

EVALDO MENDONÇA FLEURY CURADO

MODELOS DE ISING E POTTS: EFEITOS DA
DESORDEM DE LIGAÇÕES E DA DIMENSÃO

Tese de

DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro

-1983-



AGRADECIMENTOS

A Constantino Tsallis pela segura orientação e pela camaradagem e disponibilidade que sempre me dispensou. A sua seriedade científica, respeito profissional e a utilização da intuição, quase como um método "paralelo" de trabalho, tornam agradável e fecunda qualquer colaboração da qual participe. A Paulo R. Hauser pela participação no trabalho que resultou no capítulo IV desta tese assim como pelas inúmeras discussões, as quais, aliás, estão se tornando bastante "caóticas" ultimamente. À Aglaé C. N. de Magalhães pela sua visão crítica na revisão de boa parte desta tese assim como pelas discussões e sugestões apresentadas em várias ocasiões. Também lhe sou grato por ter tornado o nosso ambiente de trabalho mais agradável, sob todos os pontos de vista. Pelas sugestões apresentadas e pela parte computacional sou extremamente grato a Georges Schwachheim, Silvio V.F. Levy, Hector O. Martín e Mario J. de Oliveira que colaboraram em diversos trabalhos. Aos "retirantes" Uriel M.S. Costa, Luciano R. Silva e Ananias M. Mariz, e a Paulo M.C. Oliveira pelas pertinentes e oportunas observações, feitas principalmente nos tradicionais seminários das terças-feiras. À Nice Rocha pela paciência, carinho e compreensão. A sua contribuição na elaboração dos desenhos e na "parte artística" desta tese é, para mim, de inestimável valor. A Wellington M.F. Curado pela paciente ajuda na correção dos textos. À Helena S. Ferreira pela excelente datilografia e pela feição artística que soube dar a este trabalho. À Myriam, Vanda e Mariléa pelo carinho e atenção a mim dispensados em várias ocasiões. Aos funcionários da Biblioteca e em especial a Fátima, Zé Gordo, Elias, Baiano e Vera pela presteza e boa vontade com que sempre me atenderam. À turma do futebol pelas boas partidas e comemorações que tivemos, sem dúvida contribuindo para o nosso melhor relacionamento.

À grande maioria do povo brasileiro que, através de seu voto, finalmente possibilita que pessoas como eu possam se dedicar à ciência, minha gratidão e o meu compromisso de estar a seu lado na construção e consolidação de uma verdadeira democracia neste País.

– a Nice, Pedro e Marco

– a Asty e Otilia

AGRADECIMENTOS

A Constantino Tsallis pela segura orientação e pela camaradagem e disponibilidade que sempre me dispensou. A sua seriedade científica, respeito profissional e a utilização da intuição, quase como um método "paralelo" de trabalho, tornam agradável e fecunda qualquer colaboração da qual participe. A Paulo R. Hauser pela participação no trabalho que resultou no capítulo IV desta tese assim como pelas inúmeras discussões, as quais, aliás, estão se tornando bastante "caóticas" ultimamente. À Aglaé C. N. de Magalhães pela sua visão crítica na revisão de boa parte desta tese assim como pelas discussões e sugestões apresentadas em várias ocasiões. Também lhe sou grato por ter tornado o nosso ambiente de trabalho mais agradável, sob todos os pontos de vista. Pelas sugestões apresentadas e pela parte computacional sou extremamente grato a Georges Schwachheim, Silvio V.F. Levy, Hector O. Martín e Mario J. de Oliveira que colaboraram em diversos trabalhos. Aos "retirantes" Uriel M.S. Costa, Luciano R. Silva e Ananias M. Mariz, e a Paulo M.C. Oliveira pelas pertinentes e oportunas observações, feitas principalmente nos tradicionais seminários das terças-feiras. À Nice Rocha pela paciência, carinho e compreensão. A sua contribuição na elaboração dos desenhos e na "parte artística" desta tese é, para mim, de inestimável valor. A Wellington M.F. Curado pela paciente ajuda na correção dos textos. À Helena S. Ferreira pela excelente datilografia e pela feição artística que soube dar a este trabalho. À Myriam, Vanda e Mariléa pelo carinho e atenção a mim dispensados em várias ocasiões. Aos funcionários da Biblioteca e em especial a Fatima, Zé Gordo, Elias, Baiano e Vera pela presteza e boa vontade com que sempre me atenderam. À turma do futebol pelas boas partidas e comemorações que tivemos, sem dúvida contribuindo para o nosso melhor relacionamento pessoal. Ao povo brasileiro que, através de seu trabalho, indiretamente possibilita que pessoas como eu possam se dedicar à pesquisa. A ele a minha gratidão e o meu compromisso de estar a seu lado na luta pela obtenção e consolidação de uma verdadeira democracia neste País.

RESUMO

Ao longo deste trabalho teórico estudamos algumas propriedades de equilíbrio térmico em sistemas isolantes puros e desordenados usando o método do grupo de renormalização no espaço real.

Nos sistemas puros analisamos, em redes hipercúbicas, a tensão superficial do modelo de Ising e o comprimento de correlação do modelo de Potts a q estados, o qual generaliza o modelo anterior. Diversos comportamentos assintóticos são obtidos, em nosso conhecimento pela primeira vez, para ambas as funções e a influência da dimensão sobre estas pode ser observada. São feitas propostas numéricas de boa precisão para a tensão superficial em diversas dimensões e é mostrado o efeito do número de estados q sobre o comprimento de correlação.

No estudo de sistemas desordenados nos centramos essencialmente sobre aqueles que possam ser representados teoricamente por uma Hamiltoniana de um sistema puro onde assumimos uma distribuição de probabilidade sobre as constantes de acoplamento do mesmo (desordem nas ligações). Várias superfícies críticas aproximadas do modelo de Ising temperado, na rede quadrada, cuja distribuição de probabilidade admite dois valores, positivos (portanto não existe frustração), são obtidas com alta precisão. Todos os pontos exatos conhecidos desta superfície estão contidos nas superfícies aproximadas. Para o caso onde a distribuição de probabilidade admite também valores negativos para a constante de acoplamento (permitindo que o sistema seja desordenado e frustrado), propomos um tratamento teórico que distingue os efeitos da frustração dos da diluição e que é baseado no modo como as ligações se compõem em arranjos topológicos do tipo série-paralelo. Esta separação nos permite obter uma descrição satisfatória do diagrama de fases de um vidro de spin bidimensional.

SUMMARY

In this work we calculate, within the real space renormalization group framework, some thermal equilibrium properties of pure and disordered insulating systems.

We analyse, in the pure hypercubic lattice system, the Ising model surface tension and the correlation length of the q -state Potts model, which generalizes the former. Several asymptotic behaviors are obtained (for the first time as far as we know) for both functions and the influence of dimension over them can be observed. Accurate numerical proposals for the surface tension are made in several dimensions, and the effect of the number of states (q) on the correlation length is shown.

In disordered systems, we focus our attention essentially on those which can be theoretically represented by pure system Hamiltonians where we assume probability distributions for the coupling constants (disorder in the bonds). We obtain with high precision several approximate critical surfaces for the quenched square-lattice Ising model, whose probability distribution can assume two positive values (hence there is no frustration). These approximate surfaces contain all the exact known points. In the cases where the coupling constant probability distribution can also assume negative values (allowing disordered and frustrated systems), we propose a theoretical treatment which distinguishes the frustration effect from the dilution one. This distinction can be seen by the different ways in which the bonds of any series-parallel topological array combine.

S U M Á R I O

	<u>PÁG</u>
AGRADECIMENTO	iii
RESUMO	iv
SUMMARY	v
LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	x
INTRODUÇÃO	1
<u>CAPÍTULO I</u> - FENÔMENOS CRÍTICOS E GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO	9
1.1 - Fenômenos Críticos	9
1.2 - Construção de Kadanoff	17
1.3 - Grupo de Renormalização	21
1.4 - Grupo de Renormalização no Espaço Real	29
<u>CAPÍTULO II</u> - TENSÃO SUPERFICIAL LONGITUDINAL DO MODELO DE ISING NA REDE QUADRADA	35
2.1 - Introdução	35
2.2 - Modelo	40
2.3 - Grupo de Renormalização na Rede Quadrada	40
2.4 - Tensão Superficial Longitudinal	45
2.5 - Comportamento Assintótico e Estabilidade dos Pontos Fixos	47
2.6 - Procedimentos de Extrapolação	55
2.7 - Conclusão	61
<u>CAPÍTULO III</u> - TENSÃO SUPERFICIAL DO MODELO DE ISING EM REDES HIPERCÚBICAS	63
3.1 - Introdução	63
3.2 - Grupo de Renormalização para Redes Hipercúbicas	64
3.3 - Comportamentos Assintóticos da Tensão Superficial Longitudinal	68
3.4 - Procedimentos de Extrapolação	74
3.5 - Conclusão	76

<u>CAPÍTULO IV</u> - COMPRIMENTO DE CORRELAÇÃO DO MODELO DE POTTS	78
4.1 - Introdução	78
4.2 - Modelo	85
4.3 - Grupo de Renormalização na Rede Quadrada	86
4.4 - Comprimento de Correção	90
4.5 - Comportamentos Assintóticos de ξ_{b,b_1} de Ising em Três Dimensões	98
4.6 - Conclusão	104
<u>CAPÍTULO V</u> - SUPERFÍCIE CRÍTICA APROXIMADA DO MODELO DE ISING COM LIGAÇÕES MISTAS NA REDE QUADRADA	107
5.1 - Introdução	107
5.2 - Modelo	110
5.3 - Grupo de Renormalização -t (GR-t)	112
5.4 - Aproximação Heurística	119
5.5 - Grupo de Renormalização-S	123
5.6 - Conclusão	128
<u>CAPÍTULO VI</u> - VIDRO DE SPIN NA REDE QUADRADA	130
6.1 - Introdução	130
6.2 - Modelo	136
6.3 - Grupo de Renormalização para Temperatura Nula	140
6.4 - Grupo de Renormalização para $T \neq 0$	155
6.5 - Conclusão	160
<u>CAPÍTULO VII</u> - CONCLUSÕES	162
<u>APÊNDICE A</u> - MÉTODO CORTE-COLAPSO	167
<u>BIBLIOGRAFIA</u>	171

LISTA DE FIGURAS

<u>FIG.</u>	<u>PÁG.</u>
1.1.1 - Diagrama de fases típico de um fluido	9
1.1.2 - Diagrama de fases de um sistema ferromagnético	10
1.1.3 - Curva de coexistência de oito fluidos	12
1.3.1 - Blocos de Kadanoff	22
1.3.2 - Linha física cruzando superfícies iso- ξ	25
1.3.3 - Trajetórias do GR partindo da linha física	25
1.3.4 - Pontos fixos do GR em S_∞	27
2.1.1 - Ligações antiferromagnéticas e ferromagnéticas nas redes quadrada e cúbica	37
2.1.2 - Ligações antiferro da tensão diagonal	39
2.3.1 - Células auto-duais para o modelo de Ising ($d=2$)	42
2.4.1 - Linhas de fluxo nos espaços γ -T e γ -t	47
2.5.1 - Tensão superficial exata e do GR	54
2.5.2 - Erros relativos das tensões superficiais do GR	54
2.5.3 - Valores de algumas amplitudes da tensão	55
2.6.1 - Erros relativos de diversas extrapolações	60
2.6.2 - Função corretiva do PUE	60
3.2.1 - Células escolhidas para as redes hipercúbicas	64
3.3.1 - Grafo de "ordem zero"	68
3.3.2 - Grafo de "ordem dois"	69
3.4.1 - Tensões superficiais do GR em $d=3$	75
3.4.2 - Tensões superficiais do GR em $d=4$	75
3.4.3 - Comparação entre as tensões para $d=2,3$ e 4	76
4.4.1 - Comparação entre os ξ 's do GR e o exato ($d=2$)	96

4.4.2 - Comprimento de correlação para diversos valores de q	97
5.3.1 - Célula auto-dual para o modelo de Ising ($d=2$)	112
5.3.2 - Superfície crítica do GR	115
5.3.3 - T_c em função da concentração de J_2	117
5.4.1 - Diversas fronteiras críticas	123
6.2.1 - Duas ligações em paralelo	137
6.3.1 - Célula auto-dual para interações competitivas	141
6.3.2 - Renormalização entre dois tipos de células	142
6.3.3 - Duas ligações em série	142
6.3.4 - Duas ligações em paralelo	143
6.3.5 - Célula com distribuições diferentes em cada ligação	144
6.3.6 - Célula renormalizada em uma ligação F	147
6.3.7 - Célula renormalizada em uma ligação AF	147
6.3.8 - Célula renormalizada em uma ligação ϕ	147
6.3.9 - Estado fundamental ferromagnético	148
6.3.10 - Estado fundamental antiferromagnético	148
6.3.11 - Diagrama de fases a 0^0K sem diluição	152
6.3.12 - Diagrama de fases a 0^0K com diluição	154
6.3.13 - Diagrama de fases a 0^0K para o plano $p+q+r = 1$	154
6.4.1 - Diagrama de fases sem diluição	157
6.4.2 - Diagrama de fases no plano $p+q = 1$	158
6.4.3 - Diagrama de fases com $q=0$	159
A.1 - Vários grafos de dois terminais	168

LISTA DE TABELAS

<u>TAB.</u>	<u>PÁG.</u>
1.1.1 - Valores dos expoentes críticos	13
2.3.1 - Expoentes e amplitudes críticas	45
2.5.1 - Ilustração do GR usado para obter a tensão	54
3.2.1 - Valores de temperaturas e expoentes críticos	66
3.3.1 - Valores assintóticos de $\gamma^{(d)}$	72
3.3.2 - Valores de $A_{b,1}^{(d)}$	73
4.3.1 - Diversos valores de $v_{b,1}(q)$	90
4.4.1 - Diversos valores da amplitude $A_{b,b}^{(q)}$	99
5.3.1 - Alguns resultados exatos, do GR e heurísticos	116
5.3.2 - Linhas críticas aproximadas para $J_1/J_2 = 0.2$	117
5.5.1 - Alguns valores da superfície crítica	127

A PALAVRA

*Já não quero dicionários
consultados em vão.
Quero só a palavra
que nunca estará neles
nem se pode inventar.*

*Que resumiria o mundo
e o substituiria.
Mais sol do que o sol,
dentro da qual vivêssemos
todos em comunhão,
mudos,
saboreando-a.*

Carlos Drummond de Andrade

NAMORADOS

O rapaz chegou-se para junto da moça e disse:

—Antônia, ainda não me acostumei com o seu corpo, com a sua cara.

A moça olhou de lado e esperou.

—Você não sabe quando a gente é criança e de repente vê uma lagarta listrada ?

A moça se lembrava:

—A gente fica olhando....

A meninice brincou de novo nos olhos dela.

O rapaz prosseguiu com muita doçura:

— Antônia, você parece uma lagarta listrada.

A moça arregalou os olhos, fez exclamações.

O rapaz concluiu:

— Antônia, você é engraçada ! Você parece louca.

Manuel Bandeira

INTRODUÇÃO

As propriedades mensuráveis dos sistemas físicos e, em especial, aquelas que se manifestam na vizinhança de um ponto de transição de fase contínua (onde não existe calor latente e nem coexistência de fases) são devidas essencialmente a algum tipo de comportamento cooperativo existente entre as variáveis microscópicas do sistema. Em particular sabemos que, próximo do ponto crítico, as características essenciais dos fenômenos cooperativos não dependem dos detalhes das forças intermoleculares (assumidas de alcance finito) mas do mecanismo de propagação da ordem de longo alcance. Como consequência deste fato emerge, na teoria de fenômenos críticos, o conceito de universalidade, o qual sugere, [e a experiência confirma^(1,2)] que sistemas físicos com interações intermoleculares distintas apresentem o mesmo comportamento crítico (exibem o mesmo conjunto de expoentes críticos). A universalidade também explica porque alguns modelos relativamente simples de muitos corpos fornecem uma descrição bastante boa de muitos sistemas físicos, especialmente próximo do ponto crítico. Dentre estes modelos, um dos mais antigos e fecundos (ainda objeto de intensa pesquisa) é o usualmente chamado modelo de Ising. Ele foi proposto por Wilhelm Lenz em 1920^(3,4), o qual achava que as moléculas ou átomos dos magnetos tinham dipolos magnéticos^(*) e estes dipolos tinham somente um número limitado de

^(*) Estes dipolos tinham sido sugeridos por Langevin⁽⁵⁾ em 1905 na primeira teoria microscópica sobre o ferromagnetismo. Ele considerava estes dipolos magnéticos como sendo livres para tomar qualquer orientação em torno de uma posição fixa numa rede. A lei de Curie era reobtida por esta teoria.

orientações^(*). Utilizando a antiga teoria quântica (teoria semi-clássica) ele concluiu que havia certos ângulos privilegiados (0 e π) na orientação destes dipolos, em torno dos quais os dipolos permaneciam em média. Claramente um campo magnético quebra a simetria entre estas direções e a lei de Curie pode ser deduzida. Para tentar obter a magnetização espontânea, observada em magnetitas e piritas, ele conjecturou que se a energia potencial de um átomo com respeito aos seus vizinhos fosse diferente na posição nula ou na direção π do dipolo, então surgiria uma direção natural do dipolo correspondente ao estado cristalino e a magnetização espontânea apareceria. Ising⁽⁸⁾ resolveu este modelo, com interações de curto alcance entre os dipolos (hoje associados, em magnetismo, à componente Z de um spin $1/2$), para uma cadeia unidimensional e constatou que não havia magnetização espontânea a qualquer temperatura finita. Este fato, além de uma sugestão de Ising, baseada em alguns cálculos aproximados, de que este modelo também não apresentaria magnetização espontânea em três dimensões, relegou-o, por algum tempo, ao ostracismo. Um grande avanço conceitual ocorreu em 1936 quando Peierls⁽⁹⁾^(**) evidenciou a equivalência entre a teoria de Ising do magnetismo, a teoria de Bethe⁽¹⁰⁾ das transformações de ordem-desordem em ligas e o trabalho de Fowler⁽¹¹⁾ e Peierls⁽¹²⁾ sobre adsorção isotérmica. Desta maneira o modelo de Ising (submetido a um eventual campo magnético) poderia ser pensado como um objeto matemáti

(*) Observamos que nessa época a experiência de Stern-Gerlach⁽⁶⁾ não tinha sido ainda realizada assim como a hipótese da existência do spin $1/2$ no elétron, somente feita por Uhlenbeck e Goudsmith⁽⁷⁾ em 1925.

(**) Neste trabalho ele também deu um argumento (que em todo rigor é falho) mostrando que o modelo de Ising apresenta magnetização espontânea em duas e três dimensões, contrariamente ao que se pensava na época.

co capaz de descrever (pelo menos próximo do ponto crítico) vários sistemas físicos diferentes tais como: (a) magnetos que apresentam a interação entre spins vizinhos ao longo de uma direção muito maior que a interação entre as componentes do spin perpendiculares à esta direção (uniaxiais), como, por exemplo, o DyAlO_3 ⁽¹³⁾ e $\text{Dy}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ⁽¹⁴⁾ (sistemas tridimensionais), o Rb_2CoF_4 ⁽¹⁵⁾, K_2CoF_4 ⁽¹⁶⁾ (sistemas quase bidimensionais); (b) misturas de dois tipos de moléculas, AB, formando ligas como, por exemplo o CuZn ⁽¹⁷⁾ ("β-brass") e (c) misturas de moléculas e "buracos" (gás em rede) que descrevem bem o comportamento de fluidos próximos dos pontos críticos como o Ne, Ar, Kr, Xe, N_2 , O_2 , CO, CH_4 , etc ⁽¹⁸⁾. Isto é possível devido ao fato destes três tipos de sistemas serem representados abstratamente pelo mesmo modelo, onde em cada sítio de uma rede regular existe uma variável que só pode assumir dois valores (± 1). Por exemplo, se esta variável vale +1 (-1) pode significar que, (a) o spin correspondente aponta para cima (baixo) ou, (b) o sítio está ocupado pela espécie A (B), ou (c) a molécula está presente (ausente). Portanto, além de unificar áreas aparentemente bem distintas, o modelo apresenta, apesar de sua relativa simplicidade, descrições bastante boas de diversas substâncias ⁽¹⁹⁾. Onsager ⁽²⁰⁾ em 1944, conseguiu calcular exatamente a função de partição do modelo de Ising a campo magnético nulo em duas dimensões (rede quadrada), exibindo a mudança de fase para temperaturas finitas e cuja solução é um dos poucos exemplos solúveis de modelos de muitos corpos. Este modelo (que devido à sua relativa simplicidade e à existência de uma solução exata é um excelente teste para métodos aproximativos) também está na origem da mais recente revolução conceitual em fenômenos críticos causada pelo surgimento do grupo de renormalização ⁽²¹⁻²⁴⁾, pois este é baseado na hipótese de Kadanoff ⁽²⁵⁾ sobre blocos de spins, hipótese esta de

envolvida tendo como ilustração o modelo de Ising.

O estudo de grandezas termodinâmicas associadas a este modelo só dispõe até hoje de respostas exatas praticamente em duas dimensões (26,27). Em particular a tensão superficial (que só é diferente de zero na fase ordenada) nos fornece informações sobre o comportamento do sistema submetido a condições de contorno específicas. Em duas dimensões a resposta exata é conhecida (20,28-31) mas em dimensões superiores só são conhecidas algumas estimativas numéricas sobre o ponto crítico e o seu expoente crítico associado (1). O conhecimento do comportamento destas tensões em dimensões superiores permanece, portanto, reduzido, sendo de interesse teórico tentar ampliá-lo (32).

Um outro modelo estatístico, que apresenta comportamento crítico mais rico e complexo que o modelo de Ising, é o modelo de Potts (33,34), o qual contém o de Ising como caso particular. Ele foi proposto por Domb e Potts (que o estudou em sua tese de doutorado, em 1952) e consiste em supor que cada variável aleatória, associada a cada sítio de uma rede qualquer, pode assumir q estados. A energia de interação entre variáveis localizadas em sítios primeiros vizinhos da rede assume um valor se as duas variáveis estão em um mesmo estado e um outro valor, se estão em estados diferentes, não importando quais sejam (é também, como o Ising, um sistema com dois níveis de energia). A função de partição deste modelo, devido à sua complexidade, não é conhecida mesmo no caso bidimensional (a não ser na vizinhança do ponto crítico), sendo conhecidos nesta dimensão, os valores das temperaturas críticas (34) e dos expoentes críticos (35-37) como funções de q . Em dimensões superiores estes valores só são conhecidos em alguns casos através de estimativas numéricas (34). Portan

to, o estudo das grandezas termodinâmicas, da função de correlação (e do comprimento de correlação ξ associado à esta função) é feito utilizando-se métodos aproximativos. Em particular, do comprimento de correlação se conhece muito pouco (com exceção de ξ para $q = 2$ na rede quadrada) sobre como, por exemplo, ele varia com o número de estados q ou com a dimensão. Mesmo o cálculo de seus comportamentos assintóticos em dimensões maiores que 2 só é conhecido em alguns casos particulares ⁽³⁸⁻³⁹⁾.

Existem também realizações experimentais deste modelo na vizinhança do ponto crítico (pertencem à mesma classe de universalidade) tais como, por exemplo, átomos de ^4He adsorvidos em grafite com cobertura $1/3$ ⁽⁴⁰⁾ (realização experimental do modelo de Potts bidimensional com $q = 3$), a mistura dos fluidos etileno glicol + água + álcool laurílico + nitrometano + nitroetano ⁽⁴¹⁾ (realização experimental do modelo de Potts tridimensional com $q = 3$). Outros exemplos são exibidos no Capítulo IV. Este modelo se relaciona com vários outros modelos estatísticos, tais como o modelo $Z(N)$ ⁽³⁴⁾, o modelo de 6 vértices com regra do gelo ⁽⁴²⁾, o modelo de Ising ($q=2$) e com o problema da distribuição geométrica de ligações em função de sua concentração (suficiente ou não para originar "ilhas" infinitas de ligações conectadas), isto é, de percolação de ligações ($q \rightarrow 1$) ⁽⁴³⁻⁴⁶⁾

Se um tipo de desordem, semelhante à que existe em percolação de sítios ou ligações, ocorre em sistemas magnéticos, ela dá origem a compostos, chamados de sistemas desordenados (onde a aleatoriedade se manifesta, por exemplo, na posição dos íons magnéticos), cuja compreensão atual é bem menor que em sistemas magnéticos puros (onde não existe aleatoriedade). Nestes casos, várias questões conceituais novas (além da dificuldade natural

que os cálculos exatos apresentam) surgem. Em consequência, estes sistemas têm atraído muita atenção recentemente. Dentre os vários problemas novos que surgem estão, por exemplo, o tipo de preparação da amostra, se recozida ("annealed") ou temperada ("quenched"); a maneira da desordem (se substitucional ou estrutural); o tipo de aleatoriedade (se nos sítios, nas ligações ou em ambos); se o sistema é diluído ou misto; se apresenta interações aleatórias competitivas (vidro de spin), etc. Algumas questões importantes são, por exemplo, a variação das fronteiras críticas com a concentração de um dado átomo (por exemplo, de um átomo magnético como o Fe, Mn), se estes sistemas aleatórios apresentam ou não os mesmos expoentes críticos que os sistemas puros (isto é, pertencem à mesma classe de universalidade), etc. Exemplos de sistemas magnéticos (isolantes) desordenados são: $Mn_x Zn_{1-x} F_2$ ⁽⁴⁷⁾, $Co_x Zn_{1-x} Cs_3 Cl_5$ ⁽⁴⁸⁾, $Fe_x Mg_{1-x} Cl_2$ ⁽⁴⁹⁾ e de sistemas desordenados que apresentam interações competitivas e fase vidro de spin são o $CuMn$ ⁽⁵⁰⁾, o $AuFe$ ⁽⁵¹⁾, o $Eu_x Sr_{1-x} S$ ⁽⁵²⁾, etc. O modelo de Ising novamente se mostra adequado para discutir teoricamente os efeitos introduzidos pela aleatoriedade nas posições dos átomos. Isto pode ser feito supondo-se que os spins do modelo de Ising estão colocados aleatoriamente na rede, como por exemplo no $Co_x Zn_{1-x} Cs_3 Cl_5$ ⁽⁵³⁾, ou que existe uma distribuição de probabilidade sobre a constante de acoplamento, o que geralmente é consequência da aleatoriedade do tipo de átomo que serve como elemento de ligação entre dois outros ("superexchange"), o que ocorre em compostos do tipo $Co(S_x Se_{1-x})_2$ ⁽⁵⁴⁾ onde os átomos de S e Se atuam como elemento de ligação entre os átomos de Co. Podemos obter as fronteiras críticas deste modelo e estudar a sua classe de universalidade ⁽⁵⁵⁾. Se esta distribuição de probabilidade admitir tanto ligações ferromagnéticas quan-

to antiferromagnéticas podemos ter o efeito da frustração⁽⁵⁶⁾. O diagrama de fases pode ser analisado, podendo contribuir para o debate sobre a existência ou não da fase vidro de spin⁽⁵⁷⁻⁶²⁾.

O método que utilizamos nesta tese é o grupo de renormalização (GR) no espaço real^(23,63-64), que é uma técnica recente e poderosa para se poder estudar os fenômenos críticos (ver Capítulo I). Algumas das idéias subjacentes a este método são bastante gerais, permitindo a sua aplicação em áreas diversas das quais ele foi concebido [mecânica estatística de equilíbrio^(23,24), teoria de campos^(65,66)] como, por exemplo, em sistemas dinâmicos, onde se descobriu recentemente um tipo de universalidade em fenômenos caóticos⁽⁶⁷⁻⁷⁰⁾.

No Capítulo I expomos como, sob o nosso ponto de vista, o GR se coloca no contexto da teoria dos fenômenos críticos. Explicitamos essencialmente os seus conceitos básicos. No Capítulo II utilizamos o GR no espaço real para calcularmos a tensão superficial longitudinal do modelo de Ising na rede quadrada. O resultado obtido pode ser comparado com a solução exata obtida por Onsager⁽²⁰⁾ permitindo assim, uma avaliação sobre a precisão do método. No Capítulo III utilizamos o GR testado em duas dimensões ($d=2$) para estudar a tensão superficial em redes hipercúbicas ($d > 2$), onde não existe solução exata. A influência da dimensionalidade sobre a tensão superficial pôde ser então analisada. No Capítulo IV, devido ao fato de existir uma analogia entre a tensão superficial e o comprimento de correlação, calculamos este último em redes hipercúbicas ($d \geq 2$) para o modelo de Potts. A variação do comprimento de correlação com o número de estados e com a dimensão é estudada. No Capítulo V estudamos um sistema desordenado sem frustração (Ising) com ligações ferromagnéticas

mistas. Obtemos a sua fronteira crítica com grande precisão (a fronteira crítica exata não é conhecida). No Capítulo VI analisamos um modelo de Ising com interações aleatórias competitivas apresentando, portanto, frustração. Estudamos a fase vidro de spin na rede quadrada através do diagrama de fases do sistema.

CAPÍTULO I

FENÔMENOS CRÍTICOS E GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

1.1 - FENÔMENOS CRÍTICOS

São bastante conhecidos na natureza sistemas que podem se apresentar sob fases diferentes e que passam de uma fase à outra ao modificar-se continuamente o valor de seus parâmetros intensivos (transições de fase). Um exemplo bastante familiar destas transições é a água onde, ao aumentarmos a sua temperatura, passa da fase sólida (gelo, neve) para a fase líquida e, posteriormente, para a fase gasosa. Em um gráfico de pressão contra temperatura podemos mostrar os domínios correspondentes às várias fases de um fluido típico, ver Figura 1.1.1.

As transições de fase, em geral, podem ou não apresentar calor latente no ponto de transição. Se existe calor latente, a transição é dita de primeira ordem (o parâmetro de ordem do sistema apresenta um "salto" no ponto de transição) e, caso

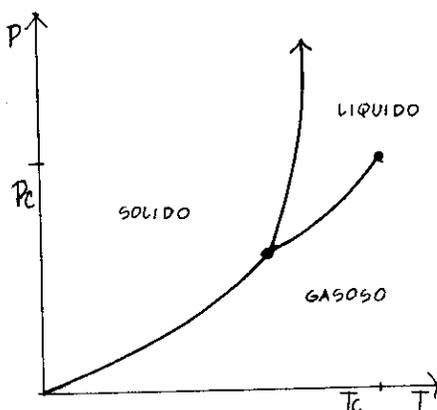


Figura 1.1.1 - Diagrama de fases típico de um fluido. As linhas representam as fronteiras de coexistência entre as fases. O ponto (T_c, P_c) é um ponto crítico (a transição é contínua).

contrário, a transição é chamada contínua (não há descontinuidade no parâmetro de ordem). O parâmetro de ordem é uma função de estado que é

nulo na fase desordenada ($T > T_c$) e é diferente de zero na fase ordenada ($T < T_c$), tal como, por exemplo, a magnetização espontânea em sistemas ferromagnéticos, a polarização espontânea em sistemas ferroelétricos, a concentração p , em uma sub-rede, do átomo A pertencente a uma liga binária $A_x B_{1-x}$, etc. Do ponto de vista teórico as transições contínuas (também conhecidas como fenômenos críticos) são mais interessantes devido à complexidade e sutileza que apresentam. O diagrama de fases de um sistema ferromagnético (cuja transição é contínua) está mostrado na Figura 1.1.2 em um gráfico de campo magnético contra temperatura. Acima de T_c o sistema é paramagnético e abaixo de T_c , com $H = 0$, ele é ferromagnético (existe magnetização espontânea ^(2, 71)). Apresentar o diagrama de fases do sistema em consideração é, geralmente, um dos objetivos centrais na área de transição de fase e fenômenos críticos.

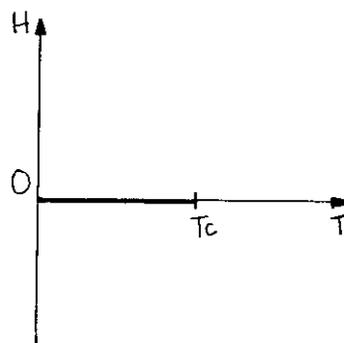


Figura 1.1.2 - Diagrama de fases para um sistema ferromagnético. Só há magnetização espontânea para $T < T_c$ e $H = 0$ (fase ferromagnética).

Existem muitos outros tipos de fase além das duas já citadas tais como: transições em sistemas que apresentam ferroeletricidade ^(72, 73), superfluidez ^(74, 75), supercondutividade ^(76, 77), em soluções ^(78, 79), transições ordem-desordem em ligas ^(17, 80) e em sistemas adsorvidos ^(40, 81), transições mesomórficas em cristais líquidos ⁽⁸²⁾, sistemas magnéticos em geral ^(83, 84), etc. Encontrar um embasamento teórico comum entre estas transições tão diversas é uma das grandes realizações da física moderna.

As primeiras tentativas teóricas onde se podia estudar

transições (Van der Waals em 1873⁽⁸⁵⁾ para fluidos, Weiss em 1907⁽⁸⁶⁾ com a teoria do campo molecular para sistemas magnéticos, Ornstein e Zernicke em 1914⁽⁸⁷⁾ com a função de correlação direta, etc) tinham em comum o fato de não considerarem adequadamente as flutuações das entidades microscópicas do sistema em que estavam interessados. Landau⁽⁸⁸⁻⁹²⁾, fez um notável trabalho no qual unificava as teorias anteriores e fornecia uma explicação qualitativa, baseada na hipótese da energia livre ser uma função analítica do parâmetro de ordem, do porque uma transição é de primeira ordem ou contínua. Mas as flutuações microscópicas novamente não eram levadas em consideração. Se supomos que próximo da temperatura crítica (em transições contínuas) o calor específico (C) (a volume constante para fluidos e a campo magnético constante para sistemas magnéticos), a susceptibilidade isoterma χ_T (a compressibilidade isoterma κ_T para fluidos) e o parâmetro de ordem M (magnetização espontânea para magnetos e diferença entre a densidade do fluido e a densidade crítica ρ_c , que é o valor da densidade do fluido no ponto crítico, ver Fig. 1.1.1) se comportam como ($\epsilon \equiv |1 - T/T_c|$)

$$C \sim \epsilon^{-\alpha} \quad (1.1.1)$$

$$\chi_T \sim \epsilon^{-\gamma} \quad (1.1.2)$$

$$M \sim \epsilon^\beta, \quad (1.1.3)$$

a teoria de Landau prediz que $\alpha = 0$ (descontinuidade), $\beta = 1/2$ e $\gamma = 1$ qualquer que seja a dimensão do sistema. Estes são também os valores preditos pelas teorias de Van der Waals e de Weiss, que são generalizadas pela teoria de Landau.

Uma série de experiências feitas por Guggenheim⁽¹⁸⁾ so

bre fluidos mostrou que o parâmetro de ordem destes, próximo do ponto crítico, ($\rho - \rho_c$ onde ρ é a densidade do fluido) tem um comportamento do tipo

$$\rho - \rho_c \sim \epsilon^\beta \tag{1.1.4}$$

onde $\beta \cong 1/3$ diferindo do resultado de campo molecular (ver Figura 1.1.3). Um ano antes (1944) Onsager ⁽²⁰⁾ conseguiu resolver

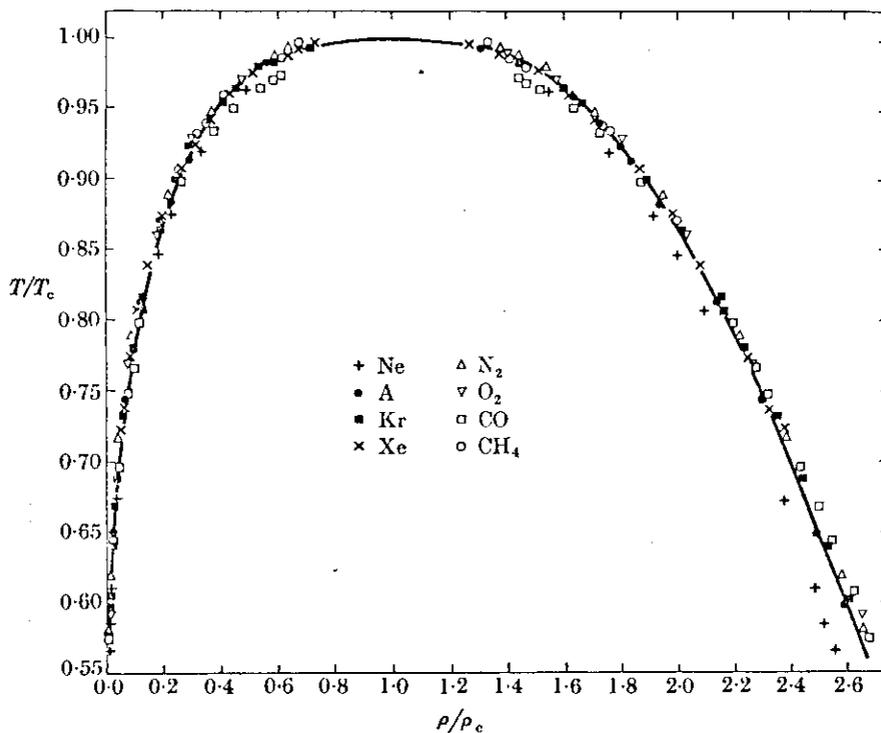


Figura 1.1.3 - Curva de coexistência de oito fluidos (projeção da superfície p vs ρT no plano ρT). A curva sólida corresponde à equação cúbica, isto é, $\beta = 1/3$. De Guggenheim (1945).

o modelo de Ising (proposto por Lenz e Ising em 1920 ^(4, 8, 26)) na rede quadrada obtendo uma divergência logarítmica no calor específico (contrastando com a descontinuidade predita pela teoria de campo molecular). Na Tabela 1.1.1 mostramos os valores dos expoentes críticos fornecidos pelo campo molecular, pelos resultados experimentais, pela solução exata do modelo de Ising em duas dimensões e estimativas numéricas destes expoentes para o modelo de Ising em três dimensões. Os expoentes críticos δ , η e ν serão

Tabela 1.1.1 - Comparação entre os valores dos expoentes críticos fornecidos pela experiência, pelo campo molecular e pelos modelos de Ising bidimensional (solução exata) e tridimensional (estimativas numéricas - cas. De Stanley (2)).

exponentes sistemas	α	β	γ	δ ($\epsilon=0$)	η ($\epsilon=0$)	ν
Fluido	$C_{V=V_C} \sim \epsilon^{-\alpha}$	$\rho-\rho_C \sim \epsilon^\beta$	$\kappa_T \sim \epsilon^{-\gamma}$	$ \rho-\rho_C \sim \rho-\rho_C ^{1/\delta}$	$G(R) \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}}$	$\xi \sim \epsilon^{-\nu}$
Magneto	$C_{H=0} \sim \epsilon^{-\alpha}$	$M_{H=0} \sim \epsilon^\beta$	$\chi_T \sim \epsilon^{-\gamma}$	$M \sim H^{1/\delta}$	$\Gamma(R) \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}}$	$\xi \sim \epsilon^{-\nu}$
Valores experimentais típicos (d=3) fluido ou magneto	0 - 0.2	0.3 - 0.5	1.1 - 1.4	4.2 - 4.4	0 - 0.1	0.5 - 0.7
Campo molecular	0 (descontínuo)	1/2	1	3	0	1/2
Ising (d=2)	0 (log)	1/8	7/4	15	1/4	1
Ising (d=3) (93)	0.125±0.020	0.312±0.005	1.250 ^{+0.003} -0.007	5.006 ^{+0.075} -0.085	0.041 ^{+0.017} -0.030	0.638 ^{+0.002} -0.008

definidos posteriormente.

Assim, após as evidências experimentais e teóricas, a falha do campo molecular no que se refere ao cálculo dos expoentes críticos, se torna clara. A falha está na desconsideração das flutuações as quais se tornam da ordem do sistema quando este se aproxima do ponto crítico. Mas a consideração destas flutuações gigantescas envolvendo milhares de graus de liberdade do sistema (spins por exemplo) em comportamento cooperativo estava totalmente fora do alcance das teorias da época. Desta maneira, por algum tempo, o tratamento teórico das transições de fase permaneceu como uma área de difícil acesso. O próprio reconhecimento de que os expoentes críticos eram quantidades de extrema relevância nos fenômenos críticos só aconteceu no começo da década de 60 através do trabalho de vários autores (38, 94, 99).

Em 1965 Widom⁽¹⁰⁰⁾ fez uma hipótese que marcaria o início de uma compreensão totalmente nova sobre os fenômenos críticos. As teorias para fluidos do tipo Van der Waals fornecem para o potencial químico μ na vizinhança do ponto crítico a expressão

$$\mu(\rho, T) - \mu(\rho_c, T) = (\rho - \rho_c) [T - \tau(\rho)] \phi \quad (1.1.5)$$

onde a equação $T = \tau(\rho)$ fornece a curva de coexistência de fases no plano T, ρ e ϕ é uma constante. A hipótese de Widom é supor que ϕ seja uma função homogênea de $T - T_c$ e $T_c - \tau(\rho)$ com um grau de homogeneidade positivo (uma função $\phi(x, y)$ é homogênea se satisfaz a propriedade $\phi(\lambda x, \lambda y) = \lambda^p \phi(x, y)$ para qualquer $\lambda \in \mathbb{R}$, sendo p o seu grau de homogeneidade⁽¹⁰¹⁾). Esta hipótese leva a uma compressibilidade isotérmica e a um calor específico não-clássico

cos (isto é, os expoentes γ e α respectivamente, são diferentes dos fornecidos pelo campo molecular), cujos expoentes críticos dependerão do grau de homogeneidade da função ϕ . Desta maneira, poder-se-ia obter os expoentes críticos reais (não-clássicos) adotando-se, fenomenologicamente, o grau de homogeneidade adequado ao sistema em estudo.

Existem outros expoentes críticos além daqueles mostrados nas eqs. (1.1.1), (1.1.2) e (1.1.3) e estão relacionados com o comportamento à longa distância da função de correlação $\Gamma(R)$ ($\Gamma(R) \equiv \langle S(0)S(R) \rangle - \langle S(0) \rangle \langle S(R) \rangle$) em $T = T_c$, com a relação entre M e H (campo magnético em $T = T_c$ e com o comportamento do comprimento de correlação ξ em temperaturas próximas de T_c . Temos que

$$\Gamma(R) \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}} \quad (T=T_c, R \rightarrow \infty) \quad (1.1.6)$$

$$M \sim H^{1/\delta} \quad (T=T_c, H \rightarrow 0) \quad (1.1.7)$$

$$\xi \sim \epsilon^{-\nu} \quad (T \rightarrow T_c) \quad (1.1.8)$$

Na Tabela 1.1.1 mostramos os valores para η , δ e ν fornecidos pelo campo molecular, pelo modelo de Ising bidimensional e tridimensional e alguns resultados experimentais típicos.

Formalmente, costuma-se definir os expoentes α' , γ' , ν' para $T < T_c$ e α , γ , ν para $T > T_c$ mas tanto experimentalmente quanto teoricamente (solução exata do modelo de Ising bidimensional, campo molecular, hipótese de escala) tem-se que as relações

$$\alpha' = \alpha \quad (1.1.9)$$

$$\gamma' = \gamma \quad (1.1.10)$$

$$v' = v \quad (1.1.11)$$

geralmente se verificam, portanto passaremos a utilizar indistintamente α , γ e v para temperaturas maiores ou menores que a crítica.

Além das eqs. (1.1.9), (1.1.10) e (1.1.11) existem outras relações entre os expoentes críticos que podem ser obtidas de argumentos termodinâmicos a saber:

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (\text{Rushbrooke } \underline{(102)}) \quad (1.1.12)$$

$$\gamma \geq \beta(\delta-1) \quad (\text{Widom-Griffiths } \underline{(100,103)}) \quad (1.1.13)$$

$$\gamma \leq v(2-\eta) \quad (\text{Fisher } \underline{(104)}) \quad (1.1.14)$$

$$dv = 2-\alpha \quad (\text{Josephson ou "hyperscaling" } \underline{(105)}) \quad (1.1.15)$$

Aplicando-se a hipótese de homogeneidade de Widom à parte singular do potencial termodinâmico e da função de correlação, obtém-se que estas desigualdades se tornam igualdades relacionando os expoentes críticos,

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (1.1.16)$$

$$\gamma = \beta(\delta-1) \quad (1.1.17)$$

$$\gamma = v(2-\eta) \quad (1.1.18)$$

$$dv = 2-\alpha \quad (1.1.19)$$

Portanto, dos seis expoentes críticos definidos acima (α , β , γ , δ , η , v) somente dois são independentes, os outros podendo ser obtidos através das relações (1.1.16), (1.1.17), (1.1.18) e (1.1.19).

1.2 - CONSTRUÇÃO DE KADANOFF

A não analiticidade das funções termodinâmicas (magnetização, susceptibilidade, calor específico, etc) e da função de correlação no ponto crítico é consequência do limite termodinâmico. Esta afirmação pode ser exemplificada se considerarmos um modelo físico simples como o de Ising

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (1.2.1)$$

onde J_{ij} é a constante de acoplamento entre os spins σ_i e σ_j , σ_i representa uma variável aleatória que pode assumir os valores ± 1 associada ao sítio i de uma dada rede e $\langle i,j \rangle$ indica que a soma é feita sobre pares de sítios primeiros vizinhos nesta rede. A função de partição será

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{\sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} \sigma_i \sigma_j} \quad (K_{ij} = \frac{J_{ij}}{k_B T}) \quad (1.2.2)$$

É claro que se o número de sítios da rede é finito, então Z será analítico em qualquer temperatura e não haverá comportamentos singulares nas funções termodinâmicas, as quais podem ser deduzidas de Z . Se o número de sítios da rede tende ao infinito, então eventualmente a soma na exponencial da eq. (1.2.2) se torna infinita, possibilitando a não-analiticidade. Nas várias teorias existentes sobre fenômenos críticos, o que basicamente as diferencia é a escolha da "função" que se considerará analítica no ponto crítico, permitindo assim, através desta função, obter-se os resultados procurados. Na teoria de campo molecular supõe-se

que a energia livre (portanto a função de partição) é analítica em relação ao parâmetro de ordem na temperatura crítica (hipótese falsa no limite termodinâmico); na teoria de Ornstein-Zernicke o que se supõe analítico em T_c é a chamada função de correlação direta (o que também não é correto em T_c) etc. Todas estas teorias escolhiam "funções" que representavam algum tipo de média sobre todo o sistema e a supunham analítica no ponto crítico. Isto sempre será falso e levará aos expoentes críticos clássicos (isto é, os do campo molecular). Aqui surge a originalidade da contribuição de Kadanoff⁽²⁵⁾. A "função" por ele escolhida para ser analítica não era algum tipo de média sobre todo o sistema, mas sim um tipo de média local, envolvendo um número finito de graus de liberdade. Para sermos específicos, consideremos o modelo de Ising, descrito pela eq. (1.2.1), em uma rede hipercúbica de d dimensões. Se dividirmos a rede em células que contêm L sítios em um "lado" então cada célula nesta rede d -dimensional conterá L^d sítios. Assumindo que estamos próximos de T_c , o comprimento de correlação é grande e podemos assumir $L \gg 1$ (parâmetro de rede cristalino = 1) mas, ao mesmo tempo, $L \ll \xi$. Seja α (não confundir com o expoente crítico α) uma destas células. Kadanoff propôs que cada uma delas se comporta como um spin, isto é,

$$\sum_{i \in \alpha} \sigma_i = \mu_\alpha \langle \sigma \rangle_L L^d, \quad (1.2.3)$$

onde $\mu_\alpha = \pm 1$ [$\langle \sigma \rangle_L$ é definido pela eq. (1.2.3)] e que a interação entre estas células é também do tipo Ising, tendo, portanto, como Hamiltoniano celular (H_{celular}) a expressão

$$\frac{H_{\text{celular}}}{k_B T} = \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} \tilde{K}_{\alpha\beta}(K_{ij}, L) \mu_\alpha \mu_\beta + f_{\text{int.}}(K_{ij}, L) \quad (1.2.4)$$

sendo $\tilde{K}_{\alpha\beta}(K,L)$ uma nova constante de acoplamento, agora entre as células α e β e $f_{int}(K,L)$ é uma constante que pode surgir ao se fazer a média sobre as células. A nova constante de acoplamento \tilde{K} é a "função" que será suposta analítica em T_c ($\epsilon = 0$), agora com o argumento que, em uma célula de tamanho L finito, a hipótese de analiticidade de \tilde{K} é bastante razoável.

