

**URIEL MEDEIROS DE SOUZA COSTA**

**INFLUÊNCIA DE DEFEITOS DA REDE  
NA CRITICALIDADE DO FERROMAGNETO DE POTTS**

**T e s e  
de  
D O U T O R A D O**

**CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS  
Rio de Janeiro**

**- 1 9 8 5 -**

Aqueles a quem amamos são eternos,  
a você, meu pai, pela sua presença.

À minha mãe, que sempre me incentivou.

A vocês Alice, Mariel e Alícia, pela  
paciência, compreensão e carinho.

## AGRADECIMENTOS

A Constantino Tsallis, por sua segura orientação e pela amizade e dedicação que sempre me dispensou. À sua capacidade de organização, que tornou possível a criação de um grupo de trabalho descontraído nas horas de lazer, porém sério e imbuído de profundo respeito nas horas de trabalho, motivando e tornando fecunda qualquer colaboração. Às pessoas deste grupo de trabalho, em especial a Ananias Monteiro Mariz, Aglaê Cristina Navarro de Magalhães, Evaldo Mendonça Fleury Curado, Luciano Rodrigues da Silva e Paulo Roberto Hauser, pelas discussões constantes, aliadas a uma camaradagem sem igual. Às outras pessoas que colaboram com este grupo, Anibal Omar Caride, Paulo Murilo Castro de Oliveira e Enaldo Fonseca Sarmiento, o meu agradecimento. À Maria da Conceição de Souza Vieira e Edson de Pinho da Silva, que recentemente se incorporaram a este grupo, como também a Marçal de Oliveira Neto pelas oportunas observações durante a redação deste trabalho. Pelas sugestões apresentadas e pelo auxílio na parte computacional sou grato a Georges Schwachheim. À Vanda Wood de Carvalho, não só pela revisão de redação e de datilografia, como também pelo tratamento carinhoso e atencioso que sempre me dedicou. À Myriam Simões Coutinho e aos demais funcioná-

rios do CBPF, pela presteza e boa vontade com que sempre fui tratado. Finalmente, a todos aqueles que, direta ou indiretamente, contribuíram para a redação deste trabalho



laram-se os expoentes críticos.

Passando para outro sistema físico estudou-se o comportamento de uma rede cúbica simples semi-infinita ferromagnética de Ising, cuja superfície livre contém interações ferromagnéticas Heisenberg anisotrópicas. Apresenta-se o diagrama de fases em função da anisotropia e mostram-se as várias classes de universalidades.

Finalmente investigam-se o comportamento crítico do modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados em um tipo particular de fractais, o tapete de Sierpinski, cuja dimensionalidade fractal está compreendida entre 1 e 2. Obtemos, entre outros, os dois grafos que se originam do método de deslocamento de ligações de Migdal-Kadonoff e mostramos que eles correspondem ao limite assintótico de alta e baixa temperaturas da resposta exata da rede hierárquica.

## S U M M A R Y

In the present work we have studied the critical properties of the  $q$ -state Potts ferromagnet and the anisotropic Heisenberg model on hypercubic lattices ( $d = 2, 3$ ); emphasis has been given to the free surface and the interface effects. We have used as mathematical tool the Real Space Renormalization Group approach.

We have first discussed the criticality of the quenched bond-mixed  $q$ -state Potts ferromagnet on square lattice. On qualitative grounds we exhibit that the "crossover" from the pure fixed point to the random one occurs, while  $q$  increases, through a pitchfork bifurcation; the relationship with the Harris criterion is analyzed. On quantitative grounds we present high precision numerical values for the critical temperatures corresponding to arbitrary concentrations of the coupling constants  $J_1$  and  $J_2$ , and arbitrary ratios  $J_1/J_2$ . The pure, random and "crossover" critical exponents are discussed as well.

We have calculated also the conductivity of a square lattice quenched bond-random resistor network, the conductance of each bond being  $g_1$  and  $g_2$  with probabilities  $(1-p)$  and  $p$  respectively. The group recovers several already known exact results (including slopes), and is consequently believed to be numerically quite reliable for almost all values and  $p$  and all ratios  $g_1/g_2$  (in particular,  $g_1 = 0$  and  $g_1 = \infty$

with finite  $g_2$  respectively correspond to the insulator-resistor and superconductor-resistor mixtures).

We have then discussed the Potts ferromagnet diagram and the universality classes of a semi-infinite simple cubic lattice constituted by two different semi-infinite bulks (respectively characterized by the coupling constants  $J_1$  and  $J_2$ ) separated by a  $(1,0,0)$  interface (characterized by  $J_S$ ) through two coupling constants ( $J_{\perp 1}$  and  $J_{\perp 2}$ ) that join the interface to the semi-infinite bulks 1 and 2 respectively.

We have also studied the critical behaviour of a semi-infinite simple cubic Ising ferromagnet whose  $(1,0,0)$  free surface contains anisotropic (in spin space) Heisenberg ferromagnetic interactions. The location of the multicritical point is calculated as a function of the anisotropy. The various universality classes of the problem are exhibited.

Finally, we have studied the critical frontiers and asymptotic behaviours of the  $q$ -state Potts model on several Sierpinski Carpets whose fractal dimensions lie between 1 and 2. Using hierarchical lattices as approximations for the Sierpinski Carpets we obtain, in particular, the two types of graphs which arise from the anisotropic square lattice bond-moving (Migdal-Kadanoff) schemes. They correspond to the exact asymptotic high and low temperature limits for the hierarchical lattices.



# SUMÁRIO

	Pág.
AGRADECIMENTOS .....	iii
RESUMO .....	v
SUMMARY .....	viii
LISTA DE FIGURAS .....	xii
LISTA DE TABELAS .....	xvi
INTRODUÇÃO .....	1
<u>CAPÍTULO 1</u> - FENÔMENOS CRÍTICOS E O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO REAL .....	10
1.1 - Transições de Fase Magnéticas .....	10
1.2 - Grupo de Renormalização .....	17
1.2.1 - O Grupo de Renormalização no Espaço Real .....	19
1.2.2 - Método do Movimento de Ligações .....	23
1.2.3 - Método do Corte-Colapso .....	27
<u>CAPÍTULO 2</u> - MODELO RANDÔMICO DE POTTS NA REDE QUADRADA: CRITICALIDADE E BIFURCAÇÃO .....	31
2.1 - Introdução .....	31
2.2 - Modelo .....	33
2.3 - Grupo de Renormalização .....	37
2.4 - Resultados .....	44
2.5 - Conclusões .....	58
<u>CAPÍTULO 3</u> - CONDUTIVIDADE DE UMA REDE QUADRADA DE RESISTORES COM LIGAÇÕES MISTAS .....	60
3.1 - Introdução .....	60

3.2 -	Modelo e Grupo de Renormalização .....	60
3.3 -	Resultados .....	65
3.4 -	Conclusões .....	70
<u>CAPÍTULO 4</u> -	CRITICALIDADE DO MODELO FERROMAGNÉTICO DE POTTS SEMI-INFINITO: UMA APROXIMAÇÃO DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO .....	72
4.1 -	Introdução .....	72
4.2 -	Modelo e Formalismo .....	76
4.3 -	Resultados .....	79
4.3.1 -	Diagrama de Fluxo .....	79
4.3.2 -	Extrapolação .....	80
4.3.3 -	Expoentes Críticos .....	81
4.3.4 -	Percolação de Ligações .....	83
4.4 -	Conclusões .....	87
<u>CAPÍTULO 5</u> -	INTERFACE NO MODELO FERROMAGNÉTICO DE POTTS: DIAGRAMA DE FASES E EXPOENTES CRÍTICOS .....	89
5.1 -	Introdução .....	89
5.2 -	Modelo e Formalismo de GR .....	90
5.3 -	Casos Particulares: Resultados e dis- cussões .....	94
5.3.1 -	Superfície Livre .....	94
5.3.2 -	Interface .....	103
5.4 -	Conclusões .....	106
<u>CAPÍTULO 6</u> -	MODELO FERROMAGNÉTICO DE ISING COM UMA SUPERFÍCIE HEISENBERG ANISOTRÔPICA .....	108
6.1 -	Introdução .....	108
6.2 -	Modelo e Formalismo .....	108
6.3 -	Resultados .....	113
6.4 -	Conclusões .....	118

<u>CAPÍTULO 7</u> -	MODELO DE POTTS NO TAPETE DE	
	SIERPINSKI .....	121
7.1 -	Introdução .....	121
7.2 -	Esquema de GR para o Tapete de	
	Sierpinski .....	123
7.3 -	Fronteiras Críticas do Modelo de	
	Potts no Tapete de Sierpinski .....	133
7.4 -	Conclusões .....	144
<u>CAPÍTULO 8</u> -	CONCLUSÕES .....	146
<u>APÊNDICE A</u>	.....	153
<u>APÊNDICE B</u>	.....	157
<u>APÊNDICE C</u>	.....	160
<u>BIBLIOGRAFIA</u>	.....	164

## LISTA DE FIGURAS

<u>FIG.</u>	<u>Pág.</u>
1.1.1 - Gráficos da magnetização em função do campo magnético .....	12
1.1.2 - Diagrama de fases típico de um ferromagnético..	12
1.2.1 - Sistema unidimensional de spins .....	24
1.2.2 - Movimento de ligações e operações de decimação .....	26
2.3.1 - Grafos auto-duais de dois terminais .....	38
2.4.1 - Fluxo do GR no espaço $(p, s_1, s_2)$ .....	46
2.4.2 - Temperatura crítica do GR ( $b = 2$ ) como uma função da concentração de $J_2$ para valores típicos de $q$ e $J_1/J_2$ .....	47
2.4.3 - Posição dos pontos fixos que atraem quase todos os pontos da superfície crítica .....	47
2.4.4 - Dependência de $q$ do expoente crítico de "crossover" do modelo puro para o randômico .....	51
2.4.5 - Dependência de $q$ dos expoentes críticos do GR .....	52
2.4.6 - Discrepância entre os expoentes críticos puro e randômico $\alpha_t$ e $\alpha_r$ como função da discrepância $\alpha_t(q) - \alpha_t(q^*)$ .....	53
2.4.7 - Variações do valor da bifurcação $q^*$ e do valor $\alpha = 0$ como função do fator de escala $b$ do GR .....	54
3.2.1 - Arranjo de condutâncias auto-duais com dois terminais .....	62
3.3.1 - Dependência da concentração da condutividade na rede quadrada de resistores com ligações mistas temperadas, para razões típicas $g_1/g_2$ ..	68

4.1.1 - Diagrama de fases do modelo de Ising na rede cúbica simples no espaço $k_B T/J_B - J_S/J_B$ .....	74
4.2.1 - Célula do GR para o volume .....	78
4.2.2 - Célula do GR para a superfície livre .....	78
4.3.1 - Diagrama de fluxo para $q = 2$ no espaço $t - t_S$ ...	79
4.3.2 - Evolução de $\Delta$ com $q$ do diagrama de fases $\Delta - T$ indicado na Fig. 4.1.1 .....	82
4.3.3 - Evolução com $q$ de $\Delta_c$ e $A$ .....	83
4.3.4 - Dependência de $q$ dos expoentes críticos do comprimento de correlação $\nu^{2D}$ e $\nu^{3D}$ , do expoente crítico $1/y_{t_1}^{SB}$ , bem como do expoente de "crossover" $\phi$ .....	84
4.3.5 - Diagrama de fases para percolação de ligações no espaço $p_S - p_B$ .....	85
5.2.1 - Corte do modelo discutido no texto .....	91
5.2.2 - Células do GR .....	93
5.3.1 - Diagrama de fases do GR para $q = 2$ nas variáveis $K_1$ , $K_{\perp 1}$ e $K_S$ .....	95
5.3.2 - Diagrama de fluxo no espaço $t_1 - t_{\perp 1} - t_S$ .....	96
5.3.3 - Diagrama de fluxo no plano $t_1 - t_S$ para $J_{\perp 1}/J_1 = 1$ .....	98
5.3.4 - Fronteira crítica no plano $t_1 - t_S$ para várias razões $J_{\perp 1}/J_1$ .....	98
5.3.5 - Dependência de $(J_S/J_1)_c$ com a razão $J_{\perp 1}/J_1$ para vários $q$ .....	99
5.3.6 - Variação de $\Delta + 1$ com a temperatura reduzida $T/T_0$ para várias razões $J_{\perp 1}/J_1$ .....	99
5.3.7 - Evolução de $(J_S/J_1)_c$ com $q$ para várias razões $(J_{\perp 1}/J_1)$ .....	100
5.3.8 - Diagrama de fases do GR, para $q=2$ , nas variáveis $t_1 - t_S - t_{\perp 1}$ .....	104
5.3.9 - Variação de $J_S/J_1$ com a razão $J_{\perp 1}/J_1$ para vários valores de $q$ .....	105
5.3.10 - Variação de $(J_S/J_1)_c$ com $q$ para várias razões $J_{\perp 1}/J_1$ .....	105
5.3.11 - Variação da temperatura com $J_S/J_1$ para várias razões $J_{\perp 1}/J_1$ .....	106

6.2.1 - Rede cúbica simples semi-infinita .....	109
6.2.2 - Células de transformação do GR .....	111
6.3.1 - Diagramas de fluxo e superfície crítica:	
6.3.1a - no espaço $(t_B, t_S, \eta)$ .....	114
6.3.1b - no sub-espaço $\eta = 1$ .....	115
6.3.2 - Cortes, para $\eta$ fixo, da superfície crítica no espaço $\Delta - T$ .....	116
6.3.3 - $\Delta_C$ em função de $\eta$ .....	117
7.2.1 - Tapetes de Sierpinski .....	123
7.2.2 - Construção da rede hierárquica para simular o tapete de Sierpinski .....	127
7.2.3 - Redes hierárquicas não uniformes .....	128
7.2.4 - Rede hierárquica do diamante .....	129
7.2.5 - Gráficos que obtemos ao aplicarmos o método do corte-colapso sobre duas redes hierárqui- cas .....	132
7.3.1 - Fronteiras críticas do tapete de Sierpinski ( $b = 3, \ell = 1$ ) no espaço $t - t_W$ , obtidas através	
7.3.1a - da rede hierárquica da fig. 7.2.2 ..	135
7.3.1b - do grafo tipo K .....	136
7.3.1c - do grafo tipo M .....	137
7.3.1d - comparação entre as três aproxi- mações .....	138
7.3.2 - Fronteiras críticas do SC com $b=5, \ell=3$ no espaço $t - t_W$ obtidas através	
7.3.2a - da rede hierárquica da Fig.7.3.3 ...	140
7.3.2b - do grafo tipo K .....	141
7.3.2c - do grafo tipo M .....	141
7.3.2d - comparação entre os três grafos ....	142
7.3.3 - A primeira interação (esquema de renormali- zação) da rede hierárquica não uniforme correspondente ao caso $b=5, \ell=3$ .....	142
7.3.4 - Fronteiras críticas do SC com $b=7, \ell=3$ no espaço $t - t_W$ .....	143

A.1 -	Grafos com dois terminais .....	153
A.2 -	Grafos com dois terminais resultantes do colapso da ligação $t_5$ e de sua eliminação .....	153
A.3 -	Passos sucessivos na resolução do grafo (a) ...	154
A.4 -	Passos sucessivos na resolução do grafo (a) ...	155
B.1 -	Grafos de dois terminais .....	157
B.2 -	Ponte de Wheatstone: (a) colapsada, (b) cortada .....	158
C.1 -	Transformação de grupo de renormalização para um arranjo de três ligações em série .....	160

## LISTA DE TABELAS

<u>TAB.</u>	<u>Pág.</u>
2.I - Elementos da distribuição $P_G(t)$ associada com o grafo da fig. 2.1b .....	42
2.II - Expoentes críticos do GR e exato $\nu$ para o modelo de Potts puro com $q$ estados .....	49
2.III - Resultados do GR associados com o modelo diluído .....	55
2.IV - Valores de $s_2$ na superfície crítica do GR, para valores típicos de $(p, s_1)$ .....	56
2.V - Valores de $p$ da mesma superfície crítica, que aparece na tabela 2.IV, para valores típicos de $J_1/J_2$ e $k_B T/qJ_2$ .....	57
3.I - Valores dos expoentes críticos $\nu$ e $t=s$ fornecidos pelo presente GR e por outros métodos .....	70
4.I - Resultados do GR e resultados exatos para os pontos críticos $t_B$ e $t_S$ .....	81
5.I - Resultados do GR comparados com outros resultados .....	102
7.I - Pontos críticos para o modelo de Potts em alguns tapetes de Sierpinski .....	139



## INTRODUÇÃO

Muito provavelmente foram os gregos os primeiros a refletir sobre as propriedades da magnetita (o minério magnético de ferro  $\text{FeO} - \text{Fe}_2\text{O}_3$ ). Este mineral, que mesmo no estado natural, exerce uma poderosa atração pelo ferro e aço, foi descoberto na província de Magnésia. Alguns autores (veja por exemplo a Ref. 1) acham que o nome magnetismo se deve à província grega onde a magnetita foi descoberta; entretanto, existe uma controvérsia, pois de acordo com o relato de Plínio, o pastor Magnes denominou a magnetita de pedra magnética quando a descobriu: "Os pregos de suas sandálias e a ponta de sua bengala ficaram presos em um campo magnético quando ele pastoreava o rebanho"<sup>2</sup>.

O estudo do magnetismo despertou o interesse de inúmeros pesquisadores no decorrer dos anos. Não pretendemos aqui contar a história do magnetismo, mas simplesmente focar os principais elementos históricos, de acordo com a nossa visão, que tornaram possível este trabalho.

Curie<sup>3</sup> em 1895 deu um dos principais passos para um inicial entendimento do comportamento das substâncias magnéticas em função da temperatura. O seu trabalho mostrava, através de medidas de susceptibilidade, que as substâncias ferromagnéticas e paramagnéticas tinham susceptibilidade proporcional a  $(T-T_C)^{-1}$ ;  $T_C$  ficou conhecida como a temperatura de Curie. Em 1905, Langevin<sup>4</sup> conjecturou que somente uma teoria de fenômeno cooperativo entre os momentos magnéticos das moléculas seria capaz de expli

car a existência de uma magnetização espontânea abaixo da temperatura de Curie. Finalmente, com a teoria de "campo molecular" ou de "campo médio" devida a Weiss<sup>5</sup> pôde-se começar a grande caminhada em busca do entendimento das transições de fase magnéticas.

