Transition Temperature for the Square Cactus Tree with Random Bonds", J. Phys. Soc. Jap. 44(1978)1033.
- (220) Domany E., "Criticality and Crossover in the Bond-Diluted Random Ising Model", J. Phys. C11(1978)L337.
- (221) Southern B.W. e Thorpe M.F., "The Dilute Random-Bond Potts Model", J. Phys. C12(1979)5351.
- (222) Bergstresser T.K., "Rigorous Upper and Lower Bounds on the Critical

- Temperature in Ising Models with Random, Quenched, Broken-Bond Disorder", J. Phys. C10(1977)3831.
- (223) Rapaport D.C., "The Ising Ferromagnet with Impurities: A Series Expansion Approach: I", J. Phys. C5(1972)1830; "The Ising Ferromagnet with Impurities: A Series Expansion Approach: II", J. Phys.C5(1972) 2813.
- (224) Ono I. e Matsuoka Y., "Determination of the Transition Temperature for a Randomly Dilute Ising Ferromagnet by Computer Simulations", J. Phys. Soc. Jap. 41(1976)1425.
- (225) Bidaux R., Carton J.P. e Sarma G., "Dilute Bond Ising Model and Percolation", J. Phys. A9(1976)L87.
- (226) Harris A.B., "The Coherent Potential Approximation for the Density Matrix of a Random Alloy", J. Phys. C9(1976)2515.
- (227) Turban F., "Effective-Medium Approximation for Quenched Bond-Disorder in the Ising Model", Phys. Lett. 75A(1980)307.
- (228) Guilmin P. e Turban L., "Cluster Extension of the Effective-Interaction Approximation: I. Quenched-Bond Disorder in the Ising Model", J. Phys. C13(1980)4077.
- (229) Lage E.J.S., "A New Approach to the Quenched Bond-Dilute Ising Model", J. Phys. C10(1977)701.
- (230) Aharony A. e Stephen M.J., "Duality Relations and the Replica Method for Ising Models", J. Phys. C13(1980)L407.
- (231) Tatsumi T. e Kawasaki K., "Renormalization-Group Approach to the Critical Behavior of the Random Bond Ising Model", Prog. Theor.Phys. 55(1976)612.
- (232) Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., "Critical Properties of Site - and Bond-Diluted Ising ferromagnets", J. Phys. C12(1979)347.
- (233) Tsallis C. e Levy S.V.F., "Renormalization Group Attempts to obtain the Transition Line of the Square-Lattice Bond-Dilute Ising Model", J. Phys. C13(1980)465.
- (234) Levy S.V.F., Tsallis C. e Curado E.M.F., "Approximate Critical Surface of the Bond-Mixed Square-Lattice Ising Model", Phys. Rev. B21 (1980)2991.
- (235) Chao N.C., Schwachheim G. e Tsallis C., "Renormalization Group Phase Boundary of the Three-Dimensional Bond-Dilute Ising Ferromagnet", Z. Phys. B43(1981)305.
- (236) de Magalhães A.C.N., Swachheim G. e Tsallis C., "Triangular and Honeycomb Lattices Bond-Dilute Ising Ferromagnet: Critical Frontier", a ser

- publicado em J. Phys.C (1982).
- (237) Southern B.W. e Thorpe M.F., "The Dilute Random-Bond Potts Model" , J. Phys. C12(1979)5351.
- (238) de Magalhães e Tsallis C., "On the Critical Frontiers of Potts ferromagnets", J. Physique 42(1981)1515.
- (239) Fisch R., "Critical Temperature for Two-Dimensional Ising Ferromagnets with Quenched Bond Disorder", J. Stat. Phys. 18(1978)111.
- (240) Tsallis C., "Conjecture on the Critical Frontier of the Fully Anisotropic Homogeneous Quenched Bond-Mixed Potts Ferromagnet in Square Lattice", J. Phys. C14(1981)L85.
- (241) Tsallis C., "Fully Anisotropic Triangular Lattice Quenched Bond-Random Potts Ferromagnet: Almost Exact Critical Frontier", a ser publicado em J. Magn. Magn. Mat. (1982).
- (242) Lubensky T.C., "Scaling Theory of Phase Transitions in Diluted Systems near the Percolation Threshold", Phys. Rev. B15(1977)311.
- (243) Coniglio A., "Thermal Phase Transition of the Dilute s-state Potts and n-Vector Models at the Percolation Threshold", Phys. Rev. Lett. 46(1981)250.
- (244) Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., "Critical Behaviour of the dilute Ashkin-Teller-Potts Model", J. Phys. C13(1980)L239.
- (245) Turban L., "Quenched Bond-Disorder in the Potts Model: Single-Bond Effective Interaction Approximation", J. Phys. C13(1980)L13.
- (246) Riera R., Oliveira P.M., Chaves C.M. e Queiroz S.L.A., "Percolation with First- and Second - Neighbor Bonds: Renormalization-Group Calculation of Critical Exponents", Phys. Rev. B22(1980)3481.
- (247) Oliveira P.M., Queiroz S.L.A., Riera R. e Chaves C.M., "Bond Percolation in a Square Lattice in Presence of a Magnetic Field", J.Phys. A13(1980)2457.
- (248) Nakanishi H., Reynolds P.J. e Redner S., "Anisotropic Bond Percolation by Position-Space Renormalization Group", J.Phys. A14(1981)855
- (249) Tsallis C., "Generalized Bond Percolation and Random Models. Application to Two-Dimensional Systems", Kinam/Revista de Fisica (Mexico)3(1981)79.
- (250) Gaunt D.S. e Sykes M.F., "Percolation Processes in Two Dimensions V. The Exponent δ_p and Scaling Theory", J. Phys. A9(1976)1104.
- (251) Fisher M.E., "The Theory of Critical Point Singularities" — Critical Phenomena, Proc. Int. Sch. Phys. "Enrico Fermi" Course 51 ed M S. Green (New York: Academic Press)(1971)1.