O comprimento de correlação ξ que na rede original era, digamos, 1000 em unidades do parâmetro de rede original ($=1$) será na nova rede (cujo parâmetro de rede agora é L) $\frac{1000}{L}$ pois os comprimentos se reescalam como $X' = X/L$.

Portanto, como o modelo da eq. (1.2.4) é o mesmo da eq. (1.2.1), o comprimento de correlação de ambos os sistemas será a mesma função de sua constante de acoplamento e teremos (omitiremos os índices de K e \tilde{K} por simplicidade)

$$\xi[\tilde{K}(K)] = \frac{1}{L} \xi(K) \quad . \quad (1.2.5)$$

A singularidade de $\xi(K)$ surge no ponto crítico K_c e, em consequência da eq. (1.2.5), segue-se que

$$\tilde{K}(K_c) = K_c \quad . \quad (1.2.6)$$

É claro que, para os pontos fixos da equação $\tilde{K}(K^*) = K^*$ ξ deve satisfazer à equação

$$\xi = \frac{1}{L} \xi \quad (L > 1) \quad , \quad (1.2.7)$$

o que só pode ser realizado se $\xi = 0$ ou ∞ . Em $K = K_c$ sabemos que ξ diverge (o sistema possui invariância de escala) enquanto que para $K = 0$ ($T = \infty$) ou $K = \infty$ ($T = 0$) ξ deve ser nulo ($\tilde{K}(0) =$

= 0 e $\tilde{K}(\infty) = \infty$). Supondo $\tilde{K}(K)$ analítica em K , temos, para K próximo de K_c

$$\tilde{K}(K) = \tilde{K}(K_c) + \lambda (K - K_c) \quad (1.2.8)$$

onde $\lambda = \left. \frac{d\tilde{K}}{dK} \right|_{K=K_c}$. Assim

$$\tilde{K}(K) - K_c = \lambda (K - K_c) \quad (1.2.9)$$

Se supomos que ξ se comporta como $(K - K_c)^{-\nu}$ para K na vizinhança de K_c então

$$\frac{\xi[\tilde{K}(K)]}{\xi(K)} = \frac{(\tilde{K}(K) - K_c)^{-\nu}}{(K - K_c)^{-\nu}}$$

que, juntamente com as eqs. (1.2.5) e (1.2.9) nos permite obter

$$\frac{1}{L} = \lambda^{-\nu} \quad (1.2.10)$$

fornecendo a relação

$$\nu = \frac{\ln L}{\ln \lambda} \quad (1.2.11)$$

Desta maneira a hipótese de Kadanoff sobre a analiticidade de $\tilde{K}(K)$ nos permite obter um valor de ν que pode ser não-clássico (ele depende da derivada de \tilde{K} com relação a K no ponto crítico).

A partir deste modelo simples de Kadanoff (onde foi também considerado o campo magnético nas eqs. (1.2.1) e (1.2.4)) podemos obter que as partes singulares das funções termodinâmicas e da função de correlação próximo de T_c devem ser homogêneas (como sugeriu Widom) e conseqüentemente as leis de escala, dadas pelas eqs. (1.1.16), (1.1.17), (1.1.18) e (1.1.19), são reobtidas. Existe porém uma lacuna: como calcular $\tilde{K}(K)$? Kadanoff na-

da diz sobre isto, o que foi feito posteriormente por Wilson (21,22,24) que propôs uma forma concreta de se calcular os equivalentes de $\tilde{K}(K)$ e interpretou de uma maneira brilhante os mapeamentos que daí resultam (grupo de renormalização).

1.3 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

A compreensão do papel do comprimento de correlação nas transições de fase contínuas é de fundamental importância. Para vermos isto basta observarmos que, por exemplo, os 10^{23} graus de liberdade (GL) que uma amostra de fluido contém apresentam, em condições normais, os mesmos valores para as observáveis intensivas (densidades de energia, de massa, etc) do que, digamos, 1000 graus de liberdade. Podemos diminuir o número de GL do sistema sem afetar estas propriedades até um número da ordem de ξ^d onde d é a dimensão do sistema. Desta maneira se estamos, por exemplo, à alta temperatura, ξ é da ordem de 1 ou 2 espaçamentos atômicos, permitindo-nos utilizar as técnicas que assumem que as propriedades da matéria estão relacionadas com as propriedades de pequenas células de átomos (expansões de virial, métodos perturbativos, Hartree-Fock, etc). Mas se estamos a uma temperatura próxima de T_c , ξ é muito grande implicando que milhares de GL estão correlacionados tornando os métodos acima inaplicáveis.

O grupo de renormalização tem dois grandes objetivos. O primeiro é diminuir o número de GL do sistema, tornando-o acessível aos métodos citados anteriormente. Isto pode ser visualizado, por exemplo, na construção de Kadanoff (Seção 1.2), ver Fig. 1.3.1. Se iniciamos de uma temperatura $K_n = J/k_B T_n$ próxima de

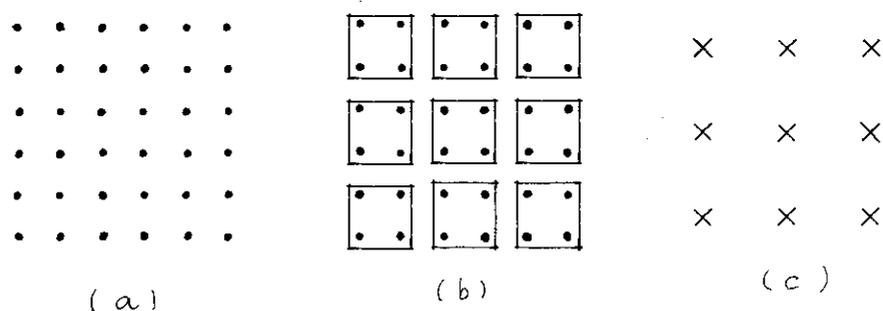


Fig. 1.3.1 - Redução de GL utilizando a construção de Kadanoff. A rede original (de espaçamento igual a um) (a) de spins é dividida em blocos de tamanho $L = 2$ (b) e os quatro spins de cada bloco são substituídos por 1 spin de uma nova rede de espaçamento entre os spins igual a 2.

T_c , ξ_n é grande indicando que existem muitos GL atuando cooperativamente. Construindo as células de Kadanoff de tamanho L cada uma (contém L^d GL) verificamos que após substituir os L^d spins de uma célula por um único spin (redução de GL), os comprimentos de correlação se relacionam como [ver eq. (1.2.5)]

$$\xi_{n+1}(K_{n+1}) = \frac{\xi_n(K_n)}{L} \quad . \quad (1.3.1)$$

Se sobre a nova rede repetimos o processo obtemos

$$\xi_{n+2}(K_{n+2}) = \frac{\xi_{n+1}(K_{n+1})}{L} = \frac{\xi_n(K_n)}{L^2} \quad . \quad (1.3.2)$$

Após m vezes,

$$\xi_{n+m}(K_{n+m}) = \frac{\xi_n(K_n)}{L^m} \quad . \quad (1.3.3)$$

Desta maneira, quando $L^m \sim \xi_n(K_n)$ isto implica que $\xi_{n+m}(K_{n+m})$ é

da ordem de 1, permitindo que o problema seja resolvido por outros métodos. O importante é que em cada etapa só temos que considerar L^d GL ($L = 2, 3, \dots$). Observamos que na primeira etapa o número de GL é da ordem de ξ_n^d ($\xi_n \gg L$). Uma das precauções a ser observada é evitar o aparecimento, em qualquer etapa, de forças de longo alcance no "novo" Hamiltoniano entre células, pois forças de alcance $\geq \xi$ invalidam o GR.

O segundo objetivo é explicar, qualitativamente, as diferentes formas (por exemplo, diferentes classes de universalidade) que o comportamento cooperativo apresenta. Esta explicação surge como consequência do caráter iterativo do grupo. Na seção anterior verificamos que, iniciando com o Hamiltoniano dado pela eq. (1.2.1), obtivemos um novo Hamiltoniano dado pela eq. (1.2.4) (após a operação de redução dos GL). Se a operação é repetida no Hamiltoniano da eq. (1.2.4) obteremos um outro Hamiltoniano e assim por diante. O que foi renormalizado nestas operações foi a constante de acoplamento ($K = J/k_B T$). Isto nos fornece um processo iterativo em uma dimensão (a dimensão associada ao parâmetro K). Em um caso mais geral onde o Hamiltoniano inicial tenha várias constantes de acoplamento e vários campos externos aplicados (a temperatura é considerada um parâmetro assim como as constantes de acoplamento e os campos externos), a operação de redução dos GL do sistema implicará em um novo Hamiltoniano cujos parâmetros estarão renormalizados (serão funções, supostas analíticas, dos parâmetros iniciais). Imaginando um espaço, abstrato, cujos eixos sejam os parâmetros do Hamiltoniano, a operação de redução dos GL (que chamaremos τ) fará com que o ponto inicial percorra uma trajetória neste espaço se aplicarmos τ repetidas vezes. Seja H_0 o Hamiltoniano inicial dividido por $k_B T$. Tere -

mos

$$\tau(H_0) = H_1 ; \tau(H_1) = H_2 ; \tau(H_2) = H_3 , \text{ etc} . \quad (1.3.4)$$

Cada ponto deste espaço de parâmetros do Hamiltoniano pode ser interpretado como um estado definido do sistema em uma dada temperatura. Se continuamos aplicando a transformação τ , a sequência pode se aproximar de um ponto fixo, isto é, um Hamiltoniano, H^* , que satisfaça à equação

$$\tau(H^*) = H^* . \quad (1.3.5)$$

Isto é o que acontece na absoluta maioria de trabalhos sobre GR, mas recentemente se conseguiu obter um GR que apresentava comportamento caótico⁽¹⁰⁶⁾, mostrando que a topologia conhecida em sistemas dinâmicos (pontos fixos, ciclos limites, caos, etc.) pode ter correspondência no GR. O ponto fixo de uma transformação é uma propriedade dela somente. Ele não faz referência ao ponto inicial que, através das iterações, termina no ponto fixo (é claro que, ver eqs.(1.2.6) e (1.2.11), os pontos fixos da transformação τ devem pertencer a superfícies iso- ξ no espaço dos parâmetros com $\xi = 0$ ou $\xi = \infty$). O fato de não fazer referência ao estado inicial indica que, se um ponto fixo H^* pertence à superfície iso- ξ com $\xi = \infty$ (S_∞), todos os pontos iniciais que terminarem, após uma série de aplicações τ , neste ponto fixo terão o mesmo comportamento crítico (o comportamento crítico, isto é, o conjunto de expoentes críticos, é determinado pelos pontos fixos de τ pertencentes a S_∞). Daí emerge naturalmente a idéia de universalidade, fenômeno conhecido experimentalmente e que significa que sistemas físicos diferentes (pontos iniciais diferentes no espaço dos parâmetros) têm o mesmo comportamento crítico (tem o

mesmo ponto fixo sob a aplicação τ). Ver por exemplo, a Fig. 1.1.3 (Guggenheim) onde existe uma espécie de lei de estados correspondentes entre as diversas substâncias (1, 2, 18).

Podemos sintetizar a imagem teórica do GR da seguinte maneira: seja um sistema cujo Hamiltoniano, dividido pela temperatura, representa um ponto no espaço dos parâmetros do Hamiltoniano. Assim que a temperatura do sistema varia, este ponto descreve uma trajetória que é chamada de linha física. Esta linha atravessa superfícies iso- ξ (pois ξ depende da temperatura) até cruzar a superfície de comprimento de correlação infinito S_∞ . Este é o ponto crítico do sistema, ver Fig. 1.3.2. Geralmente não é um ponto fixo de τ . Aplicando τ a este ponto crítico, a trajetória evoluirá sobre a superfície S_∞ até chegar a um ponto fixo de S_∞ . Este ponto controlará o comportamento crítico do sistema. Ver Fig. 1.3.3. Se houver outros pontos fixos de τ em S_∞ então

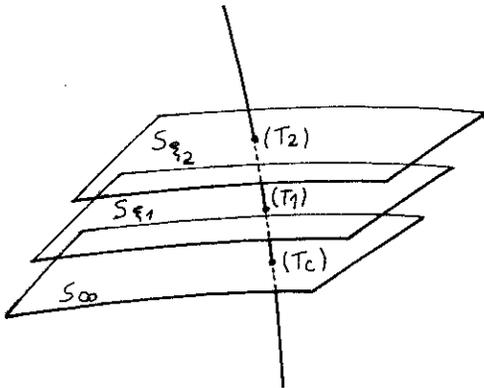


Figura 1.3.2 - linha física cruzando as superfícies iso- ξ . $\xi_2 < \xi_1 < \xi_c = \infty$.

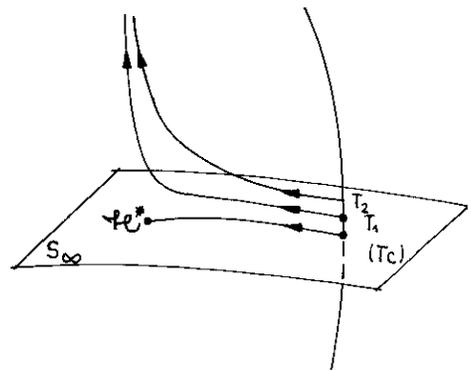


Figura 1.3.3 - Trajetórias partindo da linha física sob a aplicação de τ . $T_2 > T_1 > T_c$.

haverá "bacias atratoras" correspondentes a estes pontos, isto é, haverá uma região de S_∞ que, sob τ , evolue para um ponto fixo, digamos H_A^* ; outra região de S_∞ evoluirá para outro ponto H_B^* , etc.

Estas regiões são domínios de universalidade. A competição entre estes pontos fixos de τ pertencentes a S_∞ dá origem ao fenômeno de cruzamento ("crossover"), isto é, o sistema físico aparenta ter um comportamento crítico que, se nos aproximamos mais de T_c , é alterado para outro conjunto de expoentes críticos (mudança de classe de universalidade).

Na vizinhança de cada ponto fixo de τ (e S_∞), podemos fazer uma análise linear (linearizando τ) e estudar a sua estabilidade. Isto pode ser feito considerando-se o Jacobiano da transformação de um ponto desta superfície em outro ponto da mesma e calculando o seu valor no ponto fixo de τ que se quer estudar. Os auto-vetores são as direções privilegiadas, ao redor do ponto fixo, que se renormalizam com uma simples mudança de escala após a aplicação de τ (são chamados "campos de escala" e são combinações dos parâmetros do Hamiltoniano). Estas direções privilegiadas têm sido verificadas experimentalmente em vários casos ⁽¹⁰⁷⁾. Os auto-valores, cada qual associado a um campo de escala, podem ser relevantes (> 1), irrelevantes (< 1) ou marginais ($= 1$). Os campos de escala relevantes (auto-valor > 1), uma vez diferentes de zero, levarão o sistema a um outro ponto fixo (comportamento crítico diverso), diferente daquele no qual se fez a análise linear, que se torna então instável ao longo daquela direção particular. Os campos de escala irrelevantes (auto-valor < 1) não alteram o comportamento crítico (o sistema se aproxima do ponto fixo estudado, que é estável ao longo desta direção) e os campos de escala marginais não têm estabilidade definida no contexto desta análise. Assim, os pontos fixos de τ podem ser, dentro de S_∞ , totalmente estáveis (pontos críticos ordinários), isto é, os auto-valores associados a todos os campos de escala pertencentes

a S_∞ deste ponto fixo são menores que um; instáveis em uma direção (campo de escala) somente (pontos tricríticos); instáveis em duas ou mais direções (pontos multicríticos), etc (é claro que a temperatura e o campo magnético são sempre campos de escala relevantes para qualquer ponto fixo pertencente a S_∞ ; mas são campos de escala que não pertencem a S_∞). Teremos assim uma imagem que se assemelha com o de uma bacia hidrográfica com suas "cordilheiras" e "vales", ver Fig. 1.3.4.

O grande mérito do GR é ter transformado um problema altamente singular em um problema regular num espaço abstrato, onde cada eixo deste espaço não representa algum tipo de média sobre todo o sistema mas sim algum tipo de média local, preservando a analiticidade destes parâmetros (eixos) mesmo no ponto crítico. Desta maneira o GR interpreta um fenômeno crítico como o estudo de um mapeamento em um espaço abstrato adequado.

O método inicial do GR para calcular, concretamente, as funções equivalentes a $\tilde{K}(K)$ de Kadanoff, eq. (1.2.4), foi realizar as médias não no espaço real, como Kadanoff propôs, mas no espaço recíproco, isto é, o espaço dos momenta. Ele consiste basicamente em se integrar uma Hamiltoniana do tipo Landau - Guinzburg ^(108, 24) sobre os grandes vetores de onda [existe um corte ("cut-off") natural para os grandes vetores de onda que é proporcional ao inverso do parâmetro de rede, evitando assim a cha-

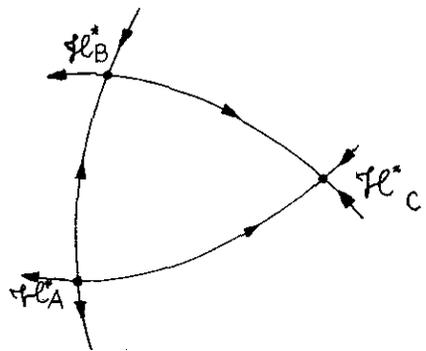


Figura 1.3.4 - Um possível exemplo onde H_A^* , H_B^* e H_C^* são pontos fixos de τ pertencentes a S_∞ . H_A^* é totalmente instável (pico), H_B^* é semi-estável (ponto de sela) e H_C^* é totalmente estável em S_∞ (vale).

mada divergência ultravioleta que aparece comumente em teoria de campos onde não existe este tipo de corte], o que corresponde a se fazer uma média sobre uma região finita da rede (bloco de tamanho L de Kadanoff⁽¹⁰⁹⁻¹¹¹⁾). Após esta integração parcial sobre os momenta, faz-se uma mudança de escala para se reobter a densidade original de GL, relacionando assim os parâmetros do novo Hamiltoniano com os parâmetros do antigo. Conseguindo-se isto pode-se fazer toda a análise topológica descrita nesta seção. O essencial neste tipo de formulação é que ele não se detem sobre a especificidade da rede em consideração (se é cúbica simples, FCC, etc) mas sim sobre os aspectos "universais" do modelo, isto é, a dimensão da rede e a dimensão do parâmetro de ordem, que se sabe serem fundamentais para se definir as classes de universalidade. Assim, esta formulação obtém bons resultados no que tange ao cálculo dos expoentes críticos para algumas dimensões, mas falha no cálculo, por exemplo, das superfícies críticas que são sensíveis à estrutura microscópica da rede.

Em particular, para um grande número de fenômenos críticos, esta formulação consegue mostrar que para $d > 4$ só existe um ponto fixo estável sobre S_∞ , que é o chamado ponto fixo gaussiano cujos expoentes críticos associados são os mesmos que os fornecidos pelo campo molecular. Portanto, podemos concluir que se fosse possível observarmos a ocorrência de qualquer um destes fenômenos críticos em uma dimensão superior a quatro os expoentes críticos obtidos seriam sempre iguais aos fornecidos pelo campo molecular. Em $d = 4$ existe uma coalescência de dois pontos fixos sobre S_∞ , o gaussiano e um novo ponto fixo sendo este um caso marginal. Para $d < 4$ o novo ponto fixo se afasta suavemente do ponto fixo gaussiano, o qual se torna instável enquanto o novo ponto fixo (chamado de pon

to fixo não-trivial) é estável sobre S_∞ . Isto implica, pelas discussões precedentes, que para $d < 4$ os expoentes críticos estão associados ao ponto fixo não-trivial sendo portanto diferentes dos fornecidos pelo campo molecular. Como o ponto fixo não-trivial se afasta suavemente do ponto fixo gaussiano, podemos expandir os expoentes críticos associados ao novo ponto fixo a partir dos expoentes de campo molecular em potências de $\epsilon = 4-d$ (não confundir com o ϵ definido anteriormente, representando o afastamento de T_c). Mas os sistemas físicos são no máximo tridimensionais, implicando que para se calcular os expoentes críticos de sistemas em $d = 3$ necessitamos assumir $\epsilon = 1$ na série. Obviamente para sistemas quase bidimensionais esta expansão já não faz muito sentido ($\epsilon = 2$). Mas em $d = 3$, apesar de $\epsilon = 1$ consegue-se obter bons resultados para os expoentes críticos, comparáveis aos obtidos por séries ^(93,111).

1.4 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO REAL

Posteriormente, com a consolidação dos novos conceitos introduzidos pelo GR, surgiu uma formulação do GR no espaço real ^(23, 112) que é uma concretização da imagem de Kadanoff e que consiste basicamente em como se fazer a média sobre o bloco de spins de tamanho L para se poder obter os análogos a $\tilde{K}(K)$.

Suponhamos, por exemplo, um sistema físico em uma rede d -dimensional cujo Hamiltoniano, dividido por $k_B T$, seja dado por

$$H(S) = H \sum_i S_i + K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \dots \quad (1.4.1)$$

onde $S_i = \pm 1$, $\langle i, j \rangle$ significa a soma sobre pares de sítios primeiros vizinhos, e $+ \dots$ representa que também existem interações entre três, quatro, etc, spins (as variáveis S_i). A adição de mais termos no Hamiltoniano além do campo magnético (H) e da interação entre primeiros vizinhos ($K = J/k_B T$) é necessária devido a que, se iniciamos com um Hamiltoniano que contenha somente estes parâmetros, após a renormalização (aplicação da transformação τ) surgirão constantes de acoplamento entre três, quatro ou mais spins (mas sempre interações de curto alcance). Portanto, a suposição inicial de vários parâmetros (constantes de acoplamento) no Hamiltoniano é simplesmente para podermos trabalhar em um espaço fechado (a rigor deveríamos trabalhar com tantos parâmetros quantos forem os gerados nas renormalizações, mas se este número for grande faz-se necessário limitar a dimensão deste espaço de parâmetros). Suponhamos que existam N spins S_i nesta rede. Consideremos agora um conjunto de N' spins celulares (spins correspondentes a um bloco de Kadanoff) $S'_{i'} = \pm 1$, onde i' denota um sítio da nova rede (isomorfa a rede original) e S' é o spin celular. Definimos o Hamiltoniano celular (H') como satisfazendo à igualdade

$$\exp[G + H'(S')] = \sum_{\{S\}} P(S', S) \exp[H(S)] \quad (1.4.2)$$

onde G é uma constante (que depende dos parâmetros do Hamiltoniano inicial $H(S)$), $P(S', S)$ é um peso, heurístico, que satisfaz às condições

$$P(S', S) \geq 0 \quad \forall S', S \quad (1.4.3)$$

e

$$\sum_{\{S'\}} P(S', S) = 1 \quad (1.4.4)$$

e $\sum_{\{S\}}$ é a soma sobre todas as configurações dos spins iniciais. Somando ambos os lados da eq. (1.4.2) sobre todas as configurações dos spins celulares $\{S'\}$ e utilizando a eq. (1.4.4) obtemos:

$$\exp(G) \sum_{\{S'\}} \exp[H'(S')] = \sum_{\{S\}} \exp H(S) \quad (1.4.5)$$

Como

$$Z = \sum_{\{S\}} \exp H(S) \quad , \quad Z' = \sum_{\{S'\}} \exp H'(S'), \quad (1.4.6)$$

tomando o logaritmo em ambos os lados da eq. (1.4.5) tem-se a relação entre a energia livre do sistema inicial (F) de spins e a energia livre (F') do sistema de spins celulares

$$G + F' = F \quad (1.4.7)$$

onde F e F' são adimensionais (divididas por $-k_B T$).

Consideremos agora F' e F como funções dos parâmetros $\{K'\} = (H', K', \dots)$ e $\{K\} = (H, K, \dots)$. No limite termodinâmico F' e F assumem a forma

$$F' = N' f(\{K'\}) \quad (1.4.8)$$

e

$$F = N f(\{K\}) \quad (1.4.9)$$

sendo que a função f é a mesma em ambos os casos. Também

$$G = N g(\{K\}) \quad (1.4.10)$$

e

$$\frac{N}{N'} = L^d \quad (1.4.11)$$

onde L é o tamanho da célula em unidades do espaçamento de rede ($= 1$) do sistema inicial. Substituindo as eqs. (1.4.8), (1.4.9), (1.4.10) e (1.4.11) na eq. (1.4.7) temos

$$f(\{K\}) = g(\{K\}) + L^{-d} f(\{K'\}) \quad . \quad (1.4.12)$$

Esta relação é extremamente importante pois nos diz como proceder, nas renormalizações, para preservarmos a parte singular da energia livre (e conseqüentemente as propriedades termodinâmicas do sistema). Para realizar o que propôs Kadanoff, o peso $P(S', S)$ é escolhido de modo a representar as simetrias do problema e a tornar as novas constantes $\{K'\}$ funções regulares dos antigos $\{K\}$. Na vizinhança de um ponto crítico do GR as energias livres podem ser expressas em termos dos campos de escala u_i (que são funções regulares dos parâmetros $\{K\}$) e a eq. (1.4.12) se torna

$$f(u_1, u_2, \dots) = g(u_1, u_2, \dots) + L^{-d} f(\lambda_1 u_1, \lambda_2 u_2, \dots) \quad . \quad (1.4.13)$$

As mudanças de escala dos campos $\{u_i\}$ podem ser escritas (devido ao caráter iterativo do GR^(71,113)) como

$$\lambda_i = L^{y_i} \quad . \quad (1.4.14)$$

Assim, a parte singular da energia livre se comporta como, após a renormalização,

$$f_{\text{sing}}(u_1, u_2, \dots) = L^{-d} f_{\text{sing}}(L^{y_1} u_1, L^{y_2} u_2, \dots) \quad . \quad (1.4.15)$$

Deste modo o GR obtém que a parte singular da energia livre (e também a da função de correlação) é uma função homogênea generalizada de seus campos de escala. A hipótese de Widom é generali-

zada pelo GR e, em consequência, as leis de escala, eqs. (1.1.16), (1.1.17), (1.1.18) e (1.1.19), são reobtidas. Uma função homogênea generalizada $g(x,y,z,\dots)$ satisfaz à relação

$$g(\lambda^{p_1}x, \lambda^{p_2}y, \lambda^{p_3}z, \dots) = \lambda g(x,y,z, \dots) \quad (1.4.16)$$

para λ positivo e $p_1, p_2, p_3, \dots \in \mathbb{R}^{(101)}$.

Alguns possíveis exemplos de campos de escala são

$$u_1 \cong \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right| \equiv \varepsilon \quad (T \rightarrow T_c) \quad (1.4.17)$$

$$u_2 \cong h \quad (\text{campo magnético}). \quad (1.4.18)$$

Para estes campos de escala em particular, a eq. (1.4.15) se escreve como

$$f_{\text{sing}}(\varepsilon, h, \dots) = L^{-d} f_{\text{sing}}(L^{y_\varepsilon} \varepsilon, L^{y_h} h, \dots) \quad (1.4.19)$$

onde

$$y_\varepsilon = \frac{1}{\nu} \quad (1.4.20)$$

$$y_h = \frac{d+2-\eta}{2} .$$

Assim os expoentes críticos podem ser obtidos como funções (simples) dos expoentes de L (os y_i são chamados de dimensões anômalas) que aparecem reescalando os campos de escala após cada renormalização. Isto conecta os expoentes y_ε e y_h da teoria com os seis expoentes críticos conhecidos $(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \nu)$.

Os GR no espaço real que utilizaremos neste trabalho consistem em se escolher um grafo (célula) que melhor simule a rede e o modelo escolhidos. Nos sítios deste grafo localizaremos

as variáveis aleatórias (spins) do modelo adotado e as suas ligações representarão as constantes de acoplamento do modelo. Fazemos o traço parcial sobre os spins localizados em alguns sítios do grafo e o renormalizamos em outro grafo com menos sítios e ligações. Isto preserva a função de partição do grafo porque o traço sobre os spins restantes fornecerá a função de partição original. Este método é muito útil para se calcular a parte singular da energia livre (existe um método gráfico⁽¹¹⁴⁾, chamado "corte - colapso", que nos permite realizar este traço parcial com considerável economia) e portanto das funções termodinâmicas que não necessitem da parte regular $G(\{K\})$ que surge na renormalização^(31, 64). Contudo, incluindo-se adequadamente $G(\{K\})$ no método, pode-se calcular o calor específico, a magnetização^(115), etc. Assim o processo seguido nos capítulos seguintes pode ser esquematizado como:

- i) escolha do grafo (célula) adequada à rede e ao modelo,
- ii) traço parcial sobre alguns spins da célula,
- iii) obtenção, através do traço parcial, das relações de recorrência entre os parâmetros do modelo,
- iv) localização da superfície crítica e dos pontos fixos no espaço dos parâmetros e
- v) estudo da estabilidade destes pontos fixos, estudo do comportamento crítico.

CAPÍTULO II

TENSÃO SUPERFICIAL LONGITUDINAL DO MODELO DE ISING NA REDE QUADRADA

2.1 - INTRODUÇÃO

Entre as várias propriedades importantes de um sistema físico estão certamente as interfaces entre 2 fases puras (1) e (2) e suas condições de contorno. O cálculo da tensão superficial associada a estes fenômenos nos permite conhecer e compreender melhor as suas diversas manifestações.

Em termodinâmica a tensão superficial $\gamma^{(12)}$ entre as fases puras (1) e (2) é dada por:

$$F = F^{(1)} + F^{(2)} + A \gamma^{(12)} \quad (2.1.1)$$

onde $F^{(1)}$, $F^{(2)}$ são as energias livres das fases (1) e (2), F é a energia livre da mistura e A é a área da superfície de separação das duas fases (se o sistema é tridimensional).

Sistemas ferromagnéticos (isolantes) também podem apresentar uma tensão superficial dependendo da magnetização que colocamos em sua superfície. Para estudarmos a tensão superficial em ferromagnetos utilizamos um dos modelos teóricos mais simples para sistemas ferromagnéticos que é o modelo proposto por Lenz a Ising (4, 8), usualmente conhecido como modelo de Ising. Ele consiste em se colocar nos sítios de uma rede variáveis $\sigma_i = \pm 1$

(que hoje são interpretadas como as componentes z de spins $1/2$, S_i^z) que interagem entre si somente se os sítios i e j são primeiros vizinhos. A Hamiltoniana deste modelo, se consideramos um campo magnético H é:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (2.1.2)$$

onde $J_{ij} > 0$ (< 0) para ferromagnetos (para antiferromagnetos) e $\sum_{\langle i,j \rangle}$ significa que a soma é sobre pares de sítios primeiros vizinhos. Apesar de Ising não encontrar transição de fase a temperatura finita ($T_c = 0$) em uma cadeia unidimensional, sabe-se (daí a importância deste modelo) que para dimensão (d) > 1 este modelo apresenta uma transição de fase de segunda ordem ($T_c \neq 0$). A função de partição exata deste modelo na rede quadrada foi calculada por Onsager⁽²⁰⁾ em 1944 e, como foi ressaltado no Capítulo I, contribuiu para mostrar que a teoria do campo molecular era falha próximo do ponto de transição. Devido à sua simplicidade, à existência de alguns resultados exatos e à relativa facilidade com que podem ser obtidos comportamentos assintóticos de grandezas termodinâmicas através de séries de altas e baixas temperaturas, este modelo teve e tem um papel central no estudo dos fenômenos críticos. Além deste interesse teórico, o modelo de Ising também é um bom modelo para compostos que apresentam interação anisotrópica entre spins, com a interação entre as componentes Z do mesmo sendo muito maior que a interação entre as componentes X ou Y. Algumas substâncias que podem ser descritas com boa aproximação pelo modelo de Ising são, por exemplo, o CoCs_3Br_5 ($d=2$), CoCs_3Cl_5 ($d=3$), DyPO_4 ($d=3$), sistemas adsorvidos em substratos como os átomos de ^4He adsorvidos em uma camada de Krip

tônio ($d=2$) sobre grafite, etc.

Podemos definir a tensão superficial em um sistema ferromagnético tipo Ising da seguinte forma ^(28,30,31): seja uma rede hipercúbica (d dimensões) cíclica, com N sítios. Em cada um destes sítios, que denominaremos por i, j , etc, colocamos uma variável $\sigma_i = \pm 1$. O Hamiltoniano será o dado pela eq. (2.1.2) fazendo $H = 0$ (supomos campo magnético nulo). Suponhamos dois sistemas físicos: (a) no primeiro consideramos todos os $J_{ij} = J > 0$ e chamemos a sua função de partição de Z_I ; (b) no segundo sistema consideramos um hiperplano de $d-1$ dimensões perpendicular a um dos eixos da rede hipercúbica, digamos ζ , separando esta em duas sub-redes hipercúbicas e cujas interações, pertencentes a este hiperplano e conectando as duas sub-redes, sejam negativos ($J_{ij} = -J < 0$) (ver Fig. 2.1.1). Chamemos a função de partição deste sis

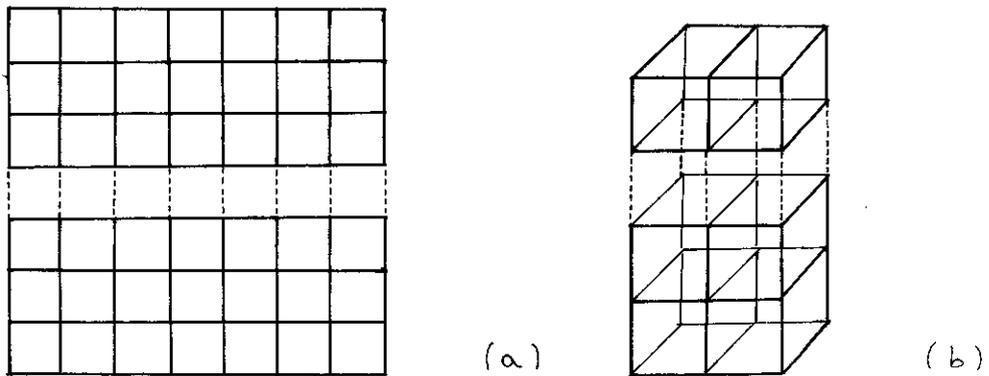


Figura 2.1.1 - Ligações antiferromagnéticas (linha pontilhada) e ferromagnéticas (linha cheia) na rede (a) quadrada e (b) cúbica.

tema de Z_{II} .

A tensão superficial longitudinal do segundo sistema (o 1º não apresenta tensão superficial) é definida como:

$$\frac{\gamma}{k_B T} = - \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{1}{A} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln(Z_{II}/Z_I) \quad (2.1.3)$$

onde A é a área do hiperplano de $d-1$ dimensões. Se este hiperplano faz um ângulo qualquer (diferente de zero) com o eixo ζ então teremos uma tensão superficial "inclinada". A definição formal desta tensão superficial deverá ser igual à dada pela eq. (2.1.3) mais um termo proporcional ao logaritmo do número de possibilidades de se arranjar estas ligações antiferromagnéticas sem alterar a energia do sistema. Onsager⁽²⁰⁾ calculou a tensão superficial longitudinal exata do modelo de Ising na rede quadrada, Fisher e Ferdinand⁽²⁸⁾ calcularam a tensão superficial diagonal e Abrahams e Reed⁽²⁹⁾ a tensão superficial fazendo um ângulo θ qualquer com a horizontal do mesmo modelo na mesma rede. Estes são os únicos resultados exatos conhecidos para a tensão superficial do modelo de Ising.

Existem definições alternativas da tensão superficial no modelo de Ising como por exemplo não supor condições de contorno periódicas mas fixar os spins pertencentes ao contorno^(29,116-119) ou então defini-la através da função de correlação (de desordem) do sistema dual na temperatura t^* dual⁽¹¹⁹⁻¹²¹⁾. Mas no limite termodinâmico as diversas definições fornecem resultados iguais.

Se focalizarmos a nossa atenção no modelo de Ising na rede quadrada podemos, além da tensão superficial longitudinal (cujo esquema nesta rede está mostrado na Fig. 2.1.1a) ter também as ligações antiferromagnéticas formando uma "escada" (ver Fig. 2.1.2) originando a assim chamada tensão superficial diagonal⁽²⁸⁻³¹⁾. Estas ligações também podem formar qualquer ângulo (além de $\pi/2$ e $\pi/4$) com a vertical⁽²⁹⁻³¹⁾. A tensão superficial correspondente dependerá, em geral, desta orientação. Esta dependência tem sido discutida em vários casos^(29,122,123) ou diretamente

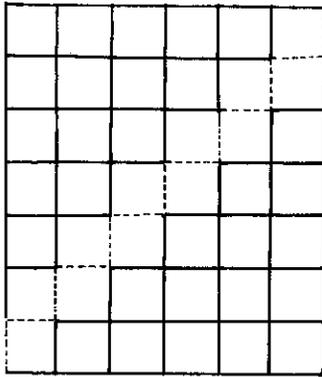


Figura 2.1.2 - Ligações antiferromagnéticas (linha pontilhada) e ferromagnéticas (linha cheia).

em $\gamma(T)$ ou sobre a entropia superficial $(-d\gamma/dT)_{T=0}$. Contudo, devido à divergência do comprimento de correlação ξ , a isotropia aparece na vizinhança da temperatura crítica T_c , isto é, se definimos $\gamma(T) \sim A(1-T/T_c)^\mu$, no limite $1-T/T_c \rightarrow 0$ esperamos que A e μ sejam os mesmos para qualquer orientação da linha das interações antiferromagnéticas que se tome ⁽²⁸⁾. Estes fatos estão de pleno acordo com os resultados exatos conhecidos ^(28, 29).

O cálculo exato de $\gamma(T)$ é geralmente muito difícil. Na verdade, para modelos não triviais de Ising os únicos resultados exatos são para duas dimensões ^(20,28,29). Para outras dimensões é necessário atacarmos o problema com métodos aproximativos. As soluções exatas em duas dimensões poderão servir como um teste para estes métodos antes de os aplicarmos em dimensões superiores. Como método aproximativo utilizaremos uma técnica moderna e poderosa de fenômenos críticos que é o GR no espaço real.

Na Seção 2 apresentamos o modelo. Na seção 3 construiremos um grupo de renormalização (GR) para o modelo de Ising na rede quadrada. Na Seção 4 introduzimos a tensão superficial longitudinal no contexto do GR. Na Seção 5 apresentamos comportamentos assintóticos analíticos para a tensão superficial longitudinal fornecida pelo GR e os comparamos com o resultado exato de Onsager ⁽²⁰⁾. Na Seção 6 apresentamos alguns métodos de extrapolação que nos permitirá obter precisão maior que 0.4% para $0 \leq T < \frac{3}{4} T_c$

e maior que 3% se considerarmos todo o intervalo.

2.2 - MODELO

Seja uma rede quadrada com condições de contorno periódicas e com variáveis $\sigma_i = \pm 1$ em cada sítio i da rede. O Hamiltoniano que consideraremos é o de Ising

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad , \quad (2.2.1)$$

onde $\langle i,j \rangle$ significa pares de sítios primeiros vizinhos e $J_{ij} \gtrless 0$ (ligação ferromagnética ou antiferromagnética).

Suponhamos que sobre uma linha "horizontal" (que separa a rede quadrada em duas sub-redes) colocamos todas as ligações "verticais" (conectando as duas sub-redes) com $J_{ij} = -J < 0$. Todas as outras ligações são supostas serem ferromagnéticas ($J_{ij} = +J > 0$; ver Fig. 2.1.1a).

A tensão superficial é calculada de acordo com a fórmula dada pela eq. (2.1.3) sendo que $A = L$ (a "área" do hiperplano separando as duas sub-redes é o comprimento do cristal).

2.3 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NA REDE QUADRADA

O modelo de Ising é invariante com relação à transformação de simetria (calibre) global que consiste em inverter todos os spins da rede simultaneamente, isto é, o seu Hamiltoniano não se altera frente a esta transformação. O grupo de simetria

associado a esta operação é chamado de Z_2 e é constituído de dois elementos. A transformação de dualidade, que é sempre possível de ser realizada em qualquer teoria cujo grupo de simetria seja abeliano, implica que podemos mapear a região de baixa temperatura de um modelo na região de alta temperatura do seu modelo dual e vice-versa. A estrutura geral desta transformação de dualidade para qualquer teoria com simetria Z_2 (incluindo portanto o Hamiltoniano dado pela eq. (2.2.1)) pode ser discutida introduzindo-se o conceito de simplex⁽¹²¹⁾. Se nos limitamos às redes hipercúbicas, um simplex de dimensão s será um elemento desta rede hipercúbica. Assim um simplex de dimensão zero é um sítio da rede, o simplex de dimensão um é constituído de uma ligação unindo dois sítios da rede, o simplex de dimensão dois é constituído de uma interação entre os sítios pertencentes a uma face elementar (ou plaqueta) da rede, e assim por diante. Portanto, podemos ter, em geral, um modelo s -simplex em uma rede d -dimensional. O dual deste modelo é um modelo $d-s$ simplex na mesma rede hipercúbica de d dimensões. Claramente $s \leq d$ pois a "dimensão" das interações não pode ser maior que a dimensão do espaço físico. Todo modelo com simetria Z_2 em uma rede hipercúbica onde $s = \frac{d}{2}$ é auto-dual, isto é, a transformação de dualidade mapeia a região de baixa temperatura ($T < T_c$) na região de alta temperatura ($T > T_c$) do mesmo modelo na mesma rede. Desta maneira, o modelo de Ising na rede quadrada é um modelo 1-simplex (interações entre dois sítios) e como a rede tem dimensão $d = 2$ o seu dual é também um modelo 1-simplex na mesma rede, isto é, é o próprio modelo em uma outra temperatura (a temperatura dual). Os primeiros a obter esta dualidade no modelo de Ising na rede quadrada foram Kramers e Wannier⁽¹²⁴⁾ que, através dela, conseguiram calcular a temperatura crítica exata.

Para simularmos o modelo de Ising na rede quadrada escolhemos a família de células (grafos) mostrada na Fig.2.3.1. As-

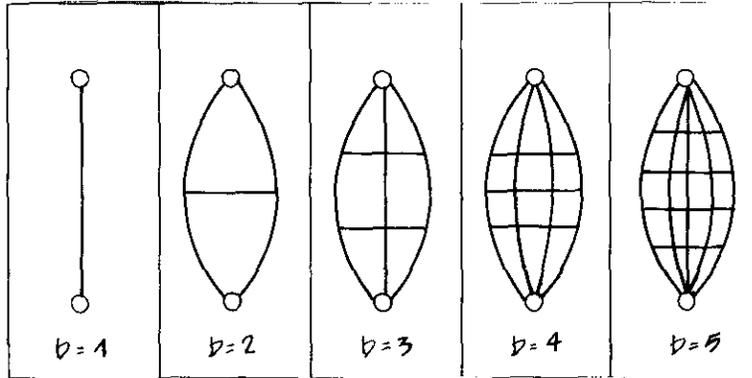


Figura 2.3.1 - Família de células auto-duais para o modelo de Ising. b é o tamanho da célula. Cada célula tem 2 sítios terminais, $b(b-1)$ sítios internos e $[2b(b-1)+1]$ ligações.

associamos a cada sítio destas células uma variável $\sigma_i = \pm 1$ e a cada ligação uma transmissividade

$$t = \tanh J/k_B T \quad (2.3.1)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, J é a interação entre primeiros vizinhos, e T a temperatura absoluta. A seguir associaremos a cada célula uma transmissividade equivalente $t_b = R_b(t)$ a qual é obtida através de um traço parcial sobre os sítios "internos" da célula (por exemplo na Fig. 2.3.1 os sítios "internos" da célula $b = 2$ são os de número 3 e 4). Este traço parcial pode ser feito de uma maneira mais elegante e rápida através de grafos pelo método chamado "corte-colapso" (ver Apêndice A). Os resultados para $b = 2, 3, 4$ e 5 estão listados abaixo [$R_2(t)$ tem sido calculado por diversos autores (64,125)]:

$$t_1 = R_1(t) = t \quad , \quad (2.3.2)$$

$$t_2 = R_2(t) = \frac{2t^2 + 2t^3}{1 + 2t^3 + t^4} \quad , \quad (2.3.3)$$

$$t_3 = R_3(t) = \frac{3t^3 + 8t^4 + 10t^5 + 8t^6 + 12t^7 + 16t^8 + 6t^9 + t^{11}}{1 + 4t^3 + 4t^4 + 4t^5 + 14t^6 + 20t^7 + 11t^8 + 4t^9 + 2t^{10}} \quad (2.3.4)$$

$$\begin{aligned} t_4 = R_4(t) = & (4t^4 + 18t^5 + 42t^6 + 70t^7 + 120t^8 + 232t^9 + 362t^{10} + 462t^{11} + 600t^{12} \\ & + 716t^{13} + 638t^{14} + 418t^{15} + 232t^{16} + 120t^{17} + 46t^{18} + 10t^{19} + 4t^{20} \\ & + 2t^{21}) / (1 + 6t^3 + 10t^4 + 8t^5 + 30t^6 + 68t^7 + 102t^8 + 214t^9 + 390t^{10} \\ & + 544t^{11} + 616t^{12} + 622t^{13} + 618t^{14} + 460t^{15} + 225t^{16} + 114t^{17} \\ & + 50t^{18} + 10t^{19} + 6t^{20} + 2t^{21}) \end{aligned} \quad (2.3.5)$$

$$\begin{aligned} t_5 = R_5(t) = & (5t^5 + 32t^6 + 108t^7 + 256t^8 + 582t^9 + 1300t^{10} + 2829t^{11} + 5396t^{12} \\ & + 9756t^{13} + 17116t^{14} + 28678t^{15} + 44716t^{16} + 65514t^{17} + 90840t^{18} \\ & + 114171t^{19} + 129800t^{20} + 133338t^{21} + 123288t^{22} + 103312t^{23} \\ & + 75032t^{24} + 47834t^{25} + 28356t^{26} + 14611t^{27} + 6820t^{28} + 3012t^{29} \\ & + 1196t^{30} + 478t^{31} + 124t^{32} + 54t^{33} + 16t^{34} + 5t^{35} + t^{37}) \\ & / (1 + 8t^3 + 18t^4 + 12t^5 + 59t^6 + 160t^7 + 248t^8 + 520t^9 + 1242t^{10} \\ & + 2496t^{11} + 4880t^{12} + 9640t^{13} + 17565t^{14} + 29396t^{15} + 45326t^{16} \\ & + 66636t^{17} + 90744t^{18} + 112284t^{19} + 128012t^{20} + 133628t^{21} \\ & + 125285t^{22} + 102824t^{23} + 74540t^{24} + 48704t^{25} + 28098t^{26} \\ & + 14552t^{27} + 6864t^{28} + 2960t^{29} + 1187t^{30} + 420t^{31} + 169t^{32} \\ & + 44t^{33} + 12t^{34} + 4t^{35} + 2t^{36}) \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Estas funções $R_b(t)$ são extremamente adequadas para se

estudar o modelo de Ising na rede quadrada pois elas também são auto-duais. A propriedade extremamente interessante do modelo de Ising em $d=2$ que é o mapeamento da alta-temperatura na baixa temperatura (dualidade) é satisfeita por estas células qualquer que seja o tamanho b da mesma. Devido a isto encontra-se a temperatura crítica exata para o modelo de Ising qualquer que seja b (por argumentos do tipo usado por Kramers e Wannier⁽¹²⁴⁾). Portanto:

$$R_b(t_c) = t_c \quad \forall b \quad (2.3.7)$$

onde $t_c = \sqrt{2} - 1 \implies \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\arg \sinh 1} \cong 2.269$

que é a temperatura crítica exata do modelo de Ising na rede quadrada.