Lenz<sup>6,7</sup>, em 1920, utilizando a antiga teoria quântica, sugeriu que os momentos magnéticos dos átomos em um cristal paramagnético eram livres para ter movimentos de rotação em torno de uma posição fixa de repouso numa rede e que estes momentos se orientavam quase que exclusivamente em duas direções opostas, tendo estas, em média, igual probabilidade. A partir disto, com a aplicação de um campo magnético que quebrasse a simetria entre estas duas direções, ele pode deduzir a lei de Curie ( $\chi_c \propto T^{-1}$ ). Com estas idéias Lenz conjecturou que se a energia potencial de um átomo com respeito a seus vizinhos fosse diferente em uma direção ou na direção oposta, poderia surgir uma direção natural do dipolo e teríamos a magnetização espontânea. Lenz propôs ao seu estudante de doutorado Ising<sup>8</sup> que calculasse a função de partição deste modelo de dois níveis (posteriormente conhecido como modelo de Ising) com interações entre primeiros vizinhos a uma dimensão. Ising ficou desapontado ao constatar que não havia magnetização espontânea a temperatura finita. Anos mais tarde<sup>9</sup> mostrou-se que para sistemas ferromagnéticos com interações invariantes por rotação com  $d > 2$  existia magnetização espontânea para temperaturas diferentes de zero. Em 1944, Onsager<sup>10</sup> resolveu exatamente o modelo de Ising a duas dimensões; podemos dizer que começou assim a era moderna no estudo de transições de fase.

Um outro modelo que tem despertado um enorme interesse tanto do ponto de vista teórico como experimental foi proposto, em 1952, por Domb e Potts<sup>11</sup> (que o estudou em sua tese de doutoramento). Este modelo conhecido como modelo de Potts com  $q$  estados consiste em supor que cada variável aleatória, associada a cada sítio de uma rede qualquer, pode assumir  $q$  estados. Ele é uma generalização do modelo de Ising pois a energia associada à interação entre as variáveis localizadas em sítios primeiros vizinhos da rede assume um valor se as variáveis estão em um mesmo estado e um outro valor, se estão em estados diferentes. Sendo, portanto, um modelo a dois níveis, e se fazemos  $q=2$ , obtemos o modelo de Ising.

Nos últimos 15 anos o modelo de Potts tem sido objeto de estudo tanto devido a sua riqueza como a sua relação com um grande número de problemas notáveis em estatística de rede, seu comportamento crítico também tem provado ser mais rico que o do modelo de Ising. Finalmente, podemos dizer que o modelo de Potts tem sido um importante teste fundamental para os diferentes métodos e aproximações (campo médio, grupo de renormalização, séries, Monte Carlo, etc.) no estudo da teoria de fenômenos críticos. Do ponto de vista experimental nos últimos anos têm sido identificadas várias substâncias e sistemas experimentais que podem ser considerados como realizações do modelo de Potts. Por exemplo, para  $q=2$ , podemos citar entre outros (veja o artigo de revisão de Jongh e Miedina<sup>12</sup>, 1974):  $\text{CoCs}_3\text{Br}_5$  para duas dimensões ( $d=2$ ),  $\text{CoCs}_3\text{Cl}_5$  (Wielinga e Col<sup>13</sup>, 1967) e  $\text{DyPO}_4$  (Wright e Col<sup>14</sup>, 1971) para  $d=3$ . Mukamei e Col<sup>16</sup> (1976) sugeriram que uma

substância ferromagnética cúbica com três eixos fáceis colocada em um campo magnético, que atua ao longo da diagonal do cubo, pode ser considerada como o modelo de Potts com três estados, fornecendo, assim, uma realização experimental em três dimensões. Para sistemas com  $q=4$  a discussão geral sobre o esquema de classificação de sistemas adsorvidos (Domany e col<sup>17</sup> (1978) Domany e Riedel<sup>18</sup> (1978) e Domany e Schick<sup>19</sup> (1979)) tem levado a uma grande quantidade de possíveis realizações do modelo em duas dimensões. Em três dimensões a realização do modelo com  $q=4$  (e com  $q=3$ ) em redes antiferromagnéticas cúbicas de face centradas tipo I (tais como CeAs) foi sugerida por Domany e col<sup>20</sup> (1981) Finalmente Lubensky e Isaacson<sup>21</sup> (1978) mostraram que certas transições nos processos de solidificação e vulcanização em polímeros ramificados são da mesma classe de universalidade que a do modelo de Potts com  $D \leq q \leq 1$ . Sugerimos o artigo de revisão do Wu<sup>22</sup> (1982) para um estudo didático do modelo de Potts.

Em resumo, vimos a importância do modelo de Potts com  $q$  estados, o qual está intimamente relacionado com outros modelos, tais como:

- (a) o modelo de Ising, o qual é um caso particular do modelo de Potts para  $q=2$ ;
- (b) o modelo de percolação de ligações em redes (regulares ou não) é isomorfo ao modelo de Potts puro no limite  $q \rightarrow 1$ <sup>23</sup>;
- (c) uma rede de resistores (regular ou não) é isomorfa ao modelo de Potts com  $q \rightarrow 0$ <sup>24</sup>.

Normalmente os tratamentos teóricos de transições de fase, sobre estes modelos, consideram redes homogêneas de tamanho infinito. Entretanto, as experiências são realizadas com amostras de tamanho finito, logo, pode ser necessário considerar os efeitos devidos a este tamanho finito através da análise de sua superfície. O comportamento teórico de sistemas magnéticos com uma superfície livre tem sido objeto de incessantes estudos por parte de vários pesquisadores, não só por sua riqueza intrínseca, como também por sua contribuição no entendimento das transições de fase volumétricas.

Como um dos primeiros trabalhos nesta área vale a pena ressaltar as investigações de Mills<sup>25</sup> (1971), o qual tem como modelo um volume semi-infinito ferromagnético de Ising no qual os spins da superfície livre interagem uns com os outros com constante acoplamento  $J_s$  que é diferente da do volume  $J_v$ . Para este modelo simples ele utilizou uma teoria de campo médio e previu uma fase de superfície para  $J_s$  maior que um valor crítico  $J_{sc}$ , ou seja, para  $J_s \geq J_{sc}$  o sistema está ordenado na superfície e desordenado no volume. Posteriormente, utilizando técnicas mais sofisticadas<sup>26,28</sup>, mais ainda semelhantes à aproximação de campo médio, mostrou-se que esta previsão era qualitativamente correta, sendo que os resultados quantitativos poderiam ser melhorados. Para uma revisão dos trabalhos nesta área até 1976 deve-se ler o artigo de Binder e Landau<sup>29</sup> (1976). A partir desta data vários pesquisadores têm utilizado a técnica de Grupo de Renormalização (GR) na investigação dos efeitos de superfície e interface. Entre os trabalhos que consideram um volume ferromagnético

tico de Ising semi-infinito temos os de Svrakic e Wortis<sup>30</sup> (1977); Burkhardt e Eisenriegler<sup>31,32</sup> (1977),(1978); Bray e Moore<sup>33</sup> (1977); Svrakic e col<sup>34</sup> (1980); Dunfield e Noolandi<sup>35</sup> (1980); Lipowsky e Wagner<sup>36</sup> (1981); Nagai e Toyonaga<sup>37</sup> (1981); Wortis e Svrakic<sup>38</sup> (1982). Neste modelo, em dimensão  $d > 2$ , o diagrama de fases consiste de três fases, nominalmente: volume ferromagnético (VF), superfície ferromagnética (SF) e paramagnética (P); no Capítulo 4 apresentamos uma discussão mais detalhada.

Com relação ao estudo de transições de fase em interfaces e superfícies livres para o modelo de Potts ferromagnético com  $q$  estados o comportamento qualitativo do diagrama de fases, para um valor de  $q$  fixo, é o mesmo do modelo de Ising. Dentre os vários trabalhos que utilizam a técnica de Grupo de Renormalização para estudar os problemas de interface e superfície livre no modelo ferromagnético de Potts, vale a pena mencionar: Lipowsky<sup>39,40</sup> (1982)(a),(b); Burkhardt e Eisenriegler<sup>(41)</sup> (1981); Law e Zhang<sup>42,43</sup> (1983),(1984); e mais recentemente Tsallis e Sarmiento<sup>44</sup> (1985); Costa e col<sup>45</sup> (1985); da Silva e col<sup>46</sup> (1985); como uma excelente revisão ver o artigo do Binder<sup>47</sup>(1983).

O estudo do comportamento crítico em superfícies é complicado pelo fato de que, além do efeito geométrico da perda de vizinhos, as interações microscópicas perto da superfície podem assumir valores bem diferentes daquelas no interior do volume. Como consequência a superfície pode ordenar a uma temperatura mais alta do que a do volume, ou ainda, exibir um fenômeno de ordenamento de natureza diferente daquela no interior do volume, tal como uma transição anti-ferromagnética na superfície de um material ferromagnético. Ape

sar das dificuldades de se detectar experimentalmente tais transições, com o aprimoramento na preparação de amostras, o surgimento de novas técnicas e a melhoria na precisão das medidas já começam a aparecer os primeiros resultados experimentais e estes, até o momento, parecem confirmar as teorias. Rau<sup>48</sup> (1982), utilizando técnica de espectroscopia de captura de elétrons, sugeriu que a superfície de Gd ferromagnético permanece ordenada a uma temperatura  $T_{CS} = 306K$  superior a do volume  $T_{CV} = 292K$  (onde  $T_C$  é a temperatura crítica). Rau e Eichner<sup>49</sup> (1981) também utilizaram esta técnica para estudar ordens locais em superfícies. Gidley e col<sup>50</sup> (1982), através de um estudo da superfície Ni(1,1,0), utilizando positrons polarizados de baixa energia, forneceu uma nova prova do magnetismo de superfície, obtendo para o expoente crítico  $\beta_1$  da magnetização na superfície  $m_1$  o valor  $0,7 \pm 0,1$ ; o qual é consistente com os resultados obtidos por Alvarado e col<sup>51,52</sup> (1982)(a)(b), utilizando a técnica de microscopia eletrônica. Esta técnica consiste em estudar a assimetria na intensidade de espalhamento de um feixe de elétrons com spins polarizados paralelos ou antiparalelos à magnetização do alvo. Sua utilização no estudo do magnetismo de superfície tornou-se possível pela descoberta de que a fotoemissão produzida pelo GdAs pode provocar uma intensa fonte de elétrons polarizados. Felcher<sup>53</sup> (1981), através de um processo no qual neutrons polarizados são refletidos em uma superfície de uma substância ferromagnética, mostrou que esses neutrons são sensíveis à magnetização perto da superfície bem como à magnetização no interior do volume, podendo através de medidas do neutron, determinar a dependência da magnetização na superfície com a temperatura.

Nosso objetivo é utilizar a técnica de Grupo de Renormalização no Espaço Real (ver, para maiores detalhes, o Capítulo 1) no estudo dos problemas de superfície livre e interface no modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados. Uma das motivações de nosso trabalho deveu-se em parte à descoberta do método do "corte-colapso"<sup>54</sup> (BCM) para a obtenção dos traços parciais para os sítios "internos" de uma célula de dois terminais (ver Capítulo 1 e Apêndice A para uma descrição do método BCM). Este método nos permite, através de sua operacionalização, trabalharmos com células relativamente grandes evoluindo, deste modo, em direção ao sistema físico que se está modelando. Com a utilização dessas células poderíamos melhorar os resultados obtidos através de outros métodos, tais como o do "deslocamento de ligações" de Migdal-Kadanoff<sup>55</sup>. Bem como verificar a "conjectura" de que ao aumentarmos o tamanho da célula os resultados obtidos com a técnica de Grupo de Renormalização no Espaço Real (GRER) deveriam melhorar. Por outro lado, muito pouco é conhecido no estudo de transições de fase em superfícies e sendo o GRER uma técnica relativamente simples, apesar de poderosa, podemos não só dirimir as dúvidas já existentes, como também fazermos novas propostas, principalmente no que se refere a pontos fixos, fronteiras e expoentes críticos.

Esta dissertação é organizada como se segue. No Capítulo 1 fazemos uma revisão do estudo de fenômenos críticos e do método do Grupo de Renormalização no Espaço Real; no Capítulo 2, com a intenção de melhor compreendermos as transições de fase magnéticas a duas dimensões, estudamos o comportamento crítico do modelo de Potts com ligações mistas na rede quadrada. Continuando a trabalhar em duas dimensões, no Capítulo 3 calculamos o compor-



tamento crítico de sistemas resistivos (Potts,  $q \rightarrow 0$ ) com ligações mistas na rede quadrada. No capítulo 4 consideramos um volume semi-infinito ferromagnético de Potts com  $q$  estados, tendo na superfície uma constante de acoplamento  $J_S$  e no restante do volume uma constante de acoplamento  $J_V$ . Calculamos a fronteira crítica e os expoentes críticos para  $0 < q < 3$ . No capítulo 5 consideramos dois volumes semi-infinitos com constantes de acoplamento  $J_1$  e  $J_2$  separados por uma interface de constante de acoplamento  $J_S$  acoplada aos volumes respectivamente por  $J_{\perp 1}$  e  $J_{\perp 2}$ . Estudamos dois casos particulares deste modelo, respectivamente  $J_1 = J_2, J_{\perp 1} = J_{\perp 2}$ ; e  $J_2 = J_{\perp 2} = 0$  correspondentes a um problema de interface e outro de superfície livre. Para melhor simular um sistema físico real estudamos no Capítulo 6 o comportamento de um sistema, no qual um volume semi-infinito ferromagnético de Ising é limitado por uma superfície ferromagnética Heisenberg anisotrópica. Finalmente, no Capítulo 7, investigamos o comportamento crítico de um tipo particular de fractal, o tapete de Sierpinski com ligações ferromagnéticas de Potts, o qual, como veremos no Capítulo, devido ao fato de ter ligações na borda de buracos, permite o estudo de defeitos. No Capítulo 8 são apresentadas as conclusões. Detalhes operacionais são dados nos Apêndices A, B e C.

## CAPÍTULO 1 - FENÔMENOS CRÍTICOS E O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO REAL

A teoria de Grupo de Renormalização teve uma importância fundamental no estudo quantitativo dos fenômenos críticos. As teorias anteriores, por exemplo a teoria de campo médio de Landau, algumas vezes eram capazes de reproduzir qualitativamente os diagramas de fases, mas elas falhavam do ponto de vista quantitativo perto dos pontos críticos, onde o comportamento crítico era interessante, devido ao seu caráter universal e não trivial. Antes de falarmos sobre Grupo de Renormalização, gostaríamos de fazer uma ligeira introdução ao estudo das transições de fase magnéticas.

### 1.1 - Transições de Fase Magnéticas

Existem várias substâncias na natureza capazes de passarem, com a variação de sua temperatura, de um estado para outro. Por exemplo, suponha que fornecemos calor à água, se formos capazes de medir a sua densidade veremos que ela irá variar rapidamente e drasticamente quando sua temperatura é aumentada de  $99^{\circ}\text{C}$  a  $101^{\circ}\text{C}$  (sob pressão normal); ela decresce por um fator de 1600 quando a água passa do estado líquido para o gasoso. Este fenômeno é conhecido como uma transição de fase.

Consideremos, agora, uma barra de ferro inicialmente desmagnetizada. Apliquemos ao longo do seu eixo um forte campo magnético  $H$ . Se formos capazes de medir a magnetização da barra veremos que, depois de um certo tempo, ela atingirá um valor de

equilíbrio  $M$ . Retirando agora o campo,  $M$  irá decrescer até um valor não nulo, ou seja para  $H=0$  teremos uma magnetização espontânea  $M_0$ . Na FIGURA 1.1.1a representamos a magnetização ( $M$ ) como função do campo magnético aplicado<sup>56</sup> ( $H$ ). É importante observarmos que para  $H$  tendendo a zero, quando o campo magnético está aplicado no sentido contrário, obtemos para a magnetização o valor  $-M_0$ . Logo, para  $H=0$  teremos dois valores distintos para a magnetização ( $+M_0$  e  $-M_0$ ) de acordo com o sentido do campo magnético aplicado. Este fato pode ser comparado ao que acontece com a densidade de um gás na transição de fase líquido-gás. Isto acontece à temperatura ambiente; suponha agora que começamos a variar a temperatura. O gráfico de  $M$  em função de  $H$  será semelhante, mas  $M_0$  começa a decrescer. Quando  $T$  atinge um valor crítico  $T_c$  (temperatura de Curie)  $M_0$  anula-se e  $M$  torna-se uma função contínua de  $H$ , com inclinação infinita (susceptibilidade) em  $H=0$ , como na FIGURA 1.1.1b. Se continuarmos a aumentar a temperatura,  $M$  permanece uma função contínua de  $H$ , tornando-se analítica no ponto  $H=0$ , FIGURA 1.1.c.

Podemos expressar a variação da magnetização com a temperatura no plano  $T$ - $H$ , FIGURA 1.1.2. Atravessando a região ( $H=0$ ,  $0 < T < T_c$ ), a magnetização sofre uma descontinuidade, a qual decresce ao longo do eixo da temperatura, sendo nula no ponto  $T=T_c$ , o qual é chamado de ponto crítico. Grandezas tais como a magnetização para transições de fase magnéticas e a variação de densidade para transições de fase líquido-gás são chamadas de parâmetro de ordem.