- (252) Suzuki M., "Static and Dynamic Finite Size Scaling Theory", Prog. Theor. Phys. 58(1977)1142.
- (253) Tsallis C. e de Magalhães A.C.N., "Conjecture on the Critical Frontier of the Potts Ferromagnet on Planar Lattices", J. Physique Lett. 42(1981)L227.
- (254) Fisch R., Tese de PhD, Universidade da Pennsylvania, U.S.A.(1977).
- (255) Sarychev A.K. e Vinogradoff "Percolation in Anisotropic Systems and the Infinite Cluster", J. Phys. C12(1979)L681.
- (256) Guyon E., Clerc J.P., Giraud G. e Roussenoq J., "A Network Simulation of Anisotropic Percolation", J. Physique 42(1981)1553.
- (257) Lage E.J.S., "Effective Medium Approach to Real Space Renormalization", Physica 96A(1979)645.
- (258) Ikeda H., "Percolation in Anisotropic Systems", Prog. Theo. Phys. 61(1979)842.
- (259) Lobb C.J., Frank D.J. e Tinkham M., "Percolative Conduction in Anisotropic Media: A Renormalization-Group Approach", Phys. Rev. B23(1981)2262.
- (260) Niemeyer Th. e van Leeuwen J.M., "Wilson Theory for 2-dimensional Ising Spin Systems", Physica 71(1974)17.
—————, "Renormalization Theory for Ising Like Spin Systems", do livro Phase Transitions and Critical Phenomena" vol.6(1976), ed. C. Domb e M.S. Green (New York: Academic Press)pg.425.
- (261) Oliveira P.M.C. e Tsallis C., "Anisotropic Square Lattice Potts Ferromagnet: Renormalization Group Treatment", J. Phys. A15(1982)2865.
- (262) Tsallis C., "Phase diagram of Anisotropic Planar Potts Ferromagnets: A New Conjecture", J. Phys. C15(1982)L757
- (263) Dean P., "A New Monte Carlo Method for Percolation Problems on a Lattice", Proc. Camb. Phil. Soc. 59(1963)397.
- (264) Neal D.G., "Estimates of Critical Percolation Probabilities for a Set of Two-Dimensional Lattices", Proc. Camb. Phil. Soc. 71(1972)97.
- (265) Ottavi H., "Majorant et Minorant du Seuil de Percolation de Lieu du Kagomé", J. Physique 40(1979)233.
- (266) Tsallis C. e Levy S.V.F., "Single Method to Calculate Percolation, Ising and Potts Clusters: Renormalization-Group Applications", Phys. Rev. Lett. 47(1981)950.
- (267) Wu F.Y., "Critical Point of Planar Potts Models", J. Phys. C12(1979)

L645.

- (268) Enting I.G. e Wu F.Y., "Triangular Lattice Potts Models", submetido para publicação no J. Stat. Phys. (1982).
- (269) Tóth L.F., "Regular Figures" (Pergamon Press) 1964.
- (270) Dalton N.W. e Wood D.W., "Critical Point Behavior of the Ising Model with Higher-Neighbor Interactions Present", J. Math. Phys. 10 (1969)1271.
- (271) Nauenberg M. e Nienhuis B., "Critical Surface for Square Ising Spin Lattice, Phys. Rev. Lett. 33(1974)944.
- (272) Oitmaa J., "The Triangular Lattice Ising Model with First and Second Neighbour Interactions", J. Phys. A15(1982)573.
- (273) Thorpe M.F., "The Random Ising Model on Cacti Lattices, J.Phys. A11 (1978)955.
- (274) Philhours J., "Ising Model with First, Second, and Third Neighbor Interactions", Phys. Rev. B4(1971)929.
- (275) Horiguchi T. e Morita T., "Phase Transition in a Random. Ising Model on a Cayley tree, J. Phys. A13(1980)L-71.
- (276) Nelson D.R. e Fisher M.E., "Soluble Renormalization Groups and Scaling Fields for Low-Dimensional Ising Systems". Ann. Phys. 91 (1975)226.
- (277) Oguchi T. e Ueno Y., "Curie Point in a Quenched Bond Model for the Two Dimensional Lattice", J. Phys. Soc. Jap. 44(1978)1449.

**“FRONTEIRA E EXPOENTES CRÍTICOS EM PERCOLAÇÃO E
FERROMAGNETOS DE ISING E POTS GRUPO DE
RENORMALIZAÇÃO E OUTRAS TÉCNICAS”**

AGLAÉ CRISTINA NAVARRO DE MAGALHÃES

Tese apresentada no Centro
Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Conselho
Nacional de Desenvolvimento Científico e
Tecnológico, fazendo parte da Banca Exa-
minadora os seguintes Professores:

Constantino Tsallis/CBPF

Maurício Coutinho/CBPF

Silvio Roberto Salinas/USP

Amós Troper/CBPF

Carlos Guido Bolinni/CBPF

Paulo Murilo/UFF

Rio de Janeiro, 24 de agosto de 1982