O grupo de renormalização é dado pela seguinte relação:

$$R_{b'}(t') = R_b(t) \quad b' < b \quad (b = 2, 3, 4, 5; b' = 1, 2, \dots, b-1) \quad (2.3.8)$$

que "representa" a renormalização da rede quadrada nela mesma por um fator de expansão b/b' , como está mostrado no Capítulo I. Esta relação admite 2 pontos fixos triviais, associados ao comprimento de correlação $\xi = 0$, ($t^* = 0$ e $t^* = 1$) e um ponto fixo não trivial, associado a $\xi = \infty$ ($t^* = t_c$).

O expoente crítico $\nu_{b,b'}$, do ξ (ver Cap. I) é dado por:

$$\nu_{b,b'} = \frac{\ln(b/b')}{\ln \lambda_{b,b'}} \quad (2.3.9)$$

onde

$$\lambda_{b,b'} = \left. \frac{dR_b(t)/dt}{dR_{b'}(t')/dt'} \right|_{t=t'=t_c} \quad (2.3.10)$$

Os resultados para $b'=1$ e $b=2,3,4$ e 5 estão na Tabela 2.3.1.

Tabela 2.3.1 - Expoentes críticos $\nu_{b,1}$ e coeficientes $A_{b,1}$, $B_{b,1}$, $C_{b,1}$ e $D_{b,1}$ ($\gamma_{b,b'} \sim 1 - C_{b,b'}(k_B T/J) - D_{b,b'}(k_B T/J) e^{-2Jk_B T}$) do GR para vários tamanhos das células. A temperatura crítica associada é a exata em todos os casos.

b	$\nu_{b,1}$	$A_{b,1}$	$B_{b,1}$	$C_{b,1}$	$D_{b,1}$
2	1.14863	1.41	1.11	$\frac{1}{2} \ln 2 \approx 0.35$	$\frac{1}{4} = 0.25$
3	1.10936	1.52	1.23	$\frac{1}{4} \ln 3 \approx 0.27$	$\frac{4}{9} \approx 0.44$
4	1.09499	1.58	1.30	$\frac{1}{6} \ln 4 \approx 0.23$	$\frac{9}{16} \approx 0.56$
5	1.08791	1.63	1.34	$\frac{1}{8} \ln 5 \approx 0.20$	$\frac{16}{25} \approx 0.64$
exato ⁽²⁰⁾	1	2	2	0	1

2.4 - TENSÃO SUPERFICIAL LONGITUDINAL

A tensão superficial longitudinal, que definimos como a energia livre subextensiva, por unidade de área, da hipersuperfície ($d-1$ dimensões) de separação entre as duas fases "conflitantes" (cada uma com d dimensões), deve satisfazer à seguinte equação quando renormalizamos uma célula de tamanho b em outra de tamanho b' (30):

$$(b')^{d-1} \frac{\gamma'(T')}{T'} = b^{d-1} \frac{\gamma(T)}{T} \quad (2.4.1)$$

Esta relação deriva do fato que as distâncias obedecem à relação de renormalização

$$x \rightarrow x' = \frac{x}{b} \quad (2.4.2)$$

implicando que a área da hipersuperfície (A_{hs}) deve se reescalar

$$A_{hs} \rightarrow A'_{hs} = \frac{A_{hs}}{b^{d-1}} \quad (2.4.3)$$

Como a tensão superficial é definida por unidade de área, o termo b^{d-1} (b'^{d-1}) aparece no numerador.

Devido à homogeneidade da energia livre próximo de T_c segue que $\gamma'(T') = \gamma(T')$.

Para o caso particular $d = 2$ a relação acima se torna:

$$b' \frac{\gamma(T')}{T'} = b \frac{\gamma(T)}{T} \quad (2.4.4)$$

As eqs.(2.4.4) e (2.3.8) são as equações básicas necessárias e suficientes para podermos obter, numericamente, a tensão superficial desejada. Elas "fecham" o problema pois fornecem um mapeamento (GR) do espaço $t-\gamma$ (ou equivalentemente $T-\gamma$) nele mesmo. Teremos "linhas de fluxo" neste espaço, sendo que a fronteira de separação destas "linhas", se fixamos $\gamma(T=0) = \gamma_0$, nos fornecerá γ .

As equações (2.4.4) e (2.3.8) admitem como pontos fixos:

- i) $T = T_c$ e $\gamma = 0$
- ii) $T = 0$ e $\gamma = \gamma_0$ $\gamma_0 \neq 0$ (temos uma linha de pontos fixos) onde escolhemos $\gamma_0 = 1$ (normalizando pelo valor de $\gamma(T)$ quando $T = 0$)
- iii) $T = \infty$, $\gamma = 0$.

O primeiro ponto fixo ($T = T_c$ e $\gamma = 0$) é instável, o segundo e o terceiro são estáveis.

O diagrama de fluxo (nos espaços $T\gamma$ e $t\gamma$) está indicado esquematicamente nas Figuras 2.4.1a e 2.4.1b.

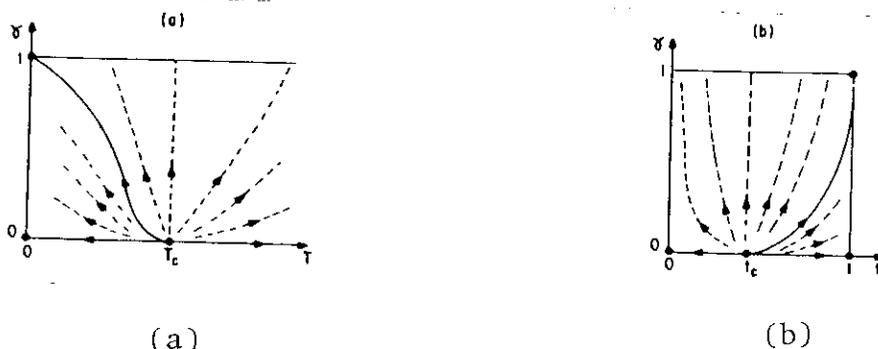


Figura 2.4.1 - Linhas de fluxo no espaço (a) γ - T e (b) γ - t para (b, b') fixos. A linha cheia é a tensão superficial. Os pontos indicam os pontos fixos, as setas o sentido do fluxo.

2.5 - COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO E ESTABILIDADE DOS PONTOS FIXOS

Utilizando a teoria dos grafos (método corte-colaço^(114,126)) podemos calcular o comportamento assintótico das funções $R_b(t)$ para $b \neq 1$ (ver Apêndice A). O resultado obtido é:

$$t_b \equiv R_b(t) \sim \begin{cases} bt^b + 2(b-1)^2 t^{b+1} + \dots & \text{se } t \rightarrow 0 & (2.5.1a) \\ 1 - 2b\left(\frac{1-t}{2}\right)^b - 2[b^2 + 2(b-1)^2] \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b+1} + \dots & \text{se } t \rightarrow 1 & (2.5.1b) \end{cases}$$

Novamente observamos que, devido a estas células, com interações tipo Ising, serem auto-duais, podemos passar da alta para a baixa temperatura do mesmo modelo. A transformação dual nestas variáveis t é simplesmente^(55, 64)

$$t \rightarrow t^D = \frac{1-t}{1+t} \quad (2.5.2)$$

onde t^D é a variável dual. Com esta transformação podemos passar da eq. (2.5.1a) para a eq. (2.5.1b) exibindo de um modo simples e bonito a dualidade.

Para calcularmos o Jacobiano nos dois pontos fixos ($T = T_c, \gamma = 0$) e ($T = 0, \gamma_0 = 1$) necessitamos linearizar $\gamma_{b,b'}(T)$ nestes dois pontos. Vamos indicar os cálculos para o espaço $T-\gamma$. O Jacobiano será:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial T'}{\partial T} & \frac{\partial T'}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial \gamma'}{\partial T} & \frac{\partial \gamma'}{\partial \gamma} \end{pmatrix} \quad (2.5.3)$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial T'}{\partial T} &= \left(\frac{T'}{T}\right)^2 \frac{\cos^2(J/k_B T')}{\cos^2(J/k_B T)} \frac{dR_b(t)/dt}{dR_{b'}(t')/dt'} \\ &= \left(\frac{T'}{T}\right)^2 \frac{1-t^2}{1-t'^2} \frac{dR_b(t)/dt}{dR_{b'}(t')/dt'} \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

$$\frac{\partial T'}{\partial \gamma} = 0 \quad (2.5.5)$$

$$\frac{\partial \gamma'}{\partial T} = \frac{b}{b'} \frac{\gamma}{T} \left(\frac{\partial T'}{\partial T} - \frac{T'}{T} \right) \quad (2.5.6)$$

$$\frac{\partial \gamma'}{\partial \gamma} = \frac{b}{b'} \frac{T'}{T} \quad (2.5.7)$$

i) no ponto crítico ($T = T_c$) o Jacobiano será:

$$\begin{pmatrix} \lambda_{b,b'} & 0 \\ 0 & b/b' \end{pmatrix} \quad (2.5.8)$$

implicando que os campos de escala $1-T/T_c$ [auto-vetor (1,0)] e γ [auto-vetor (0,1)] se renormalizam na vizinhança de T_c como

$$\frac{T_c-T}{T_c} \rightarrow \frac{T_c-T'}{T_c} = \lambda_{b,b'} \frac{T_c-T}{T_c} \quad (2.5.9)$$

$$\gamma \rightarrow \gamma' = \left(\frac{b}{b'}\right) \gamma \quad . \quad (2.5.10)$$

Em consequência de $\lambda_{b,b'} > 1$ e $(b/b') > 1$ nos afastaremos do ponto crítico a cada iteração demonstrando a instabilidade do mesmo.

Sabemos também que $(T_c-T)/T_c$ se renormaliza como [ver eqs. (1.4.17) e (1.4.19)]

$$\frac{T_c-T}{T_c} \rightarrow \frac{T_c-T'}{T_c} = \left(\frac{b}{b'}\right)^{y_\epsilon} \frac{T_c-T}{T_c} \quad . \quad (2.5.11)$$

Comparando a eq. (2.5.11) com a eq. (2.5.9) obtemos:

$$\left(\frac{b}{b'}\right)^{y_\epsilon} = \lambda_{b,b'} \implies y_\epsilon = \frac{\ln \lambda_{b,b'}}{\ln (b/b')} \quad (2.5.12)$$

mas, ver eq. (1.4.20),

$$y_\epsilon = \frac{1}{\nu} \quad (2.5.13)$$

então a relação

$$\nu = \frac{\ln (b/b')}{\ln \lambda_{b,b'}} \quad (2.5.14)$$

é reobtida.

O mesmo pode ser feito com o outro campo de escala (γ') utilizando-se do fato que próximo de T_c vale a relação

$$\gamma \sim \left(\frac{T_c-T}{T_c}\right)^\mu \quad \left(\frac{T_c-T}{T_c}\right) \rightarrow 0 \quad . \quad (2.5.15)$$

assim, a eq. (2.5.10) resulta:

$$\left(\frac{T_c - T'}{T_c}\right)^\mu = \left(\frac{b}{b'}\right) \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^\mu \quad (2.5.16)$$

Utilizando a eq. (2.5.11) temos:

$$\left(\frac{b}{b'}\right)^{\mu \gamma_\varepsilon} \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^\mu = \left(\frac{b}{b'}\right) \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^\mu \quad (2.5.17)$$

ou seja,

$$\left(\frac{b}{b'}\right)^{\frac{\mu}{\nu}} = \left(\frac{b}{b'}\right) \quad , \quad (2.5.18)$$

que nos leva a

$$\mu = \nu \quad (2.5.19)$$

obedecendo a conhecida relação de escala

$$\mu = (d-1)\nu \quad (2.5.20)$$

entre o expoente μ e ν para $d = 2$.

ii) Para calcular o Jacobiano à temperatura nula, devemos primeiro tomar algumas precauções. Elas são necessárias devido à indeterminação que aparece na eq. (2.4.4) se fizermos $T=T'=0$.

Para contornarmos esta dificuldade teremos que calcular o comportamento assintótico de $T'(T)$ quando $k_B T/J \rightarrow 0$. Tomando a eq. (2.3.8), utilizando o comportamento assintótico

$$R_b(t) \sim 1 - 2b \left(\frac{1-t}{2}\right)^b \quad \text{se } t \rightarrow 1 \quad (2.5.21)$$

fornecido pela eq. (2.5.16) e o fato que

$$t = \tanh \frac{J}{k_B T} \sim 1 - 2e^{-2J/k_B T} \quad \frac{k_B T}{J} \rightarrow 0 \quad (2.5.22)$$

obtemos:

$$b' \exp(-2b'J/k_B T') \sim b \exp(-2bJ/k_B T). \quad (2.5.23)$$

Segue que

$$\frac{T'}{T} \sim \frac{b'}{b} \left[1 + \frac{k_B T}{2bJ} \ln(b/b') \right] \quad (2.5.24)$$

e

$$\frac{dT'}{dT} \sim \frac{b'}{b} \left[1 + \frac{k_B T}{bJ} \ln(b/b') \right]. \quad (2.5.25)$$

Então o Jacobiano será:

$$\begin{pmatrix} b'/b & 0 \\ \frac{k_B}{J} \frac{\ln(b/b')}{2b} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.5.26)$$

implicando que os campos de escala $g_2 \equiv (0,1) = \gamma$ e $g_1 \equiv (u,v)$ com

$$\frac{v}{u} = - \frac{k_B}{J} \frac{\ln(b/b')}{2(b-b')} \quad (2.5.27)$$

se renormalizam como:

$$a) \quad \gamma \rightarrow \gamma' = 1 \gamma \quad (\text{caso marginal}) \quad (2.5.28)$$

$$b) \quad g_1 \rightarrow g_1' = \left(\frac{b'}{b}\right) g_1 \quad (2.5.29)$$

mostrando que o campo de escala g_1 tem auto-valor $(b'/b) < 1$ sendo portanto estável e o campo de escala $g_2 = \gamma$ tem auto-valor = 1 (marginal) cujo efeito é ter uma linha de pontos fixos em $k_B T/J = 0$.

A eq. (2.5.27) nos dá a derivada de $\gamma_{b,b'}$ com relação a T fornecendo-nos

$$\gamma_{b,b'}(T) \sim 1 - \frac{\ln(b/b')}{2(b-b')} \frac{k_B T}{J} \quad \text{se} \quad \frac{k_B T}{J} \rightarrow 0 \quad (2.5.30)$$

Esta expressão assintótica pode ser desenvolvida para englobar o termo seguinte simplesmente se tomarmos toda a expressão assintótica dada pela eq. (2.5.1b), a eq. (2.3.8) e o fato de que $t = \tanh \frac{J}{k_B T}$. Obtemos a seguinte relação, no limite $\frac{k_B T}{J} \rightarrow 0$,

$$F(T';b') \sim F(T;b) \quad (2.5.31)$$

onde

$$F(T;b) \equiv \frac{k_B T/J}{b \left[1 - \frac{\ln b}{2b} \frac{k_B T}{J} - \left(\frac{b-1}{b}\right)^2 \frac{k_B T}{J} e^{-2J/k_B T} \right]} \quad \forall b \quad (2.5.32)$$

Finalmente utilizando a eq. (2.4.4) obtemos:

$$\gamma_{b,b'} \sim 1 - \frac{\ln(b/b')}{2(b-b')} \frac{k_B T}{J} - \left(\frac{b-1}{b}\right)^2 \frac{k_B T}{J} e^{-2J/k_B T} \quad \text{se} \quad \frac{k_B T}{J} \rightarrow 0 \quad (2.5.33)$$

cujo limite

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \gamma_{b,b'}(T) = 1 - \frac{k_B T}{J} e^{-2J/k_B T} \quad (2.5.34)$$

é o comportamento assintótico exato da solução de Onsager⁽²⁰⁾ para a tensão superficial longitudinal γ_L do modelo de Ising na rede quadrada.

$$\gamma_L = 1 - \frac{k_B T}{J} \ln \coth \frac{J}{k_B T} \quad (2.5.35)$$

$$\sim \begin{cases} 1 - \frac{k_B T}{J} e^{-2J/k_B T} & \text{se} \quad \frac{k_B T}{J} \rightarrow 0 \\ 2 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) & \text{se} \quad \frac{T_c - T}{T_c} \rightarrow 0 \end{cases} \quad (2.5.36a)$$

$$\text{se} \quad \frac{T_c - T}{T_c} \rightarrow 0 \quad (2.5.36b)$$

Assim, este notável resultado nos indica que, apesar de a cada escolha de (b, b') finitos o comportamento assintótico de $\gamma_{b, b'}(T)$ ser errado, no $\lim b \rightarrow \infty$ ($b' < b$) a resposta exata é reobtida, ver Tabela 2.3.1 e Figuras 2.5.1, 2.5.2 e 2.5.3. Isto justifica e dá credibilidade ao método (GR) que estamos utilizando. Analogamente, em outras dimensões este método poderá ser utilizado alternativamente a séries, por exemplo, para cálculos de comportamentos assintóticos de grandezas termodinâmicas. Isto será feito nesta tese no Capítulo III e no Capítulo IV.

O procedimento operacional seguido para obtermos as figuras é o seguinte:

Primeiro escolhemos uma temperatura arbitrária T_0 menor que T_c e então usamos a eq. (2.3.8)

$$R_b, (\tanh J/k_B T_{j+1}) = R_b (\tanh J/k_B T_j) \quad (j=0, 1, 2, \dots, n-1) \quad (2.5.37)$$

para obter a sequência de temperaturas decrescentes $T_1, T_2, \dots, T_j, \dots, T_n$. Terminamos a sequência arbitrariamente no n -ésimo passo com a única restrição que T_n seja bastante próximo de zero (a definição objetiva do "bastante próximo de zero" acima depende do computador disponível). A seguir, calculamos a tensão superficial γ_n associada a T_n utilizando a eq. (2.5.33) e "retornamos" através da relação

$$\gamma_j = \frac{b'}{b} \frac{T_j}{T_{j+1}} \gamma_{j+1} \quad (j=n-1, \dots, 1, 0) \quad (2.5.38)$$

para obtermos a sequência de tensões superficiais decrescentes $\gamma_{n-1}, \dots, \gamma_0$. Os pares associados (T_i, γ_i) $i = 0, 1, \dots, n$ são então colocados no gráfico. Um exemplo de tal sequência é mostrado

na Tabela 2.5.1. Os resultados que obtivemos para $b'=1$ e $b=2,3,4$ e 5 estão indicados na Tabela 2.3.1 e nas Figs. 2.5.1, 2.5.2 e 2.5.3.

Tabela 2.5.1 - Ilustração ($b=2, b'=1$) do procedimento do GR que tem sido usado para obter $\gamma_{b,b'}(T) \times T$.

j	$k_B T/J$	$\gamma_{2,1}$
0	1.9	0.1687
1	1.6557	0.2941
2	1.3151	0.4671
3	0.9201	0.6537
4	0.5635	0.8006
5	0.3136	0.8911
6	0.1658	0.9425
7	0.0854	0.9704

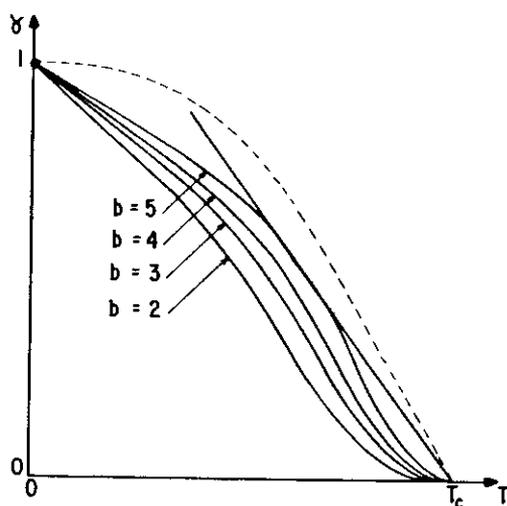


Figura 2.5.1 - Resultados (fora de escala) para a tensão superficial longitudinal reduzida de Onsager (linha tracejada) e de GR (linhas cheias: $b' = 1$ e $b = 2,3,4,5$). A inclinação da reta é $(-B_{5,1} J/k_B T_c)$ (veja o texto).

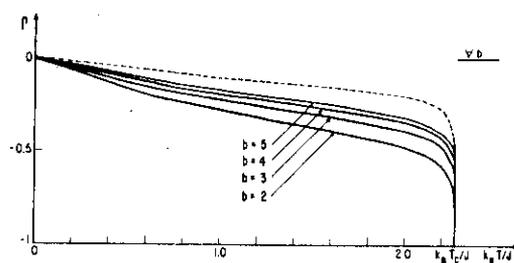
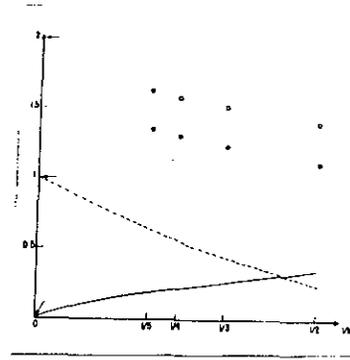


Figura 2.5.2 - Dependência térmica dos erros relativos $\Gamma \equiv (\gamma_{b,1} - \gamma_L) / \gamma_L$ [com respeito ao resultado exato de Onsager $\gamma_L(T)$] dos resultados para a tensão superficial da aproximação do GR [$\{\gamma_{b,1}(T)\}$, linhas cheias] e do PEM [$\gamma^M(T)$, linha tracejada].

Figura 2.5.3 - Dependência do tamanho das células dos coeficientes $A_{b,1}$ (círculos vazios), $B_{b,1}$ (círculos cheios), $C_{b,1}$ (linha cheia) e $D_{b,1}$ (linha tracejada); as setas indicam os valores exatos respectivos (Onsager).



Para estudarmos o comportamento de $\gamma_{b,b'}(T)$ próximo de T_c (estudo numérico) definimos $A_{b,b'}$ através do resultado do GR

$$\gamma_{b,b'} \sim A_{b,b'} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{\nu_{b,b'}} \quad \text{se} \quad \frac{T_c - T}{T_c} \rightarrow 0 \quad (2.5.39)$$

e denominamos por $B_{b,b'}$ o número puro obtido pela multiplicação de $(-k_B T_c / J)$ pela inclinação da linha reta que, começando no ponto $(T=T_c, \gamma = 0)$ toca tangencialmente a curva $\gamma_{b,b'}(T)$ (Veja Figura 2.5.1). As estimativas numéricas para ambos coeficientes estão na Tabela 2.3.1 e na Figura 2.5.3 e tendem para o valor $\underline{2}$, que é o exato de acordo com a eq. (2.5.36b).

2.6 - PROCEDIMENTOS DE EXTRAPOLAÇÃO

Utilizando os resultados do GR para $b = 2, 3, 4$ e 5 , podemos fazer extrapolações para $b \rightarrow \infty$. Os procedimentos que adotamos são os seguintes:

A. PROCEDIMENTO DE EXTRAPOLAÇÃO MÚLTIPLA (PEM)

Este é um procedimento direto. Para uma dada temperatura, nós extrapolamos linearmente para a origem $\gamma_{b,1}$ vs b^{-1} . A es

colha de b^{-1} se deve a que a temperatura escala como $b^{-1/\nu}$ e a tensão superficial escala como $b^{-\mu/\nu}$. Como em duas dimensões $\frac{\mu}{\nu}=1$ a escolha é natural. Porém esta é uma lei de escala válida somente para b grandes ⁽¹²⁷⁾, não havendo nenhuma razão particular para elas poderem ser aplicadas a pequenos valores de b . Contudo isto frequentemente ocorre com boa precisão ^(45, 128). Uma medida da credibilidade de tal extrapolação em cada caso particular é dada por quão próximo o fator de correlação linear se aproxima da unidade. Os resultados para a tensão superficial obtida através desta extrapolação (que chamaremos γ^M) são mostrados na Fig. 2.5.2 (o fator de correlação linear cresce de 0.998 em $T = 0$ para a unidade em $T = T_c$). Os erros sensíveis (com respeito ao resultado exato de Onsager γ_L , dado pela eq. (2.5.35)) obtidos na vizinhança imediata de T_c são devidos ao fato que $\nu_{b,1}$ (embora bastante próximo) não é exatamente igual a ν . Observamos que o PEM globalmente diminui o erro por um fator 2. Se nós, respectivamente, chamamos ν_M , A_M e B_M o expoente crítico e as amplitudes de $\gamma^M(T)$ (definidos de maneira análoga a $\nu_{b,1}$, $A_{b,1}$ e $B_{b,1}$) na vizinhança de T_c , nossos resultados serão $\nu_M \cong 1.069$, $A_M \cong 1.83$ e $B_M \cong 2$.

B. PROCEDIMENTO DE ÚNICA EXTRAPOLAÇÃO (PUE)

Esta é uma extrapolação pouco comum no sentido que basta uma só curva $\gamma_{b,1}(T)$ para ela poder ser aplicada. Ela é útil pois utiliza os resultados exatos possíveis do sistema em estudo para se obter a extrapolação. Por exemplo, em nosso caso utilizaremos os seguintes dados: o valor de $T_{b,1}$ dado pelo GR para a temperatura crítica (as células auto-duais que utilizamos fornecem

$T_{b,1} = T_c \sqrt{b}$, mas para o método poder ser aplicado em geral deixamos $T_{b,1}$, o expoente $v_{b,1}$ do GR, a derivada do GR

$$C_{b,1} \equiv - \frac{J}{k_B} (d\gamma_{b,1}/dT)_{T=0} = \frac{\ln b}{2(b-1)} \quad , \quad (2.6.1)$$

os valores exatos de T_c , v e a derivada

$$C_L \equiv - \frac{J}{k_B T} (d\gamma_L/dT)_{T=0} = 0 \quad . \quad (2.6.2)$$

Observamos que usamos a tensão superficial reduzida assumindo que conhecemos o valor exato de $\gamma_L(0)$. Introduzimos agora as variáveis

$$x_{b,1}(T) \equiv \left(1 - \frac{T}{T_{b,1}}\right)^{v_{b,1}} \quad (0 \leq T \leq T_{b,1}) \quad , \quad (2.6.3)$$

$$x(T) \equiv \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^v \quad (0 \leq T \leq T_c) \quad , \quad (2.6.4)$$

e a relação

$$\gamma_{b,1}^S = f_{b,1}(x) \gamma_{b,1} \quad , \quad (2.6.5)$$

entre a proposta ($b \rightarrow \infty$) do PUE $\gamma_{b,1}^S$ gerada por $\gamma_{b,1}$, e a função corretiva $f_{b,1}(x)$ que será encontrada adiante. Para $T = 0$ ($x = x_{b,1} = 1$) queremos que $\gamma_{b,1}^S$ seja igual à unidade (porque este é o resultado exato para γ_L), e como este é o valor de $\gamma_{b,1}$ temos que ter

$$f_{b,1}(1) = 1 \quad . \quad (2.6.6)$$

A equação (2.6.5) implica

$$\frac{d\gamma_{b,1}^S}{dT} = \frac{df_{b,1}(x)}{dx} \frac{dx}{dT} \gamma_{b,1} + f_{b,1}(x) \frac{d\gamma_{b,1}}{dT} \quad (2.6.7)$$

que se torna, em $T = 0$,

$$\left. \frac{d\gamma_{b,1}^S}{dT} \right|_{T=0} = - \frac{v}{T_c} \left. \frac{df_{b,1}(x)}{dx} \right|_{x=1} + \left. \frac{d\gamma_{b,1}}{dT} \right|_{T=0} \quad (2.6.8)$$

onde utilizamos as eqs. (2.6.4) e (2.6.6). Ou, alternativamente,

$$\left. \frac{df_{b,1}}{dx} \right|_{x=1} = \frac{k_B T_c / J}{v} (C_L - C_{b,1}) \quad (2.6.9)$$

Utilizando agora os valores deste problema (Ising, duas dimensões), obtemos

$$\left. \frac{df_{b,1}}{dx} \right|_{x=1} = \frac{-1}{\arg \sinh 1} \frac{\ln b}{(b-1)} \quad (2.6.10)$$

A função corretiva $f_{b,1}(x)$ foi introduzida para corrigir uma possível derivada térmica errada de $\gamma_{b,1}$ em $T = 0$, e desejamos que seus efeitos diminuam gradualmente à medida que nos aproximamos de T_c ($x=0$). Assim, é razoável impormos que

$$\left. \frac{df_{b,1}(x)}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (2.6.11)$$

Esta hipótese será confirmada "a posteriori" pelos resultados que obtivermos. A função mais simples que satisfaz às restrições dadas pelas eqs. (2.6.6), (2.6.9) e (2.6.11) é a parábola

$$f_{b,1}(x) = \left[1 + \frac{k_B T_c / J}{2v} (C_{b,1} - C_L) \right] - \frac{k_B T_c / J}{2v} (C_{b,1} - C_L) x^2 \quad (2.6.12)$$

que no nosso caso particular se torna

$$f_{b,1}(x) = 1 + \frac{1}{2 \operatorname{arg} \operatorname{senh} 1} \frac{\ell n b}{b-1} - \frac{1}{2 \operatorname{arg} \operatorname{senh} 1} \frac{\ell n b}{b-1} x^2 \quad . \quad (2.6.13)$$

Necessitamos agora indicar os argumentos de $\gamma_{b,1}^S$ e $\gamma_{b,1}$ para o PUE se completar. Postularemos que esta relação conecta $\gamma_{b,1}^S(T)$ com $\gamma_{b,1}(T')$ onde

$$x_{b,1}(T') = x(T) \quad . \quad (2.6.14)$$

Assim, a relação dada pela eq. (2.6.5) pode ser reescrita como

$$\gamma_{b,1}^S(T) = f_{b,1} \left[\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^v \right] \gamma_{b,1} \left[T_{b,1} \left[1 - \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{v/v_{b,1}} \right] \right] \quad (2.6.15)$$

A equação (2.6.15) acima sintetiza o PUE. Ele estabelece que uma forma de lei de estados correspondentes vale para as funções aproximadas $\{\gamma_{b,1}(T)\}$ associadas a diferentes tamanhos de células. Observamos que a relação da eq. (2.6.15) é identicamente satisfeita no limite $b \rightarrow \infty$, assumindo que $T_{b,1} \rightarrow T_c$, $v_{b,1} \rightarrow v$, e $C_{b,1} \rightarrow C_L$ (isto é, quando $\gamma_{b,1}(T)$ tende regularmente para $\gamma_L(T)$).

O PUE é confirmado satisfatoriamente pelos resultados que ele fornece. Na Fig. 2.6.1 nós representamos o erro $(\gamma_{b,1}^S - \gamma_L) / \gamma_L$ associado ao conjunto $\{\gamma_{b,1}\}$ para $b = 2, 3, 4, 5$. Este permanece inferior a 3% para todo intervalo de temperatura (de $T = 0$ até $T = T_c$) e para todo valor de b (o erro é inferior a 1% para $b = 5$). Para ilustrar a validade da proposta feita na eq. (2.6.12) para a função corretiva $f_{b,1}(x)$, nós representamos, na Fig. 2.6.2, a pior delas $[f_{2,1}(x)]$ junto com a função corretiva exata

$$\gamma_L(T)/\gamma_{2,1}(T').$$

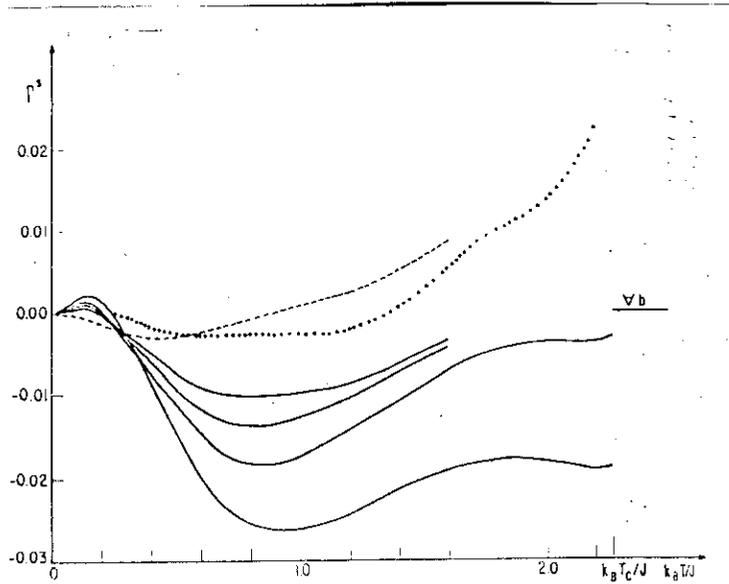


Figura 2.6.1 - Dependência térmica dos erros relativos $\Gamma^S \equiv (\gamma_{b,1}^S - \gamma_L)/\gamma_L$ dos resultados para a tensão superficial do PUE [$\{\gamma_{b,1}^S(T)\}$, linhas cheias], PUEM [$\gamma^{UM}(T)$, linha tracejada], e o PMUE [$\gamma^{MU}(T)$, linha pontilhada]. Dificuldades de precisão numérica (oscilações caóticas) nos forçaram a não considerar os resultados $b=4$ e $b=5$ do PUE perto de T_c .

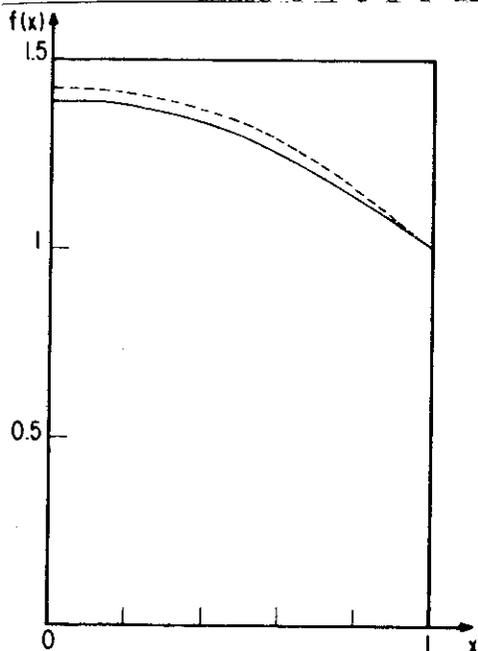


Figura 2.6.2 - Resultados para a função corretiva $f(x)$ do PUE (linha cheia) e a exata (linha tracejada) como função de $x \equiv 1 - T/T_c = (1 - T'/T_c)^{2,1}$ (erro menor que 2,2%).

C. PROCEDIMENTOS DE EXTRAPOLAÇÃO MISTOS (PUEM e PMUE)

Estes procedimentos são obtidos aplicando-se, de uma maneira combinada, o PEM e o PUE.

O Procedimento do Múltiplo em uma Única Extrapolação (PMUE) consiste na aplicação do PUE sobre o resultado $\gamma^M(T)$ utilizando seus próprios valores para a temperatura T_M (em nosso caso $T_M = T_C$), expoente ν_M e derivada C_M para temperatura nula. O erro de $\gamma^{MU}(T)$ (resultado obtido através do PMUE) está mostrado na Fig. 2.6.1. O erro é inferior a 3% em todo intervalo de temperatura (ele é inferior a 0,4% para temperaturas menores que $3/4 T_C$).

O Procedimento com Únicas Extrapolações Múltiplas (PUEM) consiste na aplicação do PEM às funções $\{\gamma_{b,1}^S(T)\}$, isto é, consiste na extrapolação linear para a origem de $\gamma_{b,1}^S(T)$ vs b^{-1} para temperaturas fixas. O resultado, $\gamma^{UM}(T)$, e o erro estão mostrados na Fig. 2.6.1. Novamente o erro é pequeno e até $3/4 T_C$ ele é menor que 0.4% (o fator de correlação linear se aproxima de 1 na vizinhança de $k_B T/J \cong 1$ mas decresce ($\cong 0.95$) quando nos aproximamos de $T = 0$ ou $T = T_C$).

2.7 - CONCLUSÃO

Calculamos, utilizando o GR no espaço real, a tensão superficial longitudinal do modelo de Ising na rede quadrada. A utilização de células auto-duais para este modelo nos permite obter a temperatura crítica exata do mesmo, qualquer que seja o tamanho (b) da célula. Através de cálculos de comportamentos assín

tóticos destas células para $b\psi$ e $k_B T/J \rightarrow 0$ podemos estudar, analiticamente, a convergência em direção ao comportamento assintótico exato da tensão superficial longitudinal (calculada por Onsager⁽²⁰⁾) quando $b \rightarrow \infty$ (pois nesse caso se reobtem a rede quadrada). Como esta convergência de comportamentos assintóticos foi total e como os resultados numéricos para $b = 2, 3, 4$ e 5 indicam uma tendência (suave) em direção à resposta exata somos levados a concluir que este GR provavelmente conduzirá à resposta exata no limite $b \rightarrow \infty$. Desta maneira este é um método confiável para calcularmos, por exemplo, a tensão superficial longitudinal de Ising em três e quatro dimensões⁽³²⁾ onde não há resposta exata conhecida. Isto será feito no próximo capítulo (Capítulo III). O comprimento de correlação (ξ) também será calculado⁽³⁹⁾ por um método análogo a este no Capítulo IV desta tese. Finalmente desenvolvemos alguns métodos de extrapolação que nos permitiram obter respostas bem próximas às exatas e que servirão, no próximo capítulo, para obtermos, acreditamos, boas aproximações da tensão em três e quatro dimensões.

CAPÍTULO III

TENSÃO SUPERFICIAL DO MODELO DE ISING EM REDES HIPERCÚBICAS

3.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo estenderemos a metodologia utilizada no capítulo II, principalmente para o caso tri e quadri-dimensional (31, 32). A tensão superficial do modelo de Ising em redes hipercúbicas é definida de maneira análoga à feita na Seção 1 do Capítulo II e, em particular, a eq. (2.1.3) define a tensão em redes hipercúbicas (é a tensão associada a um hiperplano perpendicular a um eixo da rede hipercúbica, ζ , e cujas constantes de acoplamento pertencentes a este hiperplano são antiferromagnéticas; $J_{ij} = -J$ para J_{ij} pertencente ao hiperplano).

Dentre os objetivos deste trabalho estão estudar a influência da dimensionalidade cristalina d sobre a tensão superficial e a obtenção de comportamentos assintóticos a baixas temperaturas para a tensão. Como modelo consideraremos o Ising, ferromagnético, com spin $1/2$, em uma rede hipercúbica (cíclica) d -dimensional, cujo Hamiltoniano é:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma_i = \pm 1) \quad (3.1.1)$$

onde a soma é sobre pares de sítios primeiros vizinhos e $J_{ij} = J > 0$ com exceção das constantes de acoplamento pertencentes ao hiperplano onde $J_{ij} = -J$.

3.2 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO PARA REDES HIPERCÚBICAS

O Modelo de Ising dado pela eq. (3.1.1) não é auto-dual em redes hipercúbicas para $d \neq 2$. Em três dimensões o seu modelo dual é um modelo de plaquetas (2-simplex) na rede cúbica, enquanto em quatro dimensões o seu dual é um modelo de cubos (3-simplex) na rede hipercúbica. Ambos são modelos com simetria de calibre local Z_2 contrariamente ao modelo original [eq.(3.1.1)] que apresenta somente simetria de calibre global Z_2 . Portanto a escolha de células (grafos) auto-duais, que tem um papel importante no caso bidimensional, não é possível de ser realizada em outras dimensões. As famílias de células que adotamos para as redes hipercúbicas ($d > 2$) estão mostradas na Fig. 3.2.1. A cada

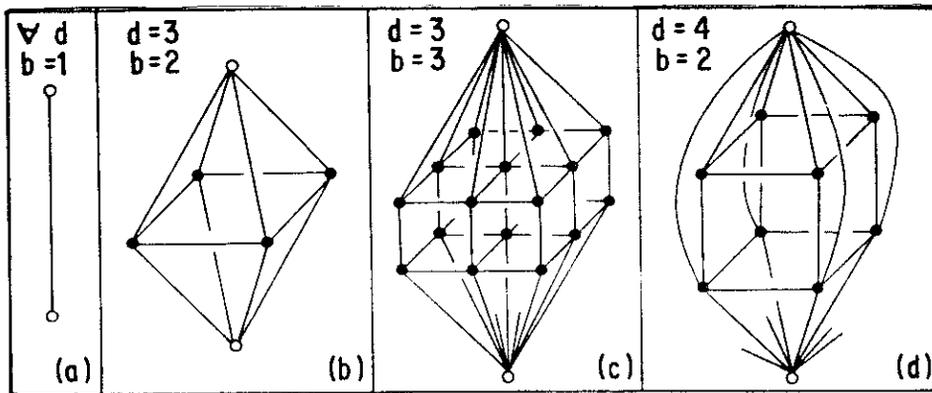


Figura 3.2.1 - Células escolhidas para as redes hipercúbicas $d = 3$ e $d = 4$. Cada célula contém $b^{d-1}(b-1)+2$ sítios, b^d ligações "verticais" e $(d-1)b^{d-2}(b-1)^2$ ligações "horizontais".

sítio destas células associamos uma variável aleatória $\sigma_i = \pm 1$ e a cada ligação uma transmissividade térmica ⁽⁵⁵⁾

$$t = \tanh \left(\frac{J}{k_B T} \right) \quad (3.2.1)$$

onde $J > 0$ é a constante de acoplamento entre variáveis σ 's localizadas em sítios primeiros vizinhos. Analogamente ao realiza-

ta, como acontece em duas. Cada uma delas satisfaz à uma equação

$$R_b^d(t_{bc}^d) = t_{bc}^d \quad (3.2.6)$$

onde t_{bc}^d depende do tamanho e da "dimensão" da célula considerada. Os valores de $k_B T_{bc}^d / J = [\text{arctanh}(t_{bc}^d)]^{-1}$ tendem para o valor estimado numericamente (129, 93) (no caso tridimensional) à medida que b aumenta, ver Tab. 3.2.1.

Tabela 3.2.1 - Comparação entre os valores de T_{bc}^d e $\nu_{b,1}(d)$ para $b = 2,3$ ($d = 3$), $b = 2$ ($d = 4$) e as estimativas numéricas da temperatura crítica e do expoente crítico ν do modelo de Ising em redes hiper-cúbicas.

	$k_B T_{bc}^3 / J$	$\nu_{b,1}(d=3)$	$k_B T_{bc}^4 / J$	$\nu_{b,1}(d=4)$
$b = 2$	5.457399	0.8692	10.625469	0.8426
$b = 3$	5.048460	0.8189		
estimativa numérica	4.5112(<u>129</u>)	0.630(<u>93</u>)	6.6815(<u>129</u>)	0.5

O GR consiste em se assumir que

$$R_{b'}^d(t') = R_b^d(t) \quad (b' = 1, \dots, b-1) \quad (3.2.7)$$

Esta relação simula a renormalização da temperatura em redes hiper-cúbicas quando renormalizamos uma célula de tamanho b em uma de tamanho $b' < b$.

A eq. (3.2.7) admite dois pontos fixos triviais, associados ao comprimento de correlação $\xi = 0$ ($t^* = 0$ e $t^* = 1$) e um ponto fixo não-trivial associado a $\xi = \infty$ ($t^* = t_{b,b'}^*$).

O expoente $\nu_{b,b'}(d)$ do comprimento de correlação é dado por:

$$v_{b,b'}(d) = \frac{\ln(b/b')}{\ln \lambda_{b,b'}(d)} \quad , \quad (3.2.8)$$

onde

$$\lambda_{b,b'}(d) = \left. \frac{dR_b^d(t)/dt}{dR_{b'}^d(t')/dt'} \right|_{t=t'=t_{b,b'}^d} \quad , \quad (3.2.9)$$

sendo $t_{b,b'}^d$ a temperatura que satisfaz a equação

$$R_b^d(t_{b,b'}^d) = R_{b'}^d(t_{b,b'}^d) \quad . \quad (3.2.10)$$

Se $b' = 1$ então $t_{b,1}^d = t_{bc}^d$ mostrado na Tabela 3.2.1.

Os resultados de $v_{b,1}$ para $b = 2, 3$ ($d=3$) e $b=2$ ($d=4$) estão mostrados na Tabela 3.2.1.