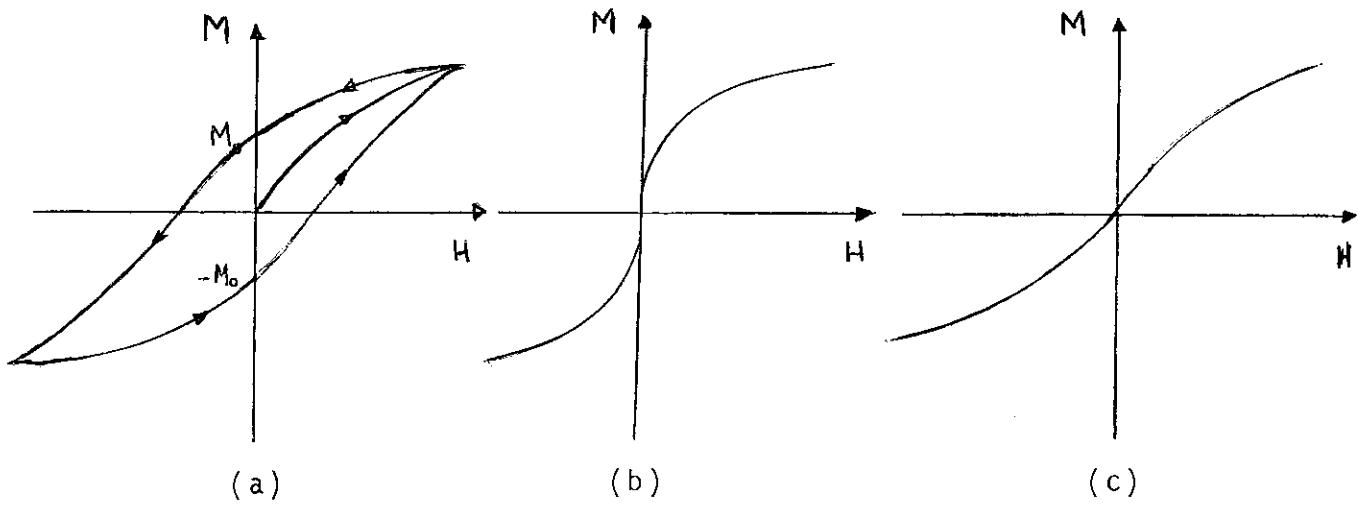


FIGURA 1.1.1 - Gráficos da Magnetização em função do campo magnético: (a)  $T < T_c$ ; (b)  $T = T_c$ ; (c)  $T > T_c$

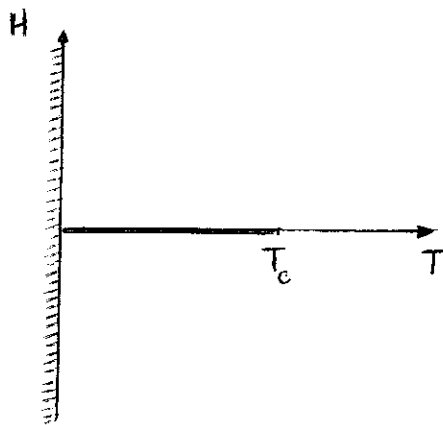


FIGURA 1.1.2 - Diagrama de fase típico de uma substância ferromagnética

Quando, durante uma transição de fase, existe uma descontinuidade no parâmetro de ordem, dizemos que a transição de fase é de 1ª ordem (Landau e Lifshitz<sup>57</sup> (1958); Stanley<sup>58</sup> (1971)); quando não existe a descontinuidade, a transição é dita de 2ª ordem. Tendo em vista o exposto acima, qualquer estudo de uma transição de fase deve especificar o parâmetro de ordem, predizer a ordem da transição e descrever as propriedades do sistema nas vizinhanças da transição. Nas proximidades de um ponto de transição de fase um sistema possui duas diferentes fases, respectivamente estáveis em duas regiões vizinhas, o que pode acarretar a existência de flutuações. Consideremos, por exemplo, um material ferromagnético cujo diagrama de fases seja o da FIGURA 1.1.2. Para  $T > T_c$ , a fase estável é a desordenada; entretanto, se  $T$  é muito próxima de  $T_c$ , a fase ordenada é somente um pouco menos estável, logo irão aparecer regiões ordenadas localmente, as quais persistem durante um certo tempo. Podemos portanto, definir, para tais flutuações, o comprimento de correlação  $\xi$ , medindo a sua extensão média, e o tempo de correlação  $\zeta$ , medindo o seu tempo de vida médio. Estes ( $\xi$  e  $\zeta$ ) aumentam quando nos aproximamos do ponto crítico. De uma maneira aproximada, o comprimento de correlação  $\xi$  governa a estática do fenômeno crítico, enquanto que o tempo de correlação  $\zeta$  governa a sua dinâmica. Limitar-nos-emos aqui a falar do comprimento de correlação, o qual é uma função da temperatura se os outros parâmetros são fixos. O que acontece com  $\xi$  para  $T \rightarrow T_c$ ? Se  $\xi$  diverge para  $T \rightarrow T_c$  então as flutuações são completamente dominantes, a transição é dita de 2ª ordem, em caso contrário, sua influência é apenas parcial e a transição é dita de 1ª ordem (veja a Ref.59).

Perto de um ponto crítico (isto é, de uma transição de 2ª ordem) as funções termodinâmicas obedecem a leis de potência, com expoentes que podem não ser inteiros. É conveniente definirmos aqui a temperatura reduzida  $t$  como:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (1.1)$$

Eis alguns dos comportamentos destas funções, próximos de  $T_c$ :

$$M_0(T) \sim (-t)^\beta \quad t \rightarrow 0^- \quad (1.2)$$

$$M(H, T_c) \sim H^{1/\delta} \quad H \rightarrow 0 \quad (1.3)$$

$$\chi(0, T) \sim t^{-\gamma} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (1.4)$$

$$\chi(0, T) \sim (-t)^{-\gamma'} \quad t \rightarrow 0^- \quad (1.5)$$

$$\xi(T) \sim t^{-\nu} \quad t \rightarrow 0 \quad (1.6)$$

$$C_H(T) \sim (-t)^{-\alpha'} \quad t \rightarrow 0^- \quad (1.7)$$

$$C_H(t) \sim t^{-\alpha} \quad t \rightarrow 0^+ \quad (1.8)$$

Os expoentes  $\beta$ ,  $\delta$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma'$ ,  $\nu$ ,  $\alpha'$ , e  $\alpha$  são números independentes de  $H$  e  $T$  e são conhecidos com o nome de expoentes críticos. Notável é que, apesar das singularidades no comportamento das quantidades termodinâmicas, os expoentes críticos não assumem valores quaisquer; diferentes sistemas, sofrendo as mais diversas classes de transições, podem pertencer a um pequeno

número de classes, cada uma delas especificada por uma série de valores dos expoentes. Além disso, observamos entre os expoentes, algumas relações simples tais como:  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ , chamadas leis de escala, cujo grau de universalidade é muito maior.

As leis de escala são automaticamente satisfeitas se supomos que a parte singular da energia livre e da função de correlação são funções homogêneas de seus argumentos. Entendemos que uma função  $f(x,y)$  é homogênea se ela pode ser escrita na forma:

$$f(x,y) = x^\lambda g\left(\frac{y}{x^\mu}\right) \quad (1.9)$$

Além da hipótese de homogeneidade, um outro fator importante é o conceito de universalidade pelo qual os expoentes críticos são ditos universais, ou seja independentes dos parâmetros do Hamiltoniano, dependendo somente da dimensionalidade do sistema e de algumas simetrias relevantes no Hamiltoniano. Entretanto, temos exceções tais como a do modelo de "oito-vértices" bidimensional, cujos expoentes variam continuamente com os parâmetros de Hamiltoniano. Apesar desta violação na hipótese de universalidade, acredita-se que tais violações ocorrem somente para uma classe muito especial de Hamiltonianos. Uma outra coisa que devemos destacar é que, apesar da hipótese de escala e do conceito de universalidade serem agrupados juntos, eles são independentes.

Até o momento não foi dito como calcularmos as funções termodinâmicas, tais como a magnetização  $M(H,T)$ , conhecendo as forças microscópicas entre os componentes do sistema. Gibbs<sup>60</sup>,

em 1902, resolveu este problema, o qual podemos resumir da seguinte forma. Considere um sistema com  $n$  configurações e seja  $\mathcal{H}(n)$  o seu Hamiltoniano. A função de partição será:

$$Z = \sum_n e^{-\mathcal{H}(n)/k_B T} \quad (1.10)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e a soma é efetuada sobre todos os estados acessíveis do sistema. A energia livre será dada por:

$$F = - k_B T \ln Z \quad (1.11)$$

A probabilidade de se encontrar o sistema em um dado estado  $s$  é igual a:

$$P = Z^{-1} e^{-\mathcal{H}(s)/k_B T} \quad (1.12)$$

Seja  $A$  alguma propriedade observável do sistema por exemplo: a energia total ou a magnetização; no estado  $s$  este observável terá o valor  $A(s)$ . A sua média termodinâmica é dada por:

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_s A(s) e^{-\mathcal{H}(s)/k_B T} \quad (1.13)$$

A energia interna é igual a:

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle = Z^{-1} \sum_s \mathcal{H}(s) e^{-\mathcal{H}(s)/k_B T} \quad (1.14A)$$



ou, utilizando as expressões (1.10) e (1.11), temos:

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} (F/T) \quad (1.14B)$$

O problema fundamental da Mecânica Estatística é calcular a função de partição  $Z$ , ou seja, efetuar a soma sobre todas os estados acessíveis do sistema (Eq. 1.10). As propriedades termodinâmicas são, então, obtidas por diferenciação desta equação. Infelizmente, para um sistema físico de tamanho macroscópico com interações microscópicas o cálculo exato de  $Z$  é extremamente difícil. Mesmo para modelos relativamente simples, tal como o de Ising, muito pouca coisa se conhece exatamente (por exemplo, não se conhece o valor exato de  $Z$  para o modelo de Ising puro a três dimensões). Daí a necessidade dos métodos aproximativos, dentre os quais o método de Grupo de Renormalização (Wilson<sup>61</sup>, (1971)) ocupa um papel de fundamental importância no estudo dos fenômenos críticos.

## 1.2 - Grupo de Renormalização

O Grupo de Renormalização é um método de aproximação que tem como objetivo tratar a classe de problemas em física que envolve um número muito grande de graus de liberdade. Ele vem sendo utilizado em várias áreas da física, entre elas, a Teoria de Campo e a Mecânica Estatística (veja para uma revisão sobre Grupo de Renormalização (GR): Fisher<sup>62</sup> (1974); Ma<sup>63</sup> (1973); Wegner<sup>64</sup> (1973), (1975); Wilson e Kogut<sup>65</sup> (1974); o volume seis da coleção Domb and Green<sup>66</sup> (1976)).

As idéias do Grupo de Renormalização (GR) estão relacionadas com a física dos pontos críticos e tem como ponto de partida o fato de que as flutuações mais importantes no ponto crítico são aquelas que se estendem até distâncias da ordem do comprimento de correlação, o qual é infinito para transições de fase de 2ª ordem. É esta a razão pela qual o Grupo de Renormalização fornece excelentes resultados, inclusive temperaturas críticas exatas, para transições de fase de 2ª ordem.

O termo aproximação de GR está sendo aqui utilizado como sendo uma teoria das propriedades de transformação dos Hamiltonianos efetivos sobre dilatação. Existem determinados Hamiltonianos, conhecidos como Hamiltonianos de pontos fixos que, para determinados valores de seus parâmetros permanecem invariantes sobre esta operação. Kadanoff<sup>67</sup>, em 1966, formulou um método que utilizou tal transformação, para derivar as propriedades de homogeneidade e as relações entre os expoentes críticos, sem entretanto justificar analiticamente o seu método. Wilson<sup>61</sup>, em 1971, mostrou como os procedimentos de escala de Kadanoff poderiam ser explicitamente obtidos, perto do ponto fixo, a partir de um fluxo do espaço de parâmetro do Hamiltoniano. Ele fez o primeiro cálculo prático de Grupo de Renormalização do fluxo induzido pela eliminação das componentes de Fourier de pequeno comprimento de onda do parâmetro de ordem do campo. Esta descoberta de um procedimento de expansão sistemático em  $\epsilon$  para sistemas a  $d=4-\epsilon$  dimensões deu origem a uma série de cálculos de quantidades críticas, como função da dimensão  $d$  e da dimensionalidade do parâmetro de ordem  $n$  (veja o artigo de Wilson e Kogut<sup>65</sup> (1974) para o Grupo de Renormalização no espaço recíproco).

Uma outra classe de procedimento de Grupo de Renormalização, que trabalha diretamente com os Hamiltonianos microscópicos, é o Grupo de Renormalização no Espaço Real (GRER), onde, como o próprio nome diz, a renormalização é feita no Espaço Real. Não existe uma receita única para o GRER e temos um considerável número de técnicas desenvolvidas. Limitar-nos-emos aqui, a introduzir o Grupo de Renormalização no Espaço Real e a seguir descreveremos dois procedimentos muito utilizados, como o método do movimento de ligações de Migdal-Kadanoff<sup>68</sup> (1976) e um método desenvolvido para se calcular o traço parcial sobre as variáveis internas em grafos de dois terminais, conhecido com o nome de Método do Corte-Colapso (BCM), devido a Tsallis e Levy<sup>54</sup> (1981) para o modelo de Potts com q estados, extendido posteriormente para rede de resistores (Tsallis e Col<sup>69</sup> (1983)) e para o modelo Z(4) (Mariz e Col<sup>70</sup> (1985); Tsallis e Souletie<sup>70</sup> (1985)).

### 1.2.1 - O Grupo de Renormalização no Espaço Real

Exemplificaremos aqui o método utilizando spins interagentes de Ising. Esta simplificação tem o objetivo didático de facilitar o entendimento daqueles que nunca trabalharam com o Grupo de Renormalização, podendo entretanto, ser estendida para outros tipos de interações de spins. Consideremos uma rede com N sítios, cada um dos quais sendo ocupado por um spin  $s_i$ , tendo valores  $s_i = \pm 1$ . A energia de interação deste sistema com N graus de liberdade é dada por:

$$\mathcal{H}(s) = -H \sum_i s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (1.15)$$

onde o primeiro termo representa a energia magnética, devido a

um campo magnético aplicado e o segundo a energia de interação entre sítios vizinhos somando sobre todos os pares  $\langle i, j \rangle$  de primeiros vizinhos na rede com condições de contorno periódicas. A energia livre  $F$  é dada por:

$$\frac{1}{k_B T} F = -\log \text{Tr} \exp[-\mathcal{H}(s)/k_B T] \quad (1.16)$$

onde o traço é efetuado sobre todas as  $2^N$  configurações dos  $N$  spins e  $1/k_B T$  é o fator de Boltzmann.

Por uma transformação de renormalização nós entendemos mapear o Hamiltoniano  $\mathcal{H}(s)$  em um Hamiltoniano  $\mathcal{H}'(s')$  para um sistema que possua um menor número  $N'$  de graus de liberdade. Este mapeamento é feito de modo que a energia livre de ambos os sistemas esteja simplesmente relacionada. Isto pode ser feito introduzindo um Hamiltoniano de acoplamento  $\mathcal{H}_I(s', s)$  com a propriedade (supomos que  $\mathcal{H}(s)$  e  $\mathcal{H}'(s')$  comutam):

$$\text{Tr}' \exp[-\mathcal{H}_I(s', s)/k_B T] = 1 \quad (1.17)$$

de modo que a energia livre do sistema  $\mathcal{H}(s)$  com acoplamento  $\mathcal{H}_I(s', s)$  seja igual a  $F$ :

$$\frac{1}{k_B T} F = -\log \text{Tr} \text{Tr}' \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} [\mathcal{H}_I(s', s) + \mathcal{H}(s)] \right\} = \log \text{Tr} \exp \left[ -\mathcal{H}(s)/k_B T \right] \quad (1.18)$$

Definimos agora  $\mathcal{H}'(s')$ , tal que:

$$-\frac{1}{k_B T} [G + \mathcal{H}'(s')] = \log \text{Tr} \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} [\mathcal{H}_I(s', s) + \mathcal{H}(s)] \right\} \quad (1.19)$$

onde  $G$  é determinado pela restrição

$$\text{Tr}' [-\mathcal{H}'(s')/k_B T] = 0 \quad (1.20)$$

supõe-se inicialmente que  $\mathcal{H}(s)$  tem traço nulo, logo, de acordo com (1.17), a energia livre  $F'$  de  $\mathcal{H}'(s')$

$$\frac{1}{k_B T} F' = -\log \text{Tr}' \exp[-\mathcal{H}'(s')/k_B T] \quad (1.21)$$

está relacionada a  $F$  por:

$$F = G + F' \quad (1.22)$$

Em lugar de considerarmos o Hamiltoniano no espaço recíproco, consideramos a transformação (1.22) no espaço de parâmetros das constantes de interações. Denominemos o conjunto de parâmetros de interação (por exemplo  $-H/k_B T$  e  $-J/k_B T$ , onde  $H$  e  $J$  aparecem na eq. (1.15)) por  $K$ . A eq. (1.19) nos mostra que os  $K'$  de  $\mathcal{H}(s)$  são funções de  $K$ , e definindo  $g \equiv G/N$ , temos:

$$K' = K'(K) \quad (1.23)$$

$$g = g(K)$$

As energias livres  $F$  e  $F'$  são funções de  $(N, K)$  e  $(N', K')$ , respectivamente. No limite termodinâmico temos para a energia livre por sítio:

$$f(K) = g(K) + b^{-d} f(K'(K)) \quad (1.24)$$

onde introduzimos o fator de escala linear

$$b^d = N/N' \quad (1.25)$$

Embora a eq. (1.24) estabeleça somente uma relação entre as energias livres em diferentes pontos  $K$  e  $K'$  do espaço de parâmetros, ela contém através de iterações, a solução para a energia livre. Se denominarmos a seqüência de pontos que são obtidos para  $K$ , por meio de sucessivas interações das eqs. (1.23) por  $K, K', \dots, K^{(j)}, \dots$ , podemos resolver a eq. (1.24) através de

$$f(K) = \sum_{j=0}^{\infty} b^{-dj} g(K^{(j)}) \quad (1.26)$$

com a condição de contorno:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} b^{-dj} f(K^{(j+1)}) \rightarrow 0 \quad (1.27)$$

A equação (1.26) nos dá a expressão da energia livre em termos da transformação de renormalização (1.23). Esta última é a mais utilizada no estudo dos fenômenos críticos e tem duas propriedades muito importantes (se o sistema exibe transição de fase a  $T$  finito)

i) existe um ponto fixo não trivial tal que

$$K^* = K'(K^*) \quad (1.28)$$

ii) nas proximidades de  $K^*$  as funções  $K'(K)$  e  $g(K)$  são regulares.

Dentro deste contexto vale a pena destacar a essência do método de Grupo de Renormalização: explicar as singularidades em  $f(K)$  em termos das funções regulares  $g(K)$  e  $K'(K)$  através do uso da eq. (1.24). Mesmo sem cálculo, com o uso da suposição de regularidade, podemos deduzir certas propriedades. Por exemplo, se olharmos para a eq. (1.24), vemos que se  $f(K)$  é singular para um da valor de  $K$ , também o será para o valor correspondente de  $K'$ . Logo, pontos de singularidades semelhantes (transição de fase, pontos críticos) formam sub-espacos invariantes da transformação de renormalização. Estamos aqui interessados em tais sub-espacos. No nosso trabalho preocupamo-nos apenas com as eqs. (1.23) que nos fornecem as fronteiras críticas e os expoentes críticos.

### 1.2.2 - Método do Movimento de Ligações

Iremos aqui, novamente, limitar-nos ao modelo de Ising, ressaltando entretanto, que este método pode ser aplicado a outros sistemas de spins. A transformação de renormalização foi feita pela primeira vez por Migdal (1976) sendo reinterpretada, utilizando as idéias de movimento de ligações por Kadanoff (1976) (veja a Ref. (68)). Na derivação de Kadanoff, ligações são movidas de modo que os spins possam ser eliminados através de uma decimação a uma dimensão. Explicaremos inicialmente a decimação unidimensional.

Suponha uma cadeia linear com  $N$  sítios, e em cada um deles coloquemos um spin de Ising  $s_i$ . Admitimos que existem apenas interações entre primeiros vizinhos e que não existe campo externo FIGURA 1.2.1a. O Hamiltoniano é dado por:

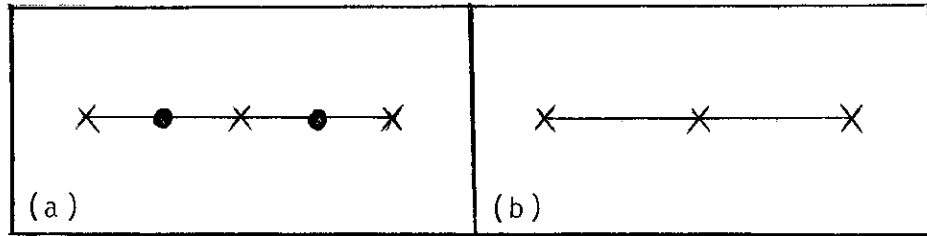


FIGURA 1.2.1 - Sistema unidimensional de spins:  
 (a) antes da decimação;  
 (b) depois da decimação

$$\mathcal{H} = K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (1.29)$$

onde  $K = J/k_B T$ . A função de partição é igual a:

$$Z(\mathcal{H}) = \sum_{s_1, \dots, s_{N-1}} e^{K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} \quad (1.30)$$

Vamos agora "decimar" a cadeia somando sobre os spins marcados por pontos. A nova cadeia consiste dos spins restantes (indicados por cruces, FIGURA 1.2.1b que estão agora separados de duas unidades. O fator de escala  $b$ , neste exemplo é igual a 2. Impõe-se que a função de partição permaneça invariante sobre a decimação.

Para uma cadeia linear com um fator de escala  $b$  qualquer inteiro (e para o modelo de Ising com interações entre primeiros vizinhos), a constante de acoplamento renormalizada  $K'$  ( $K' = J'/k_B T$ ) é dada por:

$$\exp(K'_0 + K'_L s'_L s'_M) = \sum_{s_1, \dots, s_{b-1}} \exp[K(s_L s_1 + s_1 s_2 + \dots + s_{b-2} s_{b-1} + s_{b-1} s'_M)] \quad (1.31)$$

na qual os spins  $s_1, \dots, s_{b-1}$  que separam os dois spins sobreviventes são decimados, e  $K'_0$  é um fator de correção para levar em



consideração a contribuição dos graus de liberdade de curto alcance na energia livre.

Para acharmos  $K'=K'(K)$ , utilizamos a igualdade:

$$\exp(K s_i s_j) = (\cosh K)(1+s_i s_j \tanh K) \quad (1.32)$$

e substituindo esta expressão em ambos os lados da equação (1.3.1), ao efetuarmos o somatório teremos a relação de recorrência:

$$K' = \text{arc tanh} (\tanh K)^b \quad (1.33)$$

ou 
$$K' = R^{(b)}(K) \quad (1.34)$$

A relação de recorrência de Migdal<sup>68</sup> para o modelo de Ising em uma rede hipercúbica a  $d$  dimensões é uma generalização simples do resultado a uma dimensão, ou seja:

$$K' = b^{d-1} \text{arc tanh} (\tanh K)^b \quad (1.35)$$

ou 
$$K' = R^{(b)}(b^{d-1}K) \quad (1.36)$$

a equação acima é exata para  $d=1$ . Kadanoff<sup>68</sup> propôs uma versão modificada da transformação de renormalização de Migdal para sistemas anisotrópicos. Para exemplificação, consideremos uma rede quadrada,  $d=2$  e  $b=3$ , com constantes de acoplamento  $K_1$  e  $K_2$  (FIGURA 1.2.2a, os spins a serem dizimados são representados por pontos, os restantes por cruzes). Deslocam-se para as bordas dos quadrados as ligações verticais  $K_2$  (FIGURA 1.2.2b); efetua-se

a decimação sobre os spins ao longo das cadeias horizontais, de modo a obterem-se ligações equivalentes  $\tilde{K}_1$  em cada fila horizontal (FIGURA 1.2.2c). Movem-se as ligações equivalentes  $\tilde{K}_1$  ao longo da horizontal para as bordas dos quadrados (FIGURA 1.2.2d). Dizimam-se os spins verticais.

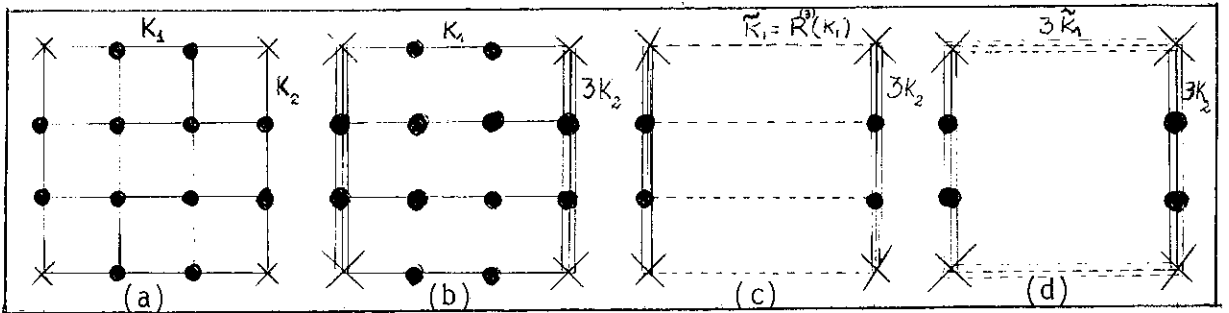


FIGURA 1.2.2 - Movimento de ligações e decimação correspondentes à equação (1.39)

As equações de renormalização são:

$$K'_1 = 3 R^{(3)}(K_1) \quad (1.37)$$

$$K'_2 = R^{(3)}(3K_2) \quad (1.38)$$

Para uma rede hipercúbica d-dimensional estas equações são iguais a

$$K'_n = b^{d-n} R^{(b)}(b^{n-1}K_n) \quad (1.39)$$

onde  $n = 1, 2, \dots, d$ . A equação (1.35) será igual a eq.(1.39) se substituirmos  $K$  e  $K'$  respectivamente por  $b^{n-d}K_n$  e  $b^{n-d}K'_n$ . Logo, a equação (1.39) tem um ponto fixo  $K^*_n = b^{d-n}K^*$ ,  $n=1, 2, \dots, d$ , para cada ponto fixo  $K^*$  da equação (1.35). Devemos observar

ainda que o ponto fixo de (1.39) é anisotrópico, exceto no limite  $b \rightarrow 1$  de uma transformação infinitesimal. Este é um limite conveniente se o Hamiltoniano inicial é anisotrópico, já que a transformação (1.39) gera uma anisotropia não natural. O que se faz normalmente para modelos isotrópicos em redes hipercúbicas é formular o problema considerando a anisotropia e depois tomar o limite  $b \rightarrow 1$ , restaurando assim a isotropia.

### 1.2.3 - Método do Corte-Colapso

Dentro do campo de procedimento do Grupo de Renormalização no Espaço Real, existe um estágio operacional central que consiste em realizar contagem sobre todas as configurações possíveis do que podemos chamar graus de liberdade internos de uma célula (normalmente infinita), enquanto que, o que podemos chamar graus de liberdade externos, ou terminais (da mesma célula) são mantidos fixos em configurações particulares convenientes (isto corresponde ao processo de decimação). O método do corte-colapso (BCM para "break-collapse method") permite a obtenção das relações de recorrência sem efetuar tal contagem de configurações. Em resumo, dada uma rede qualquer, escolhido o grafo de dois terminais para representá-la, o método BCM faz o traço parcial sobre as configurações internas do sistema, obtendo-se assim, as equações de recorrência. Para apresentarmos as propriedades básicas do BCM, consideremos a  $i$ -ésima ligação de um modelo ferromagnético de Potts de  $q$  estados de uma certa célula, seu Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H}_i = -q J_i \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.40)$$

onde  $J_i$  é a constante de acoplamento e  $\sigma$  e  $\sigma'$  são as variáveis associadas respectivamente a dois sítios da ligação. Se um sítio está em uma dada configuração, a probabilidade para um outro sítio estar na mesma configuração (sítio conectado) será  $p_i^c$ , enquanto que  $p_i^d$  será a probabilidade para o sítio estar em configuração diferente (sítio desconectado), podemos definir a transmissividade térmica<sup>54</sup>,  $t_i$ , como:

$$t_i \equiv p_i^c - p_i^d = \frac{1 - e^{-qJ_i/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ_i/k_B T}} \quad (1.41)$$

para  $q=1$  existe um isomorfismo entre  $t$  e a probabilidade de percolação de ligações (veja a Ref. 71 e outras referências aí contidas para maiores detalhes).

Se temos duas ligações (com transmissividades  $t_1$  e  $t_2$ ) em série a transmissividade equivalente é dada por:

$$t_s = t_1 t_2 \quad (1.42)$$

Para um arranjo de duas ligações em paralelo temos:

$$t_p^D = t_1^D t_2^D \quad (1.43)$$

onde:

$$t_i^D \equiv \frac{1 - t_i}{1 + (q-1)t_i} \quad (i=1,2,p) \quad (1.44)$$

(D significa dual). A generalização destas equações para  $N$  ligações é facilmente obtida.

O BCM torna possível o cálculo da transmissividade e equivalente  $G(\{t_i\})$  para qualquer grafo de dois terminais redutíveis ou não a seqüência série-paralelo. Consideremos um grafo de dois terminais, cada ligação tem transmissividade  $\{t_i\}$ , logo, a transmissividade equivalente será dada por:

$$G(\{t_i\}) = \frac{N(\{t_i\})}{D(\{t_i\})} \quad (1.45)$$

onde ambos numerador  $N(\{t_i\})$  e o denominador  $D(\{t_i\})$  são funções multilineares de  $\{t_i\}$ . Escolhemos agora uma ligação interna  $j$  e impomos  $t_j=0$  (corte) e logo após  $t_j=1$  (colapso), temos agora duas novas transmissividades equivalentes denominadas por  $G_j^b$  e  $G_j^c$ , tal que:

$$G_j^b(\{t_i\}') = \frac{N_i^b(\{t_i\}')}{D_j^b(\{t_i\}')} \quad (1.46)$$

e

$$G_j^c(\{t_i\}') = \frac{N_j^c(\{t_i\}')}{D_j^c(\{t_i\}')} \quad (1.47)$$

onde o conjunto  $\{t_i\}'$  exclui agora  $t_j$ . A multilinearidade de ambos  $N$  e  $D$  leva a:

$$N(\{t_i\}) = (1-t_j)N_j^b(\{t_i\}') + t_j N_j^c(\{t_i\}') \quad (1.48)$$

e

$$D(\{t_i\}) = (1-t_j)D_j^b(\{t_i\}') + t_j D_j^c(\{t_i\}') \quad (1.49)$$

O uso seqüencial destas equações é o que chamamos método de corte-colapso (BCM), e que torna possível o cálculo das equações de recorrência para um grafo qualquer com dois terminais. Nos Capítulos 2 e 3 serão feitas duas aplicações do método do corte-colapso, respectivamente, para o modelo de Potts com  $q$  estados e para um sistema de resistores.

## CAPÍTULO 2 - MODELO RANDÔMICO DE POTTS NA REDE QUADRADA: CRITICALIDADE E BIFURCAÇÃO

### 2.1 - Introdução

Nos últimos anos vários pesquisadores têm-se dedicado ao estudo dos sistemas magnéticos desordenados. Em particular, uma grande quantidade de trabalhos teóricos tem sido feitos com modelos particulares tais como: Ising (veja Ref. 72 e referências aí contidas), Heisenberg (Ref. 73) e Potts (Ref. 74; para uma excelente revisão sobre o modelo de Potts, ver Ref. 22). Os sistemas magnéticos desordenados podem ser divididos, em geral, em duas categorias: condutores (onde existe transporte eletrônico) e isolantes (onde não existe transporte). Preocupar-nos-emos aqui apenas com a segunda categoria, ou seja, com sistemas magnéticos desordenados isolantes. Tais sistemas podem ser obtidos experimentalmente em compostos do tipo:  $\text{Co}(\text{S}_x \text{Se}_{1-x})_2$ <sup>75</sup>,  $\text{K}_2 \text{Mn}_x \text{Fe}_{1-x} \text{F}_4$ <sup>76</sup>,  $\text{Fe}_x \text{Mg}_{1-x} \text{Cl}_2$ <sup>77</sup>, etc, onde se faz variar a concentração dos íons magnéticos. Existem duas maneiras básicas de se preparar estes compostos:

- (a) recozido: após a preparação da amostra à alta temperatura o sistema é esfriado lentamente, dando tempo para que os íons da amostra se coloquem na posição de mais baixa energia.
- (b) temperado: o esfriamento se faz de maneira brusca, ficando o sistema na configuração em que se encontrava na hora em que começou o esfriamento (geralmente um estado metastável).

Neste trabalho estudaremos o modelo de Potts com  $q$  estados, temperado, na rede quadrada com ligações randômicas, que devido à sua riqueza, tem recebido recentemente especial atenção. Em particular, o modelo de Potts randômico tem sido recentemente estudado dentro da aproximação de campo médio<sup>78,79</sup>, através de relações de dualidade<sup>80-84</sup>, e Grupo de Renormalização no Espaço Real (RG)<sup>85,86</sup>. Um dos aspectos interessantes do modelo de Potts está relacionado com o critério de Harris<sup>87-90</sup>, inicialmente estabelecido para o modelo de Ising ( $q=2$ ) mas provavelmente correto para qualquer valor de  $q$  (no mínimo até onde existe transição de 2ª ordem). De acordo com este critério, se o expoente crítico do calor específico  $\alpha$  ( $C \propto |T - T_c|^{-\alpha}$ ) do modelo puro é negativo (positivo), o conjunto de expoentes críticos do modelo diluído ou, generalizando, do modelo randômico é (não é) a do modelo puro; na linguagem de grupo de renormalização, um novo ponto fixo, nominalmente o randômico, é esperado aparecer para  $\alpha > 0$ . Além disso, se supomos a hipótese de hiperescala (isto é,  $2-\alpha=d\nu$ , onde  $d$  é a dimensionalidade do sistema e  $\nu$  o expoente crítico do comprimento de correlação ( $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$ )), a fronteira entre os regimes críticos puro e randômico deve corresponder a  $\nu=2/d$ ; para o modelo ferromagnético planar de Potts, isto implica em  $\nu=1$  quando  $q=2$ . Entretanto, este fato está provavelmente associado com o limite termodinâmico (sistema macroscópico), e em princípio, não existe razão para se manter invariante dentro da aproximação de grupo de renormalização com grafos finitos, a qual está frequentemente associada a redes hierárquicas (e não a redes de Bravais). Analisamos aqui este problema aproximando a rede quadrada por grafos autoduais; procedimento este já utilizado na Ref. 72 ao tratar o modelo ferromagnético de Ising com ligações mistas. Cal



culamos a temperatura crítica  $T_c$  bem como os expoentes críticos  $\nu$  e  $\phi$  (expoente de "crossover") para o sistema ferromagnético de Potts com ligações mistas. Este capítulo é organizado da seguinte forma: nas seções 2.2 e 2.3 introduzimos o modelo e o formalismo de RG, respectivamente, e na seção 2.4 apresentamos os resultados (que são sensivelmente precisos para as temperaturas críticas, mas somente aproximados para os expoentes críticos); finalmente concluímos na seção 2.5.

## 2.2 - Modelo

Consideremos o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -q \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (\sigma_i = 1, 2, \dots, q, \forall i) \quad (2.1)$$

onde somamos sobre todos os pares  $i, j$  de sítios primeiros vizinhos na rede quadrada, e  $J_{ij}$  é uma variável randômica cuja lei da probabilidade é dada por:

$$P(J_{ij}) = (1-p) \delta(J_{ij} - J_1) + p \delta(J_{ij} - J_2) \quad (2.2)$$

com  $J_1 \geq 0$ ,  $J_2 > J_1$  e  $0 \leq p \leq 1$ . Observemos que o modelo ferromagnético puro de Potts pode ser recuperado com  $p=0$ ,  $\forall J_2$ , ou  $p=1$ ,  $\forall J_1$ , ou igualmente  $J_1=J_2$ ,  $\forall p$ ; o caso  $\gamma \equiv J_1/J_2 = 0$  corresponde ao modelo diluído.