A equação do GR para a tensão superficial "longitudinal" é fornecida pela eq. (2.4.1) do Capítulo II

$$(b')^{d-1} \frac{\gamma(T')}{T'} = b^{d-1} \frac{\gamma(T)}{T} \quad . \quad (3.2.11)$$

A eq. (3.2.11) é invariante com relação à transformação $\gamma \rightarrow \lambda\gamma$, onde λ é uma constante significando que o GR pode obter γ a menos de uma constante. Esta constante é escolhida de tal modo que $\gamma(0) = 1$ fornecendo-nos a tensão superficial reduzida. As eqs. (3.2.7) e (3.2.11) completam o problema pois, se fixarmos a constante λ acima, de tal maneira que $\gamma(0) = 1$, então estas equações (após definirmos a dimensão que estamos interessados) nos permitem obter a tensão superficial estudando-se os fluxos no espaço γ - T (ver Fig. 2.4.1 do Capítulo II). Novamente existem três pontos fixos importantes fisicamente no espaço γ - T , que são:

i) $T = T_{b,b'}^d$ e $\gamma = 0$ onde $T_{b,b'}^d = [\text{arctanh}(t_{b,b'}^d)]^{-1}$,

- i) $T = 0$ e $\gamma = \gamma_0$ $\gamma_0 \neq 0$ (escolhemos $\gamma_0 = 1$) ,
 ii) $T = \infty$ e $\gamma = 0$.

3.3 - COMPORTAMENTOS ASSINTÓTICOS DA TENSÃO SUPERFICIAL LONGITUDINAL

Para obtermos os comportamentos assintóticos da tensão superficial na rede cúbica devemos obter os comportamentos assintóticos das funções $R_b^3(t)$ para um tamanho b qualquer. Isto nos permitirá considerarmos o limite $b \rightarrow \infty$ de $\gamma_{b,b}(T)$ que, acreditamos, nos fornecerá o comportamento assintótico exato da tensão superficial do modelo de Ising nesta rede. Para obtermos estes comportamentos das função $R_b^3(t)$ utilizamos o método corte-colapso (31). Para um tamanho b qualquer, este método nos fornece uma expansão em grafos. Por exemplo, para temperaturas baixas ($t \rightarrow 1$) o grafo correspondente a, digamos, aproximação de ordem zero, é o grafo de uma célula de tamanho b onde todas as ligações "horizontais" estão colapsadas, ver Fig. 3.3.1. Neste grafo existem b

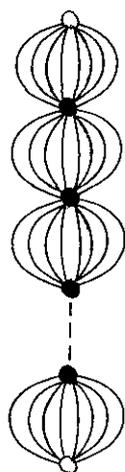


Figura 3.3.1 - Grafo correspondente a colapsar todas as ligações "horizontais".

"cebolas" em série, cada uma delas com b^2 ligações (no caso d -dimensional, cada cebola teria b^{d-1} ligações) em paralelo. Na aproximação de ordem 1 cortamos uma ligação "horizontal" e colapsamos todas as outras ligações "horizontais", o grafo resultante sendo também o mostrado na Fig. 3.3.1 (por exemplo, as ligações "horizon-

tais" da célula $b=2$ na Fig. 3.2.1a são as ligações pertencentes ao "plano" constituído pelos sítios A B C D). Naturalmente, devemos considerar todos os casos onde podemos cortar 1 ligação "horizontal". Na aproximação de ordem 2 cortamos 2 ligações "horizontais" e colapsamos as restantes (horizontais). Quando estas duas ligações forem as ligações de um canto do "plano", então o grafo correspondente será diferente do mostrado na Fig. 3.3.1 e está mostrado na Fig. 3.3.2. A aproximação de ordem 3 nos permite isolar um sítio pertencente a um "lado" do plano (ver célula $b=3$ da Fig. 3.2.1a), enquanto a aproximação de ordem 4 nos permite isolar um sítio no "interior" do plano (cujo número de coordenação no plano é quatro, ver Fig. 3.2.1a, célula $b=3$). É necessário ir até a quarta ordem porque no limite $b \rightarrow \infty$ as contribuições dos "cantos" e "lados" são, em um certo sentido, "subextensivas". Resolvendo todos estes grafos (que, até a ordem 4, são redutíveis à série e paralelo) e utilizando o algoritmo do método corte-colapso, obtemos, após considerável esforço (o cálculo para $t \rightarrow 0$ é feito de maneira similar, porém é bem mais simples):

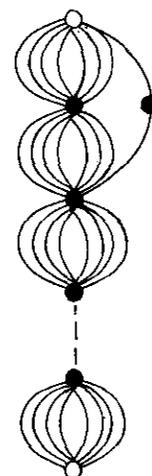


Figura 3.3.2 - Grafo correspondente a cortar as 2 ligações de um canto de um plano horizontal.

$$R_b^3(t) \sim \left\{ \begin{array}{l} b^2 t^b + 4b(b-1)^2 t^{b+1} + \dots \quad (t \rightarrow 0) \\ 1 - 2b \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2} - 2b^3 \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2+1} - [b^3(b^2+1) + 32(b-1)] \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2+2} \\ - \left[\frac{1}{3} b^3(b^2+1)(b^2+2) + 32b^2(b-1) + 64(b-1)(b-2)\right] \dots \end{array} \right. \quad (3.3.1)$$

$$\begin{aligned}
 & + 128(b-1) \left] \left(\frac{1-t}{2}\right) b^{2+3} - \left[\frac{1}{12} b^3 (b^2+1) (b^2+2) (b^2+3) + \right. \\
 & + 16b^2 (b^2+1) (b-1) + 64b^2 (b-1) (b-2) + 160b^2 (b-1) - \\
 & \left. - 128(b-1) (b-2) + 720(b-1) + 256(b-1)^2 \right] \left(\frac{1-t}{2}\right) b^{2+4} - \dots
 \end{aligned}
 \tag{3.3.2}$$

Utilizando a eq. (3.3.2), as eqs. (3.2.7) e (3.2.11) com $d=3$ e seguindo um procedimento similar ao feito no Capítulo II, obtemos para o comportamento assintótico de $\gamma_{b,b'}$, em três dimensões a expressão

$$\begin{aligned}
 \gamma_{b,b'}(T) \sim & 1 - \frac{\ell n (b/b')}{2(b^2-b'^2)} \frac{k_B T}{J} - 8 \frac{b-1}{b^3} \frac{k_B T}{J} e^{-4J/k_B T} - \\
 & - 16 \left[\frac{(b-1)(b-2)}{b^3} + \frac{b-1}{b^3} \right] \frac{k_B T}{J} e^{-6J/k_B T} - \\
 & - \left[8 \left(\frac{b-1}{b}\right) - 80 \frac{(b-1)(b-2)}{b^3} + 108 \frac{b-1}{b^3} - \right. \\
 & \left. - 64 \frac{(b-1)^2}{b^4} + 64 \frac{(b-1)^2}{b^3} \right] \frac{k_B T}{J} e^{-8J/k_B T} .
 \end{aligned}
 \tag{3.3.3}$$

O limite $b \rightarrow \infty$ ($b' < b$) nos fornece a expressão

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \gamma_{b,b'}(T) \sim 1 - 8 \frac{k_B T}{J} e^{-8J/k_B T}
 \tag{3.3.4}$$

que, acreditamos, seja o comportamento assintótico exato (aqui obtido pela primeira vez, pelo que é de nosso conhecimento) para a tensão superficial longitudinal reduzida do modelo de Ising na rede cúbica.

Para outras dimensões ($d > 2$) podemos focalizar a nos-

sa atenção unicamente sobre os sítios (e ligações) que não pertençam ao exterior dos "hiperplanos" (isto é, que não sejam sub-extensivos). Estes sítios interiores dos "hiperplanos" têm número de coordenação igual a $2d$. Mas as células podem ser divididas em $b-1$ hiperplanos de $d-1$ dimensões conectados entre si. Desta maneira, o número de coordenação de um sítio dentro de um hiperplano, isto é, o número de ligações saindo do sítio e pertencentes ao hiperplano, é $2(d-1)$. A contribuição deste termo em $R_b^d(t)$ é:

$$R_b^d(t) \sim 1 - 2 \times 2^{2(d-1)} b^{d-1} (b-1) \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^{d-1} + 2(d-1)} - \dots \quad (3.3.5)$$

Utilizando as eqs. (3.3.5), (3.2.7) e (3.2.11) podemos obter a primeira contribuição relevante no limite $b \rightarrow \infty$ para a tensão superficial longitudinal do GR em d -dimensões.

$$\gamma_{b,b}^{(d)}(T) \sim 1 - 2^{2d-3} \left(\frac{b-1}{b}\right) \frac{k_B T}{J} e^{-4(d-1)J/k_B T} \quad . \quad (3.3.6)$$

O limite $b \rightarrow \infty$ da expressão dada pela eq. (3.3.6) é:

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \gamma_{b,b}^{(d)}(T) \sim 1 - 2^{2d-3} \frac{k_B T}{J} e^{-4(d-1)J/k_B T} \quad , \quad (3.3.7)$$

que deve ser o comportamento assintótico exato da tensão superficial longitudinal reduzida do modelo de Ising em redes hipercúbicas d -dimensionais ($d > 2$). Este resultado poderá, naturalmente, ser confirmado por futuros trabalhos em séries de baixas temperaturas.

Para estudarmos a variação da tensão superficial com a

dimensão vamos reescrever, utilizando as eqs. (2.5.34) e (3.3.7) os comportamentos assintóticos para $d=2, 3$ e 4 como $\{\gamma^{(d)}(T) \equiv \gamma(d;T)/\gamma(d;0)\}$

$$\gamma^{(2)} \sim 1 - \frac{k_B T_c^{(2)}}{J} \left(\frac{T}{T_c^{(2)}}\right) e^{-\frac{2J}{k_B T_c^{(2)}} \left(\frac{T_c^{(2)}}{T}\right)} \quad (d=2) \quad (3.3.8)$$

$$\gamma^{(3)} \sim 1 - 8 \frac{k_B T_c^{(3)}}{J} \left(\frac{T}{T_c^{(3)}}\right) e^{-\frac{8J}{k_B T_c^{(3)}} \left(\frac{T_c^{(3)}}{T}\right)} \quad (d=3) \quad (3.3.9)$$

$$\gamma^{(4)} \sim 1 - 32 \frac{k_B T_c^{(4)}}{J} \left(\frac{T}{T_c^{(4)}}\right) e^{-\frac{12J}{k_B T_c^{(4)}} \left(\frac{T_c^{(4)}}{T}\right)} \quad (d=4) \quad (3.3.10)$$

onde $\frac{k_B T_c^{(2)}}{J} = 2.269185314$ é a temperatura crítica exata de Ising em $d=2$ e $T_c^{(3)}$ e $T_c^{(4)}$ são as estimativas numéricas da temperatura crítica em $d=3$ e 4 , respectivamente (ver Tabela 3.2.1). A Tabela 3.3.1 mostra os valores de $\gamma^{(d)}$ correspondentes a diversos valores de $T/T_c^{(d)}$. Vemos que, para $T/T_c^{(d)}$ próximo de zero, as tensões superficiais obedecem à seguinte desigualdade

$$\gamma^{(3)} > \gamma^{(4)} > \gamma^{(2)} \quad . \quad (3.3.11)$$

Tabela 3.3.1 - Comparação entre os valores assintóticos de $\gamma^{(d)}$ para diversos valores de $T/T_c^{(d)}$ ($d = 2, 3$ e 4). Claramente $\gamma^{(3)} > \gamma^{(4)} > \gamma^{(2)}$.

$T/T_c^{(d)}$ \ $\gamma^{(d)}$	d=2	d=3	d=4
0.05	0.999999997	$\cong 1.0$	$\cong 1.0$
0.1	0.99996626	0.99999993	0.99999966
0.15	0.99904474	0.99996027	0.99979750
0.2	0.99446622	0.99898232	0.99461379

O caso bidimensional é diferente das dimensões superiores. Por exemplo, quando cortamos uma ligação "horizontal" e colapsamos as restantes ("horizontais"), para todas as dimensões maiores que 2, o grafo correspondente é o mesmo que se colapsássemos todas estas ligações. Já em $d=2$ este grafo será diferente, o que explica o fato da eq. (3.3.7) não reproduzir o comportamento correto em $d=2$, só sendo válida para $d > 2$. Assim, acreditamos que o comportamento de $\gamma^{(d)}$ será suave para $d > 2$, isto é,

$$\gamma^{(d)} > \gamma^{(d+1)} \quad (T/T_c^{(d)} \rightarrow 0, \quad d > 2) \quad (3.3.12)$$

permanecendo o caso bidimensional como um caso anômalo.

Podemos estudar também (numericamente) o comportamento de $\gamma^{(d)}$ próximo de T_c . Definindo

$$\gamma_{b,b'}^{(d)}(T) \sim A_{b,b'}^{(d)} \left(\frac{T_{b,b'}^d - T}{T_{b,b'}^d} \right)^{\mu_{b,b'}^{(d)}} \quad (3.3.13)$$

onde

$$\mu_{b,b'}^{(d)} = (d-1)\nu_{b,b'}^{(d)} \quad , \quad (3.3.14)$$

podemos estimar os valores de $A_{b,b'}^{(d)}$. Estes estão mostrados na Tabela 3.3.2. Novamente verificamos que o caso bidimensional tem um comportamento anômalo em relação a outras dimensões.

Tabela 3.3.2 - Valores de $A_{b,1}^{(d)}$. Os valores de $d=2$ foram tirados da Tab.2.3.1.

d \ b	2	3	4
2	1.41	1.65	1.38
3	1.52	1.86	—
4	1.58	—	—
5	1.63	—	—
exato	2.00	—	—

3.4 - PROCEDIMENTOS DE EXTRAPOLAÇÃO

Utilizamos os procedimentos de extrapolação desenvolvidos no Capítulo II, fazendo as adaptações necessárias. Assim, no procedimento de extrapolação múltipla (PEM) a extrapolação linear, ($d=3$; $b = 2,3$), para a origem é feita em $\gamma_{b,1}^{(d)} \times b^{-2}$ pois $\mu = 2v$ em três dimensões. Devemos também normalizar as temperaturas críticas pois elas são diferentes para $b = 2$ ou 3 . No procedimento de única extrapolação (PUE) é suficiente notarmos que

$$C_{b,1}^{(d)} = \frac{\ln b}{2(b^{d-1}-1)}, \quad (3.4.1)$$

utilizar os valores da Tabela 3.2.1 nas eqs. (2.6.3), (2.6.4) e (2.6.12) e a mesma metodologia se aplica para $d = 3$ e 4 ($C_L^{(d)} = - (\partial \gamma_L^{(d)}) / \partial T |_{T=0} = 0$).

Na Figura 3.4.1 mostramos (para redes cúbicas) as tensões superficiais fornecidas pelo GR para $b = 2$ e 3 , os respectivos PUE e o PUEM (ver Capítulo II), o qual é a nossa melhor proposta numérica para a tensão superficial longitudinal do modelo de Ising em três dimensões. Lembramos que esta extrapolação (PUEM) no caso bidimensional apresenta um erro menor que 3% (ver Capítulo II).

Na Figura 3.4.2 mostramos o resultado do GR para γ em $d = 4$ e o respectivo PUE, o qual é a nossa melhor proposta numérica.

Na Figura 3.4.3 mostramos as nossas melhores propostas para γ em 3 e 4 dimensões e a tensão superficial exata em 2 dimensões com o objetivo de compará-las.

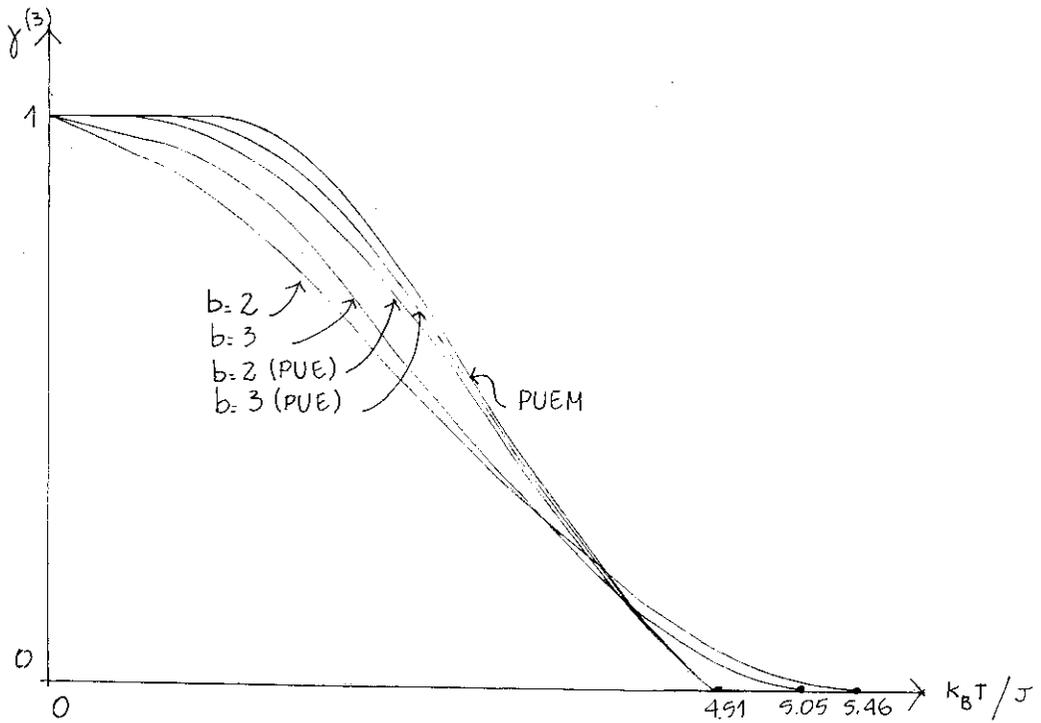


Figura 3.4.1 - Resultados das tensões superficiais, ($d=3$), fornecidas pelo GR para $b=2,3$ e por diversas extrapolações (PUE, PUEM). A curva obtida pelo PUEM é a nossa melhor proposta numérica para a tensão superficial longitudinal reduzida de Ising em três dimensões.

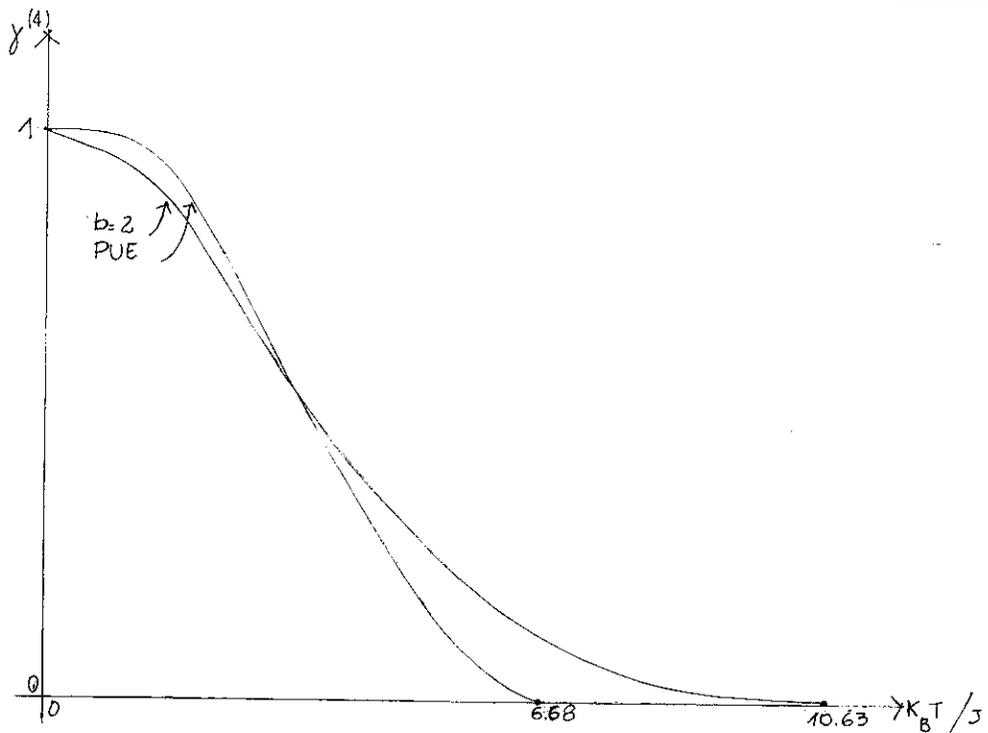


Figura 3.4.2 - Tensão superficial em quatro dimensões fornecidas pelo GR ($b=2$) e pelo PUE. O PUE é a nossa melhor proposta numérica.

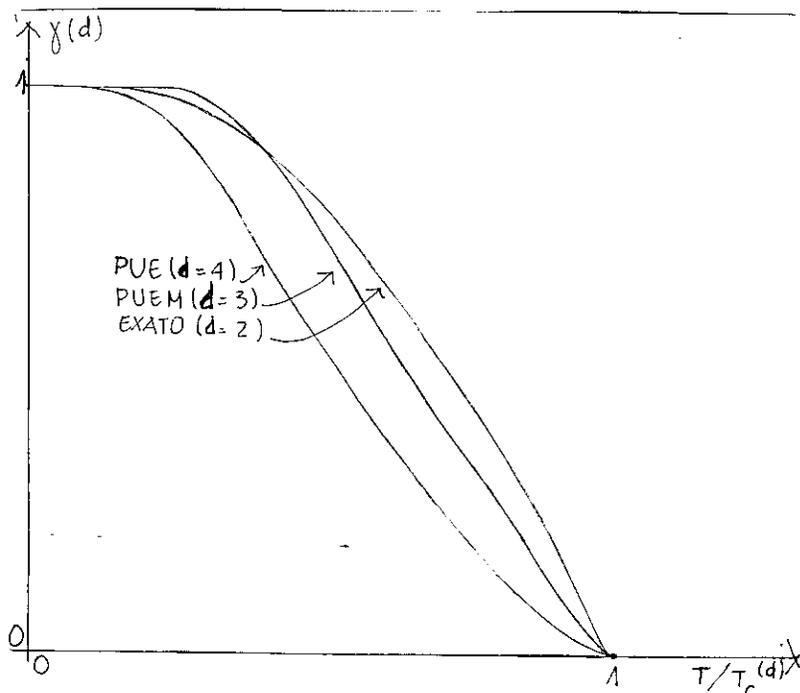


Figura 3.4.3 - Comparação entre o resultado exato de γ em duas dimensões e as melhores propostas numéricas para $d = 3$ (PUEM) e $d = 4$ (PUE).

3.5 - CONCLUSÃO

A tensão superficial longitudinal reduzida (γ) do modelo de Ising com spin $1/2$, ferromagnético, isotrópico, com interações de curto alcance, é calculada, através do GR no espaço real, para redes hipercúbicas. Propostas numéricas da tensão superficial foram obtidas para três e quatro dimensões. Os comportamentos assintóticos de γ para $k_B T/J \rightarrow 0$ foram analisados analiticamente e os resultados obtidos são certamente os exatos para qualquer dimensão maior que 2. A análise destes comportamentos assintóticos leva a concluir que as tensões superficiais obedecem à relação $\gamma^{(d)} > \gamma^{(d+1)}$ para $k_B T/J \rightarrow 0$ onde $d (>2)$ é a dimensão da rede hipercúbica. A tensão superficial na rede quadrada

tem um comportamento peculiar próximo da temperatura nula, não obedecendo à relação acima. Isto se deve às suas propriedades topológicas particulares.

CAPÍTULO IV

COMPRIMENTO DE CORRELAÇÃO DO MODELO DE POTTS

4.1 - INTRODUÇÃO

Se observarmos um fluido simples que está bem próximo mas acima de seu ponto crítico de separação de fases gás-líquido, notaremos um forte acréscimo no espalhamento de luz a pequenos ângulos. O fluido, que era transparente, torna-se translúcido e este fenômeno é conhecido há bastante tempo por opalescência crítica. Em misturas binárias de fluidos observados com luz e raios-X logo acima e abaixo do ponto crítico de separação de fases também se nota um espalhamento crítico similar^(2, 17). Os espalhamentos críticos de neutrons em sistemas magnéticos próximos do ponto de Curie apresentam o mesmo fenômeno⁽¹⁷⁾ e são conhecidos há mais de quarenta anos. Também foi observado este espalhamento crítico em pontos críticos anti-ferromagnéticos (pontos de Néel). Sistemas como ligas metálicas binárias no ponto de transformação ordem-desordem apresentam espalhamento crítico se irradiadas com raios-X ou neutrons⁽¹⁷⁾.

Desta maneira, sistemas bem diferentes entre si apresentam fenômenos similares próximos de seus pontos críticos. Deve, portanto, haver alguma propriedade que seja comum a todos estes sistemas e responsável pelo espalhamento crítico.

Smoluchowski foi o primeiro a sugerir que em to-

dos os casos acima o grande aumento do espalhamento se deve a um rápido acréscimo do tamanho (especialmente falando) das flutuações inhomogêneas que ocorrem no sistema assim que ele se aproxima de seu ponto crítico. Por exemplo, no fluido simples (uma componente) as flutuações da densidade são a propriedade importante; para fluidos binários e ligas as flutuações de composição são as determinantes; para os ferromagnetos (antiferromagnetos) as flutuações da magnetização (magnetização da sub-rede) são a causa do espalhamento crítico.

O estudo teórico deste fenômeno (espalhamento crítico) deve, portanto, centrar-se nas flutuações. O ponto central é que o espalhamento é proporcional à transformada de Fourier de uma adequada função de correlação de equilíbrio entre dois "corpos" (dois spins em sítios diferentes; duas densidades em posições diferentes no fluido, etc). Desta maneira, o estudo teórico do espalhamento crítico se resume à análise da função de correlação apropriada na região crítica.

Se o sistema em estudo pode ser representado (modelo) por um sistema clássico de muitos corpos os quais interagem entre si através de forças de curto alcance, Ornstein e Zernike⁽⁸⁷⁾ predisseram que a função de correlação das flutuações (Γ) entre duas quantidades definidas localmente $A(\vec{O})$ e $B(\vec{R})$ (spins, densidades, concentração de um elemento em uma liga binária, etc),

$$\Gamma_{AB}(\vec{R}) = \langle (A(\vec{O}) - \langle A(\vec{O}) \rangle) (B(\vec{R}) - \langle B(\vec{R}) \rangle) \rangle \quad (4.1.1)$$

onde $\langle \dots \rangle$ é a média térmica com relação ao "ensemble" apropriado, apresenta um decaimento assintótico quando $R \rightarrow \infty$ da forma (e que é correto para $d > 4$)

$$\Gamma_{AB}(\vec{R}) \sim R^{-(d-1)/2} e^{-R/\xi(T)} \quad . \quad (4.1.2)$$

d é a dimensão do sistema e $\xi(T)$ é o alcance efetivo das correlações das flutuações chamado, muito propriamente, de comprimento de correlação^(*). Esta fórmula, eq. (4.1.2), perde a sua validade na temperatura crítica^(97, 99) onde $\Gamma_{AB}(\vec{R})$ apresenta um comportamento tipo lei de potência⁽¹³⁰⁾, ver Capítulo I (o comprimento de correlação diverge na temperatura crítica de uma transição de fase contínua). Mas mesmo para $T \neq T_c$ onde se acredita que $\Gamma_{AB}(\vec{R})$ apresente, na grande maioria dos casos, um decaimento exponencial (acima e abaixo de T_c) verificou-se^(99, 131) que $\Gamma_{AB}(\vec{R})$ divergia do comportamento do tipo Ornstein-Zernike, principalmente no que se refere à potência de R ($-(d-1)/2$), sendo necessário introduzir um novo expoente crítico, η , para se satisfazer os resultados experimentais^(97, 2). Mas o decaimento tipo exponencial com um alcance finito das correlações que depende da temperatura, para $T \neq T_c$, é uma característica de sistemas com forças de curto-alcance. Existem definições alternativas de $\xi(T)$, não necessariamente equivalentes mas que apresentam o mesmo comportamento.

O cálculo de $\xi(T)$ pela maneira direta, isto é, o cálculo exato da função de correlação para se poder obter $\xi(T)$ é extremamente difícil para os modelos não-triviais ($d > 1$) e os cálculos baseados em se obter os primeiros autovalores da matriz transferência para se poder conseguir ξ não são mais fáceis de serem conseguidos.

(*) A opalescência crítica ocorre quando o comprimento de correlação do sistema se torna da ordem do comprimento de onda da radiação incidente sobre o mesmo.

Sabe-se que ξ depende da direção entre as variáveis $A(\vec{O})$ e $B(\vec{R})$, se estão, por exemplo, sobre um mesmo eixo ou sobre a diagonal principal de uma rede hipercúbica. Mas próximo a T_c esta dependência da direção entre as variáveis deve desaparecer e as correlações à longa distância se tornam isotrópicas (26). Na vizinhança de T_c o comprimento de correlação é esperado ter a forma

$$\xi \sim A \left| \frac{T_c - T}{T_c} \right|^{-\nu}, \quad (4.1.3)$$

onde a amplitude A e o expoente crítico ν não dependem da direção na qual ξ é definido.

Um dos poucos modelos com interações de curto-alcance, onde se conseguiu calcular exatamente ξ é o modelo de Ising bi-dimensional (20,130). Neste modelo se conseguiu mostrar que a sugestão de Widom, baseada na hipótese de escala (100), para $T \approx T_c$

$$\gamma(T) \propto \xi(0,T) M^2(0,T) / \chi(0,T) \quad (4.1.4)$$

é correta, sendo γ a tensão superficial longitudinal, ξ o comprimento de correlação na direção (1,0), $M(0,T)$ a magnetização a campo nulo e $\chi(0,T)$ a susceptibilidade a campo nulo. Em particular se conseguiu mostrar que entre a tensão superficial diagonal e o comprimento de correlação diagonal [direção (1,1) do modelo de Ising isotrópico] existe a relação simples

$$\gamma(T) \xi(T) = \frac{k_B T}{J} \quad (4.1.5)$$

válida para todo $T \in [0, T_c]$ (132). Utilizaremos ξ para represen-

tar o comprimento de correlação adimensional, isto é, o alcance efetivo das interações em unidades do parâmetro de rede a . Como sabemos do Capítulo II que, na vizinhança de T_c ,

$$\gamma(T) \sim \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^\mu \quad (4.1.6)$$

existe uma relação conectando os expoentes μ e ν que é dada por (em duas dimensões):

$$\mu = \nu \quad (4.1.7)$$

Esta relação íntima entre ξ e γ , eq. (4.1.5), válida para Ising isotrópico, em $d = 2$, não se sabe ao certo se continuará válida para outros modelos. O comprimento de correlação (de Ising isotrópico), para $T > T_c$ só difere de ξ dado pela eq. (4.1.5), $T < T_c$, por um fator $^{-2}$ ⁽¹³²⁾.

Nosso objetivo, neste trabalho, será calcular, através do grupo de renormalização no espaço real, o comprimento de correlação horizontal, do modelo de Potts ^(33, 34) a q estados. Este é um modelo clássico de muitos corpos que contém o modelo de Ising como caso particular ($q=2$). Ele consiste em se colocar, nos sítios de uma dada rede, variáveis σ_i que podem assumir q "estados" (podemos visualiza-las como confinadas em um plano, onde cada uma delas aponta para uma das q direções igualmente espaçadas especificadas pelos ângulos $\theta_n = 2\pi n/q$, $n = 0, 1, \dots, q-1$). Duas destas variáveis, situadas em sítios primeiros vizinhos, interagem entre si de duas maneiras: se ambas estão no mesmo estado a interação vale $-qJ$ ($J > 0$), e em caso contrário a interação vale zero. O Hamiltoniano para uma dada rede é ^(34, 39):

$$H = -qJ \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (4.1.8)$$

onde

$$\delta_{\sigma_i \sigma_j} = \begin{cases} 1 & \text{se } \sigma_i = \sigma_j \\ 0 & \text{se } \sigma_i \neq \sigma_j \end{cases} \quad (4.1.9)$$

é a delta de Kronecker^(*). O modelo de dois níveis descrito acima, isotrópico, homogêneo, com q estados e interações de curto alcance tem como função de correlação entre dois sítios^(34,133)

$$\Gamma_{\alpha\alpha}(\sigma_i \sigma_j) = P_{\alpha\alpha}(\sigma_i \sigma_j) - q^{-2} \quad (4.1.10)$$

onde $P_{\alpha\alpha}(\sigma_i \sigma_j)$ é a probabilidade de que as variáveis nos sítios i e j estejam em um mesmo estado α ($\alpha = 1, \dots, q$). Foi mostrado rigorosamente que $\Gamma_{\alpha\alpha}$ decai exponencialmente acima da temperatura crítica T_c ⁽¹³⁴⁾ (existindo portanto um comprimento de correlação ξ). Abaixo de T_c o decaimento de $\Gamma_{\alpha\alpha}$ não é conhecido (exceto para $q = 2$ em duas dimensões^(26, 27) onde é exponencial). Mas, provavelmente, ele também é exponencial (associado a ξ para $T < T_c$) pois o grupo de simetria do modelo acima não é contínuo, como o modelo XY, e suas interações são de curto alcance. Portanto, os resultados que apresentaremos só poderão ser comparados com o caso $q = 2$ em duas dimensões. Para os outros valores de q os nossos resultados numéricos (com pretensões de pequenos erros) e os nossos comportamentos assintóticos à alta e baixa temperaturas (que acreditamos serem exatos) para o comprimento de correlação horizontal poderão ser comparados com futuros tra

(*) Este modelo apresenta transição de fase contínua até um certo valor de q , acima do qual a transição se torna de primeira ordem. Por exemplo, em duas dimensões a transição se torna de primeira ordem para $q > 4$ ⁽¹³⁵⁾ enquanto que em três dimensões se acredita que a transição para $q = 3$ já é de primeira ordem⁽¹³⁶⁾.

balhos de séries de alta e baixa temperatura ou, talvez, novos resultados analíticos exatos.

Desde quando Domb propôs este modelo para Potts como assunto de sua tese (33) até muitos anos depois, ele foi considerado como um sistema que exibia uma transição de fase não-trivial de interesse estritamente teórico. No entanto, recentemente, mostrou-se que o modelo de Potts poderia ser realizado experimentalmente. A associação de uma dada experiência com o modelo de Potts de q estados é possível devido ao conceito, extremamente importante, de universalidade. Isto é, podemos dizer que este modelo com q estados e uma dada experiência estão relacionados porque pertencem à mesma classe de universalidade, portanto possuem o mesmo conjunto de expoentes críticos; têm comportamentos críticos similares.

Vários autores, analisando a Hamiltoniana de Landau - Guinzburg para o modelo de Potts, têm pesquisado sobre as classes de universalidade para diversos valores de q (137-139). Domaney et al. (137), em particular, mostraram que os sistemas adsorvidos (sistemas que apresentam transição em monocamadas e submonocamadas adsorvidas em superfícies cristalinas) podem ser classificados e catalogados utilizando-se a teoria de Landau e o Hamiltoniano de Landau-Guinzburg dos átomos adsorvidos considerados como gás em rede ("lattice gas"). Também foi observado que as transições pertencentes às várias classes de universalidade do modelo de Potts bidimensional podem ser realizadas experimentalmente escolhendo-se apropriadamente o substrato e a cobertura ("coverage") dos átomos adsorvidos (137 - 139). Alguns destes sistemas experimentais são: átomos de ^4He adsorvidos em uma camada de Kriptônio sobre Grafite (81) [que é uma realização experi-

mental de um sistema adsorvido, com cobertura $1/2$, em um substrato tipo colmeia ("honeycomb")⁽¹³⁸⁾] apresentando comportamento tipo Ising ($q = 2$); ^4He adsorvidos, com cobertura $1/3$, em grafite⁽¹⁴⁰⁾, adsorção de Kriptônio em grafite⁽¹⁴⁰⁾, ordenamento estrutural em prata β alumínio⁽¹⁴¹⁾ (realizações experimentais do modelo de Potts com três estados); O_2 adsorvido em superfície de Ni⁽¹⁴²⁾ (realização para Potts, $q = 4$, $d = 2$).

Mas também em sistemas magnéticos [CoCs_3Br_5 , $d = 2$, $q = 2$ ⁽¹⁴³⁾; CoCs_3Cl_5 , $d = 3$, $q = 2$ ⁽¹⁴³⁾; DyPO_4 , $d = 3$, $q = 2$ ⁽¹⁴⁴⁾]; em ferromagnetos cúbicos com campo magnético diagonal [como DyAl_2 ⁽¹⁴⁵⁾], cujos três eixos fáceis seriam uma realização de $q = 3$, $d = 3$ ⁽¹⁴⁶⁾; em transições estruturais de primeira ordem no, por exemplo, SrTiO_3 tensionado [$q = 3$, $d = 3$ ⁽¹⁴⁷⁾] e outros⁽³⁴⁾, podemos obter realizações experimentais do modelo de Potts. Desta maneira este modelo (Potts) transcende o interesse puramente teórico que o caracterizou inicialmente para se realizar, cada vez mais, em sistemas físicos "concretos".

É interessante ressaltarmos também que o modelo de Potts está relacionado com vários outros modelos estatísticos em redes tais como o modelo $Z(N)$ (para $N = 1, 2, 3$ e 4), percolação (caso particular $q \rightarrow 1$), resistências aleatórias em circuitos ("random resistor network", caso particular $q \rightarrow 0$), Ising ($q=2$), modelo de 6 vértices com regra de gelo, etc.

4.2 - MODELO

Considere uma rede quadrada onde cada sítio i possui uma variável σ_i que pode tomar os valores $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$. Estas

variáveis interagem entre si através do Hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} q J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (4.2.1)$$

onde $\sum_{\langle i,j \rangle}$ significa que somamos somente sobre pares de sítios primeiros vizinhos, J_{ij} é a constante de troca (interações) entre estes sítios e $\delta_{\sigma_i \sigma_j}$ é a delta de Kronecker, isto é, se $\sigma_i = \sigma_j$ ($\sigma_i \neq \sigma_j$) então $\delta_{\sigma_i \sigma_j} = 1(0)$. É, como já foi dito na introdução deste Capítulo, um modelo de dois níveis, como Ising, só diferenciando deste pela degenerescência de cada nível. Supomos também condições de contorno periódicas na rede. Vamos considerar, neste trabalho, somente o caso isotrópico ferromagnético, isto é,

$$J_{ij} = J > 0 \quad . \quad (4.2.2)$$

4.3 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NA REDE QUADRADA

O grupo de simetria que, sob uma transformação de calibre global, deixa invariante o Hamiltoniano do modelo de Potts com q estados é o Z_q . Este é um grupo discreto (se q é finito) e abeliano, o que significa que o seu modelo dual é sempre possível de ser obtido. No caso geral, o modelo dual de um modelo original com simetria Z_q é também um modelo com esta simetria. Mas se é um modelo em uma rede hipercúbica cujo simplex é $s = \frac{d}{2}$, ele não é necessariamente auto-dual, o que sabemos ocorrer se o grupo de simetria for Z_2 , ver Capítulo II, Seção 3 (o modelo de Potts vetorial, onde as constantes de acoplamento dependem da diferença de ângulo entre as variáveis σ_i e σ_j localizadas em sítios

tios primeiros vizinhos i e j , e cuja simetria também é Z_q , não é auto-dual se $s = d/2$) ⁽¹²¹⁾. Somente sobre certas condições um modelo com simetria Z_q pode ser auto-dual e o modelo de Potts, dado pela eq. (4.2.1), satisfaz a estas condições. Assim, toda a discussão feita na Seção 3 do Capítulo II sobre dualidade é válida para Potts. Em particular, o modelo de Potts (1-simplex) na rede quadrada ($d=2$) é auto-dual ($d-s = 1$ -simplex). Existe, portanto, um mapeamento da alta na baixa temperatura deste modelo, o que nos permite calcular a temperatura crítica exata qualquer que seja q .

Desta maneira, a família de células auto-duais escolhida para a rede quadrada no Capítulo II (ver Fig. 2.3.1) deve se mostrar adequada também para este modelo. Assim, colocamos em cada sítio destas células ($b \geq 2$) uma variável σ_i de Potts e fazemos o traço parcial sobre seus sítios "internos" para podermos renormalizá-las em uma única ligação ($b' = 1$; análogo ao que foi feito no Capítulo II). A variável $J/k_B T$ novamente não é a mais adequada para se fazer a renormalização. Para isto, vamos definir a transmissividade térmica de Potts ⁽¹¹⁴⁾ (que tem algoritmos simples para ligações em série e paralelo, ver Apêndice A) como ^(*)

$$t_q = \frac{1 - e^{-qJ/k_B T}}{1 + (q-1) e^{-qJ/k_B T}} \quad (4.3.1)$$

Em função de t_q as quatro primeiras células ($b=1,2,3,4$) da família mostrada na Fig. 2.3.1 do Capítulo II foram calculadas pelo

^(*) Observe que ela se reduz à transmissividade de Ising se $q = 2$, ver eq. (2.3.1) e reproduz, no limite $q \rightarrow 1$, a variável isomorfa da concentração de ligações em percolação, ver Kasteleyn-Fortuin ⁽⁴³⁾.

método corte-colapso. Os resultados para $b = 1, 2$ e 3 são mostrados a seguir, sendo que o resultado para $b = 4$, devido à sua dimensão, não está escrito mas simplesmente indicado.

$$R_1(t_q; q) = t_q \quad (4.3.2)$$

$$R_2(t_q; q) = [2t_q^2 + 2t_q^3 + 5(q-2)t_q^4 + (q-2)(q-3)t_q^5] / [1+2(q-1)t_q^3 + (q-1)t_q^4 + (q-1)(q-2)t_q^5] \quad (4.3.3)$$

$$R_3(t_q; q) = [3t_q^3 + 8t_q^4 + (8q-6)t_q^5 - (45q-82)t_q^6 + (24q^2-50q+16)t_q^7 + (2q^3+62q^2-223q+198)t_q^8 + (34q^3-37q^2-270q+422)t_q^9 + (4q^4+123q^3-952q^2+2287q-1814)t_q^{10} + (66q^4-593q^3+2098q^2-3430q+2157)t_q^{11} + (13q^5-144q^4+671q^3-1646q^2+2115q-1126)t_q^{12} + (q^6-13q^5+74q^4-237q^3+451q^2-482q+224)t_q^{13}] / [1+(4q-4)t_q^3 + (4q-4)t_q^4 + (2q^2-2q)t_q^5 + (8q^2-10q+2)t_q^6 + (21q^2-43q+22)t_q^7 + (10q^3+q^2-62q+51)t_q^8 + (32q^3-107q^2+101q-26)t_q^9 + (7q^4+51q^3-394q^2 + 722q-386)t_q^{10} + (57q^4-445q^3+1275q^2-1565q + 678)t_q^{11} + (13q^5-135q^4+559q^3-1143q^2+1138q - 432)t_q^{12} + (q^6-13q^5+71q^4-207q^3+337q^2-287q + 98)t_q^{13}] \quad (4.3.4)$$

$$R_4 = R_4(t_q; q) \quad (4.3.5)$$

Todas estas equações, (4.3.2), (4.3.3), (4.3.4) e (4.3.5) são auto-duais, isto é, se substituimos t_q por seu dual (114) (ver Apêndice A)

$$t_q^D = \frac{1-t_q}{1+(q-1)t_q} \quad , \quad (4.3.6)$$

obteremos $R_b^D(t_q; q)$ que nos fornece o mapeamento da alta na baixa temperatura (ou vice-versa). A temperatura crítica será a temperatura igual à sua dual, isto é,

$$t_{qc} = t_{qc}^D \quad (4.3.7)$$

de onde obtemos

$$t_{qc} = \frac{1}{1+\sqrt{q}} \quad (4.3.8)$$

que é a temperatura crítica exata para o modelo de Potts com q estados. As eqs. (4.3.2), (4.3.3), (4.3.4) e (4.3.5) apresentam, todas elas, t_{qc} como ponto fixo crítico ($\xi = \infty$)

$$R_b(t_{qc}; q) = t_{qc} \quad (4.3.9)$$

o que nos permitirá obter esta temperatura crítica exata qualquer que seja o tamanho b da célula. Aquelas equações também têm como pontos fixos (triviais) $t_q^* = 0$ e $t_q^* = 1$ ($\xi = 0$), correspondentes à situação de temperatura infinita e nula, respectivamente.

A renormalização do modelo na rede quadrada, por um fator de escala b/b' , está contida nas relações

$$R_{b'}(t'_q; q) = R_b(t_q; q) \quad . \quad (4.3.10)$$

As renormalizações que faremos serão para $b = 2,3,4$ e $b' = 1$.

A linearização da eq. (4.3.10) em torno do ponto fixo crítico ($t^* = t_{qc}$) nos permite obter o expoente crítico $\nu_{b,b'}$ do comprimento de correlação ξ para o número de estados q dado:

$$\nu_{b,b'} = \frac{\ln(b/b')}{\ln \lambda_{b,b'}^q} \quad (4.3.11)$$

$$\lambda_{b,b'}^{(q)} = \left. \frac{\partial R_b(t_q; q) / \partial t_q}{\partial R_{b'}(t'_q; q) / \partial t'_q} \right|_{t_q = t'_q = t_{qc}} \quad (4.3.12)$$

Na Tabela 4.3.1 mostramos $\nu_{b,1}$ para $b = 2,3,4$ e $q = 1, 2,3$ e 4.

Tabela 4.3.1 - Valores de $\nu_{b,1}$ para diversos valores de b e q . Os resultados de $q = 2$ reproduzem os da Tabela 2.3.1.

$q \backslash b$	1.0	2.0	3.0	4.0
2	1.4277	1.1486	1.0236	0.9484
3	1.3797	1.1094	0.9883	0.9156
4	1.3627	1.0950	0.9752	0.9033
Conjectura de den Nijs (35)	4/3	1.0	5/6	2/3

4.4 - COMPRIMENTO DE CORRELAÇÃO

Para obtermos o comportamento do comprimento de correlação contra a temperatura necessitamos, na linguagem do GR, de um mapeamento do espaço $\xi-T$ (ou $\xi-t$) nele mesmo. A eq. (4.3.10)

nos exibe o mapeamento, unidimensional, da temperatura nela mesma (a temperatura é um subespaço invariante do espaço ξ -T). Desta maneira resta-nos obter mais uma equação, relacionando ξ e T, para "fechamos", no contexto do GR, o problema. Esta equação adicional é obtida simplesmente observando que, em uma mudança de escala, do tipo da realizada pelo GR, os comprimentos se reescalam como

$$x \rightarrow x' = \frac{x}{(b/b')} \quad (4.4.1)$$

onde b/b' é a escala da renormalização. O comprimento de correlação ξ é, como o próprio nome indica, o alcance máximo, a partir de uma determinada variável σ_i , das variáveis que têm comportamento cooperativo com a inicial. É portanto um comprimento e deve se reescalar como^(*)

$$\xi'(T';q) = \frac{\xi(T;q)}{(b/b')} \quad (4.4.2)$$

As eqs. (4.3.10) e (4.4.2) completam, assim, o problema pois fornecem um mapeamento do espaço ξ -T (ou ξ -t) nele mesmo. Os pontos fixos físicos neste espaço serão: ($\xi=0$, $T=\infty$) e ($\xi=0$, $T=0$) correspondentes à temperatura infinita e nula, respectivamente, e ($\xi=\infty$, $T=T_c$) correspondente ao ponto fixo crítico onde ξ diverge como $\xi_{b,b'} \sim |T-T_c|^{-\nu_{b,b'}}$.

O comportamento assintótico de $R_b(t_q;q)$ para $t_q \rightarrow 0$ ou $t_q \rightarrow 1$ novamente pode ser obtido pelo método de "corte-colapso"

(*) Observamos que a equação (4.4.2) é invariante com relação à transformação $\xi \rightarrow \lambda\xi$ onde λ é uma constante. Em consequência, os resultados obtidos pelo GR estão corretos a menos de uma constante, a qual não é possível ser determinada pelo presente formalismo.

em um processo similar ao feito no Apêndice A onde não assumimos a priori que $q = 2$ nas eqs. (A.8) e (A.9). O comportamento obtido é:

$$R_b(t_q; q) \sim \begin{cases} bt_q^{b+2(b-1)^2} t_q^{b+1} + \dots & \text{se } t_q \rightarrow 0 \quad (4.4.3) \\ 1 - qb \left(\frac{1-t_q}{q}\right)^b - q[b^2(q-1)+2(b-1)^2] \left(\frac{1-t_q}{q}\right)^{b+1} \dots & \text{se } t_q \rightarrow 1 \quad (4.4.4) \end{cases}$$

Podemos passar da eq. (4.4.3) para a eq. (4.4.4), ou vice-versa, utilizando a variável t_q^D dada pela eq. (4.3.6). Isto, é claro, se deve a que o modelo de Potts é dual na rede quadrada. Observamos que se tomarmos $q = 2$ nas eqs. (4.4.3) e (4.4.4) reobtemos as eqs. (2.5.1a) e (2.5.1b) (Ising).

O comportamento assintótico de $\xi_{b,1}$ a altas temperaturas ($t_q \rightarrow 0$) pode ser obtido tomando-se a eq. (4.3.10), a eq. (4.4.3) e fazendo-se

$$t_q \sim \frac{J}{k_B T} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{(q-2)J}{k_B T} + \dots \right] \quad (4.4.5)$$

tem-se a relação:

$$\left(\frac{k_B T}{J}\right)^{-1} \sim \frac{\left(\frac{k_B T}{J}\right)^b}{b} \left[1 - \left(\frac{b}{2}(q-2) + \frac{2(b-1)^2}{b}\right) \frac{J}{k_B T} \dots \right] \quad (4.4.6)$$

As eqs. (4.4.6) e (4.4.2) nos fornecem o comportamento assintótico de $\xi_{b,b'}$ a altas temperaturas

$$\left(\xi_{b,b'}\right)^{-1} \sim - \frac{\ln(b/b')}{(b-b')} + \ln\left(\frac{k_B T}{J}\right) - \left[\frac{q-2}{2} + 2\left(\frac{b-1}{b}\right)^2\right] \frac{J}{k_B T} + \dots \quad (4.4.7)$$

Este resultado, fornecido pelo GR, pode ser comparado unicamente com a resposta exata do comprimento de correlação de Ising (caso particular $q = 2$). Para temperaturas maiores que $T_c^{(20)}$ [ver eq.

(5.22) da ref. (38)]:

$$(\xi_x)^{-1} = \ln \coth \frac{J}{k_B T} - \frac{2J}{k_B T} \quad (4.4.8)$$

$$\sim \ln \left(\frac{k_B T}{J} \right) - \frac{2J}{k_B T} \quad \left(\frac{k_B T}{J} \rightarrow \infty \right) \quad (4.4.9)$$

Se tomarmos o limite $b \rightarrow \infty$ ($b' < b$) na eq. (4.4.7) e fizermos $q = 2$ obteremos

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \xi_{b,b'}^{-1}(q=2) \sim \ln \left(\frac{k_B T}{J} \right) - \frac{2J}{k_B T} \quad (4.4.10)$$

que é idêntico ao comportamento assintótico exato dado pela eq. (4.4.9). Esta concordância confirma uma vez mais a correção deste grupo para $b \rightarrow \infty$. Podemos assim propor como comportamento assintótico exato do comprimento de correlação na direção (1,0) do modelo de Potts a expressão

$$\lim_{b \rightarrow \infty} (\xi_{b,b'})^{-1} \sim \ln \left(\frac{k_B T}{J} \right) - \left[\frac{q+2}{2} \right] \frac{J}{k_B T} + \dots \quad (4.4.11)$$

que acreditamos seja correta para qualquer valor de q . A eq. (4.4.11) poderá ser verificada por futuros cálculos exatos de ξ para Potts, por séries de alta temperatura, etc. Não conhecemos, no momento, nenhum outro resultado além de $q=2$, dado pela eq. (4.4.8).

Para calcularmos o comportamento assintótico de $\xi(q)_{b,b'}$ a baixas temperaturas ($T \ll T_c$) utilizamos as eqs. (4.3.10) e (4.4.4) para obtermos uma relação entre T' e T

$$G(T'; b') \sim G(T; b) \quad (4.4.12)$$

onde

$$G(T;b) \sim \frac{k_B T/J}{b \left[1 - \frac{\ln b}{b} \frac{k_B T}{Jq} - 2 \left(\frac{b-1}{b} \right)^2 \frac{k_B T}{qJ} e^{-qJ/k_B T} \right]}, \quad (4.4.13)$$

que, juntamente com a eq. (4.4.2), nos permite obter (a menos de uma constante $C(q)$ que é provavelmente $C(q) = q$, porque $k_B T/qJ$ parece ser uma variável natural do problema)

$$(\xi_{b,b'})^{-1} \sim \frac{J}{k_B T} \left[1 - \frac{\ln(b/b')}{(b-b')} \frac{k_B T}{qJ} - 2 \left(\frac{b-1}{b} \right)^2 \frac{k_B T}{qJ} e^{-qJ/k_B T} - \dots \right] \quad (4.4.14)$$

cujo limite, quando $b \rightarrow \infty$ ($b' < b$), toma a forma

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} (\xi_{b,b'})^{-1} \sim \frac{J}{k_B T} \left[1 - \frac{2}{q} \frac{k_B T}{J} e^{-qJ/k_B T} - \dots \right] \quad \left(\frac{k_B T}{J} \rightarrow 0 \right) \quad (4.4.15)$$

A única comparação possível da expressão dada pela eq. (4.4.15) é com o caso particular $q = 2$ (Ising). Utilizando a relação entre o comprimento de correlação e a tensão superficial dada pela eq. (4.1.5) e a expressão para a tensão superficial exata dada pela eq. (2.5.35) do Capítulo II, obtemos para o comprimento de correlação exato (a menos do valor da tensão a temperatura nula, $\gamma(0) = 2$)

$$\xi^{-1} = \frac{1 - \frac{k_B T}{J} \ln \coth \left(\frac{J}{k_B T} \right)}{k_B T/J} \quad (4.4.16)$$

cujo comportamento assintótico, quando $k_B T/J \rightarrow 0$, é idêntico ao fornecido (tomando-se $q = 2$) pela expressão (4.4.15). Assim o GR obtém a resposta exata para o comportamento assintótico de ξ de Ising também para $k_B T/J \rightarrow 0$. Acreditamos, portanto, que a expressão dada pela eq. (4.4.15) seja válida para qualquer valor de q , o

que poderá ser confirmado por séries de baixas temperaturas, por exemplo.

Observamos outrossim que se invertermos a eq. (4.4.15) teremos

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \xi_{b,b'} \sim \frac{k_B T}{J} + \frac{2}{q} \left(\frac{k_B T}{J}\right)^2 e^{-qJ/k_B T} + \dots \quad (4.4.17)$$

indicando que o comprimento de correlação sai linearmente com a temperatura, resultado talvez um pouco inesperado para Ising ou Potts pois, devido a existir um "gap" entre o seu estado fundamental e o primeiro estado excitado, tende a ter comportamentos tipo Cauchy ($e^{-\text{const.}/T}$) nas suas funções termodinâmicas. Dissemos tende a ter, pois a tensão superficial diagonal de Ising também apresenta um comportamento linear para T próximo de zero. Na seção seguinte, em dimensões maiores, apresentaremos uma possível explicação para este comportamento.

Para obtermos as figuras vamos proceder da seguinte maneira (maneira alternativa a obter a fronteira através de fluxos): Escolhemos uma temperatura arbitrária T_0 maior que T_c e usamos a eq. (4.3.10) obtendo uma sequência de temperaturas crescentes T_1, T_2, \dots, T_n . Paramos a sequência arbitrariamente em uma temperatura $T_n \gg T_c$ ($t_{qn} \approx 0$). Utilizamos o comportamento assintótico de $\xi_n(T_n)$ para $T_n \gg T_c$, dado pela eq. (4.4.7), e "voltamos" através da relação

$$\xi_{i-1} = \left(\frac{b}{b'}\right) \xi_i \quad i = (n, n-1, \dots, 1) \quad (4.4.18)$$

obtendo a sequência de comprimento de correlação crescentes $\xi_{n-1}, \dots, \xi_1, \xi_0$. Os pares (T_i, ξ_i) são colocados no gráfico fornecendo -

-nos, numericamente, o comprimento de correlação para $T > T_c$. Para $T < T_c$ a temperatura arbitrária escolhida \bar{T}_0 deve ser menor que T_c e utilizando a eq. (4.3.10) obtemos uma sequência de temperaturas decrescentes $\bar{T}_1, \bar{T}_2, \dots, \bar{T}_n$. Usamos o comportamento assintótico de $\bar{\xi}_n(\bar{T}_n)$ dado pela eq. (4.4.14) e retornamos utilizando a eq. (4.4.18) para obtermos outra sequência (para $T < T_c$) $\bar{\xi}_{n-1}, \dots, \bar{\xi}_1, \bar{\xi}_0$. Os pares $(\bar{T}_i, \bar{\xi}_i)$ nos fornecerão ξ para $T < T_c$.

Na Figura 4.4.1 ($\xi \times T$) mostramos a variação de ξ , se fixamos uma temperatura, com o tamanho b da célula para $q = 2$ (Ising) e comparamos estes resultados com a resposta exata de Onsager. Observamos que os resultados do GR estão acima da solução exata e tendem para a mesma quando b aumenta.

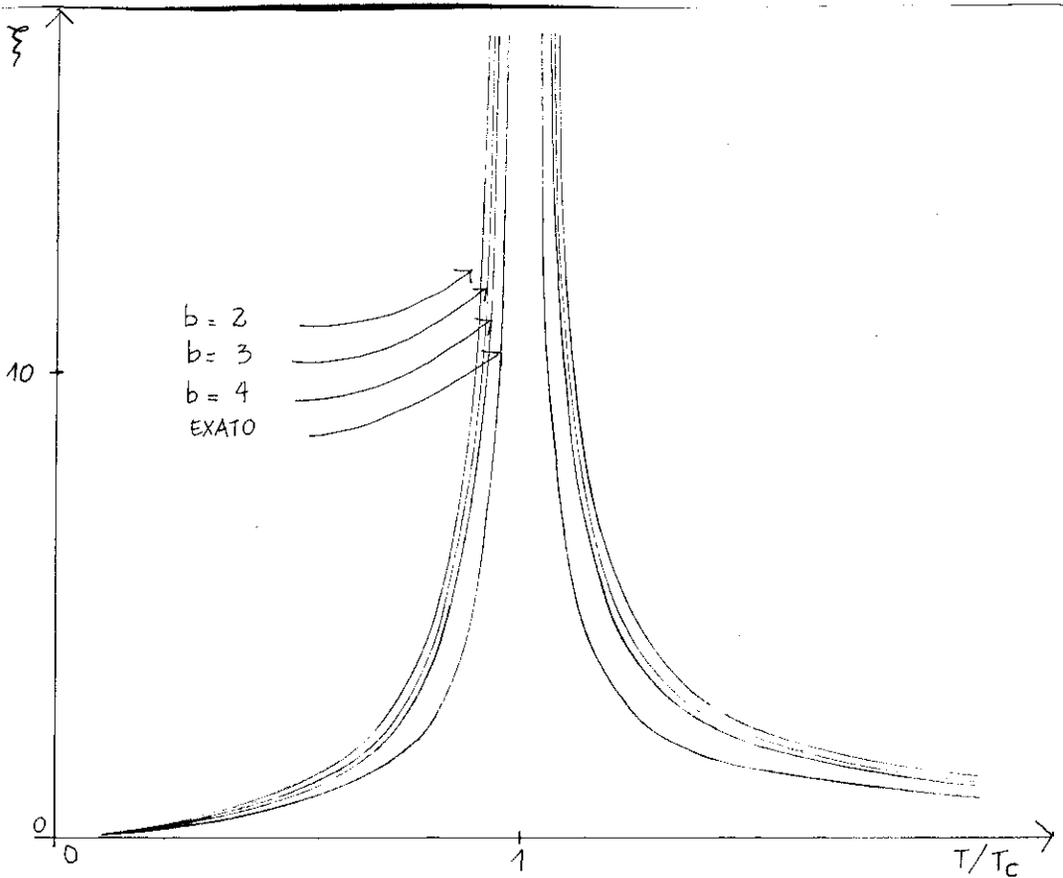


Figura 4.4.1 - Comparação entre os resultados do GR para o comprimento de correlação (linhas cheias, $b = 2, 3, 4$; $b' = 1$ do modelo de Ising na rede quadrada e a resposta exata $k_B T_c / J = 2.269185314$.

Na Figura 4.4.2 mostramos a evolução de $\xi \times \frac{T}{T_c(q)}$ para $q = 1.0$ (percolação), 2 (Ising) e 4 (sistemas adsorvidos) sendo $b = 4$ e $b' = 1$. Vemos que, para $\frac{T}{T_c(q)}$ fixo, à medida que q aumenta o comprimento de correlação diminui. Isto pode ser intuitivamente entendido como sendo devido a que, considerando a interação entre variáveis σ_i e σ_j localizadas em sítios primeiros vizinhos, quando q cresce, estas variáveis têm maiores possibilidades de se colocarem em estados diferentes, diminuindo a "chance" de atuarem cooperativamente e diminuindo conseqüentemente o comprimento de correlação.

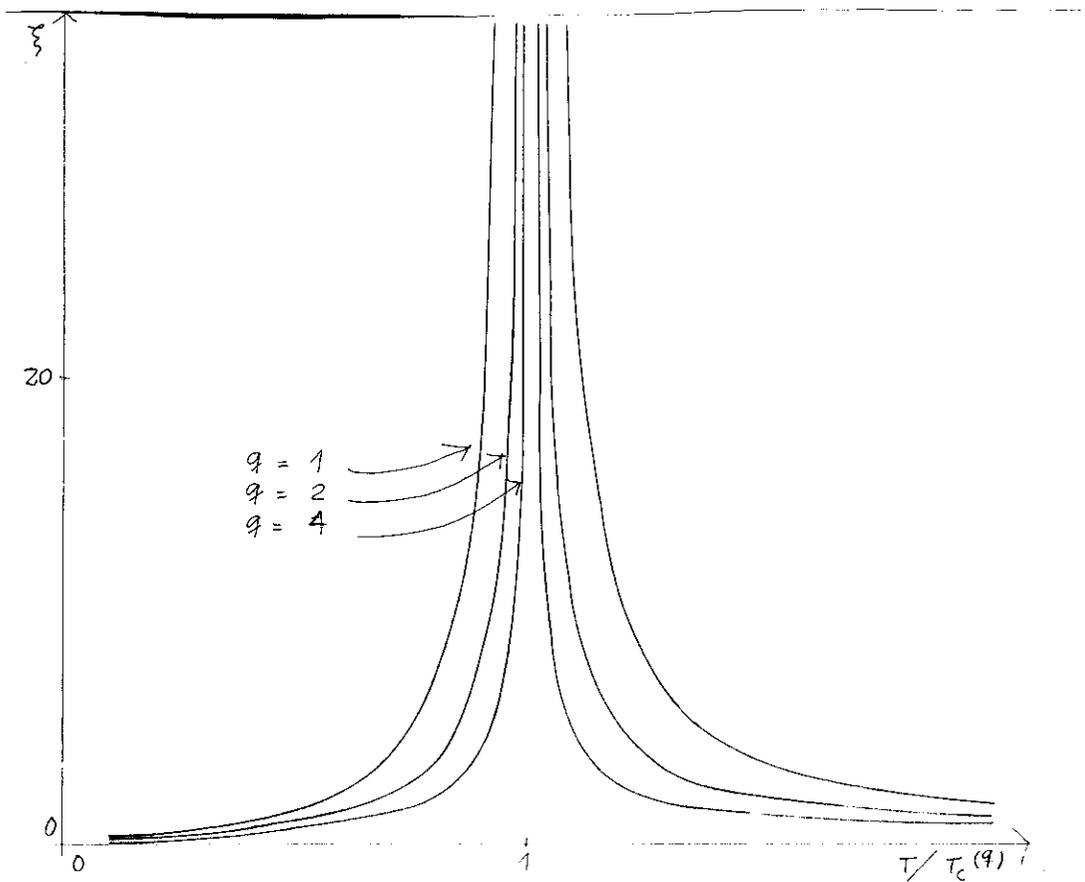


Figura 4.4.2 - Comprimento de correlação em função de $T/T_c(q)$ para $q=1.0$, 2.0 e 4.0. As curvas acima são para $b = 4$ e $b' = 1$.

Se consideramos que os resultados do GR para o comprimento de correlação apresentam, próximo de $T_c(q)$, o comportamento assintótico

$$\xi_{b,b'}(t_q; q) \sim A_{b,b'}(q) \left| \frac{T - T_c(q)}{T_c(q)} \right|^{-\nu_{b,b'}} \quad , \quad (4.4.19)$$

podemos obter as amplitudes $A_{b,b'}^{(q)}$ para diversos tamanhos de célula e diversos valores de q . A Tabela 4.4.1 mostra as amplitudes $A_{b,b'}^{(q)}$ para $b = 2, 3, 4$; $b' = 1$ e q variando de 0.1 até 4.0. No caso $q=2$ verifica-se que as amplitudes $A_{2,1}^{(2)}$, $A_{3,1}^{(2)}$ e $A_{4,1}^{(2)}$ tendem suavemente para o valor exato. Fazemos a extrapolação linear $\xi \times b^{-1}$ para q fixo. O pior resultado do coeficiente de correlação linear (CCL) foi para $q = 4.0$ onde o CCL = 0.9995. O erro entre o resultado extrapolado para $q = 2$ e o exato é de 10%. Os resultados das amplitudes $A_{b,b'}^{(q)}$ acima e abaixo de T_c são os mesmos. Na verdade [ver comentário logo acima da equação (4.4.14)] os coeficientes $A_{b,b'}^{(q)}$ para $T < T_c$ dependerão da constante $C(q)$ (que provavelmente é igual a q para $T < T_c(q)$). As amplitudes abaixo e acima de T_c serão iguais entre si se tomarmos $C(q) = 1 \forall q$.

4.5 - COMPORTAMENTOS ASSINTÓTICOS DE $\xi_{b,b'}$ DE ISING EM TRÊS DIMENSÕES

Vamos estudar em uma rede cúbica somente o caso $q = 2$ (Ising) do modelo de Potts. Para esta dimensão escolhemos como nossa família de células a mostrada na Fig. 3.2.1 do Capítulo III. Como estamos interessados somente nos comportamentos assintóti -

Tabela 4.4.1 - Amplitude $A_{b,b}^{(q)}$, para diversos valores de b e q. A amplitude exata é para $T > T_c$.

b \ q	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
2	8.130	3.761	2.609	2.076	1.765	1.560	1.413	1.302	1.214	1.144	0.924	0.805	0.729	0.675	0.634	0.602
3	6.998	3.318	2.330	1.867	1.596	1.416	1.287	1.187	1.111	1.049	0.852	0.746	0.677	0.629	0.592	0.563
4								1.13	1.06	1.00	0.816	0.715	0.650	0.604	0.569	0.541
EXTRAP. LINEAR	4.734	2.432	1.772	1.449	1.258	1.128	1.035	0.957	0.906	0.857	0.708	0.626	0.571	0.534	0.505	0.481
EXATO	$\frac{1}{2\ell n(1+\sqrt{2})}$ ≈ 0.5673															

cos de ξ horizontal [direção (1,0,0)], interessa-nos conhecer os comportamentos assintóticos das funções $R_b^d(t)$ ($d = 3$), os quais resultam após se fazer o traço parcial sobre os sítios "internos" daquelas células. Estes comportamentos podem ser calculados pelo método de "corte-colapso" e resultam

$$R_b^3(t) \sim \left\{ \begin{array}{l} b^2 t^b + 4b(b-1)^2 t^{b+1} + \dots \quad (t \rightarrow 0) \quad (4.5.1) \\ \\ 1 - 2b \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2} - 2b^3 \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2+1} - [b^3(b^2+1) + 32(b-1)] \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2+2} - \\ - \left[\frac{1}{3}b^3(b^2+1)(b^2+2) + 32b^2(b-1) + 64(b-1)(b-2) + \right. \\ \left. + 128(b-1)\right] \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2+3} - \left[\frac{1}{12}b^3(b^2+1)(b^2+2)(b^2+3) + \right. \\ \left. + 16b^2(b^2+1)(b-1) + 64b^2(b-1)(b-2) + 160b^2(b-1) - \right. \\ \left. - 128(b-1)(b-2) + 720(b-1) + 256(b-1)^2\right] \left(\frac{1-t}{2}\right)^{b^2+4} - \dots \\ \quad (t \rightarrow 1) \quad (4.5.2) \end{array} \right.$$

Estas expressões e as equações

$$R_{b'}^3(t') = R_b^3(t) \quad , \quad (4.5.3)$$

$$\xi_{b,b'}(T) = \frac{\xi_{b,b'}(T)}{(b/b')} \quad , \quad (4.5.4)$$

nos permitem obter, de forma exatamente análoga à seção anterior, os comportamentos assintóticos do comprimento de correlação horizontal do modelo de Ising tridimensional (que não é auto-dual) a altas e baixas temperaturas (a menos de constante):

$$(\xi_{b,b'})^{-1} \sim -2 \frac{\ln b}{b-1} + \ln \frac{k_B T}{J} - 4 \left(\frac{b-1}{b}\right)^2 \frac{J}{k_B T} + \dots \quad (4.5.5)$$

($k_B T/J \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} \xi_{b,b'} \sim & \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{1/2} + \sum_{j=1}^{\infty} \left[\frac{\ln(b/b')}{4(b^2 - b'^2)} \right]^j \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{j+\frac{1}{2}} + \\ & + 4 \frac{(b-1)}{b^3} \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{3/2} e^{-4J/k_B T} + 8 \left[\frac{(b-1)(b-2)}{b^3} + \right. \\ & + \left. \frac{(b-1)}{b^3} \right] \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{3/2} e^{-6J/k_B T} + \left[4 \left(\frac{b-1}{b}\right) - 40 \frac{(b-1)(b-2)}{b^3} + \right. \\ & + \left. 54 \frac{b-1}{b^3} - 32 \frac{(b-1)^2}{b^4} + 32 \frac{(b-1)^2}{b^3} \right] \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{3/2} e^{-8J/k_B T} + \\ & + \dots \quad \left(\frac{k_B T}{J} \rightarrow 0 \right) \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

A eq. (4.5.5) ($k_B T/J \rightarrow \infty$) pode ser comparada com os resultados obtidos por Fisher e Burford⁽³⁸⁾, que utilizaram séries de altas temperaturas para calcular o comportamento assintótico do decaimento exponencial da função de correlação entre dois sítios

$$\omega_x \equiv \exp(-\xi_x^{-1}) \quad (4.5.7)$$

O resultado por eles obtido é, até a segunda ordem,

$$\omega_x \sim t + 4t^2 + \dots \quad (4.5.8)$$

Se multiplicamos a eq. (4.5.5) por -1 e tomamos a exponencial obtemos:

$$\omega_{b,b'} \equiv \exp(-\xi_{b,b'}^{-1}) \sim \frac{J}{k_B T} \exp \left\{ \frac{\ln(b/b')^2}{b-b'} + 4 \left(\frac{b-1}{b}\right)^2 \frac{J}{k_B T} + \dots \right\} \quad (4.5.9)$$

Expandindo a exponencial da eq. (4.5.9) obtemos

$$\xi_{b,b'} \sim \frac{J}{k_B T} \left\{ 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \left[\frac{\ell n(b/b')^2}{b-b'} \right]^i + 4 \left(\frac{b-1}{b} \right)^2 \frac{J}{k_B T} \left[1 + 2 \frac{\ell n(b/b')}{b-b'} \right] + O\left(\frac{1}{T^2}\right) \right\} \quad (4.5.10)$$

Tomando-se o limite $b \rightarrow \infty$ a expressão (4.5.10) se torna

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \omega_{b,b'} \sim \frac{J}{k_B T} \left[1 + 4 \frac{J}{k_B T} + \dots \right] \left(\frac{k_B T}{J} \right) \rightarrow \infty \quad (4.5.11)$$

Mas, como

$$t = \tanh \frac{J}{k_B T} \quad (4.5.12)$$

temos

$$\frac{k_B T}{J} = \frac{2}{\ell n \left(\frac{1+t}{1-t} \right)} \quad (4.5.13)$$

Substituindo-se a eq. (4.5.13) na eq. (4.5.11) e expandindo a expressão resultante para $t \rightarrow 0$ ($k_B T/J \rightarrow \infty$) obtemos

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \omega_{b,b'} \sim t + 4t^2 + \dots \quad (4.5.14)$$

que é idêntica à eq. (4.5.8) obtida por Fisher e Burford⁽³⁸⁾ através de séries de altas temperaturas. Desta maneira, o nosso GR confirma, em três dimensões onde o modelo de Ising não é auto-dual, a performance obtida em duas dimensões. Assim, os comportamentos assintóticos que encontramos para ξ na direção (1,0,0) serão os fornecidos pelas eqs. (4.5.5) e (4.5.6) fazendo-se $b \rightarrow \infty$. Portanto,

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \xi_{b,b'} \sim \frac{1}{k_B T \ln(\frac{k_B T}{J})} [1 + 4 \frac{J}{k_B T} + O(\frac{1}{T^2})] \quad (k_B T/J \rightarrow \infty) \quad (4.5.15)$$

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \xi_{b,b'} \sim (\frac{k_B T}{J})^{1/2} + 4 (\frac{k_B T}{J})^{3/2} e^{-8J/k_B T} + O(T^{5/2} e^{-10J/k_B T}) \quad (\frac{k_B T}{J} \rightarrow 0) \quad (4.5.16)$$

O resultado mostrado na eq. (4.5.15) foi confirmado pela comparação com séries de altas temperaturas [ver eqs. (4.5.7 - 14)], mas tal comparação não é possível (ao menos em nosso conhecimento) para o comportamento de ξ , eq. (4.5.16), em $T \ll T_c$. Este resultado poderá ser confirmado por séries de baixas temperaturas mas estamos convencidos (devido às várias concordâncias apresentadas entre o GR e os resultados exatos em $d=2$ e $d=3$) de sua exatidão.

É interessante se notar que o comportamento de ξ , na eq. (4.5.16), sai como a raiz quadrada da temperatura enquanto em duas dimensões ele era linear.

Este primeiro termo assintótico pode ser generalizado para Potts (q estados) e dimensão d qualquer estudando-se o primeiro termo do comportamento assintótico de $R_b^d(t_q; q)$ para $t_q \rightarrow 1$ ($k_B T/J \rightarrow 0$). Temos que

$$R_b^d(t_q; q) \sim 1 - qb \left(\frac{1-t_q}{q}\right)^{b^{d-1}} - O\left(\frac{1-t_q}{q}\right)^{b^{d-1}+1} \quad (4.5.17)$$

que, juntamente com a equação

$$R_{b'}^d(t_q'; q) = R_b^d(t_q; q) \quad (4.5.18)$$

e a eq. (4.5.4) nos fornece, a menos de uma constante $C^d(q)$ (que não depende de T mas pode depender de q e da dimensão d),

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} \xi_{b,b'}^{(q)} \sim C^d(q) \left(\frac{k_B T}{J}\right)^{1/d-1} + \dots \left(\frac{k_B T}{J}\right) \rightarrow 0 \quad \forall d \quad (4.5.19)$$

Se colocarmos $d=2$ ($d=3$) e $q=2$ na eq. (4.5.19) reobteremos o primeiro termo assintótico da eq. (4.4.17) [eq. (4.5.16)]. Não conhecemos na literatura nenhuma observação sobre este tipo de comportamento. A eq. (4.5.19) nos indica também que, para uma dada temperatura $T \ll T_c$ o comprimento de correlação é tanto maior quanto maior for a dimensão (em particular para $d=\infty$, ξ apresentaria um comportamento, próximo da temperatura nula, do tipo $\ln \left(\frac{k_B T}{J} \right)$). Acreditamos, especulativamente, que isto se deva a que, em dimensões maiores, existem mais possibilidades ("caminhos") de comportamento cooperativo entre os graus de liberdade (spins, por exemplo) do sistema. Isto poderá permitir que à uma pequena excitação térmica ($T \ll T_c$), o alcance máximo entre os graus de liberdade (ξ) seja maior à medida que a dimensão do sistema aumenta pois sempre haverá "uma dimensão a mais" através da qual dois graus de liberdade poderão estar correlacionados.

4.6 - CONCLUSÃO

Utilizamos a técnica do GR no espaço real para calcularmos o comprimento de correlação na direção de um eixo de uma rede hipercúbica [direção (1,0) na rede quadrada; direção (1,0,0) na rede cúbica, etc.] do modelo de Potts isotrópico, homogêneo, ferromagnético, com q estados e interações entre primeiros vizinhos. Como o modelo de Potts é auto-dual na rede quadrada escolhemos, para esta dimensão e este modelo, uma família de células auto-duais. Isto nos permitirá obter a temperatura crítica exata do modelo de Potts qualquer que seja o tamanho da célula auto-

-dual escolhida. Para a rede cúbica o modelo de Potts não é auto-dual, e portanto o GR não conseguirá obter a temperatura crítica correta para qualquer célula tridimensional que se tome. Isto só será conseguido no limite do tamanho da célula tender para infinito. Verificamos, numericamente, que, para um mesmo valor de $\left| \frac{T_c(q) - T}{T_c(q)} \right|$, o comprimento de correlação é tanto maior quanto menor for q , (Fig. 4.4.2). Para $q = 2$ (Ising na rede quadrada a resposta exata é conhecida e os nossos resultados numéricos do GR se aproximam desta medida que o tamanho (b) da célula do GR que adotamos aumenta.

Estudando o comportamento assintótico das células do GR em duas dimensões ($d=2$) quando a temperatura tende a zero ou a infinito para um tamanho b qualquer, conseguimos calcular, analiticamente, os comportamentos assintóticos de ξ a baixas e altas temperaturas. Estes, tomados no limite $b \rightarrow \infty$ (reproduzindo a rede quadrada), podem ser comparados com os comportamentos assintóticos exatos de ξ de Ising ($q=2$) para $T \ll T_c$ e $T \gg T_c$. A comparação mostra que o GR reproduz o resultado exato de Ising. Certamente os comportamentos assintóticos de ξ do GR para outros valores de q também estão corretos, o que poderá ser verificado futuramente através de séries de baixas e altas temperaturas. Calculamos também o comportamento assintótico de ξ na direção $(1,0,0)$ de uma rede cúbica somente para o caso $q=2$ (Ising). O resultado do GR a altas temperaturas pôde ser comparado com resultados existentes obtidos através de séries de altas temperaturas que o confirmam mostrando que o GR em três dimensões também fornece, no limite adequado, a resposta exata. O resultado do GR para $T \ll T_c$ em $d=3$ (Ising) fica, na falta de resultados que possam ser comparados, como uma proposta, que acreditamos correta, do

comportamento de ξ em baixas temperaturas. Podemos também considerar que o GR, adequadamente usado, pode servir como um método alternativo a séries (pelo menos para o modelo de Potts) para se obter resultados exatos, como bem o demonstra este trabalho.

CAPÍTULO V

SUPERFÍCIE CRÍTICA APROXIMADA DO MODELO DE ISING COM LIGAÇÕES MISTAS NA REDE QUADRADA

5.1 - INTRODUÇÃO

Os sistemas magnéticos desordenados (e que portanto não possuem invariância translacional cristalina) têm sido recentemente objeto de intensa atenção devido aos problemas teóricos e experimentais que ele sugere. Podemos, em geral, separá-los em duas categorias: aquelas onde não há transporte eletrônico (isolantes) e aquelas onde existe este transporte (condutores). Neste trabalho sãõ consideraremos sistemas magnéticos desordenados isolantes. Experimentalmente podemos obtê-los em compostos do tipo $Mn_xZn_{1-x}F_2$ ⁽⁴⁷⁾, $Fe_xMg_{1-x}Cl_2$ ⁽⁴⁹⁾, $Co(S_xSe_{1-x})_2$ ⁽⁵⁴⁾, $K_2Mn_xFe_{1-x}F_4$ ⁽¹⁴⁸⁾, $x \in [0,1]$, etc, onde variamos a concentração dos íons magnéticos (Fe, Mn, Co, etc). Estes compostos podem ser preparados basicamente de duas maneiras: (a) recozido ("annealed"), isto é, após a preparação da amostra à alta temperatura o sistema é esfriado lentamente, o que permite aos íons do composto se colocarem na configuração de menor energia do sistema, e (b) temperado ("quenched"), ou seja, após a sua preparação é colocado em alta temperatura e esfriado bruscamente, ficando o sistema "congelado" naquela configuração particular que se encontrava quando sofreu o esfriamento (geralmente um estado metastável). O tratamento teórico de ambos sistemas tem que levar em considera-

ção a incerteza introduzida pelo desconhecimento da localização exata dos íons magnéticos que têm agora uma concentração menor que a unidade.

Analisando os modelos típicos de sistemas magnéticos isolantes puros, Ising ou Heisenberg, por exemplo, cujos Hamiltonianos são dados por

$$H_{\text{ISING}} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z \quad (5.1.1)$$

$$H_{\text{HEIS.}} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (5.1.2)$$

onde $\langle ij \rangle$ significa pares de sítios primeiros vizinhos e J_{ij} é a constante de interação entre os spins localizados nos sítios i (\vec{S}_i) ou j (\vec{S}_j), vemos que a incerteza quanto à posição dos íons magnéticos pode ser representada por duas situações diferentes: podemos ter esta incerteza sobre $\{J_{ij}\}$ (representada teoricamente por uma distribuição de probabilidade sobre os mesmos) ou sobre os spins $\{\vec{S}_i\}$ (representada teoricamente por variáveis locais aleatórias). Estas duas situações se manifestam na realidade. Um exemplo da primeira seria o composto do tipo $\text{Co}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_2$ ⁽⁵⁴⁾ onde os átomos de Co interagem entre si basicamente via supertroca ("superexchange") através dos átomos de S ou de Se (que simulam duas constantes de interação J_1 e J_2 por exemplo); da segunda situação, mais fácil de ser realizada experimentalmente, temos muitos sistemas: $\text{Rb}_2\text{Mn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ ⁽¹⁴⁹⁾, $\text{Mn}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ ⁽⁴⁷⁾, $\text{Rb}_2\text{Co}_x\text{Mg}_{1-x}\text{F}_4$ ⁽¹⁵⁰⁾, $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ ⁽⁴⁹⁾, etc. O estudo teórico destes modelos (Heisenberg e Ising por exemplo) com ligações (sítios) diluídos ou então com ligações mistas (J_1 e J_2 por exemplo, como no $\text{Co}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_2$) é um cam

po atual de intensa atividade ⁽¹⁵¹⁻¹⁵⁵⁾. Uma dificuldade adicional que se tem nestes problemas é a necessidade de se fazer uma outra média, além da média térmica, pois agora ou os J's ou as localizações dos spins nos sítios são variáveis aleatórias. A média sobre os J's ou as posições dos spins chama-se média configuracional e deve ser feita após a média térmica. Neste estágio podemos explicitar a diferença teórica entre os dois tratamentos experimentais que a amostra pode sofrer, o recozido e o temperado. Teoricamente, a energia livre (F_{rec}) do sistema recozido é obtida fazendo-se a média configuracional sobre a função de partição e então se toma o logaritmo

$$F_{rec} = - k_B T \ln \langle Z \rangle_{\text{configuracional}} \quad (5.1.3)$$

onde

$$Z = \text{Tr} e^{-H/k_B T} \quad (5.1.4)$$

sendo que H é a Hamiltoniana do sistema, T é a temperatura absoluta e k_B é a constante de Boltzmann. A energia livre do sistema temperado (F_{temp}) é obtida fazendo-se a média configuracional sobre o logaritmo da função de partição

$$F_{temp} = - k_B T \langle \ln Z \rangle_{\text{configuracional}} \quad (5.1.5)$$

onde Z é dado pela eq. (5.1.4).

O problema temperado é teoricamente mais simples pois as ligações (sítios) são consideradas como sendo independentes. Devido à sua simplicidade e à riqueza de seus diagramas de fase, o modelo de Ising com ligações desordenadas tem recebido atenção especial. Desta maneira uma grande quantidade de resultados exatos ^(124,156-161) são agora conhecidos assim como vários tratamentos aproximados ^(55,161-163). Nosso objetivo será calcular aproxima

madamente a superfície crítica do modelo de Ising, spin 1/2, com ligações mistas ferromagnéticas entre primeiros vizinhos, homogêneo, isotrópico, temperado, na rede quadrada. Não existe cálculo exato desta superfície, da qual só são conhecidos exatamente alguns de seus pontos e algumas derivadas. Na Seção 2 apresentamos o modelo; na Seção 3 introduzimos o grupo de renormalização -t (GR-t) no espaço real que nos permitirá calcular aquela superfície; na Seção 4 apresentamos uma proposta heurística para esta superfície crítica; na Seção 5 introduzimos outro grupo de renormalização (GR-s) para a superfície e a Seção 6 é a Conclusão.

5.2 - MODELO

Seja o Hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma_i, \sigma_j = \pm 1) \quad (5.2.1)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representa os pares de sítios primeiros vizinhos de uma rede quadrada cíclica e J_{ij} é uma variável aleatória que assume o valor J_1 com probabilidade $1-p$ e o valor J_2 com probabilidade p , a distribuição sendo independente para cada ligação (temperado). Por ser uma variável mais apropriada que J_{ij} , utilizaremos a chamada "transmissividade térmica" ⁽¹¹⁴⁾

$$t_i = \tanh \left(\frac{J_i}{k_B T} \right) \quad i = 1, 2 \quad (5.2.2)$$

Desta maneira a distribuição de probabilidade sobre J_{ij} pode ser escrita como

$$P(t_{ij}) = (1-p)\delta(t_{ij}-t_1) + p\delta(t_{ij}-t_2) \quad (5.2.3)$$

onde, por hipótese, fazemos $t_i \geq 0$ ($J_i \geq 0$) $i = 1, 2$ (caso ferromagnético) e $\delta(t_{ij})$ é a delta de Dirac. As eqs. (5.2.1) e (5.2.3) definem completamente o modelo de Ising homogêneo, isotrópico, com ligações mistas e temperado ("quenched") que desejamos estudar. Observamos que o sistema é invariante com relação à transformação $(1-p, t_1, t_2) \leftrightarrow (p, t_2, t_1)$. Ele contém também alguns casos particulares interessantes, a saber: (a) O modelo de Ising puro corresponde a $p = 1$ ($\forall t_1$), ou $p = 0$ ($\forall t_2$), ou $t_1 = t_2$ ($\forall p$); (b) O limite de percolação de ligações corresponde^(45, 128, 151) a $t_1 = 0$ e $t_2 = 1$, ou $t_1 = 1$ e $t_2 = 0$; (c) O modelo de Ising com ligações diluídas corresponde a $t_1 = 0$ ou $t_2 = 0$; (d) O modelo de Ising com ligações mistas em concentração igual corresponde a $p = 1/2$.

O modelo apresentado acima deve ter (embora não haja nenhuma prova rigorosa), no espaço (p, t_1, t_2) [ou equivalentemente no espaço (p, T, α) , onde $\alpha \equiv J_1/J_2$], uma superfície crítica que separa as regiões (entre as quais existe transição de segunda ordem) paramagnética e ferromagnética. A determinação quantitativa (com pequeno erro) desta superfície é o objetivo central deste trabalho. Alguns valores exatos desta superfície são conhecidos^(124, 156-161), tais como

$$t_c \equiv t_2(p=1) = \sqrt{2} - 1, \quad (5.2.4)$$

$$p_c \equiv p(t_1=0, t_2=1) = \frac{1}{2}, \quad (5.2.5)$$

$$\left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{\substack{t_1=0 \\ t_2=t_c \\ p=1}} = -(6\sqrt{2} - 8) \cong -0.485 \quad , \quad (5.2.6)$$

$$\left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{\substack{t_1=0 \\ t_2=t_c \\ p=1}} = -4 \ln 2 \cong -2.773 \quad , \quad (5.2.7)$$

$$t_2(p=1/2) = \frac{1-t_1}{1+t_1} \quad , \quad \forall t_1 \in [0,1] \quad . \quad (5.2.8)$$

Ao nosso conhecimento não existem outros resultados exatos independentes dessa superfície crítica.

5.3 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO -t (GR-t)

Este GR é uma generalização natural do chamado RG2 da referência (64). Ele é também parecido ao desenvolvido na ref. (163). Porém ele aperfeiçoa os dois, como veremos a seguir. Ele consiste em renormalizar a distribuição de probabilidade dada pela eq. (5.2.3) em

$$P'(t_{ij}) = (1-p')\delta(t-t'_1) + p'\delta(t-t'_2) \quad (5.3.1)$$

através do uso da célula (grafo) auto-dual^(45,163) mostrada na Fig. 5.3.1. A razão de escolhermos uma célula auto-dual se deve a que o modelo de Ising na rede quadrada é auto-dual^(121; 124) e esta propriedade, no que concerne aos fenôme-

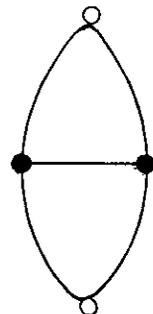


Figura 5.3.1 - Célula auto-dual para o modelo de Ising. Os círculos vazios são os sítios externos e os cheios são os internos.

menos críticos (superfícies críticas, ponto crítico, etc), tem se revelado mais importante que qualquer outra simetria que a rede quadrada possa ter. Portanto, ao escolhermos uma célula finita para representar a rede quadrada, a dualidade deve ser a simetria prioritária desta célula. Se além desta puder conter outras simetrias da rede quadrada tanto melhor. Mas necessariamente uma célula finita só poderá conter um subconjunto de todas as simetrias do modelo de Ising na rede quadrada.

Portanto, se cada ligação da célula mostrada na Fig. 5.3.1 porta uma distribuição de probabilidade dada pela equação (5.3.2), a distribuição de probabilidade de toda a célula será:

$$\begin{aligned}
 P_H(t_{ij}) = & (1-p)^5 \delta\left(t_{ij} - \frac{2t_1^2 + 2t_1^3}{1 + 2t_1^3 + t_1^4}\right) + p(1-p)^4 \delta\left(t_{ij} - \frac{2t_1^2 + 2t_1^2 t_2}{1 + 2t_1^2 t_2 + t_1^4}\right) + \\
 & + 4p(1-p)^4 \delta\left(t_{ij} - \frac{t_1 t_2 + t_1^2 + t_1^2 t_2^3}{1 + t_1^2 t_2 + t_1^3 + t_1^3 t_2}\right) + 2p^2(1-p)^3 \delta\left(t_{ij} - \frac{2t_1 t_2 + 2t_1^2 t_2^3}{1 + t_1 t_2 + t_1^2 t_2 + t_1^3}\right) + \\
 & + 4p^2(1-p)^3 \delta\left(t_{ij} - \frac{t_1^2 + t_1 t_2 + t_1^2 t_2 + t_1^2 t_2^2}{1 + t_1 t_2 + t_1^2 t_2 + t_1^3 t_2}\right) + 2p^2(1-p)^3 \delta\left(t_{ij} - \frac{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1^2 t_2}{1 + 2t_1^2 t_2 + t_1^2 t_2^2}\right) + \\
 & + 2p^2(1-p)^3 \delta\left(t_{ij} - \frac{2t_1 t_2 + t_1 t_2^2 - t_1^3}{1 + 2t_1 t_2 + t_1^2 t_2^2}\right) + 2p^3(1-p)^2 \delta\left(t_{ij} - \frac{t_2^3 + 2t_1 t_2 + t_1^2 t_2}{1 + 2t_1 t_2 + t_1^2 t_2^2}\right) + \\
 & + 2p^3(1-p)^2 \delta\left(t_{ij} - \frac{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2^2}{1 + 2t_1 t_2^2 + t_1^2 t_2^2}\right) + 4p^3(1-p)^2 \delta\left(t_{ij} - \frac{t_2^2 + t_1 t_2 + t_1 t_2^2 + t_1^2 t_2}{1 + t_1 t_2^2 + t_1^3 t_2 + t_1^2 t_2^2}\right) + \\
 & + 2p^3(1-p)^2 \delta\left(t_{ij} - \frac{2t_1 t_2 + 2t_1 t_2^2}{1 + t_2^3 + t_1 t_2^2 + t_1^2 t_2^2}\right) + 4p^4(1-p) \delta\left(t_{ij} - \frac{t_2^2 + t_2^3 + t_1 t_2 + t_1 t_2^2}{1 + t_2^3 + t_1 t_2^2 + t_1^3 t_2^2}\right) + \\
 & + p^4(1-p) \delta\left(t_{ij} - \frac{2t_2^2 + 2t_1 t_2^2}{1 + t_2^4 + 2t_1 t_2^2}\right) + p^5 \delta\left(t_{ij} - \frac{2t_2^2 + 2t_2^3}{1 + 2t_2^3 + t_2^4}\right) . \quad (5.3.2)
 \end{aligned}$$

Impomos agora que as equações

$$\langle t \rangle_{P'} = \langle t \rangle_{P_H} \quad (5.3.3)$$

$$\langle t^2 \rangle_{P'} = \langle t^2 \rangle_{P_H} \quad (5.3.4)$$

$$\langle t^3 \rangle_{P'} = \langle t^3 \rangle_{P_H} \quad (5.3.5)$$

sejam satisfeitas onde P' é a distribuição dada pela eq. (5.3.1) [$\langle \dots \rangle$ representa o valor médio; por exemplo, $\langle t^n \rangle_{P'} = (1-p')(t'_1)^n + p'(t'_2)^n$]. Ao fazer isto impomos que os três primeiros momentos das distribuições $P'(t_{ij})$ e $P_H(t_{ij})$ sejam iguais. Esta imposição introduzirá defeitos neste grupo com relação ao terceiro momento central, que para $p' = p = 1/2$ vale zero para a distribuição $P'(t_{ij})$ mas é diferente de zero para a distribuição $P_H(t_{ij})$. Este defeito será corrigido com outro GR posteriormente.