A fronteira crítica completa (no espaço  $p - k_B T/J_2 - \gamma$ , por exemplo) deste modelo permanece ainda desconhecida; entretanto são disponíveis uns poucos resultados exatos, nominalmen-

te (veja Ref. 81, e referências aí contidas):

i) para o modelo puro de Potts (isto é:  $p = 1, \forall J$ ):

$$e^{qJ_2/k_B T_c} = \sqrt{q} + 1 \quad (2.3)$$

ii) para o modelo de percolação de ligações ( $\gamma=0$  e  $T=0$ ):

$$p_c = 1/2, \quad \forall q, \quad (2.4)$$

iii) para o modelo de igual concentração ( $(p=1/2)^{81-86}$ ):

$$e^{qJ_2/k_B T_c} = \frac{e^{qJ_1/k_B T_c} + q - 1}{e^{qJ_1/k_B T_c} - 1} \quad (2.5)$$

iv) para o limite  $q \rightarrow 1$  (isomorfo a percolação de ligações<sup>23</sup>):

$$(1-p)(1 - e^{-J_1/k_B T_c}) + p(1 - e^{-J_2/k_B T_c}) = 1/2 \quad (2.6)$$

v) para o modelo de ligações diluídas, quase no limite do modelo puro de Potts ( $\gamma=0$  e  $p \rightarrow 1$ ):

$$\frac{1}{T_c(p)} \left. \frac{d T_c(p)}{dp} \right|_{p=1} = \frac{2\sqrt{q}}{(1+\sqrt{q}) \ln(1+\sqrt{q})} \quad (2.7)$$

vi) para o modelo de ligações diluídas, quase no limite de percolação de ligações ( $\gamma=0$  e  $T \rightarrow 0$ ):

$$\left. \frac{d e^{-qJ_2/k_B T_c(p)}}{dp} \right|_{p=p_c} = \frac{2 \ln q}{q-1} \quad (2.8)$$

Para valores arbitrários de  $p$ ,  $J_1$  e  $J_2$ , valores numéricos de  $T_c$ , muito próximos dos exatos, podem ser obtidos através da proposta<sup>81</sup>:

$$(1-p) \frac{\ln[1+(q-1)e^{-qJ_1/k_B T_c}]}{\ln q} + p \frac{\ln[1+(q-1)e^{-qJ_2/k_B T_c}]}{\ln q} = \frac{1}{2} \quad (2.9)$$

que satisfaz as eqs. ((2.3)-(2.6)) e (2.8), mas falha ligeiramente com respeito a eq. (2.7) se  $q \neq 1$ .

Em relação ao expoente crítico  $\nu$  associado ao modelo ferromagnético de Potts com ligações randômicas e para  $q \leq 4$  (transição de fase de 2ª ordem<sup>22,91</sup>, acredita-se que<sup>87-90</sup>:

i) para  $0 \leq q \leq 2$  e  $T > 0$

$$\alpha_{\text{randômico}} \equiv \alpha_r = \alpha(\text{puro}) \equiv \alpha_t \quad ; \quad (2.10)$$

logo, usando a expressão:  $2-\alpha = 2\nu$

$$\nu(\text{randômico}) \equiv \nu_r = \nu(\text{puro}) \equiv \nu_t \quad , \quad (2.10')$$

onde<sup>92</sup>:

$$\nu_t = \frac{2}{3} \left\{ 2 + \frac{\pi}{\arccos\left(\frac{1}{2\sqrt{q}}\right) - \pi} \right\}^{-1} \quad (2.11)$$

ii) para  $2 < q \leq 4$  e  $T > 0$  ,

$$\alpha_r < \alpha_t \quad ; \quad (2.12)$$

dai

$$v_r > v_t \quad (2.12')$$

onde  $v_t$  é ainda dado<sup>92</sup> pela expressão (2.11).

iii) para  $T=0$  ;  $\forall q$

$$v_r = v(\text{percolação}) \equiv v_p = 4/3 \quad (2.13)$$

como pode ser obtido da eq. (2.11) no limite  $q \rightarrow 1$ <sup>23</sup>.

Finalmente o expoente crítico de "crossover"  $\phi_p$  associado com o ponto de percolação satisfaz<sup>93</sup>:

$$\phi_p = 1 \quad , \quad \forall q \quad (2.14)$$

Na próxima seção, introduziremos a transformação de renormalização que nos permite calcular ambos  $T_c$  e  $v$ , bem como daremos uma descrição intuitiva de como ocorre o "crossover" do comportamento do sistema puro para o randômico.

### 2.3 - Grupo de Renormalização

Antes de construirmos as relações de GR, associaremos a cada ligação caracterizada por uma constante de acoplamento arbitrária  $J_k$ , uma variável conveniente (a transmissividade térmica: (veja Refs. 94, 81 e eq. (1.41) do Cap. 1):

$$t_k \equiv \frac{1 - e^{-qJ_k/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ_k/k_B T}} \quad (2.15)$$

Uma segunda variável, muito conveniente, é a variável  $s$ , definida como:

$$s(t) = \frac{\ln[1+(q-1)t]}{\ln q} \quad (2.16)$$

a qual satisfaz uma interessante propriedade, nominalmente:

$$s^{(D)}(t) \equiv s(t^D) = 1-s(t) \quad (2.17)$$

onde  $D$  significa dual (veja as eqs. (1.42)-(1.44) para as relações série, paralelo e dualidade na variável  $t$ ). Devido à propriedade de dualidade eq. (2.17), a variável  $s$  tem provado ser extremamente útil para o cálculo de temperaturas críticas; iremos utilizá-la posteriormente na construção do GR (veja Refs. 72, 80-82, 84 e 95 sobre a variável  $s$ ).

Na nossa transformação de Grupo de Renormalização iremos renormalizar o gráfico com fator linear de escala  $b=2$  da FIGURA 2.3.1b no gráfico da FIGURA 2.3.1a (o fator de escala,  $b=2$ , também caracteriza o tamanho do grafo, como ilustrado na FIGURA

2.3.1). O GR de ordem maior que iremos considerar consiste em renormalizar o grafo  $b=3$  da FIGURA 2.3.1c no grafo da FIGURA 2.3.1a. Esta família de grafos preserva uma invariância topológica muito importante da rede quadrada, nominalmente a auto-dualidade, e tem provado ser muito poderosa no tratamento de problemas de resistores randômicos<sup>96-100</sup>, percolação de ligações<sup>101,102</sup>, Ising<sup>72,103-105</sup>, Heisenberg<sup>70,106</sup> e Potts<sup>54,85,107</sup>.

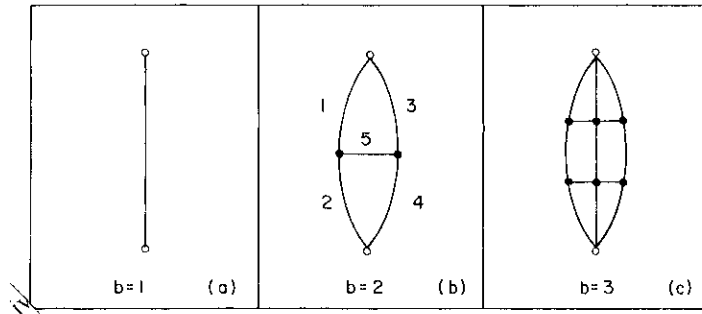


FIGURA 2.3.1 - Grafos auto-duais de dois terminais.

• (o) denota os n̄os internos (terminais)

Tal escolha de grafos fornece sistematicamente, entre outras coisa, os pontos cr̄iticos exatos, correspondentes a todos os modelos citados acima; para a rede quadrada; ela pode ser alternativamente vista como referente a redes hier̄arquicas (veja Ref. 106 e refer̄encias āi citadas).

Iremos agora determinar as relāōes de recorr̄encia para a renormalizāo com  $b=2$ . A lei de distribūo (2.2) pode ser reescrita como:

$$P(t) = (1-p) \delta(t-t_1) + p \delta(t-t_2) \quad , \quad (2.18)$$

onde foi utilizada a definição (2.15). Agora associamos esta distribuição com cada ligação do grafo da ponte de Wheatstone ( $b=2$ , FIGURA 2.1b) e obtemos agora uma nova e mais complexa lei de distribuição  $P_G$  dada por:

$$P_G(t) = \sum_{r_1=t_1, t_2} \sum_{r_2=t_1, t_2} \dots \sum_{r_5=t_1, t_2} (1-p)^{n_1^5 - n_1} \delta |t - t_G(r_1, r_2, \dots, r_5)| \quad (2.19)$$

onde  $n_1$  é o número de ligações com transmissividade  $t_1$  que aparece em uma configuração particular (entre  $2^5$  possíveis escolhas) de  $\{r_1\}$  que estamos considerando.  $t_G(r_1, r_2, \dots, r_5)$  é calculado através do método do corte colapso (veja Apêndice A para este cálculo) e é dado por:

$$\begin{aligned} t_G(r_1, r_2, r_3, r_4, r_5) = & [r_1 r_2 + r_3 r_4 + r_1 r_4 r_5 + r_2 r_3 r_5 + (q-2) \times \\ & \times (r_1 r_2 r_3 r_4 + r_1 r_2 r_3 r_5 + r_1 r_2 r_4 r_5 + r_1 r_3 r_4 r_5 + r_2 r_3 r_4 r_5) + \\ & + (q-2)(q-3) r_1 r_2 r_3 r_4 r_5] / [1 + (q-1)(r_1 r_3 r_5 + r_2 r_4 r_5 + r_1 r_2 r_3 r_4) + \\ & + (q-1)(q-2) r_1 r_2 r_3 r_4 r_5] \quad (2.20) \end{aligned}$$

Podemos verificar que a soma dos coeficientes do numerador é igual à soma dos coeficientes do denominador e ambos são iguais<sup>54, 108</sup> a  $q^\kappa$ , onde  $\kappa \equiv$  número ciclomático  $\equiv$  (número de ligações) - (número de sítios) + 1; para este gráfico  $\kappa = 2$ .

A eq. (2.19) pode ser escrita de uma forma mais explícita,

$$P_G(t) = \sum_{\ell=1}^{14} M_{\ell} (1-p)^{m_{\ell}} p^{5-m_{\ell}} \delta(t-t_{\ell}) \quad , \quad (2.21)$$

onde os fatores multiplicativos  $\{M_{\ell}\}$ , os expoentes  $\{m_{\ell}\}$  e as transmissividades  $\{t_{\ell}\}$  estão apresentadas na TABELA 2.1.

Como foi mostrado acima, uma relação de escala simples transforma a lei de distribuição com duas deltas de Dirac da eq. (2.18) na lei de distribuição com 14 deltas de Dirac da eq. (2.21). Sobre transformações de escala sucessivas, a lei de distribuição fica cada vez mais complexa, envolvendo um rápido aumento no número de deltas de Dirac. Podemos, em princípio, seguir a evolução, sobre renormalização, da lei de distribuição até que ela atinja uma forma invariante (ponto fixo). Este procedimento tem, de fato, sido utilizado<sup>109</sup> para problemas de resistores randômicos. Entretanto, um procedimento operacionalmente mais simples e numericamente excelente pode ser seguido<sup>72</sup>, nominalmente aproximar a função de distribuição  $P_G(t)$  (eq. 2.21) por uma distribuição binária, dada por:

$$P'(t) = (1-p') \delta(t-t'_1) + p' \delta(t-t'_2) \quad (2.22)$$

onde  $p'$ ,  $t'_1$  e  $t'_2$  são completamente determinados, impondo-se a conservação de três momentos apropriados. Uma possível escolha natural pode ser os três primeiros momentos de  $t$  (esta escolha já foi testada<sup>72</sup> para o modelo de Ising). Entretanto, faremos aqui uma escolha mais sofisticada, ou seja: os três primeiros



momentos de  $s(t)$  (veja a definição (2.16)); esta escolha já foi testada em problemas semelhantes<sup>72,102</sup> sendo extremamente eficiente do ponto de vista numérico. Para ser mais preciso, nós impomos:

$$\langle s(t) \rangle_{p'} = \langle s(t) \rangle_{P_G} \quad (2.23a)$$

$$\langle [s(t)]^2 \rangle_{p'} = \langle [s(t)]^2 \rangle_{P_G} \quad (2.23b)$$

$$\langle [s(t)]^3 \rangle_{p'} = \langle [s(t)]^3 \rangle_{P_G} \quad (2.23c)$$

logo, usando as equações (2.21) e (2.22) temos:

$$(1-p')s'_1 + p's'_2 = \sum_{\ell=1}^{14} M_{\ell}(1-p)^{m_{\ell}} p^{5-m_{\ell}} s_{\ell} \equiv F(p, s_1, s_2) \quad (2.24a)$$

$$(1-p')s'^2_1 + p's'^2_2 = \sum_{\ell=1}^{14} M_{\ell}(1-p)^{m_{\ell}} p^{5-m_{\ell}} s^2_{\ell} \equiv G(p, s_1, s_2) \quad (2.24b)$$

$$(1-p')s'^3_1 + p's'^3_2 = \sum_{\ell=1}^{14} M_{\ell}(1-p)^{m_{\ell}} p^{5-m_{\ell}} s^3_{\ell} \equiv H(p, s_1, s_2) \quad (2.24c)$$

onde,

$$s'_k \equiv s(t'_k) \quad (k = 1, 2) \quad , \quad (2.25)$$

e

$$s_{\ell} \equiv s(t_{\ell}) \quad (\ell = 1, 2, \dots, 14) \quad (2.26)$$

Devemos lembrar aqui que (veja TABELA 2.1) que os  $\{t_{\ell}\}$  são funções de  $(t_1, t_2)$ , e portanto (pela definição (2.16)) funções de  $(s_1, s_2) \equiv (s(t_1), s(t_2))$

TABELA 2.I - Elementos da distribuição  $P_G(t)$  (FIGURA 2.21) associada com o grafo da FIGURA 2.1b ( $q=2$  fornece a eq. (4) da Ref. 72).

$i$	$m_i$	$M_i$	$t_i$
1	0	1	$\frac{2t_2^2 + 2t_2^3 + 5(q-2)t_2^4 + (q-2)(q-3)t_2^5}{1 + (q-1)(2t_2^2 + t_2^4) + (q-1)(q-2)t_2^5}$
2	1	1	$\frac{2t_2^2 + 2t_2^3 t_1 + (q-2)(t_2^4 + 4t_2^3 t_1) + (q-2)(q-3)t_1 t_2^4}{1 + (q-1)(t_2^4 + 2t_2^3 t_1) + (q-1)(q-2)t_1^4 t_2}$
3	1	4	$\frac{t_2 t_1 + t_2^2 + t_2^2 t_1 + t_2^3 + (q-2)(4t_2^3 t_1 + t_2^4) + (q-2)(q-3)t_1^4 t_2}{1 + (q-1)(t_2^2 t_1 + t_2^3 + t_2^3 t_1) + (q-1)(q-2)t_2^4 t_1}$
4	2	2	$\frac{2t_2 t_1 + 2t_2^2 t_1 + (q-2)(3t_2^2 t_1^2 + 2t_2^3 t_1) + (q-2)(q-3)t_2^3 t_1^2}{1 + (q-1)(t_2 t_1^2 + t_2^2 t_1^2 + t_2^3) + (q-1)(q-2)t_2^2 t_1^2}$
5	2	2	$\frac{2t_2 t_1 + t_2 t_1^2 + t_2^3 + (q-2)(3t_2^2 t_1^2 + 2t_2^3 t_1) + (q-2)(q-3)t_2^3 t_1^2}{1 + (q-1)(2t_2^2 t_1 + t_2^2 t_1^2) + (q-1)(q-2)t_2^3 t_1^2}$
6	2	2	$\frac{t_2^2 + 2t_2^2 t_1 + t_1^2 + (q-2)(3t_2^2 t_1^2 + 2t_2^3 t_1) + (q-2)(q-3)t_2^3 t_1^2}{1 + (q-1)(2t_2^2 t_1 + t_2^2 t_1^2) + (q-1)(q-2)t_2^3 t_1^2}$
7	2	4	$\frac{t_2 t_1 + t_2^2 + t_2^2 t_1 + t_2 t_1^2 + (q-2)(3t_2^2 t_1^2 + 2t_2^3 t_1) + (q-2)(q-3)t_2^3 t_1^2}{1 + (q-1)(t_2 t_1^2 + t_2^2 t_1 + t_2^3 t_1) + (q-1)(q-2)t_2^3 t_1^2}$
8	3	4	$\frac{t_1 t_2 + t_1^2 + t_1^2 t_2 + t_1 t_2^2 + (q-2)(3t_1^2 t_2^2 + 2t_1^3 t_2) + (q-2)(q-3)t_1^3 t_2^2}{1 + (q-1)(t_1 t_2^2 + t_1^2 t_2 + t_1^3 t_2) + (q-1)(q-2)t_1^3 t_2^2}$
9	3	2	$\frac{t_1^2 + 2t_1^2 t_2 + t_2^2 + (q-2)(3t_1^2 t_2^2 + 2t_1^3 t_2) + (q-2)(q-3)t_1^3 t_2^2}{1 + (q-1)(2t_1^2 t_2 + t_1^2 t_2^2) + (q-1)(q-2)t_1^3 t_2^2}$
10	3	2	$\frac{2t_1 t_2 + t_1 t_2^2 + t_1^3 + (q-2)(3t_1^2 t_2^2 + 2t_1^3 t_2) + (q-2)(q-3)t_1^3 t_2^2}{1 + (q-1)(2t_1^2 t_2 + t_1^2 t_2^2) + (q-1)(q-2)t_1^3 t_2^2}$
11	3	2	$\frac{2t_1 t_2 + 2t_1^2 t_2 + (q-2)(3t_1^2 t_2^2 + 2t_1^3 t_2) + (q-2)(q-3)t_1^3 t_2^2}{1 + (q-1)(t_1 t_2^2 + t_1^2 t_2^2 + t_1^3) + (q-1)(q-2)t_1^3 t_2^2}$
12	4	4	$\frac{t_1 t_2 + t_1^2 + t_1^2 t_2 + t_1^3 + (q-2)(4t_1^3 t_2 + t_1^4) + (q-2)(q-3)t_1^4 t_2}{1 + (q-1)(t_1^2 t_2 + t_1^3 + t_1^3 t_2) + (q-1)(q-2)t_1^4 t_2}$
13	4	1	$\frac{2t_1^2 + 2t_1^2 t_2 + (q-2)(t_1^4 + 4t_1^3 t_2) + (q-2)(q-3)t_2 t_1^4}{1 + (q-1)(t_1^4 + 2t_1^3 t_2) + (q-1)(q-2)t_1^4 t_2}$
14	5	1	$\frac{2t_1^2 + 2t_1^3 + 5(q-2)t_1^4 + (q-2)(q-3)t_1^5}{1 + (q-1)(2t_1^3 + t_1^4) + (q-1)(q-2)t_1^5}$

A solução do sistema de equações (2.24) é dada por:

$$p' = \frac{L^2}{1+L^2} \quad (2.27a)$$

$$s'_1 = F \pm L \sqrt{Q} \quad (2.27b)$$

$$s'_2 = F \pm \frac{1}{L} \sqrt{Q} \quad (2.27c)$$

onde

$$Q \equiv G - F^2 > 0 \quad (2.28)$$

e

$$L \equiv \frac{\sqrt{(H-3FQ-F^3)^2 + 4Q^3} - (H-3FQ-F^3)}{2Q^{3/2}} \quad (2.29)$$

os sinais superiores (inferiores) nas eqs. (2.27b) e (2.27c) de verãõ ser utilizados na regiãõ  $s_1 > s_2$  ( $s_1 < s_2$ ), portanto  $t_1 > t_2$  ( $t_1 < t_2$ ), logo  $J_1 > J_2$  ( $J_1 < J_2$ ).

A eq. (2.27) (juntamente com as eqs. (2.28) e (2.29)) é invariante pela transformaçãõ  $(p, s_1, s_2) \pm (1-p, s_2, s_1)$  e de termina completamente o fluxo de RG no espaço  $p-s_1-s_2$  (o qual determina por sua vez, todas as propriedades importantes associadas com o espaço  $p-k_B T/J_2 - \gamma$ ). Em particular o cãlculo dos pontos fixos e do Jacobiano relevante.

$$J \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial p'}{\partial p} & \frac{\partial p'}{\partial s_1} & \frac{\partial p'}{\partial s_2} \\ \frac{\partial s'_1}{\partial p} & \frac{\partial s'_1}{\partial s_1} & \frac{\partial s'_1}{\partial s_2} \\ \frac{\partial s'_2}{\partial p} & \frac{\partial s'_2}{\partial s_1} & \frac{\partial s'_2}{\partial s_2} \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

é agora perfeitamente possível.

Nós também obtivemos, através de implementação analítica do BCM em um computador a série total de equações associada à ponte de Wheatstone (FIGURA 1c) para  $b=3$ ; os resultados são, entretanto, muito grandes para serem colocados aqui. Podemos ilustrar isto dizendo que: (i) a equação análoga à eq. (2.19) contém  $2^{13}$  termos (em lugar de  $2^5$ ); (ii)  $t_G(r_1, r_2, \dots, r_{13})$  é uma função racional cujos numerador e denominador contêm respectivamente 765 e 397 termos distintos ao invés de 10 e 5, na eq. (2.12); (iii) a equação análoga à eq. (2.21) contém 2.204 termos (invés de 14).

Nossos principais resultados para  $b=2$  e  $b=3$  são apresentados na próxima seção.

## 2.4 - Resultados

Ambos os GR para  $b=2$  e  $b=3$  fornecem os seguintes resultados (veja FIGURA 2.4.2 e 2.4.3) os quais são de fato comuns para todos os valores de  $b$ :

- (i) os pontos  $(p, s_1, s_2) = (0, 0, 0)$  e  $(1, 1, 1)$  são pontos fixos totalmente estáveis, correspondendo respectivamente aos limites  $T \rightarrow \infty$  (fase paramagnética) e  $T \rightarrow 0$  (fase ferromagnética);
- (ii) os pontos  $(0, 0, 1), (1, 0, 0), (1, 1, 0), (0, 1, 0), (1, 0, 1)$  e  $(0, 1, 1)$  são pontos fixos semi-estáveis (os três primeiros pertencentes à região paramagnética, os três últimos pertencentes à região ferromagnética);
- (iii) na superfície crítica (a região do hexágono no interior

do cubo unitário da FIGURA 2.4.1a) os pontos  $(\frac{1}{2}, 0, 1)$  e  $(\frac{1}{2}, 1, 0)$  são pontos fixos totalmente instáveis correspondentes ao limite de percolação de ligação, e localizados na posição exata  $p_c = \frac{1}{2}$  (veja eq. (2.4));

(iv) na superfície crítica, a região tipo H torcido determinada por  $(s_1=s_2=\frac{1}{2}, \forall p)$ ,  $(s_1=\frac{1}{2}, p=0, \forall s_2)$  e  $(s_2=\frac{1}{2}, p=1, \forall s_1)$  corresponde ao modelo puro de Potts, e sua localização é exata (veja eq. (2.3)); pertencem a esta região três pontos fixos (nominalmente  $(p, s_1, s_2) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}), (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  e  $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ). Se nos restringirmos à análise do fluxo de GR na superfície crítica, os pontos fixos

$(p, s_1, s_2) = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  e  $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  são semi-estáveis enquanto que o ponto central  $(p=s_1=s_2=\frac{1}{2})$  é totalmente estável para  $q \leq q^*(b)$  ( $q^*(2) \approx 5,3$  e  $q^*(3) \approx 4,9$ ) mas fica semi-estável para  $q > q^*(b)$  (veja ponto (v) abaixo e FIGURAS 2.4.1b-e);

(v) na superfície crítica, o fluxo da linha reta  $s_1+s_2=1$  e  $p=\frac{1}{2}$  corresponde ao modelo de igual concentração e obtém o resultado exato (veja eq. (2.5)); esta linha contém o ponto central  $p=s_1=s_2=\frac{1}{2}$  que, como foi dito em (iv), é um atrator, para  $q < q^*(b)$ , em cima da linha (ele atrai de fato todos os pontos da superfície crítica, exceto os pontos de percolação de ligações e os pontos do modelo puro de Potts  $(p, s_1, s_2) = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  e  $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ); este ponto central fica instável para  $q = q^*(b)$  e bifurca (em forma de garfo, veja FIGURA 2.4.3) em dois novos pontos fixos (os quais, para  $q > q^*(b)$ , são atratores na superfície crítica) localizados em  $(p, s_1, s_2) = (\frac{1}{2}, s_r, 1-s_r)$  e  $(\frac{1}{2}, 1-s_r, s_r)$  ( $r$  entende-se por randômico; veja FIGURAS 2.4.2d-e e 2.4.3); o limite  $q \rightarrow q^*(b)$  apresenta um comportamento interessante, ou seja  $s_r(q) - \frac{1}{2} \approx A [q/q^*(b) - 1]^{\frac{1}{2}}$ , onde  $A \approx 0.29$  para ambos  $b=2$  e  $b=3$ , sugerindo, portanto, uma curva independente de  $b$ , que no limite  $b \rightarrow \infty$  pode ser

$$s_r(q) - \frac{1}{2} \approx A(q/2-1)^{\frac{1}{2}}.$$

(vi) A superfície crítica para  $q=1$  é dada por:

$$(1-p) s_1 + p s_2 = \frac{1}{2} \tag{2.32}$$

a qual coincide com ambos os casos  $q \rightarrow 1$  da eq. (2.9) e com o resultado exato (veja eq. (2.6)).

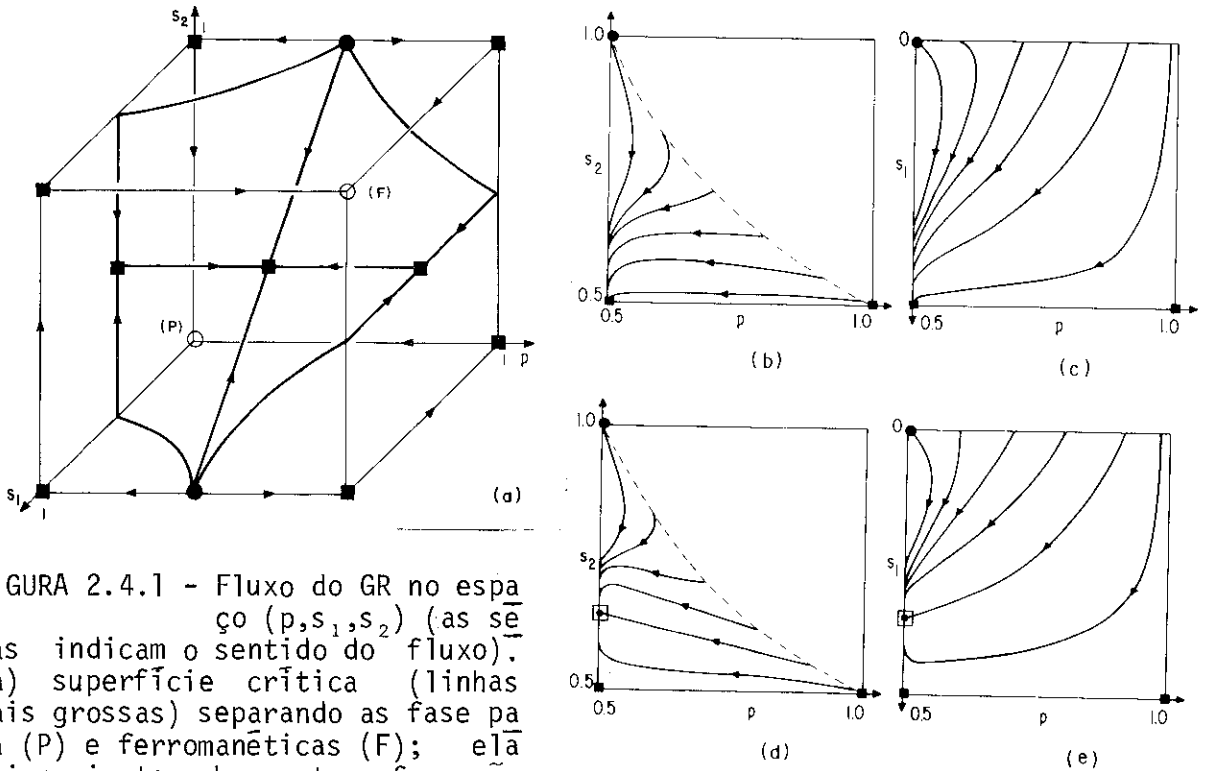


FIGURA 2.4.1 - Fluxo do GR no espaço  $(p, s_1, s_2)$  (as setas indicam o sentido do fluxo). (a) superfície crítica (linhas mais grossas) separando as fase para (P) e ferromagnéticas (F); ela é invariante sobre a transformação  $(p, s_1, s_2) \rightarrow (1-p, s_2, s_1) \rightarrow (p, 1-s_1, 1-s_2)$ , e depende muito pouco de  $q$  (para  $q > 1$ ) e do fato linear de escala  $b$  do GR; a região em forma de H torto corresponde à fase ferromagnética pura; a linha  $p = \frac{1}{2}$  constitui um sub-espaco invariante correspondendo ao modelo de igual concentração;  $\circ$ ,  $\bullet$  e  $\blacksquare$  denotam respectivamente os pontos fixos totalmente estável, totalmente instável e semi-estável; o ponto fixo central  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  bifurca-se ao longo da linha crítica  $p = \frac{1}{2}$  para  $q > q^*$ . (b) e (d) ((c) e (e)) são projeções nos sub-espacos  $(p, s_2)$   $((p, s_1))$  da superfície crítica do fluxo de GR; (b) e (c) ((d) e (e)) corresponde a  $q < q^*$  ( $q > q^*$ );  $\square$  denota o novo ponto fixo semi-estável gerado pela bifurcação; as linhas tracejadas correspondem ao modelo de ligações diluídas.

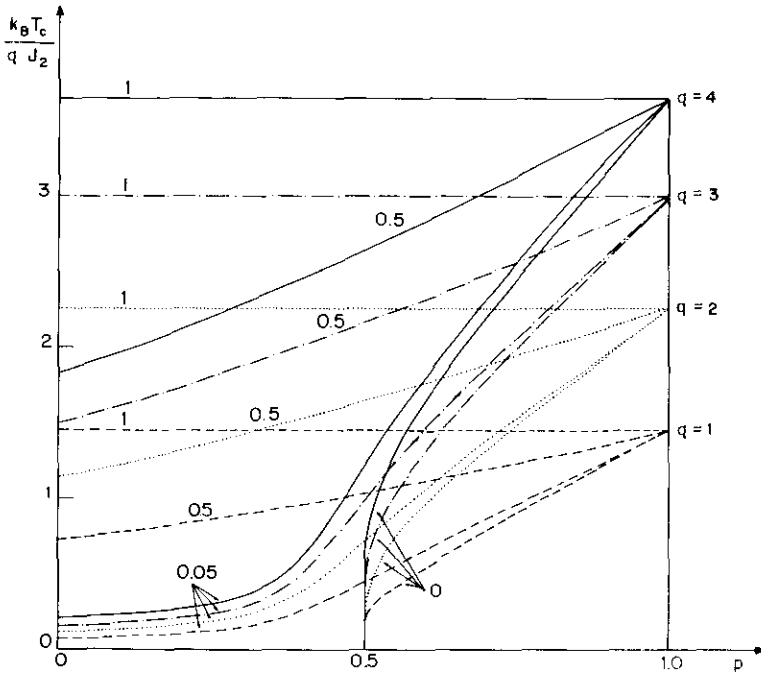


FIGURA 2.4.2 - Temperatura crítica do GR ( $b=2$ ) como uma função da concentração  $p$  de  $J_2$  para valores típicos de  $q$  e  $J_1/J_2$  (números parametrizando as curvas).

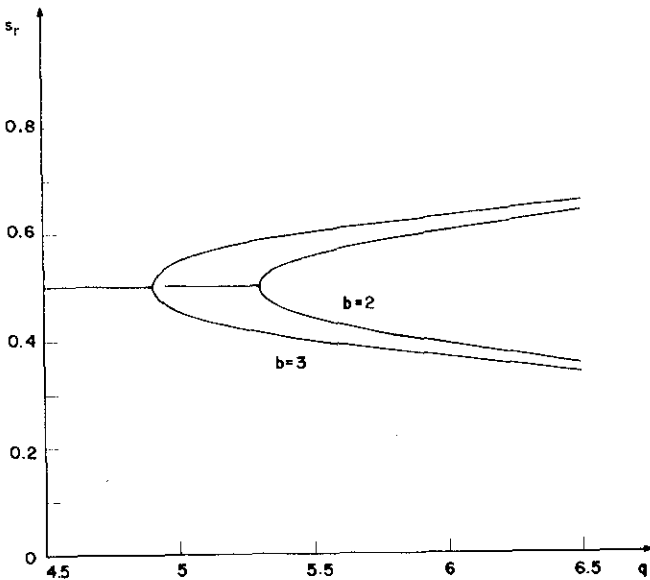


FIGURA 2.4.3 - Posição dos pontos fixos os quais atraem quase todos os pontos da superfície crítica ( $b$  denota o fator linear de escala).

Focalizaremos nossa atenção sobre os Jacobianos (veja eq. (2.30)) associados aos pontos fixos do sistema.

(i) Para os pontos fixos  $(0,0,0)$  e  $(1,1,1)$  os respectivos Jacobianos anulam-se para todos os valores de  $q$ , indicando então, que sua estabilidade é devida a termos de mais alta ordem.

(ii) Para os pontos fixos semi-estáveis  $(1,0,1)$ ,  $(1,1,0)$  e  $(1,0,0)$  os Jacobianos são dados respectivamente por.

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} g & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

onde  $g \approx 4$  para todos os valores de  $q$  (os Jacobianos correspondentes aos pontos fixos  $(0,0,1)$ ,  $(0,1,0)$  e  $(0,1,1)$  são semelhantes). Como anteriormente verificamos que a estabilidade está relacionada com termos de ordem mais alta.

(iii) O Jacobiano nos pontos fixos de percolação não depende de  $q$ , e é proporcional a 1 (portanto o expoente de "crossover"  $\phi_p$  é igual a 1, obtendo assim o resultado exato expresso na eq. (2.14)); o auto valor três vezes degenerado  $\lambda_p$  é igual a 1,62500, 2,21729, 2,76579 e 3,27894 respectivamente para  $b = 2, 3, 4$  e 5 (os valores associados com  $b = 4, 5$  foram também calculados, veja também Ref. 54). Através da expressão do RG  $\nu_p(b) = \ln b / \ln \lambda_p(b)$  nós obtemos os resultados indicados na TABELA 2.II (coluna  $q=1$ ).