Desta maneira obtemos p' , t'_1 e t'_2 como funções de p , t_1 e t_2 , isto é, $(p, t_1, t_2) \rightarrow (p', t'_1, t'_2)$. Isto nos fornece um mapeamento do espaço p, t_1, t_2 nele mesmo, "fechando" o problema. Podemos escrever como

$$(p', t'_1, t'_2) = \vec{R}(p, t_1, t_2) \quad (5.3.6)$$

onde $\vec{R}(p, t_1, t_2)$ é um vetor de três componentes, sendo que cada uma de suas componentes é função de p, t_1 e t_2 .

As soluções da equação $(p, t_1, t_2) = \vec{R}(p, t_1, t_2)$ nos fornecerá os pontos fixos. Através de aplicações continuadas da eq. (5.3.6), obteremos linhas de fluxo no espaço (p, t_1, t_2) . Elas serão análogas às mostradas na Fig. 5.3.2, com uma pequena diferença de fluxo na linha auto-dual $(t_2 = \frac{1-t_1}{1+t_1}, p=0.5 \forall t_1 \in [0,1])$. O

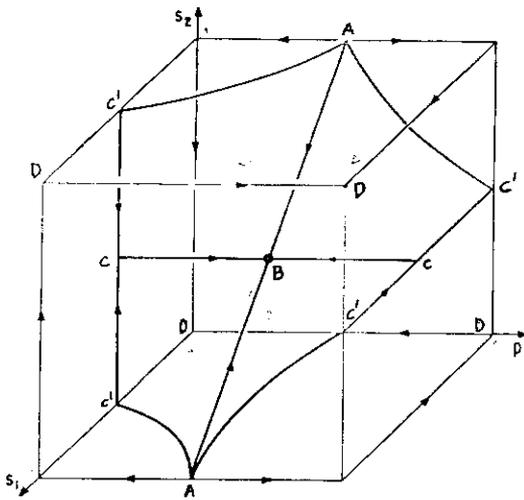


Figura 5.3.2 - GR-S e superfície crítica heurística (indistinguíveis nesta escala); as linhas de fluxo correspondem ao GR-S; a linha ABA está no plano $p = 1/2$; a linha CBC corresponde a $t_1 = t_2 = \sqrt{2} - 1$; a superfície é invariante sobre a transformação $(p, t_1, t_2) \leftrightarrow (1-p, t_2, t_1)$.

fluxo do GR-t não se mantém sobre esta linha. A estrutura destas linhas

de fluxo nos permite estabelecer numericamente a superfície crítica desejada. A linearização da eq. (5.3.6) na vizinhança dos pontos fixos interessantes normalmente leva a uma matriz jacobiana não nula cujo maior autovalor permite-nos calcular o expoente crítico ν (associado ao comprimento de correlação ξ), e cujos autovetores nos fornecem as derivadas, naquele ponto, da superfície crítica.

Este GR-t tem dois pontos fixos distintos, fisicamente interessantes (além dos triviais $p = t_1 = t_2 = 0$ e $p = t_1 = t_2 = 1$, marcados pela letra D na Fig. 5.3.2). O primeiro é o ponto fixo de percolação ($p = 1/2, t_1 = 0, t_2 = 1$), ou equivalentemente ($p = 1/2, t_1 = 1, t_2 = 0$), que é instável em todas as direções (os valores próprios de seu jacobiano são todos maiores que 1), assinalado pela letra A. O outro é o ponto fixo de Ising ($p = 1/2, t_1 = t_2 = \sqrt{2} - 1$), assinalado pela letra B na Fig. 5.3.2 e é o mesmo, fisicamente, que os pontos fixos marcados pe

la letra C na Fig. 5.3.2. O ponto fixo B é estável sobre a superfície crítica e os pontos fixos indicados por C são instáveis ao longo da linha CBC mas estáveis ao longo da linha C'CC'. Logicamente todos estes pontos são instáveis fora da superfície crítica. Assim a superfície crítica é constituída por todos os pontos do espaço (p, t_1, t_2) que fluem para o ponto fixo B sob as transformações do GR. Este tipo de fluxo sugere que os expoentes críticos do modelo de Ising bidimensional misto são os mesmos (isto é, pertencem à mesma classe de universalidade) que os expoentes do modelo de Ising puro, com exceção dos pontos fixos de percolação. Esta é, porém, uma questão controversa porque o modelo de Ising bidimensional puro é marginal no que concerne ao critério de Harris ⁽¹⁶⁰⁾, visto que o seu expoente crítico do calor específico α é nulo.

Alguns resultados da superfície crítica do GR-t estão mostrados na Tabela 5.3.1 e sua concordância com os valores exatos conhecidos é bastante boa.

Tabela 5.3.1 - Resultados associados com as três aproximações apresentadas assim como os resultados exatos conhecidos para a superfície crítica (as superfícies heurística e GR-S preservam a relação exata $t_2 = (1-t_1)/(1+t_1)$ para $p = 1/2$).

	t_c	$-\frac{\partial t_2}{\partial p} \Big _{\substack{p=1 \\ t_1=0}}$	p_c	$-\frac{\partial t_2}{\partial p} \Big _{\substack{p=1/2 \\ t_1=0}}$	$-\frac{\partial t_2}{\partial t_1} \Big _{\substack{p=1/2 \\ t_1=0}}$
GR-t	$\sqrt{2} - 1$	0.48528	1/2	2.811	2.020
Heurístico	$\sqrt{2} - 1$	$\frac{\ln 2}{\sqrt{2}} \cong 0.490$	1/2	$4 \ln 2$	2
GR-S	$\sqrt{2} - 1$	0.4852814	1/2	2.781	2
Exato	$\sqrt{2} - 1$ ⁽¹²⁴⁾	$6\sqrt{2}-8$ ⁽¹⁶⁰⁾ $\cong 0.4852814$	$1/2$ ⁽¹⁵⁶⁾	$4 \ln 2$ ⁽¹⁵⁸⁾	2 ^(159,161)

Na Tabela 5.3.2 apresentamos alguns pontos da curva tri

dimensional obtidos pela interseção da superfície crítica com a superfície cilíndrica $\alpha = 0.2 = J_1/J_2 = \arg \tanh t_1 / \arg \tanh t_2$ (veja também a Fig. 5.3.3).

Tabela 5.3.2 - Comparação das três linhas críticas aproximadas associadas com $\alpha \equiv J_1/J_2 = 0.2$ (veja também a Fig. 5.3.3).

t_2	$k_B T_c / J_2 = 1 / \arg \tanh t_2$	$t_1 = \tanh(\alpha \arg \tanh t_2)$	p (GR-t)	p (heurístico)	p (GR-s)
$\sqrt{2} - 1$	2.269	0.08791	1	1	1
0.45	2.063	0.09664	0.91013	0.91053	0.91014
0.5	1.820	0.10942	0.80412	0.80475	0.80417
0.55	1.617	0.12305	0.71482	0.71546	0.71491
0.6	1.443	0.13775	0.63745	0.63798	0.63758
0.65	1.290	0.15383	0.56852	0.56890	0.56867
0.7	1.153	0.17174	0.50523	0.50541	0.50539
0.75	1.028	0.19217	0.44499	0.44497	0.44516
0.8	0.910	0.21625	0.38491	0.38468	0.38508
0.85	0.796	0.24608	0.32072	0.32029	0.32090
0.9	0.679	0.28622	0.24378	0.24316	0.24394
0.95	0.546	0.35080	0.12563	0.12496	0.12570
0.976	0.454	$\sqrt{2} - 1$	0	0	0

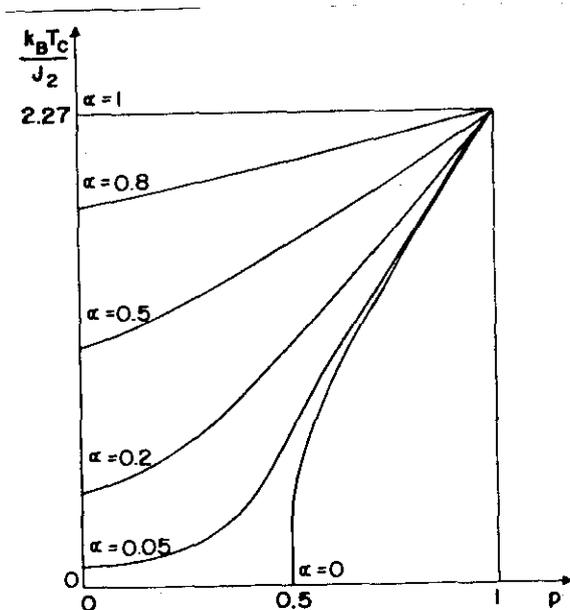


Figura 5.3.3 - Temperatura crítica como função da concentração de ligações J_2 para diferentes valores de $\alpha = J_1/J_2$ (os GR-t, heurístico e GR-s são indistinguíveis nesta escala). A fase ferromagnética (paramagnética) é estável à baixa (alta) temperatura e do lado da fronteira crítica com alta (baixa) concentração.

Faremos agora uma comparação destes nossos resultados com aqueles obtidos nas referên

cias (163) e (64). Estes três tratamentos levam aos resultados exatos $p_c = 1/2$ e $t_c = \sqrt{2} - 1$, mas o presente tratamento leva a uma melhor concordância com os valores exatos do modelo diluído (mais precisamente para $(\partial t_2 / \partial p) \Big|_{p=1, t_1=0, t_2=t_c}$ e $(\partial t_2 / \partial p) \Big|_{p=p_c, t_1=0, t_2=1}$ e com o modelo misto com concentrações iguais). A razão para esta melhor concordância do GR-t é que ele permite que os três parâmetros (p, t_1, t_2) estejam livres para se renormalizarem como quiserem, enquanto somente dois deles estão livres para se renormalizarem no RG2 da ref. (64) (onde $t_1 = t'_1 = 0$) e no tratamento da ref. (163) (onde $J'_1 / J'_2 = J_1 / J_2 = \alpha$). Desta maneira a universalidade é automaticamente preservada se os três parâmetros estão livres para se renormalizarem, enquanto que o ν (ou qualquer outro expoente), por exemplo, dependerá de α no tratamento da ref. (163).

Os expoentes críticos aproximados obtidos com o GR-t são $\nu_t \cong 1.149$ (valor exato igual a 1), $\nu_p \cong 1.423$ (valor exato igual a 4/3) (35) e finalmente $\phi = 1$ (que é o valor exato do expoente de cruzamento ("crossover")). ν_p é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação $\xi_p \sim (p-p_c)^{-\nu_p}$ de percolação. O expoente de cruzamento ("crossover") ϕ igual à unidade deriva do fato que a matriz Jacobiana de R no ponto de percolação tem os seus três autovalores degenerados. Estes valores que obtivemos para ν_t , ν_p e ϕ já foram previamente obtidos em outros trabalhos (45, 128, 163) pois eles dependem essencialmente da célula escolhida para se fazer a dizimação ("decimation") e não do grau de liberdade que os parâmetros têm para se renormalizarem.

5.4 - APROXIMAÇÃO HEURÍSTICA

Mostraremos agora um enfoque heurístico que leva a resultados muito bons para a superfície crítica que estamos procurando. É conhecido ^(124, 20) que a temperatura crítica do modelo de Ising puro retangular é dada por

$$\sinh \left(\frac{2J_1}{k_B T_c} \right) \sinh \left(\frac{2J_2}{k_B T_c} \right) = 1 \quad . \quad (5.4.1)$$

Se definimos ⁽⁶⁴⁾ a transmissividade dual t^D de uma transmissividade t como (ver Apêndice A)

$$t^D \equiv \frac{1-t}{1+t} \quad (5.4.2)$$

então a eq. (5.4.1) pode ser reescrita como

$$t_1 = t_2^D \quad (\text{ou } t_2 = t_1^D) \quad (5.4.3)$$

mas a definição natural ⁽¹⁶⁴⁾ para a probabilidade de ocupação dual P^D de uma dada probabilidade de ocupação p é

$$P^D \equiv 1-p \quad . \quad (5.4.4)$$

Assim, a linha crítica exata conhecida ⁽¹⁵⁶⁾ $p_1 + p_2 = 1$ para percolação de ligações anisotrópicas na rede quadrada pode ser reescrita como

$$p_1 = p_2^D \quad (\text{ou } p_2 = p_1^D) \quad (5.4.5)$$

que é escrita desta maneira, análoga à expressão similar para os fenômenos críticos térmicos dada pela eq. (5.4.3). Observamos

também que a linha crítica do modelo de Ising misto com concentrações iguais é também dada pela eq. (5.4.3). A auto-dualidade da rede quadrada isotrópica impõe $t_c = t_c^D$ e $p_c = p_c^D$, o que nos leva imediatamente, utilizando as eqs. (5.4.3) e (5.4.5) respectivamente, aos conhecidos valores críticos $t_c = \sqrt{2} - 1$ e $p_c = 1/2$.

Vamos agora reescrever a eq. (5.4.3) de outra maneira, mais simétrica:

$$(1+t_1)(1+t_2) = 2 \quad (5.4.6)$$

assim

$$\ln (1+t_1) + \ln (1+t_2) = \ln 2 \quad (5.4.7)$$

Como $t_c = \sqrt{2} - 1$, temos que satisfazer às equações abaixo

$$\ln (1+t_1) = \frac{1}{2} \ln 2 \quad (p=0) \quad (5.4.8)$$

$$\ln (1+t_2) = \frac{1}{2} \ln 2 \quad (p=1) \quad (5.4.9)$$

Desta maneira, uma extensão natural da eq. (5.4.7) para englobar as eqs. (5.4.8) e (5.4.9) pode ser ($p \in [0,1]$):

$$(1-p) \ln (1+t_1) + p \ln (1+t_2) = \frac{1}{2} \ln 2 \quad (5.4.10)$$

e esta é a proposta aproximada, heurística, para a superfície crítica.

Para testá-la vamos considerar um caso particular completamente independente aos casos utilizados para construir a eq. (5.4.10), ou seja, o modelo diluído ($t_1=0$). Assim, fazendo -se $t_1=0$ na eq. (5.4.10) obtemos:

$$p \ln (1+t_2) = \frac{1}{2} \ln 2 \quad (5.4.11)$$

portanto

$$\left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{\substack{p=p_C \\ t_2=1}} = -4 \ln 2 \quad (5.4.12)$$

que \hat{e} é o resultado exato. Também

$$\left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{\substack{p=1 \\ t=t_c}} = -\frac{\ln 2}{\sqrt{2}} \quad (5.4.13)$$

cujo erro em relação à resposta exata é menor que 1% (ver Tabela 5.3.1). Esta concordância com a resposta exata é superior àquela obtida por um excelente algoritmo aproximado proposto por Oguchi e Ueno [Eq. (3.5) da ref. (161)] o qual pode ser reescrito como

$$(1-p)t_1 + pt_2 = (1-p)\left(\frac{1-t_1}{1+t_1}\right) + p\left(\frac{1-t_2}{1+t_2}\right) \quad (5.4.14)$$

que reproduz exatamente os modelos puros e com concentrações iguais, mas, no limite diluído fornece

$$\left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{\substack{p=p_C \\ t_2=1}} = -\frac{8}{3} \quad (3.8\% \text{ de erro}) \quad (5.4.15)$$

$$\left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{\substack{p=1 \\ t_2=t_c}} = -\frac{1}{2} \quad (3.0\% \text{ de erro}) \quad (5.4.16)$$

Vamos definir agora uma nova variável, que chamaremos variável S, pela relação

$$S \equiv \frac{\ln(1+t)}{\ln 2} \quad , \quad (5.4.17)$$

e que satisfaz à seguinte equação

$$S^D(t) \equiv S(t^D) = 1 - S(t) \quad , \quad (5.4.18)$$

isto é, ela se comporta, em relação à variável dual, como percolação (eq. (5.4.4)) ! Se nós consideramos a distribuição de probabilidade-S como

$$P(S_{ij}) = (1-p)\delta(S_{ij}-S_1) + p\delta(S_{ij}-S_2) \quad (5.4.19)$$

e a sua distribuição dual de probabilidade

$$P_D(S_{ij}) = (1-p)\delta(S_{ij}-S_1^D) + p\delta(S_{ij}-S_2^D) \quad , \quad (5.4.20)$$

a eq. (5.4.18) implica que

$$\langle S_{ij} \rangle_P + \langle S_{ij} \rangle_{P_D} = 1 \quad . \quad (5.4.21)$$

Portanto a eq. (5.4.10) pode ser escrita de outra maneira como

$$\langle S_{ij} \rangle_P = \langle S_{ij} \rangle_{P_D} = \frac{1}{2} \quad . \quad (5.4.22)$$

A primeira destas igualdades se deve a que a rede quadrada é auto-dual. Observamos que a eq. (5.4.14) pode ser escrita como

$$\langle t_{ij} \rangle_P = \langle t_{ij} \rangle_{P_D} \quad , \quad (5.4.23)$$

sugerindo que a variável S é uma variável mais apropriada que a variável t para se fazer os cálculos. A eq. (9) da ref. (64) é um caso particular (o RG3 apresentado na ref. (64) corresponde ao limite diluído) da aproximação de Oguchi e Ueno.

Portanto, os resultados numéricos desta proposta heurística descrevem com bastante precisão a superfície crítica exata [veja Figs. 5.3.2, 5.3.3 e Tabelas 5.3.1 e 5.3.2]. Na Fig. 5.4.1 representamos (fora de escala) a posição relativa desta pro

posta heurística com respeito ao possível resultado exato, para o caso $t_1 = 0$.

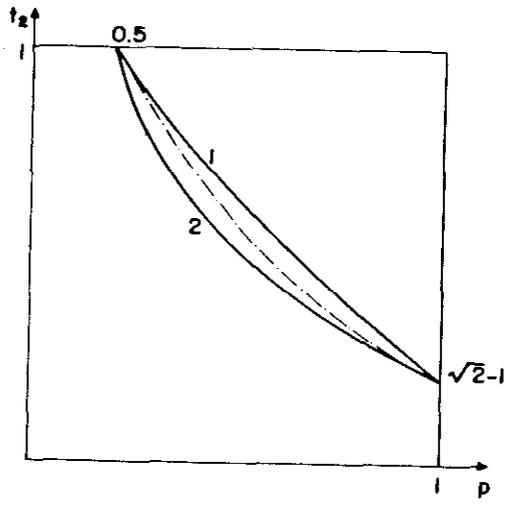


Figura 5.4.1 - Posição relativa (fora de escala) da (suposta) fronteira crítica exata (linha pontilhada) e as fronteiras heurística (linha 1) e GR-S (linha 2), no plano $t_1 = 0$ (modelo diluído).

5.5 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO-S

Tendo sido exibido na seção anterior que a variável S é aparentemente superior que a variável t para estes cálculos da fronteira crítica é natural que tentemos fazer um grupo de renormalização com essa variável. Chamaremos a este grupo de GR-S e as equações que o definem serão:

$$\langle S(t) \rangle_{P'} = \langle S(t) \rangle_{P_H} \quad (5.5.1)$$

$$\langle [S(t)]^2 \rangle_{P'} = \langle [S(t)]^2 \rangle_{P_H} \quad (5.5.2)$$

$$\langle [S(t)]^3 \rangle_{P'} = \langle [S(t)]^3 \rangle_{P_H} \quad (5.5.3)$$

onde P' e P_H são dados, respectivamente, pelas eqs. (5.3.1) e (5.3.2). Se consideramos a relação analítica entre t e S , é cla-

ro que, se as distribuições têm parâmetros suficientes para permitir a imposição de infinitas equações (ao invés de somente três), o GR-t e o GR-S deveriam levar à mesma transformação. Como somente um número finito de relações são impostas, não há razão para que o GR-t e o GR-S sejam os mesmos e na verdade eles não o são. O GR-S fornece uma superfície crítica que é mais próxima da exata (ver Tabela 5.3.1) que o GR-t. Em particular, o GR-S preserva a linha auto-dual $[t_2 = (1-t_1)/(1+t_1)]$ pois o momento central de ordem três $(\langle (S-\langle S \rangle_{P_H})^3 \rangle_{P_H})$ para a variável S se anula (contrariamente ao da variável t). O fluxo deste grupo se mantém nesta linha auto-dual. Ela é uma linha de "crestas" [ver Fig. 5.3.2]

Já foi observado que, se um ponto (p, t_1, t_2) pertence a superfície crítica exata, o ponto complementar $(1-p, t_2, t_1)$ também a pertence. Mas o ponto (p, t_1^D, t_2^D) também pertence a esta superfície, pois a rede é auto-dual. Em particular, este é o caso para $p = 1/2$, ver eq. (5.4.3). Assim, somente uma região do plano (p, t_1) é relevante na determinação de t_2 para a superfície crítica; por exemplo, a região $t_1 \leq \sqrt{2} - 1, p \geq 1/2$. As outras regiões podem ser imediatamente analisadas desde que tenhamos os resultados para a primeira; é suficiente aplicar as transformações

$$\begin{aligned} (p, t_1, t_2) &\longleftrightarrow (p, t_1^D, t_2^D) \\ &\longleftrightarrow (1-p, t_2, t_1) \\ &\longleftrightarrow (1-p, t_2^D, t_1^D) \end{aligned} .$$

Nossas três superfícies críticas aproximadas e a exata contêm os pontos de percolação pura (A, na Fig. 5.3.2), e as li-

nhas de Ising puro (linhas C'C e CB na Fig. 5.3.2). O GR-S e a proposta heurística satisfazem à transformação $(p, t_1, t_2) \leftrightarrow (p, t_1^D, t_2^D)$, e em particular a linha mista com igual concentração (AB na Fig. 5.3.2), porém o GR-t não a satisfaz. A superfície exata tem, com a proposta heurística, a mesma derivada no ponto de percolação pura, e (com um erro inferior a 10^{-7}) quase a mesma inclinação que o GR-S nos pontos de Ising puro (C' na Fig. 5.3.2). Na Fig. 5.4.1 mostramos (fora de escala) como as superfícies do GR-S, heurística e a suposta exata cortam o plano $t_1 = 0$.

Podemos, assim, ordenar as superfícies críticas da seguinte maneira: Começando, na Fig. 5.3.2, pelo plano $t_2 = 1$ e indo em direção do plano $t_2 = 0$, primeiro atravessamos a superfície crítica heurística, depois a suposta exata, depois a do GR-S e finalmente a do GR-t.

Vamos agora analisar mais cuidadosamente o porque de nossa hipótese da superfície crítica exata estar compreendida entre a proposta heurística e a superfície do GR-S se não a conhecemos. Certamente que não temos uma prova mas sim indícios de que isto aconteça. Vamos introduzir algumas definições para facilitar a discussão:

$$\tau_1 \equiv \left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{p=1, t_1=0, t_2=t_c} \quad (5.5.4)$$

$$\tau_2 \equiv \left. \frac{\partial t_2}{\partial p} \right|_{p=p_c, t_1=0, t_2=1} \quad (5.5.5)$$

Consideremos que o índice superior de τ , dado por uma letra grega, (τ^v por exemplo) indica as várias propostas que temos consi-

derado: RG1 ao RG6 da ref. (64), as propostas fornecidas pelo GR-t, GR-S e heurística, aproximação de Oguchi e Ueno e finalmente a solução exata. Observamos o seguinte: (a) Sempre que $\tau_1^v < \tau_1^\delta$ ($\tau_2^v < \tau_2^\delta$) temos $\tau_2^v \geq \tau_2^\delta$ ($\tau_1^v \geq \tau_1^\delta$); isto nos permite ordenar todas as propostas (a exata e as aproximadas); (b) sempre que τ_1 e τ_2 sugerem que uma linha crítica dada (ou superfície) estava, digamos, abaixo de uma outra (na região $t \leq \sqrt{2}-1$, $p \geq 1/2$), isto era verificado ser verdade (em todas as aproximações) para toda a linha (ou superfície) naquela região; (c) Thorpe e McGurn⁽¹⁶⁵⁾, afirmam, por outras razões, que, neste tipo de problema, as derivadas limites praticamente "sustentam" a curva (ou superfície), nada acontecendo além de uma variação suave ligando as extremidades.

Por estas razões, acreditamos que a superfície exata está compreendida entre nossas superfícies críticas heurística e GR-S. Observamos também que a proposta heurística se aproxima bastante da superfície exata na vizinhança de $p = 1/2$ (como sugerem as derivadas, que são iguais), e o mesmo acontece com o GR-S na vizinhança de $p=1$. Assim, adotamos como uma proposta numérica final, com nenhuma pretensão de exatidão analítica, a seguinte interpolação linear para todos os valores de p e t_1 para os quais existe a transição de fase:

$$\bar{t}_2 = 2[(1-p)t_2(\text{heurístico}) + (p-1/2)t_2(\text{GR-S})] \quad . \quad (5.5.6)$$

Alguns resultados para esta última proposta estão mostrados na Tabela 5.5.1 (abaixo daqueles associados ao GR-S). Estimamos o erro de \bar{t}_2 como sendo inferior a 3×10^{-4} para todo par (p, t_1) .

$p \backslash t_1$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	$\sqrt{2} - 1$	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
0.5	1	0.8182	0.6667	0.5385	0.4286	$\sqrt{2} - 1$	0.3333	0.2500	0.1765	0.1111	0.0505	0
1	1	0.8182	0.6667	0.5385	0.4286	$\sqrt{2} - 1$	0.3333	0.2500	0.1765	0.1111	0.0505	0
0.6	0.7811	0.6717	0.5777	0.4959	0.4238	$\sqrt{2} - 1$	0.3598	0.3026	0.2511	0.2044	0.1619	0.1229
0.7	0.7817	0.6720	0.5778	0.4959	0.4238	$\sqrt{2} - 1$	0.3598	0.3025	0.2509	0.2042	0.1616	0.1225
0.7	0.6397	0.5745	0.5172	0.4662	0.4203	$\sqrt{2} - 1$	0.3790	0.3414	0.3071	0.2757	0.2461	0.2197
0.8	0.6403	0.5748	0.5173	0.4662	0.4203	$\sqrt{2} - 1$	0.3790	0.3414	0.3070	0.2755	0.2463	0.2193
0.8	0.5414	0.5055	0.4734	0.4443	0.4178	$\sqrt{2} - 1$	0.3935	0.3713	0.3508	0.3317	0.3141	0.2975
0.8	0.5417	0.5057	0.4734	0.4443	0.4178	$\sqrt{2} - 1$	0.3935	0.3713	0.3507	0.3316	0.3139	0.2972
0.9	0.4693	0.4541	0.4402	0.4275	0.4158	$\sqrt{2} - 1$	0.4050	0.3950	0.3857	0.3770	0.3688	0.3612
0.9	0.4694	0.4541	0.4402	0.4275	0.4158	$\sqrt{2} - 1$	0.4050	0.3950	0.3856	0.3769	0.3688	0.3611
1	$\sqrt{2} - 1$											
1	$\sqrt{2} - 1$											

Tabela 5.5.1 - Valores da superfície crítica $t_2(p, t_1)$. Número superior t_2 (GR-S); número inferior \bar{t}_2 onde \bar{t}_2 é nossa melhor proposta.

5.6 - CONCLUSÃO

Foram feitas propostas numéricas para a superfície crítica exata do modelo de Ising com spin 1/2, ligações mistas ferromagnéticas entre primeiros vizinhos, homogêneo, isotrópico, temperado, na rede quadrada. A alta precisão obtida (veja Tabela 5.5.1), com erro estimado menor que 3×10^{-4} nas variáveis t , confirmam que o uso adequado da técnica do GR (por exemplo uma escolha adequada da célula) fornece um poderoso instrumento para cálculos numéricos de superfícies críticas e seus resultados competem com as melhores técnicas de aproximação (séries de alta e baixa temperatura, métodos Monte-Carlo, etc). A precisão obtida nos expoentes críticos ν_p e ν_t é bem menor (6% de erro em ν_p e 15% de erro em ν_t) mas pode ser diminuída aumentando-se o tamanho da célula (ver Capítulo II). A nossa melhor proposta satisfaz quase todos os resultados exatos conhecidos [eqs. (5.2.4), (5.2.5), (5.2.6) e (5.2.8)] só não satisfazendo à eq. (5.2.7) onde o erro é menor que 0.5%. Contudo se uma alta precisão não é necessária, a relação analítica simples

$$(1-p)\ln(1+t_1) + p \ln(1+t_2) = \frac{1}{2} \ln 2$$

fornece uma excelente aproximação para a superfície crítica exata.

Achamos também importante ressaltar que os resultados deste trabalho mostram a importância, no contexto do GR, de se permitir a máxima liberdade de renormalização possível aos parâmetros do problema, para se evitar efeitos artificiais sobre as

linhas (superficies) críticas ou sobre os expoentes críticos (aparente perda de universalidade) além de se obter resultados numéricos melhores.

CAPÍTULO VI

VIDRO DE SPIN NA REDE QUADRADA

6.1 - INTRODUÇÃO

Sistemas magnéticos cristalinos podem ser ordenados ou desordenados. As fases magnéticas de sistemas ordenados são geralmente bem conhecidas enquanto as dos sistemas desordenados são um campo de investigação mais recente e ainda não muito bem conhecidas. Dentre estas últimas, o "vidro de spin" [nome dado por B.R. Coles para as ligas diluídas devido à sua semelhança com os vidros] é certamente uma que maiores polêmicas tem despertado (166 - 168). A própria questão fundamental se o "estado" vidro de spin (VS) surge à uma temperatura abaixo de T_g devido à uma transição de fase (59, 169) ou a um relaxamento progressivo das flutuações (58, 170) não tem uma resposta unanimemente aceita pelos pesquisadores.

Experimentalmente o VS é caracterizado por apresentar alguns comportamentos típicos, que não necessitam estar todos "presentes" em uma dada experiência. O pico agudo ("sharp cusp") em T_g na susceptibilidade em pequenos campos magnéticos A.C. ou D.C. (171,172); uma contribuição extra para o calor específico que é aproximadamente linear na temperatura e com uma dependência muito fraca da concentração de íons magnéticos abaixo de T_g decaindo, para $T > T_g$, suavemente, fornecendo, próximo desta temperatura, um máximo arredondado no calor específico (173); a exis

tência, abaixo de T_g , de irreversibilidades, magnetização residual ("remanent") e dependência temporal com a aplicação de um campo estático externo ⁽¹⁷⁴⁾ e as curvas de histerese deslocadas em ligas mais concentradas esfriadas, através de T_g , na presença de campo ⁽¹⁷⁵⁾, são alguns dos indícios experimentais de que a substância em estudo pode apresentar uma "fase" VS.

Os primeiros materiais onde foram verificadas algumas destas propriedades eram impurezas magnéticas de metais de transição em matrizes nobres, tais como: AuFe, CuMn, AgMn ^(176,177,57) etc. Foi observado que estas impurezas magnéticas (da ordem de 1%) interagem entre si com acoplamento de longo alcance do tipo Rudermann, Kittel, Kasuya, Yosida (RKKY) ⁽¹⁷⁸⁻¹⁸⁰⁾. Mas, posteriormente, verificou-se que sistemas bastante diferentes destes exibem comportamento tipo VS, tais como:

- ligas concentradas ^(181,182) (e não obrigatoriamente diluídas),
- ligas com impurezas de terras raras ⁽¹⁸³⁾,
- materiais amorfos ^(184,185) (não precisam ter estrutura cristalina),
- materiais isolantes ⁽¹⁸⁶⁾ (com interações de curto alcance),
- sistemas somente com interações antiferromagnéticas ^(58,185) (não precisam ser competitivas),
- sistemas que não contêm spins mas momentos dipolares elétricos ⁽¹⁸⁷⁾ ou quadrupolares ⁽¹⁸⁸⁾.

As diferenças entre estes sistemas são evidentes, pois temos desde sistemas com forças de longo alcance (por exemplo CuMn), forças de curto alcance [$\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ ^(52,189)], metais, isolantes, sistemas cristalinos, amorfos, sistemas com interações competitivas, sem interações competitivas, etc. O que todos eles apresentam em comum é

o fato de serem desordenados e frustrados. A desordem implica a perda da invariância translacional nos sistemas cristalinos e a frustração, um conceito surgido recentemente⁽⁵⁶⁾, significa a contradição das interações, isto é, a inexistência de configurações do sistema que permitam satisfazer todas as interações. O fato destes sistemas serem frustrados, nos permite entender porque o estado fundamental da fase VS é altamente degenerado, além da existência de vários estados metastáveis (razão das irreversibilidades, resíduos e dependência temporal)⁽¹⁹⁰⁾. Isto se deve a que uma configuração frustrada pode ser arranjada de várias maneiras diferentes, todas com a mesma energia⁽⁵⁶⁾.

Teoricamente, o modelo mais simples que poderia descrever as propriedades de muitos destes sistemas tem como Hamiltoniano

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i \quad (6.1.1)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ é um spin clássico no sítio i de uma rede d -dimensional, J_{ij} é a interação entre pares de sítios primeiros vizinhos e h_i é o campo local. Como o sistema é desordenado, esta desordem pode ser representada por uma distribuição de probabilidade sobre J_{ij} implicando que devemos fazer uma média configuracional sobre a energia livre do sistema (temperado, ver Seção I do Capítulo V).

Para tentar explicar estas propriedades do VS existem basicamente dois pontos de vista. O primeiro tenta explicar, por exemplo, a brusca mudança da susceptibilidade em T_g , supondo que o tempo de relaxação (o tempo de resposta do sistema a um estímulo externo) cresce suavemente assim que a temperatura, suposta

acima de T_g , é diminuída, sendo T_g simplesmente a temperatura na qual o tempo de relaxação se torna igual ao tempo de medida. A temperatura T_g varia com o logaritmo da frequência, ν , como

$$\frac{\nu}{T_g} \frac{dT_g}{d\nu} = \frac{1}{\ln(\nu_0/\nu)} \quad , \quad (6.1.2)$$

onde ν_0 é uma constante. Mas na maioria dos sistemas físicos, a dependência da frequência é pequena e recentemente Malozemoff e Imry (191) obtiveram, experimentalmente, que T_g tende para uma assíntota $T_{g0} > 0$ se o tempo experimental é suficientemente longo. O valor da constante ν_0 é bastante diferente de qualquer estimativa teórica razoável e o modelo também não fornece nenhuma explicação para o rápido crescimento da susceptibilidade em T_g . De maneira geral, as últimas experiências não reforçam este ponto de vista (57,192,193).

A segunda interpretação vem do reconhecimento de que o pico da susceptibilidade pode ser um indício de uma transição de fase. Neste sentido Edwards e Anderson (59) propuseram um modelo que poderia ser dado pelo Hamiltoniano da eq. (6.1.1), com uma distribuição de probabilidade simétrica para J_{ij} . Eles propuseram um parâmetro de ordem (q) que mediria a probabilidade de um spin no sítio i (\vec{S}_i), apontando para uma direção $\vec{S}_i(t_1)$ durante uma observação feita no tempo t_1 , apontar para a mesma direção $\vec{S}_i(t_2)$ em uma outra observação feita no tempo t_2 , com $t_2 \gg t_1$. Quer dizer, haveria, abaixo de T_g , em cada sítio, direções privilegiadas para o spin, direções estas que seriam diferentes em cada sítio, resultando em uma magnetização total nula. O parâmetro de ordem, dado pela expressão

$$q = [\langle \vec{S}_i(t_1) \cdot \vec{S}_i(t_2) \rangle]_{\substack{\text{m\u00e9dia} \\ \text{configuracional}}} \begin{cases} \neq 0 & \text{se } T < T_g \\ = 0 & \text{se } T > T_g \end{cases}, \quad (6.1.3)$$

onde $\langle \dots \rangle$ \u00e9 a m\u00e9dia t\u00e9rmica e $[\dots]$ \u00e9 a m\u00e9dia configuracional, \u00e9 a base para quase todo trabalho te\u00f3rico posterior. Sherrington e Kirkpatrick⁽¹⁶⁹⁾ propuseram uma teoria de campo molecular (TCM) para VS que seria a solu\u00e7\u00e3o exata de um modelo com intera\u00e7\u00f5es de alcance infinito e onde a distribui\u00e7\u00e3o de probabilidade sobre J_{ij} \u00e9 a mesma para todos os pares de spins, i e j , n\u00e3o importando qu\u00e3o distante estejam entre si⁽¹⁹⁴⁾. Fazendo-se uma formula\u00e7\u00e3o Hamiltoniana do tipo Ginsburg-Landau em termos dos par\u00e2metros de ordem (do tipo de Edwards-Anderson) em um meio cont\u00ednuo, pode-se estudar a dimens\u00e3o cr\u00edtica acima da qual vale o campo molecular (no que se refere aos expoentes cr\u00edticos). A dimens\u00e3o encontrada \u00e9 igual a seis, podendo-se fazer a expans\u00e3o ϵ para os expoentes cr\u00edticos onde $\epsilon = 6-d$. A dimens\u00e3o m\u00ednima onde existe o fen\u00f4meno cr\u00edtico (abaixo da qual as flutua\u00e7\u00f5es destroem a transi\u00e7\u00e3o) foi calculada por Fisch e Harris⁽⁶⁰⁾ analisando a chamada susceptibilidade VS, definida atrav\u00e9s do par\u00e2metro de ordem do tipo Edwards-Anderson, utilizando expans\u00f5es em s\u00e9ries de alta temperatura para um modelo de Ising em uma rede hiperc\u00fabica d -dimensional e com distribui\u00e7\u00e3o

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2} [\delta(J_{ij}-J) + \delta(J_{ij}+J)] \quad . \quad (6.1.4)$$

Esta susceptibilidade VS (χ_{VS}) est\u00e1 relacionada com a susceptibilidade n\u00e3o-linear χ_{NL} , definida por

$$m = \chi h - \chi_{NL} h^3 + \dots, \quad (6.1.5)$$

onde m é a magnetização e h um campo magnético externo, da seguinte maneira

$$\chi_{NL} = \frac{\chi_{VS}}{3T^3} \quad . \quad (6.1.6)$$

Fisch e Harris⁽⁶⁰⁾ encontraram uma divergência em $T = T_g$ para χ_{VS} com $\gamma = 1$ para $d > 6$ (TCM), com $\gamma \neq 1$ (expoente não-clássico) para $4 < d < 6$ e não encontraram divergência para $d < 4$ indicando que a dimensão mínima seria quatro. Na verdade as séries são bastante irregulares para $d < 4$ sendo questionável o valor $d_{\text{mínimo}} = 4$ encontrado pelos autores acima⁽¹⁹⁵⁾. Os trabalhos mais recentes de Grupo de Renormalização em VS parecem, no entanto, reforçar o resultado de Fisch e Harris não encontrando fase VS (a não ser a zero graus Kelvin) em $d = 2$ ^(196,62) e $d = 3$ ^(61, 197). Estes trabalhos consideram uma distribuição $P(J_{ij})$ com três deltas de Dirac (em $J_{ij} = J, -J$ e 0) de pesos diferentes. Apesar de conseguirem com esta distribuição exibir a fase vidro de spin (a 0^0K) e o efeito de percolação, não conseguem separar o efeito, fundamental a nosso ver, da frustração, isto é, não conseguem distinguir entre modelos frustrados e não-frustrados. Benyoussef e Boccara⁽⁶¹⁾ fazem o seguinte importante comentário no fim de seu recente artigo: "Frustration being an important feature of spin-glass systems one could believe that the probability distribution of the interactions (a distribuição mencionada acima com três deltas de Dirac em $J_{ij} = +J, -J$ e 0), which does not distinguish between frustrated and non-frustrated models, is not satisfactory to describe spin-glass systems". O nosso objetivo neste trabalho será levar em conta estes efeitos gerais de VS que são a desordem e a frustração. Desenvolveremos, dentro do formalismo do grupo de renormalização no espaço real ,

uma maneira de distinguir entre modelos frustrados e não-frustrados e aplicaremos este método em duas dimensões (rede quadrada). Também consideraremos a diluição, podendo reobter os efeitos de percolação já conhecidos.

A controvérsia teórica sobre a existência ou não da fase VS a temperaturas finitas em dimensões menores que quatro, está longe de estar encerrada. O próprio reconhecimento de Benyoussef e Boccara (citado acima) de que não conseguem separar entre sistemas frustrados e não-frustrados lança objeções sobre os resultados obtidos em seus (e outros) trabalhos (não existência de VS em $d=3$ para temperaturas finitas).

6.2 - MODELO

Consideraremos o Hamiltoniano de Ising na rede quadrada

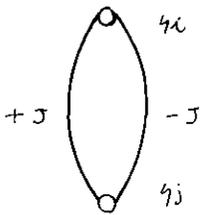
$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad , \quad (6.2.1)$$

onde existe uma distribuição de probabilidade (desordem) sobre J_{ij} (que é diferente de zero somente para pares de sítios primeiros vizinhos) e em cada sítio desta rede (i,j,\dots) há uma variável (spin) $S_i = \pm 1 \forall i$. Estes modelos de curto alcance seriam mais adequados, por exemplo, ao $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}^{(52)}$ ($d=3$) do que aos vizinhos de spin tradicionais como CuMn etc, onde a interação entre spins, como já foi dito, é de longo alcance (portanto a concentração dos íons magnéticos Eu^{3+} não pode ser tão baixa quanto a do Mn no cobre. Na verdade, o valor desta concentração mantém relação estreita com o problema de percolação na rede). Sobre a

distribuição de probabilidade notamos primeiro que J_{ij} pode ser:

- i) $J_{ij} = +J > 0$ (interação ferromagnética)
- ii) $J_{ij} = -J < 0$ (interação antiferromagnética)
- iii) $J_{ij} = 0$ (interação ausente ou frustrada).

Sobre os itens (i) e (ii) a explicação é clara, mas o item (iii) merece algum comentário. No caso da interação estar ausente (diluição) entre os sítios i e j é claro que $J_{ij} = 0$. Considere - mos agora, por exemplo, dois spins S_i e S_j com duas ligações os unindo , Fig. 6.2.1. Uma destas ligações vale $+J$ e a outra, em



paralelo com a primeira, vale $-J$. A ligação efetiva entre os spins S_i e S_j é:

$$J_{ef} = (+J) + (-J) = 0 \quad . \quad (6.2.2)$$

Figura 6.2.1 - Dois spins S_i e S_j com duas ligações em paralelo, uma com J e outra com $-J$

Desta maneira, vemos que existem 2 situações físicas bem distintas e ambas apresentam $J_{ij} = 0$. Assim, o valor de J_{ij} é insuficiente para descrever estas situações. Que J_{ij} deve ser uma variável física insuficiente é sugerido pelo seguinte argumento (emprestado das transformações de calibre em eletrodinâmica): Considere o Hamiltoniano dado pela eq. (6.2.1). Verificamos que ele é invariante frente à transformação de calibre local ⁽⁵⁶⁾ (agindo sobre os spins e as constantes de acoplamento)

$$S_i \rightarrow -S_i \quad . \quad (6.2.3)$$

$$J_{ij} \rightarrow -J_{ij} \quad .$$

(j adjacente a i)

Portanto, as propriedades termodinâmicas (função de partição, calor específico,...) do sistema dado pela eq. (6.2.1) são também invariantes frente à esta transformação de calibre local. Elas dependem das constantes de acoplamento somente via funções destas que sejam invariantes àquela transformação pois, claramente, J_{ij} não é invariante. A função frustração

$$\phi(C) = \prod_C J_{ij} \quad , \quad (6.2.4)$$

onde os J_{ij} 's são tomados ao longo de um contorno fechado C , é invariante à transformação de calibre local citada acima. É através destas funções que as propriedades termodinâmicas dependem das interações J_{ij} . Observemos agora o nosso exemplo sob o ponto de vista da função frustração. É imediato que os spins S_i e S_j isolados (interação ausente) não apresentem frustração, enquanto no segundo caso (Fig. 6.2.1), a função $\phi(C)$ é negativa indicando que existe frustração. Assim, a função frustração consegue separar estas duas situações físicas, indistinguíveis se observarmos somente o valor de J_{ij} . Parece-nos essencial separar estas duas situações. Toulouse compartilha a mesma opinião e faz a seguinte observação⁽⁵⁶⁾: "Besides the frustration effect in disordered magnets, there is a 'hole' effect due to disconnected bonds; this hole effect is to be studied with percolation concepts; in itself, it does not lead to qualitatively new phases and from a theoretical point of view, it is desirable to separate the hole effect from the frustration effect;....". Esta é a idéia central deste trabalho. Vamos propor uma maneira de separar estes efeitos utilizando indiretamente a função frustração. Como vamos utilizar a técnica de traço parcial do Grupo de Renor

malização no espaço real em células pequenas, a composição série-paralelo entre as ligações é de fundamental importância. As diferenças nesses algoritmos de série-paralelo são notórias entre o caso diluído (que tem o algoritmo de percolação ou "não-percolação") e o caso frustrado. Nesse nível será feita a diferenciação entre os dois efeitos.

Portanto, vamos considerar que uma ligação J_{ij} do Hamiltoniano dado pela eq. (6.2.1) pode ser ferromagnética, anti-ferromagnética, diluída (ausente) ou frustrada. A distribuição de probabilidade sobre J_{ij} será:

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij}-J) + q\delta(J_{ij}+J) + r\delta(J_{ij}) + s\delta(J_{ij}) \quad , \quad (6.2.5)$$

que escrita em termos da transmissividade

$$t \equiv \tanh(J/k_B T) \quad (6.2.6)$$

se torna:

$$P(t_{ij}) = p\delta(t_{ij}-t) + q\delta(t_{ij}+t) + r\delta(t_{ij}) + s\delta(t_{ij}) \quad , \quad (6.2.7)$$

onde $J > 0$, p é a probabilidade da ligação ser ferromagnética, q de ser antiferromagnética, r de estar ausente e s de estar frustrada. Utilizaremos, de agora em diante, a variável t que é bem mais conveniente que a variável J . Obviamente,

$$p+q + r+s = 1 \quad . \quad (6.2.8)$$

A interpretação de uma ligação estar frustrada ficará mais clara nas seções seguintes (em todo rigor, é necessário introduzir uma nova variável na distribuição de probabilidade que assumiria valores diferentes se a ligação fosse frustrada ou não).