TABELA 2.II - Expoente crítico ( $\nu$ ) do GR e exato<sup>92</sup> para o modelo de Potts puro com  $q$  estados ( $b$  é o fator linear de escala). Esta tabela é consistente (através da lei de escala  $2-\alpha = d\nu$ ) com a TABELA 1 da Ref.<sup>109</sup>.

b \ q	1	2	3	4
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
5	1,3553	1,0879	0,9684	0,8966
exato	4/3	1	5/6	2/3

(iv) O Jacobiano associado ao ponto fixo central do modelo puro de Potts ( $p=s_1=s_2=1/2$ ) apresenta a seguinte estrutura simples:

$$\begin{pmatrix} a(q) & 0 & 0 \\ 0 & b(q) & c(q) \\ 0 & c(q) & b(q) \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

onde  $a(q) \approx 0,5$  para todos os valores de  $q$  na faixa  $[1,10]$ . Os outros dois auto-valores (respectivamente associados aos auto-vetores  $(0,1,-1)$  e  $(0,1,1)$  são  $\lambda'(q) \equiv b(q) - c(q)$  e  $\lambda_t(q) \equiv b(q) + c(q)$ ;  $\lambda'(q)$  depende fracamente de  $q$ , e é menor (maior) do que 1 para  $q < q^*(b)$  ( $q > q^*(b)$ ) e, para o ponto de bifurcação, ele satisfaz  $\lambda'(q^*(b)) = 1$ .  $\lambda_t(q)$  é sempre maior que um e é dado por:

$$\lambda_t(q) = \frac{8 + 13q^{1/2} + 5q}{8 + 7q^{1/2} + q} \quad (b=2) \quad (2.34a)$$

$$\lambda_t(q) = \frac{576 + 2092q^{1/2} + 3051q + 2272q^{3/2} + 901q^2 + 177q^{5/2} + 13q^3}{576 + 1388q^{1/2} + 1323q + 632q^{3/2} + 157q^2 + 19q^{5/2} + q^3} \quad (b=3) \quad (2.34b)$$

$$\begin{aligned} \lambda_t(q) = & (161128382464 + 1697859502080q^{1/2} + 8483753136128q + \\ & + 26753044992000q^{3/2} + 59776725996784q^2 + 100721482408584q^{5/2} + \\ & + 132981697848499q^3 + 141113527133368q^{7/2} + 122475851169593q^4 + \\ & + 88012263034920q^{9/2} + 52807853404826q^5 + 26600381596312q^{11/2} + \\ & + 112282937714602q^6 + 4033410386968q^{13/2} + 1213716439993q^7 + \\ & + 306427439732q^{15/2} + 64547996440q^8 + 11251035116q^{17/2} + 1603874125q^9 + \\ & + 183922732q^{19/2} + 16564782q^{10} + 1129660q^{21/2} + 54907q^{11} + 1696q^{23/2} + 25q^{12}) / \\ & (161128382464 + 1447535050752q^{1/2} + 6179539095552q + 16682662418944q^{3/2} + \\ & + 31974143639184q^2 + 46299588621448q^{5/2} + 52626772572121q^3 + \\ & + 48157988221974q^{7/2} + 36100260892173q^4 + 22438276696524q^{9/2} + \\ & + 11660435998306q^5 + 5093660852058q^{11/2} + 1876055420530q^6 + \\ & + 583142336798q^{13/2} + 152826115979q^7 + 33671740016q^{15/2} + 6206221404q^8 + \\ & + 949837808q^{17/2} + 119415951q^9 + 12142442q^{19/2} + 975746q^{10} + 59778q^{21/2} + \\ & + 2629q^{11} + 74q^{23/2} + q^{12}) \quad (b=4) \quad (2.34c) \end{aligned}$$

Usando as equações (2.34), obtivemos os resultados para  $v_t$  indicados na TABELA 2.II (o caso  $b=5$  foi tratado numericamente). Além disso, o expoente de "crossover"  $\phi \equiv \ln \lambda' / \ln \lambda_t$  (associado ao surgimento de uma nova classe de universalidade devida ao aleatreamento das ligações) foi também calculado os resultados são apresentados na FIGURA 2.4.4.

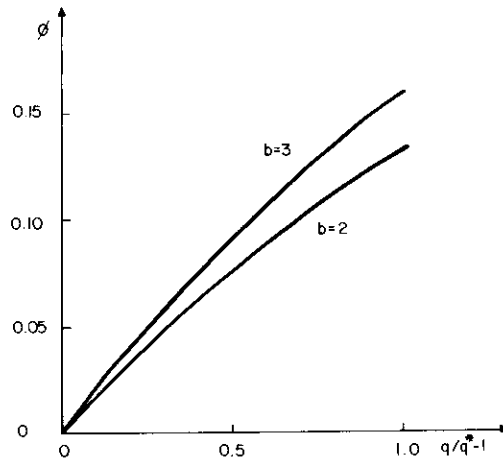


FIGURA 2.4.4 - Dependência de  $q$  do expoente crítico de "crossover"  $\phi$  do modelo puro para o randômico;  $b$  é o fator linear de escala;  $q^*$  é o valor de  $q$  para o qual existe bifurcação (veja FIGURA 2.4.3).

Lembramos aqui que para o modelo puro de Potts estão associados dois outros pontos fixos (nominalmente  $(p, s_1, s_2) = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  e  $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ). Os correspondentes Jacobianos são respectivamente

$$\begin{pmatrix} d(q) & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_t(q) & 0 \\ 0 & \lambda_t(q) - e(q) & e(q) \end{pmatrix} \quad (2.35a)$$

e

$$\begin{pmatrix} d(q) & 0 & 0 \\ 0 & e(q) & \lambda_t(q) - e(q) \\ 0 & 0 & \lambda_t(q) \end{pmatrix} \quad (2.35b)$$

onde o autovalor  $d(q) > 1, \forall q$  (seu autovetor  $\bar{e} = (1, 0, 0)$ ), o autovalor  $e(q)$  satisfaz  $0 < e(q) < 1, \forall q$  (seu autovetor  $\bar{e} = (0, 0, 1)$ ) para o ponto fixo  $p=0$  e  $(0, 1, 0)$  para  $p=1$ ), e o autovalor  $\lambda_t(q)$  é

dado pelas eqs. (2.34) (seu autovalor  $\bar{e} (0,1,1)$ ).

(v) O Jacobiano associado aos pontos fixos randômicos (nominalmente  $(p, s_1, s_2) = (\frac{1}{2}, s_r, 1-s_r)$  e  $(\frac{1}{2}, 1-s_r, s_r)$ ) não apresenta simetria, seus nove elementos são diferentes de zero e diferente entre si, os auto vetores constituem uma base não ortogonal completa, e seus auto valores são  $\lambda_1(q)$  (ele decresce muito suavemente de cerca de 0,5 a cerca de 0,3 quando  $q$  aumenta de  $q^*(b)$  a 10; seu auto vetor associado está aproximadamente na direção  $(1,0,0)$ ),  $\lambda_2(q)$  (decresce suavemente de cerca de 1 a cerca de 0,8 quando  $q$  aumenta de  $q^*(b)$  a 10), e  $\lambda_3(q) \equiv \lambda_r(q)$  (ele decresce de cerca de 2,2 a cerca de 2 quando  $q$  aumenta de  $q^*(b)$  a 10; seu auto vetor associado está aproximadamente na direção  $(0,1,1)$ ). Através do valor  $\lambda_r(q)$ , podemos calcular o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu_r = \ln b / \ln \lambda_r$  correspondendo a nova classe de universalidade (veja FIGURA (2.4.5)).

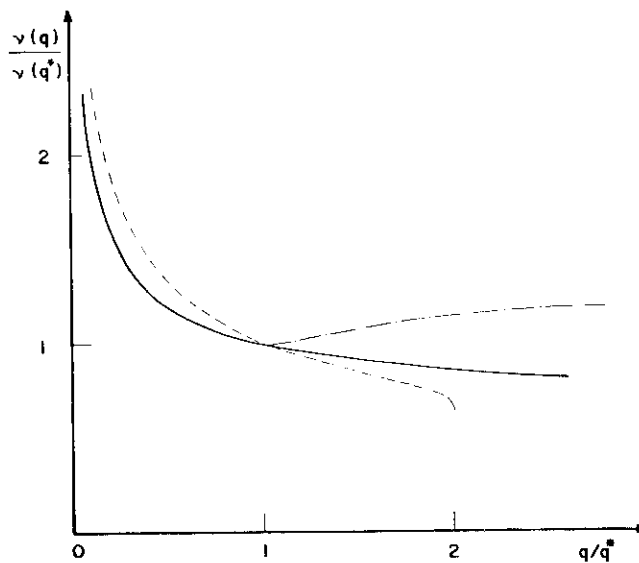


FIGURA 2.4.5 - Dependência de  $q$  dos expoentes críticos do RG( $b=2$ ) puro (—) e randômico (---)  $\nu_t$  e  $\nu_r$  comparados com o valor puro exato (-----)<sup>92</sup>. Para  $b=2$ ,  $q^*=5.3$ , para o caso exato temos suposto  $q^*=2$  (lembramos que para  $q>4$  a transição de fase correspondente ao modelo puro é de 1ª ordem).

Usando a relação de escala  $2^{-\alpha(q)} = dv(q)$  ( $d=2$ ) podemos calcular a discrepância  $\alpha_t - \alpha_r$  para  $q > q^*$  (desde que não atinjamos o regime de transição de 1ª ordem); veja FIGURA 2.4.6. Nossos resultados são sensivelmente diferentes daqueles obtidos por Kinzel e Domany<sup>86</sup>. Enquanto nossa diferença  $\alpha_t - \alpha_r$  aumenta monotonicamente com  $\alpha_t$ , a deles apresenta um máximo; além disso as escalas são bem diferentes, nosso resultado sugere que  $\alpha_t$  (exato) -  $\alpha_r$  (exato)  $\bar{e}$  (para  $q > 2$  e transição de 2ª ordem) aproximadamente proporcional a  $\alpha_t$  (exato) com um coeficiente de proporcionalidade perto de 1, enquanto eles obtêm diferenças cerca de 10 vezes menores. Nossa sugestão ( $\alpha_t - \alpha_r \approx \alpha_t$ ) implica em  $\alpha_r \approx 0$  para  $2 \leq q \leq 4$ , que  $\bar{e}$  perfeitamente consistente com ambos os dados obtidos por Monte Carlo<sup>88</sup> ( $\alpha \leq 0.0$ ) e através de resultados experimentais<sup>89,90,110</sup> ( $\alpha \approx \pm 0.14$ ) obtido da ref. 89 através da lei de hiperescala).

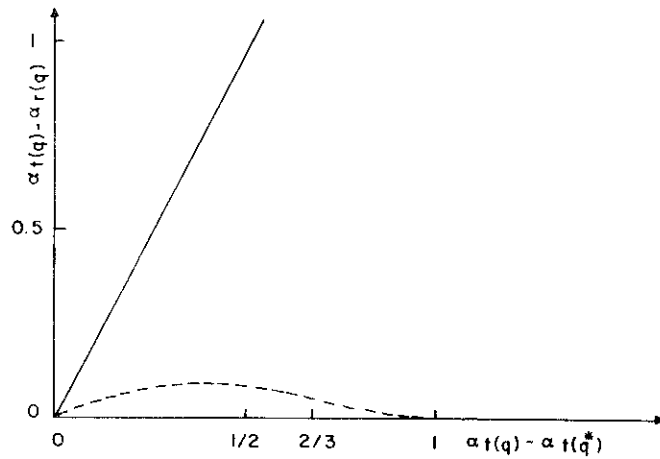


FIGURA 2.4.6 - Discrepância entre os expoentes críticos puro e randômico  $\alpha_t$  e  $\alpha_r$  como função da discrepância  $\alpha_t(q) - \alpha_t(q^*)$  resultado de GR (—) comparado com aquele obtido na Ref.<sup>86</sup> (---) (o resultado  $\alpha_r(q)$  exato  $\bar{e}$  ainda desconhecido).

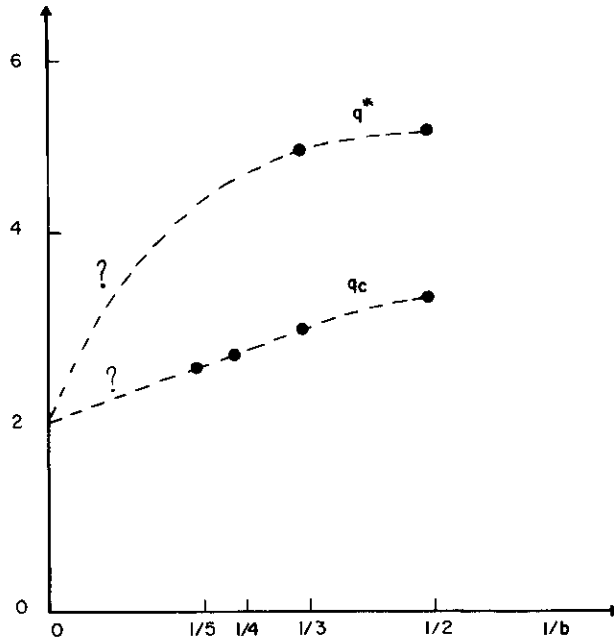


FIGURA 2.4.7 - Variações do valor da bifurcação  $q^*$  e do valor  $q_c$  correspondente a  $\alpha = 0$  como função do fator de escala linear  $b$  do GR. As linhas tracejadas são especulativas assumindo que podemos obter o critério de Harris (isto é  $q^* = q_c = 2$ ) no limite  $b \rightarrow \infty$ .

Na FIGURA 2.4.7 apresentamos, como função do tamanho  $b$ , os valores que obtemos para  $q^*(b)$  (onde aparece a bifurcação) e para  $q_c(b)$  (onde  $\alpha_t(b)$  anula-se ou equivalentemente  $v_t(b) = 1$ ). Verificamos que o critério de Harris<sup>87</sup> ( $q^*(b) = q_c(b)$  na presente linguagem) não é satisfeito para células de tamanho finito. Como este critério se refere a sistemas macroscópicos, podemos especular que  $\lim_{b \rightarrow \infty} q^*(b) = \lim_{b \rightarrow \infty} q_c(b) (= 2, \text{ no presente caso})$ .

Com respeito às derivadas associadas ao caso diluído ( $J_1 = 0$ , isto é  $s_1 = 0$ ) nós obtemos (de fato para qualquer  $b$ )  $(ds_2/dp)_{p=1/2} = -2, \forall q$ , a qual fornece o resultado exato expresso

na eq. (2.8). As derivadas obtidas no limite  $p \rightarrow 1$  estão indicadas na TABELA 2.III: infelizmente aparecem pequenos erros para  $q \neq 1$ .

TABELA 2.III - Resultados da RG( $b=2$ ) associados ao modelo diluído (ambos os pontos críticos de percolação e puro, bem como o comportamento assintótico para  $T \rightarrow 0$  são exatos para todo  $q$ ).

$q$	$-\frac{ds_2}{dp} \Big _{\substack{s_1=0 \\ s_2=1}}$	$\frac{1}{T_c(T)} \frac{dT_c(p)}{dp} \Big _{p=1}$	Erro (veja eq.(2.7))
1	$\frac{1}{2}$	1,443	0 %
2	0,495	1,329	0,1 %
3	0,490	1,267	0,4 %
4	0,488	1,232	1,5 %

Resultados numéricos típicos obtidos através do GR( $b=2$ ) são apresentados nas TABELAS 2.IV e 2.V. O caso  $q=2$  recupera os resultados exatos obtidos através do GR-s da Ref. 72. Observe na TABELA 2.IV que a superfície crítica no espaço  $p-s_1-s_2$  é quase independente de  $q$ , e muito próxima daquela determinada pela eq. (2.9) (isto é:  $(1-p)s_1 + ps_2 = \frac{1}{2}$ ). A grande quantidade de resultados exatos (de fato, todos aqueles conhecidos para a superfície crítica, menos uma derivada analisada na TABELA 2.III) que é obtida pelo presente GR tende a suportar os resultados numéricos como sendo altamente precisos. Nós estimamos (veja também a Ref. 72) que os resultados apresentados na TABELA 2.IV (e consistentemente na TABELA 2.V) são exatos em qualquer lugar com um erro  $s_2$  menor do que  $10^{-3}$  (um erro que é obti-





TABELA 2.V - Valores de  $p$  da mesma superfície crítica que aparece na TABELA 2.IV, para valores típicos de  $J_1/J_2$  e  $k_B T/q J_2$

$k_B T/q J_2$		$J_1/J_2$									
		0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8	
0	1	0,5034	0,5447	0,6164	0,7008	0,7910	0,8843	0,9795	-	-	
	2	0,5000	0,5049	0,5265	0,5640	0,6116	0,6656	0,7237	0,7845	0,8473	
	3	0,5000	0,5005	0,5061	0,5217	0,5469	0,5796	0,6176	0,6594	0,7040	
	4	0,5000	0,5000	0,5013	0,5072	0,5199	0,5391	0,5640	0,5932	0,6257	
	0,05	1	0,3611	0,4779	0,5745	0,6730	0,7735	0,8753	0,9780	-	-
		2	0,2699	0,4033	0,4614	0,5165	0,5752	0,6374	0,7020	0,7686	0,8365
		3	0,1764	0,3666	0,4217	0,4601	0,4986	0,5403	0,5852	0,6326	0,6820
		4	0,0701	0,3337	0,3985	0,4327	0,4614	0,4912	0,5237	0,5588	0,5962
	0,5	1	-	-	-	0,1418	0,4464	0,7089	0,9502	-	-
		2	-	-	-	-	-	0,0766	0,2828	0,4646	0,6328
		3	-	-	-	-	-	-	-	0,0942	0,2504
		4	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	0	1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		2	0,9116	0,9771	-	-	-	-	-	-	-
		3	0,7507	0,7990	0,8487	0,8995	0,9513	-	-	-	-
		4	0,6607	0,6977	0,7363	0,7762	0,8173	0,8593	0,9022	0,9461	0,9907
0,05		1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		2	0,9056	0,9756	-	-	-	-	-	-	-
		3	0,7330	0,7853	0,8386	0,8930	0,9482	-	-	-	-
		4	0,6354	0,6762	0,7183	0,7614	0,8055	0,8505	0,8963	0,9429	0,9902
0,5		1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		2	0,7927	0,9473	-	-	-	-	-	-	-
		3	0,3914	0,5232	0,6491	0,7713	0,8909	-	-	-	-
		4	0,1264	0,2519	0,3673	0,4764	0,5813	0,6832	0,7841	0,8828	0,9802

## 2.5 - Conclusões

Foram discutidos vários aspectos da criticalidade do modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados para a rede quadrada com ligações mistas temperadas. A análise foi feita dentro do contexto do Grupo de Renormalização no Espaço Real (GR) usando dois grafos auto-duais de dois terminais, que já provaram ser extremamente bons para a rede quadrada, embora precisamente falando, eles estejam relacionados a uma rede hierarquica (auto dual). Através das operações de renormalização, a lei de distribuição das constantes de acoplamento (inicialmente binária) envolve rapidamente uma distribuição de várias deltas. Em lugar de acompanharmos esta distribuição até atingirmos uma forma fixa, nós re-estabelecemos a forma binária impondo a conservação dos três primeiros momentos (lembramos que nosso modelo possui três parâmetros livres) de uma variável bastante conveniente (a variável  $s$ ).