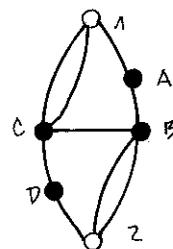
6.3 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO PARA TEMPERATURA NULA

Para construirmos um grupo de renormalização no espaço real utilizando o método do traço parcial em células finitas, a questão essencial é: quais os tipos de células (grafos) adequados ao problema que devemos adotar? Uma rede regular tem várias propriedades que só podem ser reproduzidas parcialmente se tomamos uma célula pequena. Portanto, saber qual subconjunto das propriedades (simetrias) da rede, que podem ser reproduzidas em uma célula finita, e que melhor simulam aquela rede, é um problema a ser pensado para cada rede e modelo particulares. Sabemos que para o modelo dado pela eq. (6.2.1) na rede quadrada a dualidade é uma propriedade essencial, principalmente no que se refere à obtenção de fronteiras críticas^(45, 55) (ver a discussão sobre dualidade em modelos com simetria Z_2 na Seção 3 do Capítulo II). A escolha de uma célula bidimensional em cujos sítios existe uma variável $S_i = \pm 1$ com interações (constantes de acoplamento) ligando-os dois a dois e que seja auto-dual (simulando a auto-dualidade do modelo de Ising na rede quadrada) mostrou ser condição necessária e suficiente para se obter, a qualquer tamanho da célula escolhida, a temperatura crítica exata deste modelo^(163, 31) (ver Capítulos II, III e V). Na maioria destes trabalhos a célula escolhida foi a ponte de Wheatstone^(64, 55). Porém, apesar de muitos destes trabalhos permitirem uma distribuição de probabilidade sobre J_{ij} (ver Capítulo V desta Tese), este era considerado sempre positivo (ferromagnético). A consideração de valores negativos de J_{ij} na distribuição de probabilidade [ver eq. (6.2.5)] deste modelo, torna aquela célula imprópria, pois ela não admite o estado fundamental antiferromagnético sem

frustrações ($q=1$) que a rede quadrada admite. Assim, ela introduz frustrações artificiais que certamente perturbarão o resultado final. Desta maneira, existe uma exigência adicional importante que é a célula permitir a existência do estado fundamental antiferromagnético (AF). A célula que satisfaz, simultaneamente a dualidade e o estado fundamental AF está mostrada na Figura 6.3.1^(45,198,62). Desta

maneira construiremos o GR fazendo o traço parcial sobre os spins localizados nos sítios internos (A,B,C,D) desta célula. Cada uma das nove li

Figura 6.3.1 - Célula auto-dual. Admite o AF como estado fundamental sem frustrações. Os sítios A, B, C e D são internos e os sítios 1 e 2 são os externos (terminais).



gações da célula porta uma distribuição de probabilidade [obtida da eq. (6.2.7) tomando-se $t = 1$ (temperatura nula), ver eq.(6.2.6)]

$$P(t_{ij}) = p\delta(t_{ij}-1) + q\delta(t_{ij}+1) + r\delta(t_{ij}) + s\delta(t_{ij}) \quad (6.3.1)$$

Os sítios restantes da célula (1 e 2 da Fig. 6.3.1) ficam unidos entre si, após o traço parcial sobre os spins em A,B,C,D por uma ligação que tem, como distribuição de probabilidade, a expressão

$$P'(t_{ij}) = p'\delta(t_{ij}-1) + q'\delta(t_{ij}+1) + r'\delta(t_{ij}) + s'\delta(t_{ij}) \quad (6.3.2)$$

onde, logicamente,

$$p+q + r+s = 1 \quad (6.3.3)$$

$$p'+q' + r'+s' = 1 \quad (6.3.4)$$

Para temperatura nula ($t = 1$) observamos que a distribuição renormalizada $P'(t_{ij})$ também será uma distribuição com três deltas de Dirac (em $t=1, -1$ e 0), bastando renormalizarmos o peso de cada delta de Dirac no seu correspondente. O espaço das distribuições não é alterado pela renormalização [diferentemente do que ocorrerá para $T \neq 0$ ($t \neq 1$)]. Esta renormalização é mostrada

na Figura 6.3.2.

Vamos estudar e construir os algoritmos de composição s\u00e9rie-paralelo entre duas liga\u00e7\u00f5es, cada uma com uma distribui\u00e7\u00e3o de probabilidade do tipo dado pela eq. (6.3.1).

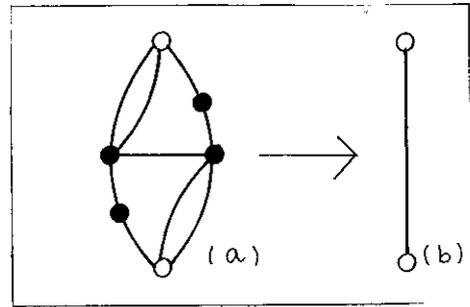
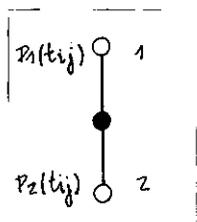


Figura 6.3.2 - Renormaliza\u00e7\u00e3o da c\u00e9lula (a) em uma liga\u00e7\u00e3o (b).

a) S\u00e9rie: Consideremos duas liga\u00e7\u00f5es em s\u00e9rie, chamadas de 1 e 2, que t\u00eam probabilidades p_1 e p_2 de serem ferromagn\u00e9ticas (F), q_1 e q_2 de serem antiferromagn\u00e9ticas (AF), r_1 e r_2 de estarem ausentes (dilui\u00e7\u00e3o) (D) e s_1 e s_2 de estarem frustradas (ϕ), respectivamente (ver Fig.6.3.3). A



distribui\u00e7\u00e3o de probabilidades para cada uma destas liga\u00e7\u00f5es \u00e9:

$$P_\alpha(t_{ij}) = p_\alpha \delta(t_{ij}-1) + q_\alpha \delta(t_{ij}+1) + r_\alpha \delta(t_{ij}) + s_\alpha \delta(t_{ij}) \quad , \quad (6.3.5)$$

Fig.6.3.3 - Duas liga\u00e7\u00f5es com distribui\u00e7\u00f5es $P_\alpha(t_{ij})$ $\alpha=1, 2$, em s\u00e9rie.

onde $\alpha = 1, 2$.

A probabilidade de que as duas liga\u00e7\u00f5es em s\u00e9rie se comportem como uma liga\u00e7\u00e3o ferromagn\u00e9tica, probabilidade esta que chamaremos p_s , \u00e9 igual a

$$p_s = p_1 p_2 + q_1 q_2 \quad , \quad (6.3.6)$$

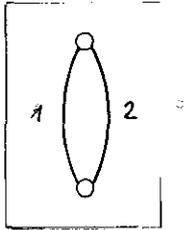
isto \u00e9, as liga\u00e7\u00f5es 1 e 2 devem ser ambas ferromagn\u00e9ticas ou antiferromagn\u00e9ticas. Analogamente, os algoritmos para q_s , r_s e s_s s\u00e3o:

$$q_s = p_1 q_2 + p_2 q_1 \quad (6.3.7)$$

$$r_s = r_1 + r_2 - r_1 r_2 \quad (6.3.8)$$

$$s_s = (p_1 + q_1) s_2 + (p_2 + q_2) s_1 + s_1 s_2 \quad (6.3.9)$$

b) Paralelo: Sejam duas ligações em paralelo como na Fig.6.3.4. Os algoritmos para as probabilidades totais destas ligações serem F, AF, D ou ϕ são:



$$p_p = p_1 + p_2 - p_1 p_2 - p_1 q_2 - p_2 q_1 \quad (6.3.10)$$

$$q_p = q_1 + q_2 - q_1 q_2 - p_1 q_2 - p_2 q_1 \quad (6.3.11)$$

$$r_p = r_1 r_2 \quad (6.3.12)$$

$$s_p = p_1 q_2 + p_2 q_1 + r_1 s_2 + r_2 s_1 + s_1 s_2 \quad (6.3.13)$$

Fig. 6.3.4 - Duas ligações em paralelo.

Naturalmente, verifica-se que $p_s + q_s + r_s + s_s = p_p + q_p + r_p + s_p = 1$. Note que os algoritmos r_s e r_p são exatamente iguais aos algoritmos de percolação para duas ligações em paralelo e em série, respectivamente. Há, portanto, uma inversão, daí nos termos chamado de "não-percolação". Como a célula que iremos calcular é auto-dual, o resultado para a probabilidade da ligação equivalente de toda a célula estar diluída é idêntico ao resultado de percolação. Este é o "hole effect" dito por Toulouse há pouco e que, diz ele, deve ser tratado com conceitos de percolação. Agora está claro porque. É importante se notar também que os algoritmos de série e paralelo de r e s são diferentes. Isto é, a frustração se compõe diferentemente da ausência (diluição). Neste nível, portanto, a diferença entre elas se torna operacional.

- Células não-redutíveis a série-paralelo

Para calcularmos a probabilidade equivalente da célula mostrada na Fig. 6.3.2 ser F, AF, D ou ϕ , devemos saber calcular estas probabilidades para grafos (células) não redutíveis à série-paralelo, pois aquela célula não é redutível. Isto pode ser

feito em uma "tour de force" contando todas as configurações possíveis daquela célula. Como são nove ligações e cada ligação pode ser de quatro tipos, teremos:

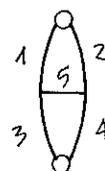
$$\text{N}^\circ \text{ conf.} = 4^9 = 262144 \quad . \quad (6.3.14)$$

Para podermos fazer este cálculo de uma maneira menos brutal, desenvolvemos um método para calcularmos pequenas células quando existem ligações AF presentes. Este método é baseado no "método de corte-colapso", desenvolvido por Tsallis e Levy (164, 114). A existência de ligações AF modifica um pouco aquele método e, em especial, o conceito de colapso deve ser abandonado.

Suponhamos, por exemplo, a célula mostrada na Fig.6.3.5.

A probabilidade desta célula ser ferromagnética (F) pode ser escrita de maneira geral como (adotamos a seguinte convenção: se uma ligação aparecer indicada por um número, isto significa que existe uma distribuição de probabilidade para aquela ligação):

Figura 6.3.5 -
Célula com cinco ligações tendo distribuições de probabilidade diferentes para cada ligação.



$$P \left[\begin{array}{c} 1 \text{ } \diamond \text{ } 2 \\ 3 \text{ } \text{ } 4 \end{array} \right] = A(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) p_5 + B(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) q_5 + \\ + C(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) r_5 + D(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) s_5 \quad , \quad (6.3.15)$$

onde $P[\theta]$ é a probabilidade da célula mostrada na Fig. 6.3.5 ser F, η_i é uma variável da ligação i podendo ser p_i, q_i, r_i ou s_i ($i = 1, 2, 3, 4$) e A, B, C e D são funções multilineares das variáveis η 's. Note que não podemos ter o termo $E(\{\eta_i\})p_5q_5$ por exemplo. Cada termo do lado direito da eq. (6.3.15) só pode ter

no máximo uma variável da ligação 5 (na verdade, no máximo uma variável de qualquer outra ligação). Isto se deve claramente a que não podemos "jogar" em uma mesma ligação uma interação F e AF simultaneamente.

Temos quatro casos a considerar:

i) $p_5 = 1 \implies q_5 = r_5 = s_5 = 0$

$$P \left[\begin{array}{c} 1 \text{---} 2 \\ \vdots \\ 3 \text{---} 4 \end{array} \right] = A(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) \quad (6.3.16)$$

isto é, a probabilidade da célula entre colchetes ser F sendo que a ligação número 5 é F ($p_5 = 1$, representada por uma linha pontilhada) é igual a $A(\{\eta_i\})$. Observamos que nada é dito sobre que tipo de interação existe para as ligações 1, 2, 3 e 4. Ela pode ser qualquer. Todas as possibilidades devem ser consideradas.

ii) $q_5 = 1 \implies p_5 = r_5 = s_5 = 0$

$$P \left[\begin{array}{c} 1 \text{---} 2 \\ \text{---} \\ 3 \text{---} 4 \end{array} \right] = B(\{\eta_i\}) \quad , \quad (6.3.17)$$

isto é, a probabilidade da célula da Fig. 6.3.5 ser F sendo que a ligação número 5 é AF ($q_5=1$, representada por uma linha tracejada) é igual a $B(\{\eta_i\})$.

iii) $r_5 = 1 \implies p_5 = q_5 = s_5 = 0$

$$P \left[\begin{array}{c} \text{O} \\ \text{---} \\ 3 \text{---} 4 \end{array} \right] = C(\{\eta_i\}) \quad (6.3.18)$$

onde $P \left[\begin{array}{c} \text{O} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right]$ é a probabilidade da célula da Fig. 6.3.5 ser F , sendo que a ligação número 5 está ausente.

iv) $s_5 = 1 \implies p_5 = q_5 = r_5 = 0$

$$P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] = D(\{n_i\}) \quad (6.3.19)$$

onde $P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right]$ é a probabilidade da ligação equivalente da célula da Fig. 6.3.5 ser F sendo que a ligação número cinco é frustrada (esta ligação está representada por uma linha ondulada).

Como $r_5 + s_5 = 1 - p_5 - q_5$ podemos escrever a probabilidade da ligação equivalente da célula ser F da seguinte maneira (para a probabilidade desta ligação ser F ou AF não importa se a ligação com $J = 0$ ($t=0$) é ϕ ou D):

$$P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] = p_5 P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] + q_5 P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] + (1 - p_5 - q_5) P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] \quad (6.3.20)$$

onde $P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] = P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right]$.

O processo pode ser continuado tomando-se, por exemplo, o 1º termo do lado direito da igualdade da eq. (6.3.20). Temos, desta maneira, que

$$P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] = p_1 P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] + q_1 P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] + (1 - p_1 - q_1) P \left[\begin{array}{c} 1 \quad 2 \\ \text{---} \quad \text{---} \\ 3 \quad 4 \end{array} \right] \quad (6.3.21)$$

e assim por diante até esgotar todas as ligações com distribuições de probabilidade e só restar células com todas as ligações "definidas". É interessante notar que em ambas as eqs. (6.3.20) e (6.3.21) o terceiro membro à direita da igualdade é redutível à série-paralelo podendo ser usado os algoritmos dados pelas eqs. (6.3.6)–(6.3.9) e (6.3.10)–6.3.13). Isto é análogo ao "corte" do

método corte-colapso ⁽¹¹⁴⁾. Assim, além de termos uma forma sistemática para calcularmos as probabilidades equivalentes das células, o trabalho para esta célula específica, é reduzido pela metade. Resta analisar o que fazer com as células resultantes compostas somente com ligações definidas (não há nenhuma ligação portadora de uma distribuição de probabilidade). Estas células, compostas de ligações F e AF, têm um estado fundamental (EF) que é o estado no qual o menor número de ligações está insatisfeita que determina o caráter da ligação equivalente da célula. Esta pode ser F (se o EF for F); AF (se o EF for AF) ou ϕ (se a energia do estado F for igual à energia do estado AF). Exemplos destes casos estão exibidos nas Figs. 6.3.6, 6.3.7 e 6.3.8, respectivamente (..... = F, ----- = AF e ~~~~~ = ϕ).

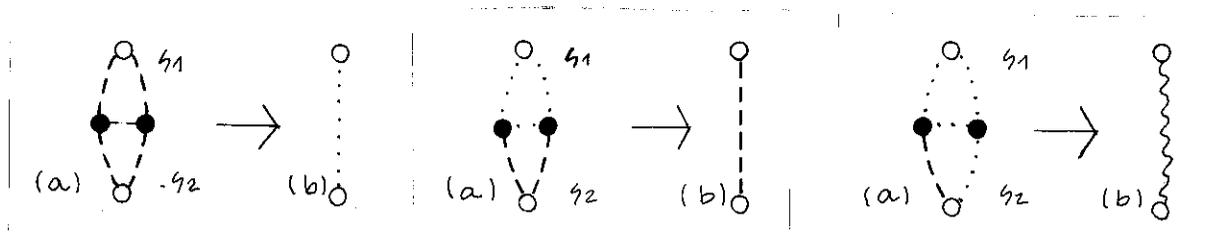


Fig.6.3.6 - A célula (a) com todas as ligações AF se renormaliza numa ligação (b) F.

Fig.6.3.7 - A célula (a) se renormaliza em uma ligação (b) AF.

Fig. 6.3.8 - A célula (a) se renormaliza em uma ligação (b) frustrada.

Veamos, por exemplo, a Fig. 6.3.6. Colocamos os spins S_1 e S_2 paralelos e verificamos qual a configuração com menos ligações insatisfeitas (ver Fig. 6.3.9). Nesta configuração só há uma ligação insatisfeita. Agora tomemos os spins S_1 e S_2 antiparalelos, Fig. 6.3.10. Existem duas ligações insatisfeitas na configuração AF de menor energia. Portanto como estamos a zero graus Kelvin, o sistema prefere a configuração de menor energia, daí esta célula

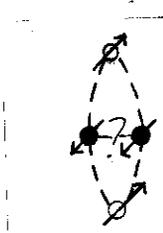


Figura 6.3.9 - Configuração de menor energia F. Só a ligação central está insatisfeita.



Figura 6.3.10 - Configuração de menor energia AF. Há duas ligações insatisfeitas.

la ser renormalizada em uma ligação ferromagnética. O mesmo raciocínio deve ser feito na Fig. 6.3.7. Na Fig. 6.3.8 verificamos que o estado de menor energia F tem uma ligação insatisfeita, o mesmo número que o estado de menor energia AF. Como o sistema não sabe optar, pois ambas têm mesma energia, a célula está totalmente insatisfeita. Então é renormalizada em uma ligação frustrada. Obviamente, quando os spins S_1 e S_2 da Fig. 6.3.6 estão isolados, sem interações a ligá-los mesmo que indiretamente, então a célula é renormalizada em uma ausência de ligação (diluição).

Para calcularmos a probabilidade equivalente da célula da Fig. 6.3.5 ser AF a equação do método é análoga à eq.(6.3.20)

$$Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \quad \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] = p_5 Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad \dots \quad 2 \\ \bullet \quad \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] + q_5 Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \quad \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] + (1-p_5-q_5) Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \quad \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] \quad (6.3.22)$$

onde $Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \quad \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right]$ é a probabilidade da célula entre colchetes ser antiferromagnética sendo que cada uma de suas ligações é portadora de uma distribuição de probabilidade do tipo dado pela equação (6.3.1). Também para este caso temos que

$$Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \quad \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] = Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \quad \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right]$$

Utilizando as eqs. (6.3.20) e (6.3.22) exaustivamente obtemos duas equações,

$$p' \equiv P \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] = p'(p_1, q_1, p_2, q_2, p_3, q_3, p_4, q_4, p_5, q_5) \quad (6.3.23)$$

$$q' \equiv Q \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] = q'(p_1, q_1, p_2, q_2, p_3, q_3, p_4, q_4, p_5, q_5) \quad , \quad (6.3.24)$$

para as probabilidades da ligação equivalente da célula da Figura 6.3.5 ser F ou AF, respectivamente.

Para calcularmos a diluição, necessitamos agora distinguir entre o caso frustrado e o diluído. Assim, para a probabilidade da ligação equivalente da célula da Fig. 6.3.5 estar ausente (diluição), temos a expressão

$$R \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] = p_5 R \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ \dots \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] + q_5 R \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] + s_5 R \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] + r_5 R \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] . \quad (6.3.25)$$

Como r_5 e r_p dados pelas eqs. (6.3.8) e (6.3.12) só envolvem a letra r , quando calcularmos $R \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right]$ obteremos

$$r' \equiv R \left[\begin{array}{c} \circ \\ 1 \quad 2 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 5 \\ \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \bullet \\ 3 \quad 4 \\ \circ \end{array} \right] = r'(r_1, r_2, r_3, r_4, r_5) \quad . \quad (6.3.26)$$

Se fizermos a seguinte substituição:

$$p_1 = p_4 = 2p - p^2 - 2pq \quad (6.3.27a)$$

$$q_1 = q_4 = 2q - q^2 - 2pq \quad (6.3.27b)$$

$$r_1 = r_4 = r^2 \quad (6.3.27c)$$

$$s_1 = s_4 = 2pq + 2rs + s^2 \quad (6.3.27d)$$

$$p_2 = p_3 = p^2 + q^2 \quad (6.3.28a)$$

$$q_2 = q_3 = 2pq \quad (6.3.28b)$$

$$r_2 = r_3 = 2r-r^2 \quad (6.3.28c)$$

$$s_2 = s_3 = 2(p+q)s + s^2 \quad (6.3.28d)$$

e

$$p_5 = p \quad (6.3.29a)$$

$$q_5 = q \quad (6.3.29b)$$

$$r_5 = r \quad (6.3.29c)$$

$$s_5 = s \quad , \quad (6.3.29d)$$

obteremos a probabilidade da ligação equivalente da célula mostrada na Fig. 6.3.1 ser F (p'), AF (q') ou diluída (ausente) (r'). A probabilidade equivalente desta célula ser frustrada (s') é deduzida das anteriores utilizando-se a eq. (6.3.4). É fácil se compreender porque as equações acima fornecerão os resultados para a célula da Fig. 6.3.1 pois as eqs. (6.3.27) dizem que as ligações 1 e 4 são iguais entre si e iguais a duas ligações em paralelo cada uma das quais portando uma distribuição de probabilidade

$$P(t_{ij}) = p\delta(t_{ij}-1) + q\delta(t_{ij}+1) + r\delta(t_{ij}) + s\delta(t_{ij}) \quad . \quad (6.3.30)$$

As eqs. (6.3.28) dizem que as ligações 2 e 3 são iguais entre si e iguais a duas ligações em série, cada uma das quais portando a distribuição de probabilidade dada pela eq. (6.3.30). Finalmente, as eqs. (6.3.29) nos dizem que a ligação 5 porta a distribuição dada pela eq. (6.3.30). Assim, se substituirmos nas eqs.

(6.3.23), (6.3.24) e (6.3.25) as relações dadas pelas equações (6.3.27), (6.3.28) e (6.3.29) obteremos as equações

$$\begin{aligned} p' = & 24pq^2 - 24pq^3 - 30pq^4 + 84pq^6 - 72pq^7 + 18pq^8 - 30p^2q^2 + \\ & - 50p^2q^3 + 84p^2q^4 + 262p^2q^5 - 394p^2q^6 + 140p^2q^7 + \\ & + 8p^3 - 12p^3q - 26p^3q^2 + 36p^3q^3 + 398p^3q^4 - \\ & - 832p^3q^5 + 400p^3q^6 - 6p^4 - 28p^4q + 60p^4q^2 + \\ & + 386p^4q^3 - 973p^4q^4 + 612p^4q^5 - 6p^5 + 12p^5q + \\ & + 218p^5q^2 - 748p^5q^3 + 588p^5q^4 + 96p^6q + \\ & - 376p^6q^2 + 372p^6q^3 + 12p^7 - 100p^7q + \\ & + 144p^7q^2 - 9p^8 + 28p^8q + 2p^9 \end{aligned} \tag{6.3.31}$$

$$\begin{aligned} q' = & 8q^3 - 6q^4 - 6q^5 + 12q^7 - 9q^8 + 2q^9 - 12pq^3 - 28pq^4 + \\ & + 12pq^5 + 96pq^6 - 100pq^7 + 28pq^8 + 24p^2q - 30p^2q^2 - \\ & - 26p^2q^3 + 60p^2q^4 + 218p^2q^5 - 376p^2q^6 + 144p^2q^7 - \\ & - 24p^3q - 50p^3q^2 + 36p^3q^3 + 386p^3q^4 - 748p^3q^5 + \\ & + 372p^3q^6 - 30p^4q + 84p^4q^2 + 398p^4q^3 - 973p^4q^4 + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 588p^4q^5 + 262p^5q^2 - 832p^5q^3 + 612p^5q^4 + 84p^6q + \\
 & + 394p^6q^2 + 400p^6q^3 - 72p^7q + 140p^7q^2 + 18p^8q \quad (6.3.32)
 \end{aligned}$$

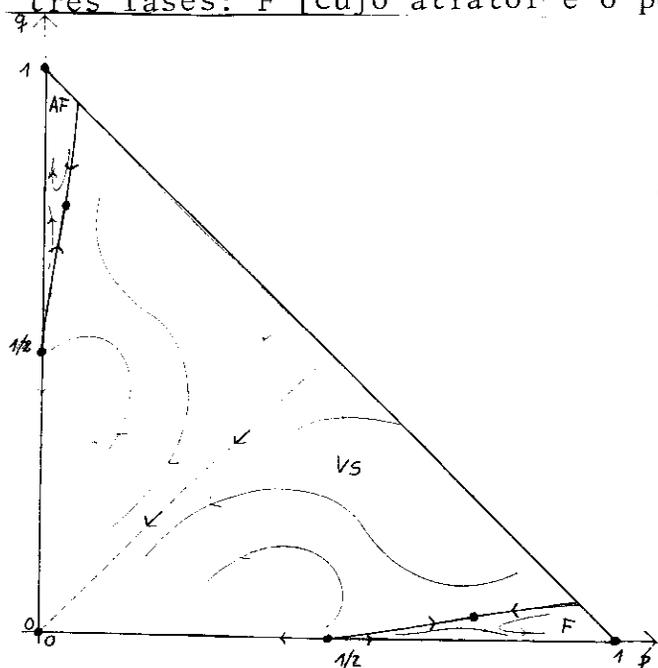
$$r' = 8r^3 - 6r^4 - 6r^5 + 12r^7 - 9r^8 + 2r^9 \quad , \quad (6.3.33)$$

que representam a renormalização indicada na Fig. 6.3.2 ($s' = 1 - p' - q' - r'$). As eqs. (6.3.31), (6.3.32) e (6.3.33), completam o problema a zero graus Kelvin pois fornecem um mapeamento do espaço constituído por (p, q, r) nele mesmo. Assim,

$$(p, q, r) \rightarrow (p', q', r') \rightarrow (p'', q'', r'') \rightarrow \dots \quad (6.3.34)$$

Para estudarmos o diagrama de fases neste espaço tridimensional faremos vários cortes no mesmo.

Façamos primeiro $r = 0$. Teremos assim um mapeamento de uma região do plano (p, q) nele mesmo. Esta região com o seu diagrama de fluxos está mostrada na Fig. 6.3.11. Vemos que existem três fases: F [cujo atrator é o ponto $(p=1, q=0)$]; AF (cujo atrator é o ponto $(p=0, q=1)$ e VS [cujo atrator é o ponto $(p=0, q=0)$]. As linhas $p=0$ $q \in [0, 1]$ ou



tor é o ponto $(p=0, q=1)$ e VS [cujo atrator é o ponto $(p=0, q=0)$]. As linhas $p=0$ $q \in [0, 1]$ ou

Figura 6.3.11 - Diagrama de fases a 0^0K sem diluição. Os fluxos são simétricos se fizermos $p \leftrightarrow q$. Os pontos fixos são representados por círculos (●). F, AF e VS são as fases ferromagnéticas, antiferromagnéticas e vidro de spin, respectivamente.

$q = 0$, $p \in [0,1]$ são como o problema de percolação de ligações na rede quadrada. Em consequência, o ponto fixo ($p=0.5$, $q=0$, por exemplo) de percolação de ligações em rede quadrada emerge. A fronteira crítica F-VS ou AF-VS tem um ponto crítico que é estável em relação ao ponto fixo de percolação, mostrando que os expoentes críticos destas transições não são os de percolação (pertencem à outra classe de universalidade). Note que se tomarmos um ponto pertencente à reta $p+q=1$ ($r=0$), pontos estes diferentes dos atratores das fases F e AF, na próxima iteração, estes pontos se afastarão desta reta, penetrando na região delimitada pelos três atratores. Nesta região, s é diferente de zero indicando que, mesmo iniciando com um sistema onde só existam ligações F e AF presentes, se o sistema é olhado com outra escala de comprimento (maior que o parâmetro de rede), surgem as frustrações. Assim, o espaço de parâmetros do G.R. deve incluir a "ligação frustrada" como definida na eq. (6.2.5) pois o subespaço dado pela distribuição

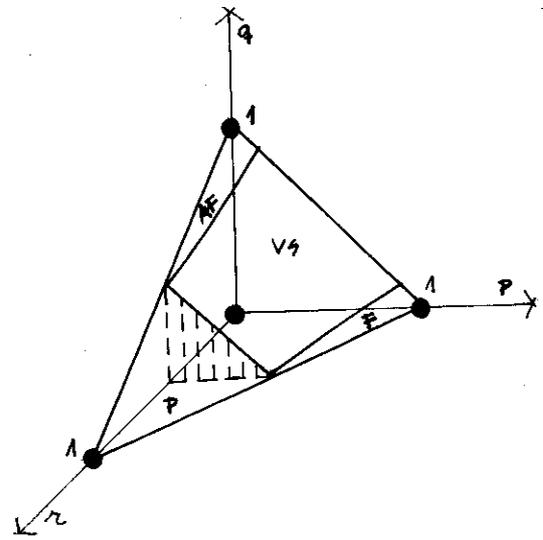
$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij}-J) + q\delta(J_{ij}+J) + r\delta(J_{ij}) \quad (6.3.35)$$

não é invariante sob as transformações do GR. Este é outro forte argumento a favor da separação feita na eq. (6.2.5).

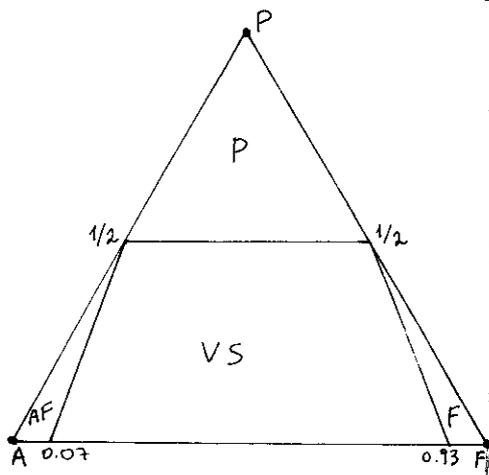
Estudemos agora $r \neq 0$, ver Fig. 6.3.12.

Verificamos que existem agora quatro fases. A fase paramagnética (cujo atrator é o ponto $r=1$), a fase ferromagnética (cujo atrator é o ponto $p=1$), a fase antiferromagnética (cujo atrator é o ponto $q=1$) e a fase vidro de spin (por nós identificada com a fase frustrada) cujo atrator é o ponto $p=q=r=0$. Desta maneira, observamos que a separação feita entre a ausência de li

Figura 6.3.12 - Diagrama de fases com diluição à temperatura nula. Os pontos fixos atratores das diversas fases estão assinalados por (●). P indica a fase paramagnética.



gação (r) e a frustração (s) é suficiente para fazer aparecer uma nova fase a zero graus Kelvin, que é a fase vidro de spin. Novamente o subespaço correspondente ao plano $p+q+r = 1$ ($s = 0$), mostrado na Fig. 6.3.13, não é invariante. Se tomarmos um ponto que esteja sobre este plano e que não seja um ponto fixo, na iteração seguinte o ponto imagem estará fora do plano (mas dentro do tetraedro limitado pelos quatro atratores das fases). É interessante observar que o ponto de



transição de fase F-VS, sem diluição, ver Fig. 6.3.13, tem sido calculado por diversos outros autores (199,200),

Figura 6.3.13 - Diagrama de fases à temperatura nula para o plano $p+q+r = 1$. As distâncias de cada ponto dentro do plano aos lados PA, PF e AF são p, q e r, respectivamente.

por métodos diversos e os valores encontrados para p_c são da ordem de 0.90 ou um pouco menos, em contraste com o nosso valor de $p_c = 0.93$. Este valor é devido, certamente, à simplicidade da célula que usamos. Esperamos que, se aumentarmos o tamanho da célula, o valor de p_c diminuirá. Portanto, apesar de quantitativamente o GR ter um erro menor que 5% (embora não se saiba o valor exato), o resultado qualitativo, dife-

renciando o efeito de percolação (ausência) do efeito da frustração, com o surgimento da fase vidro de spin associada à frustração é, a nosso ver, muito interessante.

6.4 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO PARA $T \neq 0$

A renormalização que faremos será a mostrada na Fig. 6.3.2, onde cada ligação da célula (mostrada na Fig. 6.3.1) portará uma distribuição de probabilidade

$$P(t_{ij}) = p\delta(t_{ij}-t) + q\delta(t_{ij}+t) + r\delta(t_{ij}) + s\delta(t_{ij}). \quad (6.4.1)$$

Esta célula será renormalizada em uma única ligação cuja distribuição será:

$$P'(t_{ij}) = p'\delta(t_{ij}-t') + q'\delta(t_{ij}+t') + r'\delta(t_{ij}) + s'\delta(t_{ij}) \quad . \quad (6.4.2)$$

Faremos esta renormalização em duas etapas: primeiro sem diluição e posteriormente com diluição.

a) Sistema sem Diluição ($r = r' = 0$)

As distribuições de probabilidade das ligações da célula (da ligação equivalente) serão as fornecidas pelas eqs. (6.4.1) [eq. (6.4.2)] fazendo-se $r = 0$ ($r'=0$). Vemos que a célula da Figura 6.3.1 poderá ter, neste caso, $3^9 = 19683$ possibilidades diferentes de arranjo das ligações. A cada um destes pode-se associar uma função $R_2^{(\alpha)}(t) = N^{(\alpha)}(t)/D^{(\alpha)}(t)$ ($\alpha = 1, 2, \dots, 3^9$) que

resulta do traço parcial sobre os spins "internos" da célula da Fig. 6.3.1 para aquele particular arranjo das ligações. As funções $N^{(\alpha)}(t)$ e $D^{(\alpha)}(t)$ são polinômios em t . Haverá, assim, uma distribuição de probabilidade para a ligação equivalente da célula da seguinte forma:

$$P_{eq} = \sum_{\{\alpha\}} p^k q^\ell (1-p-q)^{9-k-\ell} \delta\{t_{ij} - R^{(\alpha)}(t)\} \quad , \quad (6.4.3)$$

onde $\sum_{\{\alpha\}}$ é a soma sobre todas as 3^9 maneiras possíveis de se colocar as ligações F, AF e ϕ lembrando-se que $s = 1-p-q$. Fica subentendido que se o arranjo de ligações α tem k ligações F e ℓ ligações AF, então estas serão as potências de p e q , respectivamente. É claro que a soma dos expoentes de p , q e s deve ser igual ao número de ligações da célula (9). Desta maneira, verificamos que, se inicialmente tínhamos uma distribuição [eq.(6.4.1)] com somente 3 deltas de Dirac para cada ligação, a distribuição equivalente para a célula estudada tem muitas deltas de Dirac diferentes (o número de deltas é menor que 3^9 porque muitas são iguais entre si). Dizer que a distribuição de probabilidade da ligação equivalente da célula [dada pela eq. (6.4.3)] é igual a $P'(t)$ [dada pela eq. (6.4.2)], implica em cortar o espaço das distribuições, espaço este que aumenta após cada aplicação do GR. Como $P_{eq}(t)$ e $P'(t)$ são diferentes, podemos impor que pelo menos os seus primeiros momentos sejam iguais (64 , 55), isto é,

$$\langle t_{ij} \rangle_{P_{eq}(t)} = \langle t_{ij} \rangle_{P'(t')} \quad , \quad (6.4.4)$$

onde $P'(t')$ é dado pela eq. (6.4.2) fazendo $r' = 0$.

As eqs. (6.4.2) e (6.4.4) nos fornecem

$$p't' - q't' = F(p, q, t) \equiv \langle t \rangle_{P_{eq}}(t) \quad (6.4.5)$$

portanto:

$$t' = \frac{F(p, q, t)}{p' - q'} \quad (6.4.6)$$

As eqs. (6.3.31), (6.3.32), (6.4.6) nos fornecem um mapeamento do espaço (p, q, t) nele mesmo completando o problema sem diluição. O diagrama de fases está mostrado na Fig. 6.4.1.

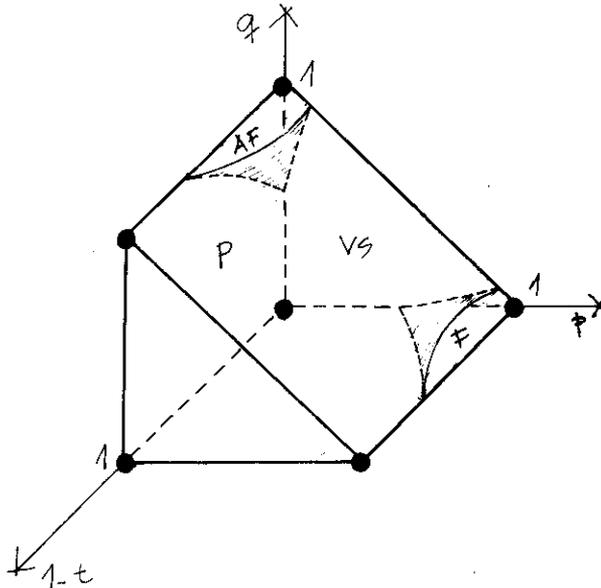


Figura 6.4.1 - Diagrama de fases para o sistema sem diluição. Existem quatro fases F, AF, VS e P. A fase VS só existe à temperatura nula ($t=1$).

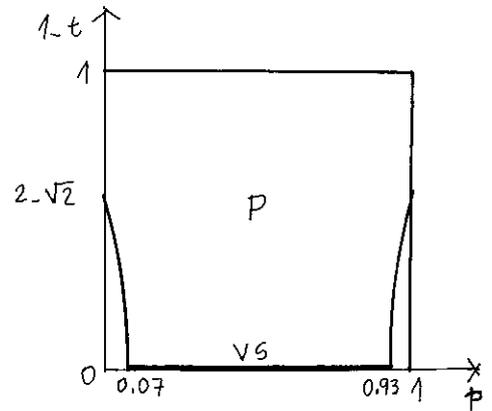
O plano $p+q = 1$ ($s = 0$) está mostrado na Fig. 6.4.2. Este plano é instável sob renormalização à exceção de seus pontos fixos.

Assim, qualquer ponto sobre o plano se afastará do mesmo após uma iteração (s será diferente de zero).

Desta maneira, este GR assim construído reforça a opinião, hoje majoritária, de que só existe vidro de spin no modelo de Ising bidimensional à temperatura nula (196,201,61).

Os primeiros trabalhos teóricos com interações de curto alcance assumiam distribuições de probabilidade com deltas de Dirac $+J$ e $-J$ somente, além de trabalharem com a variável $K = J/k_B T$ ao invés da variável $t = \tanh K$ (202 - 204). Posteriormente, verificou-se que a adoção de uma delta de Dirac na origem (196,61,197)

Figura 6.4.2 - Diagrama de fases no plano $p+q=1$ ($s=0$). A fase VS existe somente à temperatura nula ($t=1$).



era necessária para se evitar efeitos espúrios e era interpretada como representando a diluição do sistema, embora se reconhecesse que a separação entre a frustração e a diluição não era realizada. Assim, este trabalho reinterpreta a delta na origem como sendo constituída de dois efeitos bem diferentes e obtém as fases correspondentes a estes efeitos. A aplicação destes conceitos em três dimensões será interessante, em particular poderá confirmar ou não o resultado de Benyoussef e Boccara ⁽¹⁹⁷⁾ sobre a não-existência de VS à temperatura finita para o modelo de Ising tridimensional.

b) Sistema com Diluição ($r \neq 0$)

A distribuição de probabilidade de cada ligação da célula da Fig. 6.3.1 será a mostrada na eq. (6.4.1). A célula será renormalizada em uma ligação cuja distribuição será a dada pela eq. (6.4.2). Agora teremos $4^9 = 262144$ possibilidades de arranjo destas ligações. A cada um destes arranjos haverá uma função

$$R^{(\beta)}(t) = \frac{N^{(\beta)}(t)}{D^{(\beta)}(t)} \quad \beta = 1, 2, \dots, 4^9 \quad (6.4.7)$$

que se obtém quando se faz o traço parcial sobre os spins internos da célula da Fig. 6.3.1 para o arranjo β de ligações. A distribuição equivalente para a célula será

$$P_{eq} = \sum_{\{\beta\}} p^k q^\ell r^m (1-p-q-r)^{9-k-\ell-m} \delta(t_{ij} - R^{(\beta)}(t)) \quad , \quad (6.4.8)$$

onde $\sum_{\{\beta\}}$ indica a soma sobre todas as 4^9 maneiras possíveis de se colocar as ligações F, AF, ϕ e D lembrando-se que $s = 1-p-q-r$. Se em um particular arranjo de ligações β o número de ligações F é k , de AF é ℓ , de D é m , então estas serão as potências de p , q e r , respectivamente. Novamente verificamos que a distribuição de probabilidade para a ligação equivalente da célula tem várias deltas de Dirac. Assim, supor que a distribuição equivalente é dada pela eq. (6.4.2) implica em limitar o espaço das distribuições. Vamos impor que os primeiros momentos das distribuições dadas pelas eqs. (6.4.2) e (6.4.8) sejam iguais, isto é,

$$\langle t_{ij} \rangle_{P_{eq}} = \langle t_{ij} \rangle_P \quad . \quad (6.4.9)$$

A eq. (6.4.9) e as eqs. (6.3.31), (6.3.32) e (6.3.33) nos fornecem um mapeamento do espaço (p, q, r, t) nele mesmo completando a estrutura do GR. Um possível corte neste espaço está mostrado na Fig. 6.4.3. A região onde $r > 0.5$ pode ser chamada de região "não-percolante" visto não poder existir ali nenhuma ilha de

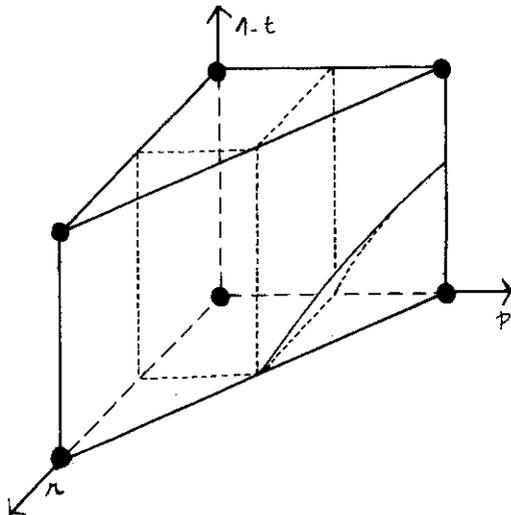


Figura 6.4.3 - Corte no espaço de parâmetros fazendo $q = 0$. Os círculos cheios representam os pontos fixos. A fase VS só existe na região compreendida entre $r < 0.5$, $p < 0.5$ e $t = 1$. A fase F está compreendida na região sombreada e cujo atrator é o ponto $p = 1$, $r = 0$ e $t = 1$.

tamanho infinito. Na região compreendida entre $r < 0.5$ e $p < 0.5$ existe uma ilha infinita de ligações frustradas com duas "fases" caracterizadas pela existência de dois atratores, um no ponto $p = r = 0, t = 1$ (fase VS) e o outro no ponto $p = r = 0, t = 0$ (fase paramagnética). O plano $p = 0.5$ simplesmente separa as regiões onde a ilha infinita é constituída de ligações frustradas ($p < 0.5$) ou de ligações ferromagnéticas ($p > 0.5$). Na região onde $p > 0.5$ existe a fase F (cujo atrator é o ponto $p=1, r=0$ e $t=1$) e a fase paramagnética (cujo atrator é o ponto $p=1, r=t=0$). Os diferentes atratores da fase P representam o mesmo estado físico macroscópico.

6.5 - CONCLUSÃO

Estudamos a fase vidro de spin analisando o modelo de Ising de spin $1/2$, isotrópico, com interações entre primeiros vizinhos na rede quadrada. Supomos a existência de interações aleatórias e competitivas. Utilizando o GR no espaço real, escolhemos células auto-duais (para este modelo) que nos permitem obter alguns pontos críticos exatos (de percolação de ligações e de Ising puro) como casos particulares, qualquer que seja o tamanho da célula. Os algoritmos de composição de ligações (interações) em série-paralelo nos permitem distinguir, operacionalmente, entre o efeito de frustração e o efeito de diluição (associado a conceitos de percolação). Isto nos permitirá obter as fases correspondentes à frustração (vidro de spin) e à diluição (paramag-

nética), separação esta até agora não realizada teoricamente. Verificamos que a fase vidro de spin só existe na rede quadrada à temperatura nula, surgindo entre a fase antiferromagnética e a ferromagnética assim que a concentração de interações (ligações) ferromagnéticas aumenta, diminuindo conseqüentemente a concentração de ligações antiferromagnéticas. As fases ferromagnética e antiferromagnética existem em temperaturas finitas para valores adequados das concentrações. Os resultados numéricos obtidos pelo GR são bastante razoáveis devido à simplicidade da célula utilizada fornecendo, por exemplo, para a concentração crítica de ligações ferromagnéticas acima da qual surge a fase ferromagnética, à temperatura nula, um valor que apresenta um erro menor que 5% em relação às melhores estimativas numéricas existentes.

A aplicação do método desenvolvido neste trabalho em células maiores do que a utilizada (ver Fig. 6.3.1, cuja célula corresponde ao tamanho $b=2$) para tentar melhorar quantitativamente os resultados, é possível [a célula correspondente a $b=3$ está contida no artigo de Oliveira e Tsallis⁽²⁰⁵⁾], embora extremamente árdua. Outra aplicação interessante da separação feita entre frustração e diluição é em redes tridimensionais. Em particular, se poderá verificar se esta separação é (ou não) suficiente para originar a fase VS para temperaturas finitas.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÕES

No transcorrer deste trabalho utilizamos o grupo de re-normalização (GR) no espaço real para calcularmos diversas propriedades relacionadas com sistemas puros ou desordenados. Para o modelo de Ising puro, calculamos a tensão superficial longitudinal associada a redes hipercúbicas. Em duas dimensões ($d=2$) a solução exata para a tensão é conhecida e serve como teste para o método. Verificamos que a tensão obtida pelo GR tende à exata quando o tamanho da célula (b), utilizada pelo GR, aumenta. Os limites assintóticos da célula para baixas e altas temperaturas nos permitem obter os comportamentos assintóticos analíticos da tensão fornecida pelo GR. No limite adequado ($b \rightarrow \infty$) os comportamentos assintóticos do GR reproduzem os exatos, evidenciando a propriedade do método. Diversos procedimentos de extrapolação foram desenvolvidos fornecendo, para os melhores, erros menores que 3% para todo o intervalo de temperatura. A tensão superficial longitudinal $\gamma^{(d)}$ em redes hipercúbicas ($d > 2$) não é conhecida, justificando a aplicação do método desenvolvido em duas para dimensões superiores. Obtivemos os comportamentos assintóticos para baixas temperaturas da tensão superficial (de maneira análoga à feita em duas dimensões) em função da dimensão. Acreditamos que sejam os comportamentos assintóticos exatos, o que poderá ser confirmado, por exemplo, por futuros trabalhos de séries de baixas temperaturas. A com

paração entre estes comportamentos (onde normalizamos a temperatura pela temperatura crítica da dimensão correspondente) nos indica que a relação $\gamma^{(d)} > \gamma^{(d+1)}$ é satisfeita para $d > 2$. Os resultados numéricos confirmam esta relação. A tensão em duas dimensões apresenta, assim, um comportamento anômalo se comparada com dimensões superiores. Isto se deve às propriedades topológicas particulares desta dimensão. A aplicação dos procedimentos de extrapolação desenvolvidos em duas dimensões é feita em três e quatro dimensões, fornecendo-nos propostas numéricas para a tensão superficial, em todo o intervalo de temperatura, que certamente estarão bastante próximos da (desconhecida) solução exata.

As analogias apresentadas entre o comprimento de correlação ξ e a tensão superficial nos sugerem também o estudo do comportamento de ξ com a dimensão. Isto é feito em um modelo mais abrangente que o de Ising, que é o modelo de Potts. Assim, estudamos o comprimento de correlação deste modelo, puro, com q estados, em redes hipercúbicas. Em duas dimensões (onde a solução exata só é conhecida para $q=2$) obtemos os comportamentos assintóticos de alta ($T \gg T_c$) e baixa ($T \ll T_c$) temperatura em função de q ($\forall q$). Estes comportamentos são também inéditos (com exceção de $q=2$, com o qual concordam), pelo menos em nosso conhecimento. A variação de ξ com q para uma temperatura fixa (onde normalizamos a temperatura pela temperatura crítica do número de estados q correspondente) é estudada e mostra que o comprimento de correlação aumenta quando o número de estados q diminui. Em três dimensões obtivemos os dois primeiros termos assintóticos de ξ em altas e baixas temperaturas para $q=2$. Em altas temperaturas eles concordam com o comportamento assintótico existente obtido de séries e em baixas temperaturas eles são inéditos. O primeiro ter-

mo assintótico de ξ em baixas temperaturas é obtido para qualquer dimensão. A sua análise nos leva a concluir que, para um q fixo e próximo da temperatura nula, o comprimento de correlação é tanto maior quanto maior for a dimensão.

Retornando ao modelo de Ising, observamos que, contra riamente ao modelo puro, onde as constantes de acoplamento têm lo calização bem definida na rede, os sistemas desordenados podem ser simulados, por exemplo, por uma incerteza na localização destas constantes de acoplamento. A distribuição de probabilidade sobre a constante de acoplamento (que, matematicamente, exprime a incer teza sobre esta) pode admitir interações competitivas ou não (admitindo ou não frustrações). Considerando o problema sem frus- trações, assumimos uma distribuição de probabilidade para a cons- tante de acoplamento do modelo de Ising na rede quadrada que admi- te somente dois valores, J_1 e J_2 , positivos. A superfície crítica deste modelo, que não é conhecida a não ser em alguns pontos (cor- respondentes a pontos de percolação e de Ising puros), é obtida numericamente pelo GR. Devido à existência de um limite superior e inferior para a superfície crítica exata, é possível estimar o erro da aproximação numérica, sendo ele inferior a 10^{-3} nas vari- áveis t ($= \tanh J/k_B T$) para qualquer ponto da superfície. Os pon- tos exatos conhecidos estão contidos na superfície obtida pelo GR. Uma proposta analítica (heurística) é formulada para esta superfí- cie, também englobando todos os pontos exatos e apresentando uma margem de erro da ordem da anterior.

Para o problema com frustrações, assumimos uma distri- buição de probabilidade para a constante de acoplamento do modelo de Ising na rede quadrada que admite os valores $\pm J$ e 0 (zero). De- vido à existência de interações competitivas aleatórias, existe o

efeito de frustração no sistema. Propomos uma reinterpretação do valor zero da constante de acoplamento, separando nela os efeitos da frustração do da diluição (distinção esta ainda não realizada teoricamente, pelo que é de nosso conhecimento). Esta separação, original em nosso modo de ver, permite obter, no diagrama de fases do modelo, o vidro de spin (fase frustrada). Este estado, como fase de equilíbrio termodinâmico, só existe a zero graus Kelvin, concordando com a opinião geral existente atualmente para modelos bidimensionais. Para o modelo à temperatura nula e sem diluição, o valor da concentração de ligações ferromagnéticas abaixo da qual desaparece a fase ferromagnética (surgindo a fase vidro de spin) é calculado ($p_c \approx 0.93$), apresentando uma diferença de 5% em relação às melhores estimativas existentes. Certamente, a consideração de células maiores no GR melhorarão este valor. Desenvolvemos também um novo método gráfico para calcularmos as probabilidades e transmissividades equivalentes de células que apresentem ligações competitivas (existindo frustração), simplificando consideravelmente o cálculo das mesmas. Este método estende o corte-colapso para o caso de interações competitivas. A importância da separação teórica entre a frustração e a diluição pode ser visualizada claramente no GR pelo seguinte argumento: considerando um subespaço (do espaço dos parâmetros) onde a frustração é zero, este subespaço não é invariante sob as transformações do GR, implicando que, se iniciamos com um ponto sobre este subespaço, o ponto imagem se situará em uma região onde existe frustração. Desta maneira a frustração é um parâmetro relevante e não pode ser ignorada, evidenciando a necessidade e a importância de uma distinção clara entre os efeitos de diluição e frustração.

Como extensões naturais deste trabalho estariam, por exemplo, a consideração da parte não singular e do campo magnético na renormalização, pertindo-nos estudar o calor específico, a magnetização espontânea, a susceptibilidade, etc. Poderíamos obter os comportamentos assintóticos destas funções termodinâmicas em alta e baixa temperatura para o modelo de Potts em redes hiper-cúbicas (ou outras), geralmente não conhecidas. A análise destes comportamentos nos forneceria informações sobre a influência da dimensão sobre elas. Em sistemas desordenados sem frustração, a fronteira crítica de sistemas tridimensionais tipo Ising poderia ser obtida e estudada a sua classe de universalidade. Em sistemas desordenados com frustrações, seria interessante estudar o impacto do efeito causado pela separação teórica entre frustração e diluição (desenvolvida neste trabalho) para problemas tridimensionais, onde existe maior polêmica do que em duas dimensões sobre a existência ou não da fase vidro de spin. Finalmente, cálculos semelhantes poderão ser feitos para outros tipos de Hamiltonianos como XY e Heisenberg (clássicos ou quânticos) por exemplo.

APÊNDICE A

MÉTODO CORTE-COLAPSO

A transmissividade do modelo de Potts é dada pela equação

$$t_q^{(i)} = \frac{1 - e^{-qJ_i/k_B T}}{1 + (q-1) e^{-qJ_i/k_B T}}, \quad (\text{A.1})$$

que se reduz à transmissividade de Ising,

$$t_i = \frac{1 - e^{-2J_i/k_B T}}{1 + e^{-2J_i/k_B T}}, \quad (\text{A.2})$$

se $q = 2$. O arranjo de duas ligações em série, cada uma delas com uma transmissividade $t_q^{(i)}$ $i = 1, 2$ (ver Fig. A.1a) apresenta, como transmissividade equivalente total $t_q^{(s)}$, obtida após se fazer o traço parcial sobre os q estados do spin central (S_3), a expressão

$$t_q^{(s)} = t_q^{(1)} \cdot t_q^{(2)}. \quad (\text{A.3})$$

A transmissividade equivalente para duas ligações em paralelo ($t_q^{(p)}$) (ver Fig. A.1b) é dada pela expressão

$$\left[t_q^{(p)} \right]^D = \left[t_q^{(1)} \right]^D \cdot \left[t_q^{(2)} \right]^D \quad (\text{A.4})$$

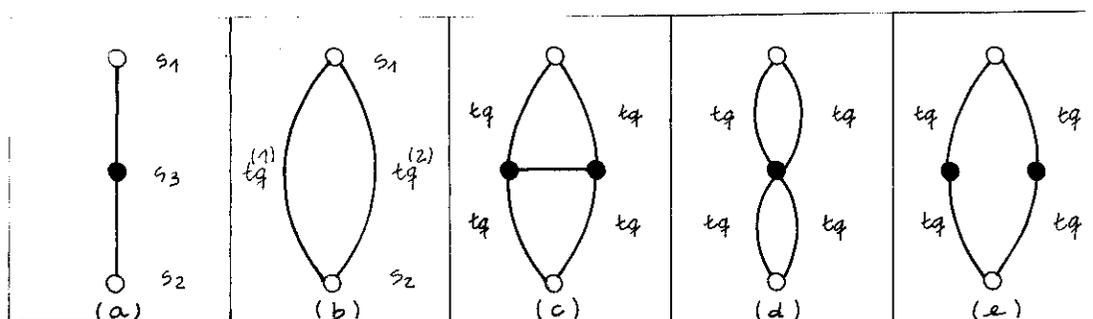


Figura A.1 - Grafos de dois terminais. Os círculos cheios (vazios) representam os sítios internos (externos) do grafo.

onde

$$t_q^D \equiv \frac{1 - t_q}{1 + (q-1)t_q} \quad (A.5)$$

é a variável dual da transmissividade ^(114,39), a qual mapeia a região de alta em baixa temperatura do modelo de Potts bidimensional. O método corte-colapso ^(164,114) calcula a transmissividade equivalente [que chamamos de $G(\{t_q^{(i)}\})$] de qualquer grafo com dois terminais, sejam eles redutíveis ou não a arranjos em série-paralelo. Vamos supor, no caso geral, um grafo de dois terminais com transmissividades $t_q^{(i)}$. Então $G(\{t_q^{(i)}\}) = N(\{t_q^{(i)}\}) / D(\{t_q^{(i)}\})$, onde o numerador N e o denominador D são, ambos, funções multilineares dos $\{t_q^{(i)}\}$. Escolhemos a j 'ésima ligação do conjunto $\{t_q^{(i)}\}$ e a "cortamos" ("colapsamos"), isto é, assumimos $t_q^{(j)} = 0$ ($t_q^{(j)} = 1$). Temos então novas transmissividades equivalentes, $G_j^{(0)}$ ($G_j^{(1)}$), que são dadas por

$$G_j^{(0)}(\{t_q^{(i)}\}') = N_j^{(0)}(\{t_q^{(i)}\}') / D_j^{(0)}(\{t_q^{(i)}\}') \quad (A.6)$$

$$[G_j^{(1)}(\{t_q^{(i)}\}') = N_j^{(1)}(\{t_q^{(i)}\}') / D_j^{(1)}(\{t_q^{(i)}\}')] \quad (A.7)$$

onde o conjunto $\{t_q^{(i)}\}'$ exclui $t_q^{(j)}$. A multilinearidade de N e

D implica que

$$N(\{t_q^{(i)}\}) = (1-t_q^{(j)}) N_j^{(0)} (\{t_q^{(i)}\}') + t_q^{(j)} N_j^{(1)} (\{t_q^{(i)}\}') \quad (A.8)$$

e

$$D(\{t_q^{(i)}\}) = (1-t_q^{(i)}) D_j^{(0)} (\{t_q^{(i)}\}') + t_q^{(j)} D_j^{(1)} (\{t_q^{(i)}\}') . \quad (A.9)$$

A utilização exaustiva das eqs. (A.8) e (A.9) constitui o que é chamado método corte-colapso. Se a ligação a ser cortada (colapsada) apresenta, ela própria, denominador diferente de 1, então as equações acima se alteram, fornecendo, por exemplo para o numerador [onde assumimos que $t_q^{(j)} = N^{(j)}/D^{(j)}$], a expressão:

$$N(\{t_q^{(i)}\}) = (D^{(j)} - N^{(j)}) N_j^{(0)} (\{t_q^{(i)}\}') + N^{(j)} N_j^{(1)} (\{t_q^{(i)}\}') , \quad (A.10)$$

havendo uma expressão similar para o denominador. Obviamente, se $q = 2$ os resultados obtidos se referem ao modelo de Ising. Os traços parciais sobre os sítios internos dos grafos são realizados automaticamente. Como exemplo vamos calcular a transmissividade equivalente do grafo mostrado na Fig. A.1c. Os grafos colapsado e cortado estão mostrados nas Figs. A.1d e A.1e, respectivamente, onde temos atuado sobre a ligação central da Fig. A.1c. Obtemos

$$G^{(0)}(t_q) = \frac{N^{(0)}(t_q)}{D^{(0)}(t_q)} = \frac{2t_q^2 + (q-2)t_q^4}{1 + (q-1)t_q^4} \quad (A.11)$$

e

$$G^{(1)}(t_q) = \frac{N^{(1)}(t_q)}{D^{(1)}(t_q)} = \frac{4t_q^2 + 4(q-2)t_q^3 + (q-2)^2 t_q^4}{1 + 2(q-1)t_q^2 + (q-1)^2 t_q^4} . \quad (A.12)$$

Portanto,

$$G(t_q) = \frac{2t_q^2 + 2t_q^3 + 5(q-2)t_q^4 + (q-2)(q-3)t_q^5}{1 + 2(q-1)t_q^3 + (q-1)t_q^4 + (q-1)(q-2)t_q^5}, \quad (\text{A.13})$$

que é igual ao resultado de $R_2(t_q; q)$ mostrado na eq. (4.3.3).

BIBLIOGRAFIA

- (1) - Vários autores, "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S. Green (Academic Press, London, New York) vols. 1 a 6, (1972).
- (2) - Stanley H.E., "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena" (Clarendon Press, Oxford)(1971).
- (3) - Lenz W., "Beitrag zum Verständnis der Magnetischen Erscheinungen in Festen Körpern", Physik Z. 21 (1920) 613.
- (4) - Brush S.G., "History of the Lenz-Ising Model", Rev. of Modern Physics 39 (1967) 883.
- (5) - Langevin P., "Sur la Théorie du Magnétisme", J. Physique Theo. Appl., 4 (1905) 678.
- (6) - Gottfried K., "Quantum Mechanics" (W.A. Benjamin, New York, Amsterdam)(1966) Vol. I, pág. 170.
- (7) - Uhlenbeck G.E. e Goudsmit S., "Ersetzung der Hypothese von Unmechanischen Zwang durch eine Forderung Bezüglich des inneren Verhaltens jedes einzelnen Elektrons", Naturwissenschaften 13 (1925) 953.
- (8) - Ising E., "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus", Z. Physik 31 (1925) 253.
- (9) - Peierls R., "On Ising's Model of Ferromagnetism", Proc. Cambridge Phil. Soc. 32 (1936) 477.
- (10) - Bethe H.A., "Statistical Theory of Superlattices", Proc. Roy. Soc. (London) A 150 (1935) 552.
- (11) - Fowler R.H., "Adsorption Isotherms. Critical Conditions", Proc. Cambridge Phil. Soc. 32 (1936) 144.
- (12) - Peierls R., "Statistical Theory of Adsorption with Interaction Between the Adsorbed Atoms", Proc. Cambridge Phil. Soc. 32 (1936) 471.
- (13) - Holmes L.M., van Uitert L.G. e Hull G.W., "Magnetoelectric effect and Critical Behavior in the Ising-like antiferromagnet, DyAlO_3 ", Solid St. Comm. 9 (1971) 1373.

- (14) - Norvell J.C. e Wolf W.P., "Magnetic Neutron Scattering in Dysprosium Aluminum Garnet. II. Short-Range Order and Critical Scattering", Phys. Rev. 186 (1969) 567.
- (15) - Breed D.J., Gilijamsen e Miedema A.R., "Magnetic Properties of K_2CoF_4 and Rb_2CoF_4 ; Two-dimensional Ising Antiferromagnets", Physica 45 (1969) 205.
- (16) - Srivastava K.G., "A Magnetic Study of some compounds having the K_2NiF_4 Structure", Phys.Lett. 4 (1963) 55.
- (17) - Als-Nielsen J., "Neutron Scattering and Spatial Correlation near the Critical Point", vol. 5a (1976) ed. C.Domb e M.S. Green (New York: Academic Press) pag. 105.
- (18) - Guggenheim, E.A., "The Principle of Corresponding States", J. Chem. Phys. 13 (1945) 253.
- (19) - de Jongh L.J. e Miedema A.R., "Experiments on simple magnetic model systems", Advances on Phys. 23 (1974) 1.
- (20) - Onsager L., "Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition", Phys. Rev. 65 (1944) 117.
- (21) - Wilson K.G., "Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture", Phys. Rev. B 4 (1971) 3174.
- (22) - Wilson K.G., "Renormalization Group and Critical Phenomena. II. Phase-Space Cell Analysis of Critical Behavior", Phys. Rev. B 4 (1971) 3184.
- (23) - Niemeijer Th. e van Leeuwen J.M.J., "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) pag. 425.
- (24) - Wilson K.G. e Kogut J., "The Renormalization Group and the ϵ Expansion", Phys. Rep. 12 (1974) 75.
- (25) - Kadanoff L.P., "Scaling law for Ising Models near T_c ", Physics 2 (1966) 263.
- (26) - Mc Coy B.M. e Wu T.T., "The Two-dimensional Ising Model" (Harvard Univ. Press; Cambridge, Massachussets)(1973).

- (27) - Baxter R.J., "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics" (Academic Press, London)(1982).
- (28) - Fisher M.E. e Ferdinand A.E., "Interfacial, Boundary, and Size Effects at Critical Points", Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 169.
- (29) - Abraham D.B. e Reed P., "Diagonal interface in two-dimensional Ising ferromagnet", J.Phys. A 10 (1977) L121.
- (30) - de Oliveira M.J., Furman D. e Griffiths R.B., "Ising-Model Surface Tension Using Real-Space Renormalization-Group Methods", Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 977.
- (31) - Curado E.M.F., Tsallis C., Levy S.V.F. e Oliveira M.J., "Extrapolated Renormalization-Group Calculation of the Surface Tension in Square-Lattice Ising Model", Phys.Rev. B 23 (1981) 1419.
- (32) - Curado E.M.F., Tsallis C., Schwachheim G. e Levy S.V.F., "Renormalization-group Longitudinal Surface Tension in Simple Cubic and Hypercubic Lattices Ising Model" (a ser publicado).
- (33) - Potts R.B., "Some Generalized Order-Disorder Transformations", Proc. Camb. Phil. Soc. 48 (1952) 106.
- (34) - Wu F.Y., "The Potts Model", Rev.Mod.Phys. 54 (1982) 235.
- (35) - den Nijs M.P.M., "A Relation Between the Temperature Exponents of the Eight-Vertex and q-State Potts Model", J. Phys. A 12 (1979) 1857.
- (36) - Pearson R.B., "Conjecture for the extended Potts Model Magnetic eigenvalue", Phys.Rev. B 22 (1980) 2579.
- (37) - Nienhuis B., Riedel E.K. e Schick M., "Magnetic Exponents of the Two-Dimensional q-State Potts Model", J. Phys. A 13 (1980) L 189.
- (38) - Fisher, M.E. e Burford R.J., "Theory of Critical-Point Scattering and Correlations. I. The Ising Model", Phys. Rev. 156 (1967) 583.
- (39) - Curado E.M.F. e Hauser P.R., "Correlation Length of the Potts Model" (a ser publicado).

- (40) - Tejwani M.J., Ferreira O. e Vilches O.E., "Possible Ising Transition in ^4He Monolayer Adsorbed on Kr-Plated Graphite", Phys. Rev. Lett. 44 (1980) 152.
- (41) - 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.
- (42) - Lieb E.H., "Residual Entropy of Square Ice", Phys. Rev. 162 (1967) 162.
- (43) - Kasteleyn P.W. e Fortuin C.M., "Phase Transitions in Lattice Systems with Random Local Properties", J. Phys. Soc. Jap. (suppl.) 26 (1969) 11.
- (44) - Wu F.Y., "Percolation and the Potts Model", J. Stat. Phys. 18 (1978) 115.
- (45) - de Magalhães A.C.N., Tsallis C. e Schwachheim G., "Probability Renormalisation Group treatment of Bond Percolation in Square, Cubic and Hypercubic Lattices", J. Phys. C 13 (1980) 321.
- (46) - de Magalhães A.C.N., Tsallis C e Schwachheim G., "Renormalisation Group Treatment of Bond Percolation in Anisotropic and 'Inhomogeneous' Planar Lattices", J. Phys. C 14 (1981) 1393.
- (47) - Baker J.M., Lourens J.A.J. e Stevenson R.W.H., "Antiferromagnetism of Mixed Crystals of Zinc and Manganese Fluoride", Proc. Phys. Soc. 77 (1961) 1038.
- (48) - Lagendijk E. e Huiskamp W., "Calorimetric Study of a Random Ising Spin System: $\text{Co}_p\text{Zn}_{1-p}\text{Cs}_3\text{Cl}_5$ ", Physica 62 (1972) 444.
- (49) - Wood T.E. e Day P., "Magneto-optical study of the magnetic phase diagram of the dilute metamagnet $\text{Fe}_p\text{Mg}_{1-p}\text{Cl}_2$ ", J. Phys. C 10 (1977) L 333.
- (50) - Mulder C.A.M., van Duynveldt A.J. e Mydosh J.A., "Susceptibility of the CuMn spin-glass: Frequency and field dependences", Phys. Rev. B 23 (1981) 1384.
- (51) - Cannella V. e Mydosh J.A., "Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys", Phys. Rev. B 6 (1972) 4220.

- (52) - Maletta H. e Convert P., "Onset of Ferromagnetism in $\text{Eu}_x \text{Sr}_{1-x} \text{S}$ near $x = 0.5$ ", Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 108.
- (53) - Stinchcombe R.B., "Critical properties of dilute Heisenberg and Ising magnets", J. Phys. C 12 (1979) 4533.
- (54) - 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.
- (55) - Levy S.V.F., Tsallis C. e Curado E.M.F., "Approximate Critical Surface of the Bond-Mixed Square-Lattice Ising Model", Phys. Rev. B 21 (1980) 2991.
- (56) - Toulouse G., "Theory of the frustration effect in spin glasses: I", Comm. Phys. 2 (1977) 115.
- (57) - Mydosh J.A., "The Present Experimental Situation in spin-glasses", do livro "Disordered Systems and Localization", ed. C. Castellani, C. Di Castro e L. Peliti (Springer-Verlag, New York)(1981) pag. 87.
- (58) - Tholence J.L. e Tournier R., "Susceptibility and Remanent Magnetization of a Spin Glass", J. Physique 35 (1974) C4-229.
- (59) - Edwards S.F. e Anderson P.W., "Theory of spin glasses" , J. Phys. F 5 (1975) 965.
- (60) - Fisch R. e Harris A.B., "Series Study of a Spin-Glass Model in Continuous Dimensionality", Phys. Rev. Lett. 38 (1977) 785.
- (61) - Benyoussef A. e Boccara N., "Existence of spin-glass phases for three- and four-dimensional Ising and Heisenberg models", J. Phys. C 16 (1983) 1901.
- (62) - Curado E.M.F. e Tsallis C., "Phase Diagram in Frustrated Bond-Mixed Bidimensional Ising Model: Renormalization -group treatment" (a ser publicado).
- (63) - Tsallis C. e Schwachheim G., "Real-Space Renormalization Group: Applications to site Percolation in Square Lattices", J. Phys. C 12 (1979) 9.
- (64) - 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. C 13 (1980) 465.

- (65) - Gell-Mann M. e Low F.E., "Quantum Electrodynamics at Small Distances", Phys. Rev. 95 (1954) 1300.
- (66) - Bogoliubov N.N. e Shirkov D.V., "Introduction to the Theory of Quantized Fields" (Interscience, New York) (1959) Capítulo VIII.
- (67) - Feigenbaum M.J., "Quantitative Universality for a Class of Nonlinear Transformations", J. Stat. Phys. 19(1978)25.
- (68) - Derrida B., Gervois A. e Pomeau Y., "Universal metric properties of bifurcations of endomorphisms", J. Phys. A 12 (1979) 269.
- (69) - Hu B., "Introduction to real-space renormalization - group methods in critical and chaotic phenomena", Phys. Rep. 91 (1982) 233.
- (70) - Hauser P.R., Tsallis C. e Curado E.M.F., "Criticality of the $1-a|x|^z$ map routes to chaos" (a ser publicado).
- (71) - Pfeuty P. e Toulouse G., "Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena" (Wiley-Interscience Publ.) (1977).
- (72) - Harwood M.G., Popper P. e Rushman D.F., "Curie Point of Barium Titanate", Nature, 160 (1947) 59.
- (73) - Blinc R. e Zeks B., "Soft Modes in Ferroelectrics and Antiferroelectrics" (North Holland Publ. Co., Amsterdam) (1974).
- (74) - Buckingham M.J. e Fairbank W.M., "The nature of the λ -transition in liquid Helium" do livro "Progress in Low Temperature Physics", ed. C.J. Gorter (North-Holland, Amsterdam) (1961) pag. 80.
- (75) - Sabisky E.S. e Anderson C.H., "Onset for Superfluid Flow in He^4 Films on a Variety of Substrates", Phys. Rev. Lett. 30 (1973) 1122.
- (76) - Milles R.G. e File J., "Observation of persistent current in a superconducting solenoid", Phys. Rev.Lett. 10(1963)93.

- (77) - Gorter C.J., "Superconductivity until 1940 in Leiden and As Seen From There", Rev. Mod. Phys. 36 (1964) 3.
- (78) - Kawasaki K., "Decay Rate of Concentration Fluctuation of a Binary Mixture in the non-hydrodynamical Regime", Phys. Lett. 30 A (1969) 325.
- (79) - Ferrel R.A., "Decoupled-mode Dynamical Theory of the Binary-liquid Phase Transition", Phys. Rev. Lett. 24(1970)1169.
- (80) - Norvell J.C. e Als-Nielsen J., "Long-Range Order in β Brass", Phys. Rev. B 2 (1970) 277.
- (81) - Tejwani M.J., Ferreira O. e Vilches O.E., "Possible Ising Transition in a He Monolayer adsorbed on Kr-Plated Graphite", Phys. Rev. Lett. 44 (1980) 152.
- (82) - Chistyakov I.G., Usp. Fiz. Nauk. 89 (1966)563. Na tradução inglesa, "Liquid Crystals", Sov. Phys. Uspekhi 9 (1967) 551. Ver também de Gennes, "The Physics of Liquid Crystals" (Clarendon Press, Oxford)(1974).
- (83) - Dietrich O.W. e Als-Nielsen J., "Neutron Diffraction Study of the Magnetic Long-Range Order in Tb", Phys. Rev. 162 (1967) 315.
- (84) - Herpin A., "Théorie du Magnétisme" (P.U.F., Paris)(1968).
- (85) - van der Walls J.D., Tese de Doutorado (1873) University of Leiden.
- (86) - Weiss P., "L'Hypothèse du Champ Moléculaire et la Propriété Ferromagnétique", J. Physique Theo.Appl. 6(1907)661.
- (87) - Ornstein L.S. e Zernicke, Proc. Acad. Sci. Amsterdam 17 (1914) 793; Z. Physik 19 (1918) 134; ver Stanley H.E., "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena" (Clarendon Press, Oxford)(1971) pag.94.
- (88) - Landau L.D., Zh. éksp. teor. Fiz. 7 (1937) 19. Na tradução alemã em Phys. Z. Sowjet. 11 (1937) 26.
- (89) - Landau L.D., Zh. éksp. teor. Fiz. 7 (1937) 627. Na tradução alemã em: Phys. Z. Sowjet. 11 (1937) 545.
- (90) - Landau L.D., "Collected Papers of L.D. Landau", ed. D. ter Haar (Pergamon Press, Oxford)(1965) pag. 193.

- (91) - Landau L.D. e Lifchitz E., "Physique Statistique", (MIR , Moscou)(1967) capítulo XIV.
- (92) - Landau L.D. e Ginzburg V.L., Zh. ěksp. teor. Fiz. 20(1950) 1064. Na versăo inglesa em "Collected Papers of L. D. Landau", pag. 546.
- (93) - Le Guillou J.C. e Zinn-Justin J., "Critical exponents from field theory", Phys. Rev. B 21 (1980) 3976.
- (94) - Domb C., "On the Theory of Cooperative Phenomena in Crystals", Adv. Phys. 9 (1960) 149.
- (95) - Heller P. e Benedeck G.B., "Nuclear Magnetic Resonance in MnF_2 near the Critical Point", Phys. Rev. Lett. 8 (1962) 428.
- (96) - Fisher M.E., "On the theory of Critical Point Density Fluctuations", Physica 28 (1962) 172.
- (97) - Fisher M.E., "Correlation Functions and the Critical Region of Simple Fluids", J.Math.Phys. 5 (1964) 944.
- (98) - Essam J.W. e Fisher M.E., "Padé Approximant Studies of the Lattice Gas and Ising Ferromagnet below the Critical Point", J. Chem. Phys. 38 (1963) 802.
- (99) - Ginzburg V.L., Fiz. Tverd. Tela 2 (1960) 2031. Na tradu- çăo inglesa "Some Remarks on Phase Transitions of the second kind and the microscopic theory of Ferroelectric Materials", Sov. Phys. - Sol. State 2 (1960) 1824.
- (100) - Widom B., "Equation of State in the Neighborhood of the Critical Point", J. Chem. Phys. 43 (1965) 3898.
- (101) - Stanley H.E., Chang T.S., Harbus F. e Liu L.L., "Five introductory lectures on critical phenomena in simple and complex systems: the unifying hypotheses of scaling and universality", do livro "Proprietà Locali alle Transizioni di Fase", Rendiconti della Scuola Intern. di Fis. "Enrico Fermi", LIX Corso, ed. K.A. Müller (Società Italiana di Fisica, Bologna)(1976) pag. 69.
- (102) - Rushbrooke G.S., "On the Thermodynamics of the Critical Region for the Ising Problem", J. Chem. Phys. 39(1963)842.

- (103) - Griffiths R.B., "Ferromagnets and Simple Fluids near the Critical Point: Some Thermodynamic Inequalities", J.Chem. Phys. 43 (1965) 1958.
- (104) - Fisher M.E., "Rigorous Inequalities for Critical-Point Correlation Exponents", Phys. Rev. 180 (1969) 594.
- (105) - Josephson B.D., "Inequality for the specific heat I. Derivation", Proc. Phys. Soc. 92 (1967) 269 e "Inequality for the specific heat II. Application to Critical Phenomena", Proc. Phys. Soc. 92 (1967) 276.
- (106) - McKay S.R., Berker A.N. e Kirkpatrick S., "Spin-Glass Behavior in Frustrated Ising Models with Chaotic Renormalization-Group Trajectories", Phys.Rev.Lett. 48(1982)767.
- (107) - Becerra C.C. , Shapira Y., Oliveira Jr. N.F. e Chang T.S., "Lifshitz Point in MnP", Phys. Rev. Lett. 44(1980)1692.
- (108) - Luban M., "Generalized Landau Theories", do livro "Phase Transitions and Critical Phenomena" vol. 5A, ed. C. Domb e M.S. Green (Academic Press, New York)(1976) pag. 35.
- (109) - Wilson K.G., "Feynman-Graph Expansion for Critical Exponents", Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 548.
- (110) - Fisher M.E., "The Renormalization group in the theory of critical behavior", Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 597.
- (111) - Brezin E., Le Guillou J.C. e Zinn-Justin J., "High order contributions to critical exponents", Phys. Lett. A 44 (1973) 227.
- (112) - Harris A.B., Lubensky T.C., Holcomb W.K. e Dasgupta C. , "Renormalization - Group Approach to Percolation Problems", Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 327.
- (113) - Ma S.K., "Introduction to the Renormalization Group", Rev. Mod. Phys. 45 (1973) 589.
- (114) - 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.
- (115) - Mártin H.O. e Tsallis C., "Renormalization Group Specific Heat and Magnetization of the Ising Ferromagnet in Cubic

- and Hypercubic Lattices", Z. Phys. B 44 (1981) 325.
- (116) - Gallavotti G., "Instabilities and Phase Transitions in the Ising Model. A Review", Rivista del nuovo Cimento 2(1972) 133.
- (117) - Fontaine J.R. e Gruber Ch., "Surface Tension and Phase Transition for Lattice Systems", Commun. Math. Phys. 70 (1979) 243.
- (118) - Gruber C. e Hinterman A., "On the Uniqueness of the Invariant Equilibrium State and Surface Tension", Commun.Math. Phys. 56 (1977) 147.
- (119) - Abraham D.B., "Comment on "Ising-Model surface tension using real-space renormalization-group methods"", Phys. Rev. B 19 (1979) 3833.
- (120) - Gruber C., Hinterman A. e Merlini D., "Group Analysis of Classical Lattice Systems" da série "Lecture Notes in Physics" Nº 60, ed. J. Ehlers, K. Hepp, H.A. Weidmüller e J. Zittartz (Springer-Verlag: Berlin, Heidelberg, New York) (1977).
- (121) - Savit R., "Duality in field theory and statistical systems", Rev. Mod. Phys. 52 (1980) 453.
- (122) - Cahn J.W. e Kikuchi R., "Theory of Domain Walls in Ordered Structures - I. Properties at Absolute Zero", J. Phys. Chem. Solids 20 (1961) 94.
- (123) - Weeks J.D., Golmer G.H. e Leamy H.J., "Structural Transition in the Ising-Model Interface", Phys. Rev. Lett. 31 (1973) 549.
- (124) - Kramers H.A. e Wannier G.H., "Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I", Phys. Rev. 60 (1941) 252 .
"Part II", Phys. Rev. 60 (1941) 263.
- (125) - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., "Critical properties of site-and bond-diluted Ising ferromagnets", J. Phys. C 12 (1979) 347.
- (126) - Tsallis C., "Generalized bond percolation and random models. Application to two-dimensional systems", Kinam 3(1981)79.

- (127) - Fisher M.E., "The Theory of Critical Point Singularities" - Critical Phenomena, Proc. Int. Sch. Phys. "Enrico Fermi" Course 51 ed. M.S. Green (Academic Press, New York) (1971).
- (128) - Reynolds P.J., Stanley H.E. e Klein W., "Percolation by Position - Space Renormalisation Group with Large Cells", J. Phys. A 11 (1978) L 199.
- (129) - de Magalhães A.C.N. e Tsallis C., "On the critical frontiers of Potts ferromagnets", J. Physique 42 (1981) 1515.
- (130) - Kaufman B. e Onsager L., "Crystal Statistics. III. Short-range Order in a Binary Ising Lattice", Phys. Rev. 76 (1949) 1244.
- (131) - Kadanoff L., "Spin-Spin Correlations in the Two-Dimensional Ising Model", Il Nuovo Cimento 44 (1966) 276.
- (132) - Baxter R.J., "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics" (Academic Press, London) (1982) pag. 118 (120), equação (7.10.44)[(7.11.4)].
- (133) - Wang Y.K. e Wu F.Y., "Multi-component spin model on a Cayley tree", J. Phys. A 9 (1976) 593.
- (134) - Hinterman A., Kunz H. e Wu F.Y., "Exact Results for the Potts Model in Two Dimensions", J. Stat. Phys. 19 (1978) 623.
- (135) - Baxter R.J., "Potts Model at the Critical Temperature", J. Phys. C 6 (1973) L 445.
- (136) - Nienhuis B., Riedel E.K. e Schick M., "q-state Potts Model in General Dimension", Phys.Rev. B 23 (1981) 6055.
- (137) - Domany E., Schick M., Walter J.S. e Griffiths R.B., "Classification of continuous order-disorder transitions in adsorbed monolayers", Phys. Rev. B 18 (1978) 2209.
- (138) - Domany E. e Schick M., "Classification of continuous Order-disorder Transitions in Adsorbed Monolayers. II", Phys. Rev. B 20 (1979) 3828.
- (139) - Domany E. e Riedel E.K., "Phase Transitions in Two-Dimensional Systems", J.Appl.Phys. 49 (1978) 1315.

- (140) - Berker A.N. e Ostlund S., "Renormalization-group treatment of a Potts Lattice gas for Krypton adsorbed onto graphite", Phys. Rev. B 17 (1978) 3650.
- (141) - Goyet J. -F., Sapoval B., "Antiferroelectric transition in β -alumina, a realization of the $D=2$, $s=3$ Potts model ?" , J. Physique Lett. 41 (1980) L115.
- (142) - 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) pag. 17.
- (143) - Wielinga R.F., Blöte H.W.J., Roest J.A. e Huiskamp W.J. , "Specific Heat Singularities of the Ising Antiferromagnets CoCs_3Cl_5 and CoCs_3Br_5 ", Physica 34 (1967) 223.
- (144) - Wright J.C. e Moos H.W., "DyPO₄: A Three-Dimensional Ising Antiferromagnet" , Phys. Rev. B 3 (1971) 843.
- (145) - Barbara B., Rossignol M.F. e Per Bak, "First-order Transitions and tricritical points in DyAl₂: A realisation of the three-state Potts model", J. Phys. C 11 (1978) L 183.
- (146) - Mukamel D., Fisher M.E. e Domany E., "Magnetization of Cubic Ferromagnets and the Three-Component Potts Model", Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 565.
- (147) - Aharony A., Müller K.A. e Berlinger W., "Trigonal-to-Tetragonal Transition in Stressed SrTiO₃: A Realization of the Three-State Potts Model", Phys. Rev. Lett. 38 (1977) 33.
- (148) - Bevaart L., Frikkee E., Lebesque J.V. e de Jongh L.J., "Magnetic and neutron scattering experiments on the antiferromagnetic layer-type compounds $\text{K}_2\text{Mn}_{1-x}\text{M}_x\text{F}_4$ (M=Fe,Co)", Phys. Rev. B 18 (1978) 3376.
- (149) - 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.
- (150) - Ikeda H., "Sharp Phase Transition in Two-Dimensional Dilute Antiferromagnets $\text{Rb}_2\text{Co}_p\text{Mg}_{1-p}\text{F}_4$ ", J. Phys. Soc. Jpn. 50 (1981) 3215.
- (151) - Lubensky T.C., "Scaling Theory of phase transition in diluted systems near the percolation threshold", Phys. Rev. B 15 (1977) 311.

- (152) - Gonçalves da Silva C.E.T., "Disordered Ising spin system on a Cayley tree", J. Phys. C 12 (1979) L 219.
- (153) - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., "Critical properties of the site-diluted Ising ferromagnet", J. Phys.C 11 (1978)L525.
- (154) - Jakubczak J., Mrozińska Z. e Pekalski A., "Critical temperature of mixed ferromagnetic and antiferromagnetic Ising systems with arbitrary spin", J. Phys. C 12 (1979) 2341.
- (155) - McGurn A.R. e Thorpe M.F., "A bond-diluted Ising ferromagnet with first-and second-neighbour interactions", J. Phys. C 11 (1978) 3667.
- (156) - Sykes M.F. e Essam J.W., "Some Exact Critical Percolation Probabilities for Bond and Site Problems in Two Dimensions", Phys. Rev. Lett. 10 (1963) 3.
- (157) - Bergstresser T.K., "Rigorous Upper and Lower Bounds on the Critical Temperature in Ising Models with Random, Quenched, Broken-Bond Disorder", J.Phys. C 10 (1977) 3831.
- (158) - Domany E., "Criticality and crossover in the bond--diluted random Ising model", J.Phys. C 11 (1978) L337.
- (159) - Fisch R., "Critical Temperature for Two-Dimensional Ising Ferromagnets with Quenched Bond Disorder", J. Stat. Phys. 18 (1978) 111.
- (160) - Harris A.B., "Effect of random defects on the critical behavior of Ising models", J. Phys. C 7 (1974) 1671.
- (161) - Oguchi T. e Ueno Y., "Curie Point in a Quenched Bond Model for the Two Dimensional Lattice", J. Phys. Soc. Jpn. 44 (1978) 1449.
- (162) - Plischke M. e Zobin D., "Renormalization group calculations for two dimensional disordered Ising models", J. Phys. C 10 (1977) 4571.
- (163) - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., "A renormalization group approach for the mixed Ising model", J. Phys. C 12 (1979) L 169.
- (164) - Tsallis C., "Generalized bond percolation and random models. Application to two-dimensional systems", Kinam 3 (1981) 79.

- (165) - Thorpe M.F. e McGurn A.R., "Phase diagrams of random Ising magnets", Phys. Rev. B 20 (1979) 2142.
- (166) - Vários Autores, "Proceedings of the Second Joint Intermag -Magnetism and Magnetic Materials Conference 1979", J. Appl. Phys. 50 (1980) 7308.
- (167) - Vários Autores, "Proceedings of the International Conference on Magnetism", Part I - J. Mag. Mag. Mat. 15-18 (1980) 99.
- (168) - Vários Autores, "Proceedings of the Twenty-Sixth Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials", J. Appl. Phys. 52 (1981) 1708.
- (169) - Sherrington D. e Kirkpatrick S., "Solvable Model of a Spin-Glass", Phys. Rev. Lett. 35 (1975) 1792.
- (170) - Tholence J.L., "Frequency dependency of the susceptibility of spin-glasses", J. Appl. Phys. 50 (1979) 7310.
- (171) - Cannella V., Mydosh J.A. e Budnick J.I., "Magnetic Susceptibility of Au-Fe Alloys", J. Appl. Phys. 42(1971)1689.
- (172) - Cannella e Mydosh J.A., "Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys", Phys. Rev. B 6 (1972) 4220.
- (173) - Martin D.L., "Specific heat of CuMn at the spin-glassfreezing temperature", Phys. Rev. B 21 (1980) 1902.
- (174) - Emmerich K. e Schwink Ch., "Magnetization Processes of CuMn below the Freezing Temperature T_f ", Solid Stat. Commun. 31 (1979) 705.
- (175) - Prejean J.J., Joliclerc M.J. e Monod P., "Hysteresis in CuMn: The effect of spin orbit scattering on the anisotropy in the spin glass state", J. Physique 41(1980)427.
- (176) - Souletie J. e Tournier R., "Specific Heat and Magnetization in dilute Magnetic Alloys", J. Low Temp. Phys. 1(1969) 95.
- (177) - Mulder C.A.M., van Duyneveldt A.J. e Mydosh J.A., "Susceptibility of the CuMn spin-glass: Frequency and field dependences", Phys. Rev. B 23 (1981) 1384.

- (178) - Ruderman M.A. e Kittel C., "Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons" , Phys. Rev. 96 (1954) 99.
- (179) - Kasuya T., "A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Model", Prog. Theor. Phys. 16(1956)45.
- (180) - Yosida K., "Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys", Phys. Rev. 106 (1957) 893.
- (181) - Nieuwenhuys G.J., Verbeek B.H. e Mydosh J.A., "Towards a uniform magnetic phase diagram for magnetic alloys with mixed types of order", J. Appl. Phys. 50 (1979) 1685.
- (182) - Tholence J.L., "On the Frequency Dependence of the Transition Temperature in Spin Glasses", Solid Stat. Commun. 35 (1980) 113.
- (183) - Löhneysen H.v. e Tholence J.L., "Magnetic Properties of (La, Gd) Al₂ Alloys", Z. Physik B 29 (1978) 319.
- (184) - Ferré J., Pommier J., Renard J.P. e Knorr K., "Magnetic properties of an amorphous insulating spin glass: manganese aluminosilicate", J. Phys. C 13 (1980) 3697.
- (185) - Renard J.P., Miranday J.P. e Varret F., "Evidence of a Spin-Glass Transition in the vitreous Insulating Fluorides", Solid Stat. Commun. 35 (1980) 41.
- (186) - Maletta H. e Felsch W., "Insulating spin-glass system Eu_xSr_{1-x}S", Phys. Rev. B 20 (1979) 1245.
- (187) - Borsa F., HÜchli U.T., van der Klink J.J. e Rytz D., "Condensation of Random-Site Electric Dipoles: Li in KTaO₃", Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 1884.
- (188) - Sullivan N.S., Devoret M., Cowan B.P. e Urbina C., "Evidence for quadrupolar glass phases in solid hydrogen at reduced ortho concentrations", Phys.Rev. B17 (1978)5016.
- (189) - Maletta H., Felsch W., Scheuer H. e Pink H., "The Spin-glass-to-ferromagnetism transition in the diluted Heisenberg system Eu_xSr_{1-x}S", J. Mag. Mat. 15-18 (1980) 167.
- (190) - Fert A., "Verres de Spins", em "Methodes Nucleaires et

Sciences des Materiaux" do 11º Colóquio Franco-Brasileiro - ed. J. Danon e J.M. Friedt (CBPF, Rio de Janeiro) pag. II.1.

- (191) - Malozemoff A.P. e Imry Y., "Long-time cooling-rate dependence of spin-glass freezing", Phys.Rev. B 24(1981)489.
- (192) - Berton A., Chaussy J., Odin J., Rammal R. e Tournier R., "Magnetocaloric investigation of (H,T) phase diagram of CuMn spin glass", J. Physique Lett. 43 (1982) L 153.
- (193) - Coles B.R., "Phase (?) Transitions in Systems with Spin-Glass and Long-Range Order Regimes" em "Multicritical Phenomena" da NATO Advanced Study Institute, Geilo, Noruega (1983). preprint.
- (194) - de Almeida J.R.L. e Thouless D.J., "Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model", J. Phys. A 11 (1978) 983.
- (195) - Rajan V.T. e Riseborough P.S., "High-temperature-series expansion for random Ising magnets", Phys.Rev. B27(1983)532.
- (196) - Southern B.W., Young A.P. e Pfeuty P., "Effects of percolation on spin glass order", J. Phys. C 12(1979) 683.
- (197) - Benyoussef A. e Boccara N., "Real Space Renormalization Group Investigation of Three-Dimensional Ising Spin Glasses", Phys. Lett. 93 A (1983) 351.
- (198) - Oliveira P.M.C., "Anisotropic Bond Percolation by Position-Space Renormalization Group", Phys. Rev. B 25 (1982) 2034.
- (199) - Morgenstern I. e Binder K., "Magnetic correlations in two-dimensional spin-glasses", Phys.Rev. B 22 (1980) 288.
- (200) - Barahona F., Maynard R, Rammal R. e Uhry J.P., "Morphology of ground states of two-dimensional frustration model", J. Phys. A 15 (1982) 673.
- (201) - Binder K. e Kinzel W., "Spin Glass Models with Short-Range Interactions: A Short Review of Numerical Studies" do Livro "Disordered Systems and Localization", ed. C. Castellani, C. Di Castro e L. Peliti (Springer-Verlag, New York)(1981) pag. 124.

- (202) - Bray A.J., Moore M.A. e Reed P., "Vanishing of the Edwards-Anderson order parameter in two- and three-dimensional Ising spin glasses", J. Phys. C 11 (1978) 1187.
- (203) - Jayaprakash C., Chalupa J. e Wortis M., "Spin-glass behavior from Migdal's recursion relations", Phys. Rev. B 15 (1977) 1495.
- (204) - Kinzel W. e Fisher K.H., "Existence of a phase transition in spin glasses ?", J. Phys. C 11 (1978) 2115.
- (205) - Oliveira P.M.C. e Tsallis C., "Anisotropic square lattice Potts ferromagnet: renormalisation group treatment", J. Phys. A 15 (1982) 2865.

“MODELOS DE ISING E POTTS-EFEITOS DA DESORDEM DE LIGAÇÕES E DA DIMENSÃO ”

EVALDO MENDONÇA FLEURY CURADO

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

Anibal Omar Caride/CBPF

Afonso Augusto Guidão Gomes/CBPF

Mario José de Oliveira/USP

Paulo Murilo Castro de Oliveira

Rio de Janeiro, 12 de setembro de 1983