O nosso RG reproduz vários resultados exatos disponíveis na literatura, tais como os pontos críticos correspondentes à percolação de ligações, modelos de Potts puro e de igual concentração, bem como o comportamento assintótico da linha crítica associada ao caso de diluição de ligações no limite  $T \rightarrow 0$ , o expoente crítico de "crossover"  $\phi_p$  e o ponto crítico no limite  $q \rightarrow 1$  (isto é, ele satisfaz o teorema de Kasteleyn e Fortuin).

O presente tratamento introduz um pequeno erro (o qual, para grafos com  $b=2$ , cresce de 0% a 1,5%, enquanto  $q$  aumenta de 1 para 4) da derivada da linha crítica associada ao ca

so particular de diluição de ligação, bem como no expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu_t$  (o qual, para grafos com  $b=5$ , cresce de 1,6% a 34,5%, enquanto  $q$  aumenta de 1 para 4). O crescimento do erro quando nos aproximamos de  $q=4$  origina-se do fato de que este GR não reproduz o aparecimento do regime de transição de 1ª ordem (esperado no mínimo para o caso puro); para sobrepujar esta dificuldade deveremos considerar um espaço de parâmetros maior.

Finalizaremos resumindo os principais aspectos que a presentaram algum progresso em nossa discussão:

- (i) a temperatura crítica associada a valores arbitrários da concentração  $p$  e da razão  $J_1/J_2$  foi estabelecida numericamente com alta precisão (o erro na variável  $s$  sendo menor do que  $10^{-3}$  na peor região), os resultados são para  $1 \leq q \leq 4$ , consistentemente reproduzidos pela simples aproximação analítica expressa na eq. (2.9)<sup>81</sup>;
- (ii) o expoente crítico randômico do calor específico  $\alpha_r$  é quase igual a zero para todos os valores acima de  $q^*$ , o que é consistente com os resultados disponíveis de Monte Carlo<sup>80</sup> e experimental<sup>110</sup> para o caso  $q=4$ ;
- (iii) a dependência de  $q$  (acima de  $q^*$ ) do expoente crítico  $\phi_t$  de "crossover" do caso puro para o randômico é estabelecida aproximadamente .

Tratamentos do modelo de Potts ferromagnético randômico, incorporando simultaneamente o "crossover" do caso puro para o randômico e a mudança do regime de 2ª para 1ª ordem, serão muito bem vindos.

## CAPÍTULO 3 - CONDUTIVIDADE DE UMA REDE QUADRADA DE RESISTORES COM LIGAÇÕES MISTAS

### 3.1 - Introdução

A condutividade elétrica em redes randômicas de resistores e a sua criticalidade tem sido tema de considerável número de estudos nos últimos anos. Aproximações teóricas, tais como simulações em computadores<sup>111,112</sup>, Grupo de Renormalização<sup>96,113</sup> (GR) e outros<sup>114-120</sup>, bem como resultados experimentais<sup>121-123</sup> já estão disponíveis. Entretanto, o problema ainda não foi resolvido totalmente mesmo para sistemas mais simples, tais como a rede quadrada com uma distribuição temperada binária de condutâncias (a condutância da ligação, sendo  $g_1$  ou  $g_2$ , respectivamente, com probabilidades  $(1-p)$  e  $p$ ). A forma funcional da condutividade  $\sigma = \sigma(p, g_1, g_2)$  permanece até agora desconhecida.

Neste capítulo utilizamos o formalismo de Grupo de Renormalização visto no capítulo anterior para o modelo de Potts e o adaptamos para tratar a condutividade na rede quadrada com ligações mistas. No parágrafo 2º nós introduzimos o modelo e o formalismo de RG, no parágrafo 3º apresentamos os resultados, e finalmente, concluímos no parágrafo 4º.

### 3.2 - Modelo e Grupo de Renormalização

Consideremos a rede quadrada com a seguinte distribuição de condutâncias associada a cada ligação:

$$P(g) = (1-p) \delta(g-g_1) + p \delta(g-g_2) \quad (g_1, g_2 \geq 0) \quad (3.1)$$

A condutância de um arranjo em série ou em paralelo de duas ligações (com condutâncias  $\bar{g}_1$  e  $\bar{g}_2$  e respectivamente da da por:

$$g_s = \bar{g}_1 \bar{g}_2 / (\bar{g}_1 + \bar{g}_2) \quad (\text{série}) \quad (3.2)$$

$$g_p = \bar{g}_1 + \bar{g}_2 \quad (\text{paralelo}) \quad (3.3)$$

A primeira equação pode ser escrita da mesma forma que a segunda, nominalmente:

$$g_s^D = \bar{g}_1^D + \bar{g}_2^D \quad (3.4)$$

com 
$$g_i^D \equiv g_0^2 / g_i \quad (i = 1, 2, s) \quad (3.5)$$

onde D entende-se por dual<sup>69</sup> (veja também Refs. 74, 81, 122 para uma discussão relacionada sobre os modelos de Potts e Z(N)), e  $g_0$  é uma condutância arbitrária de referência.

Introduziremos agora uma variável conveniente<sup>69</sup>:

$$S = \frac{g}{g+g_0} \quad (3.6)$$

a qual satisfaz uma interessante propriedade (como se fosse uma probabilidade, veja eq. (2.17) do capítulo anterior), ou seja:

$$S^D(g) \equiv S(g^D) = 1 - S(g) \quad (3.7)$$

onde utilizamos a definição (3.5). Baseando-nos na variável  $S$ , ser-nos-á possível construir um GR, muito eficiente (semelhante ao que ocorre para o problema de diluição de ligações<sup>69</sup>).

Introduziremos agora o formalismo de GR, que leva  $\sigma(g_1, g_2, p)$ , através da renormalização do grafo auto-dual da ponte de Wheatstone (veja FIGURA 3.2.1b), a uma simples ligação (FIGURA 3.2.1a). A condutância  $g_H$  de uma ponte de Wheatstone com condutância elementares  $\bar{g}_1, \bar{g}_2, \dots, \bar{g}_5$  (como está indicado na FIGURA 3.2.1b; veja o Apêndice B para o calculo de  $g_H$  através do BCM<sup>69</sup>)

$$g_H = \frac{\bar{g}_1 \bar{g}_2 \bar{g}_3 + \bar{g}_1 \bar{g}_2 \bar{g}_4 + \bar{g}_2 \bar{g}_3 \bar{g}_4 + \bar{g}_1 \bar{g}_3 \bar{g}_4 + \bar{g}_5 (\bar{g}_1 \bar{g}_3 + \bar{g}_2 \bar{g}_3 + \bar{g}_1 \bar{g}_4 + \bar{g}_2 \bar{g}_4)}{\bar{g}_1 \bar{g}_2 + \bar{g}_1 \bar{g}_3 + \bar{g}_2 \bar{g}_4 + \bar{g}_3 \bar{g}_4 + \bar{g}_5 (\bar{g}_1 + \bar{g}_2 + \bar{g}_3 + \bar{g}_4)} \quad (3.8)$$

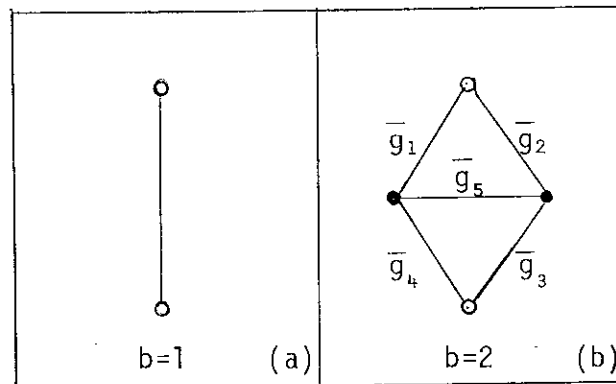


FIGURA 3.2.1 - Arranjo de condutâncias auto duais com dois terminais (o e ● denotam respectivamente os terminais e os nós internos). Dentro do presente RG o grafo (b) é renormalizado no grafo (a).

Conseqüentemente a lei de distribuição  $P_H$  associada à FIGURA 3.2.1b, se cada uma das ligações está associada à distribuição  $P(g)$  (Eq. 3.1), é dada por:

$$\begin{aligned}
 P_H(g) = & [(1-p)^5 + (1-p)^4 p] \delta(g-g_1) + 4(1-p)^4 p \delta\left(g - \frac{3g_1^2 + 5g_1 g_2}{5g_1 + 3g_2}\right) + \\
 & 2(1-p)^3 p^2 \delta\left(g - \frac{g_1^2 + 5g_1^2 g_2 + 3g_2^2}{2g_1 + 6g_2}\right) + \\
 & 2(1-p)^3 p^2 \delta\left(g - \frac{2g_1 g_2}{g_1 + g_2}\right) + 4(1-p)^3 p^2 \delta\left(g - \frac{g_1^3 + 5g_1^2 g_2 + 2g_1 g_2^2}{2g_1^2 + 5g_1 g_2 + g_2^2}\right) \\
 & + 2(1-p)^3 p^2 \delta\left(g - \frac{g_1^3 + 4g_1^2 g_2 + 3g_1 g_2^2}{3g_1^2 + 4g_1 g_2 + g_2^2}\right) + 2(1-p)^2 p^3 \delta\left(g - \frac{g_2^3 + 4g_2^2 g_1 + 3g_2 g_1^2}{3g_2^2 + 4g_2 g_1 + g_1^2}\right) \\
 & + 4(1-p)^2 p^3 \delta\left(g - \frac{g_2^3 + 5g_2^2 g_1 + 2g_2 g_1^2}{2g_2^2 + 5g_2 g_1 + g_1^2}\right) \\
 & + 2(1-p)^2 p^3 \delta\left(g - \frac{2g_2 g_1}{g_2 + g_1}\right) + 2(1-p)^2 p^3 \delta\left(g - \frac{g_2^2 + 4g_2 g_1 + 3g_1^2}{2g_2 + 6g_1}\right) \\
 & + 4(1-p)^4 p \delta\left(g - \frac{3g_2^2 + 5g_2 g_1}{5g_2 + 3g_1}\right) + [(1-p)p^4 + p^5] \delta(g-g_2) \quad (3.9)
 \end{aligned}$$

Podemos, em princípio, acompanhar a evolução sobre sucessivas renormalizações, da lei de distribuição até que ela atinja uma forma invariante. Este procedimento já foi feito<sup>113</sup> para redes randômicas de resistores. Vamos, entretanto, utilizar o mesmo procedimento do capítulo anterior, que consiste em aproximar a função de distribuição  $P_H(g)$  por uma binária dada por:

$$P'(g) = (1-p') \delta(g-g'_1) + p' \delta(g-g'_2) \quad (3.10)$$

onde  $p'$ ,  $g'_1$  e  $g'_2$  serão completamente determinadas (como uma

função de  $(p, g_1, g_2)$  impondo-se a conservação dos três primeiros momentos da função  $f(g)$  a ser escolhida. Uma possível e natural escolha é  $f(g) = g$ , e chamaremos este GR de GR-g. Entretanto, uma escolha mais conveniente e sofisticada é possível, nominalmente  $f(g) = S(g)$  (chamaremos o correspondente GR de GR-S). Para sermos precisos, nós impomos:

$$\langle S(g) \rangle_{p'} = \langle S(g) \rangle_{p_H} \quad (3.11a)$$

$$\langle [S(g)]^2 \rangle_{p'} = \langle [S(g)]^2 \rangle_{p_H} \quad (3.11b)$$

$$\langle [S(g)]^3 \rangle_{p'} = \langle [S(g)]^3 \rangle_{p_H} \quad (3.11c)$$

daí:

$$(1-p)S_1' + p'S_2' = [(1-p)^5 + (1-p)^4 p] S_1 + 4(1-p)^4 p S \left( \frac{3g_1^2 + 5g_1 g_2}{5g_1 + 3g_2} \right) + \dots = F(p, S_1, S_2) \quad (3.12a)$$

$$(1-p)S_1'^2 + p'S_2'^2 = [(1-p)^5 + (1-p)^4 p] S_1^2 + 4(1-p)^4 p \left[ S \left( \frac{3g_1^2 + 5g_1 g_2}{5g_1 + 3g_2} \right) \right]^2 + \dots = G(p, S_1, S_2) \quad (3.12b)$$

$$(1-p)S_1'^3 + p'S_2'^3 = [(1-p)^5 + (1-p)^4 p] S_1^3 + 4(1-p)^4 p \left[ S \left( \frac{3g_1^2 + 5g_1 g_2}{5g_1 + 3g_2} \right) \right]^3 + \dots = H(p, S_1, S_2) \quad (3.12c)$$

onde  $S_i \equiv S(g_i)$  e  $S_i' \equiv S(g_i')$  ( $i=1,2$ ). A solução da série de eq. (3.12) nos dá:

$$p' = \frac{L^2}{1+L^2} \quad (3.13a)$$



$$S'_1 = F \pm L\sqrt{K} \quad (3.13b)$$

$$S'_2 = F \pm \frac{1}{L} \sqrt{K} \quad (3.13c)$$

onde

$$K \equiv G - F^2 > 0 \quad (3.14)$$

e

$$L \equiv \frac{\sqrt{(H-3FK-F^3)^2 + 4K^3} - (H-3FK-F^3)}{2K^{3/2}} \quad (3.15)$$

o sinal de cima (de baixo) nas eqs. (3.13b) e (3.13c) será usado na região  $S_1 > S_2$  ( $S_1 < S_2$ ), isto é  $g_1 > g_2$  ( $g_1 < g_2$ ). As equações (3.13) fornecem  $p'$ ,  $g'_1$  e  $g'_2$  como funções de  $p$ ,  $g_1$  e  $g_2$ ; a condutância de referência  $g_0$  é cancelada devido à estrutura homogênea das eqs. (3.13), fechando, portanto, o problema operacional. Finalmente, a condutividade  $\sigma$  do sistema, como uma função de  $p$  e  $g_1/g_2$  para um valor fixo de  $g_2$ , renormaliza-se como  $1/g_2$  (veja Refs. 69, 113, 123-125)

### 3.3 - Resultados

As relações de recorrência (3.13) fornecem a superfície indicada na FIGURA 2.4.1a. A única diferença entre o grafo da FIGURA 2.4.1a e o grafo para resistores, é que neste último não existem as fases paramagnética (P) e ferromagnética (F). Observemos que:

i) existem dois pontos fixos totalmente estáveis, ou seja

$(p, s_1, s_2) = (0, 0, 0)$  e  $(1, 1, 1)$ , que permitem (através da de

terminação da separatriz entre suas respectivas bases atratoras) o cálculo numérico da superfície que estamos interessados;

- ii) o caso particular isolante-resistor (supercondutor-resistor) corresponde às linhas sobre os planos  $S_1 = 0$  e  $S_2 = 0$  ( $S_1 = 1$  e  $S_2 = 1$ );
- iii) o caso puro ou homogêneo ( $g_1 = g_2$ ) corresponde à região tipo um H torcido formada pelos segmentos  $p=0$ ,  $p=1$  e  $S_2 = S_1$ ;
- iv) a caso de igual concentração ( $p = \frac{1}{2}$ ;  $g_1 \neq g_2$ ) corresponde à linha  $S_1 + S_2 = 1$ .

Na FIGURA 3.3.1 nós representamos, no espaço  $(\sigma, p)$  para  $g_2$  fixo e valores típicos de  $\alpha \equiv g_1/g_2 > 0$ , a superfície que a parece na FIGURA 2.4.1a.

Este GR-S fornece os seguintes resultados exatos:

$$\left. \frac{d\sigma(p)}{\sigma(1) dp} \right|_{p=0} = \frac{2\alpha(1-\alpha)}{1+\alpha} \quad (3.16)$$

e consistentemente

$$\left. \frac{d\sigma(p)}{\sigma(1) dp} \right|_{p=1} = \frac{2(1-\alpha)}{1+\alpha} \quad (3.17)$$

bem como:

$$\sigma(0)/\sigma(1) = \infty \quad (3.18)$$

$$\frac{\sigma(p)}{\sigma(1)} \frac{\sigma(1-p)}{\sigma(1)} = \alpha \quad \forall p \quad (3.19)$$

Logo:

$$\frac{\sigma(\frac{1}{2})}{\sigma(1)} = \sqrt{\alpha} \quad (3.19')$$

A eq. (3.16) reproduz para  $d=2$  a eq. (9) da Ref. 96; a eq. (3.19) reproduz a eq. (5) da Ref. 96. O Grupo de Renormalização  $g$  (GR- $g$ ) é numericamente menos performante: por exemplo, in vés da eq. (3.16) exata, ela leva a:

$$\left. \frac{d\sigma(p)}{\sigma(1)dp} \right|_{p=0} = \frac{8\alpha(1-\alpha)}{3\alpha+5} \quad (3.20)$$

que coincide com a eq. (8) da Ref. 96 para  $(d,n) = (2, 1)$ .

Os expoentes críticos  $t$  e  $s$  (definidos, no limite de percolação de ligação  $p \rightarrow p_c = \frac{1}{2}$ , através de  $\sigma(p; \alpha=0) \propto (p-p_c)^t$  e  $\sigma(p, \alpha=\infty) \propto (p-p_c)^{-s}$ ) coincidem<sup>118</sup> para a rede quadrada, mas seu valor numérico exato é ainda desconhecido. Para determiná-los dentro do presente GR-S, nós calculamos o Jacobiano  $J \equiv \partial(p', \alpha', S_2') / \partial(p, \alpha, S_2)$  no ponto de percolação  $(p, \alpha, S_2) = (\frac{1}{2}, 0, 1)$ , e obtemos:

$$J = \begin{pmatrix} 13/8 & 0 & 0 \\ 0 & 23/12 & 0 \\ 13/8 & 0 & 23/12 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

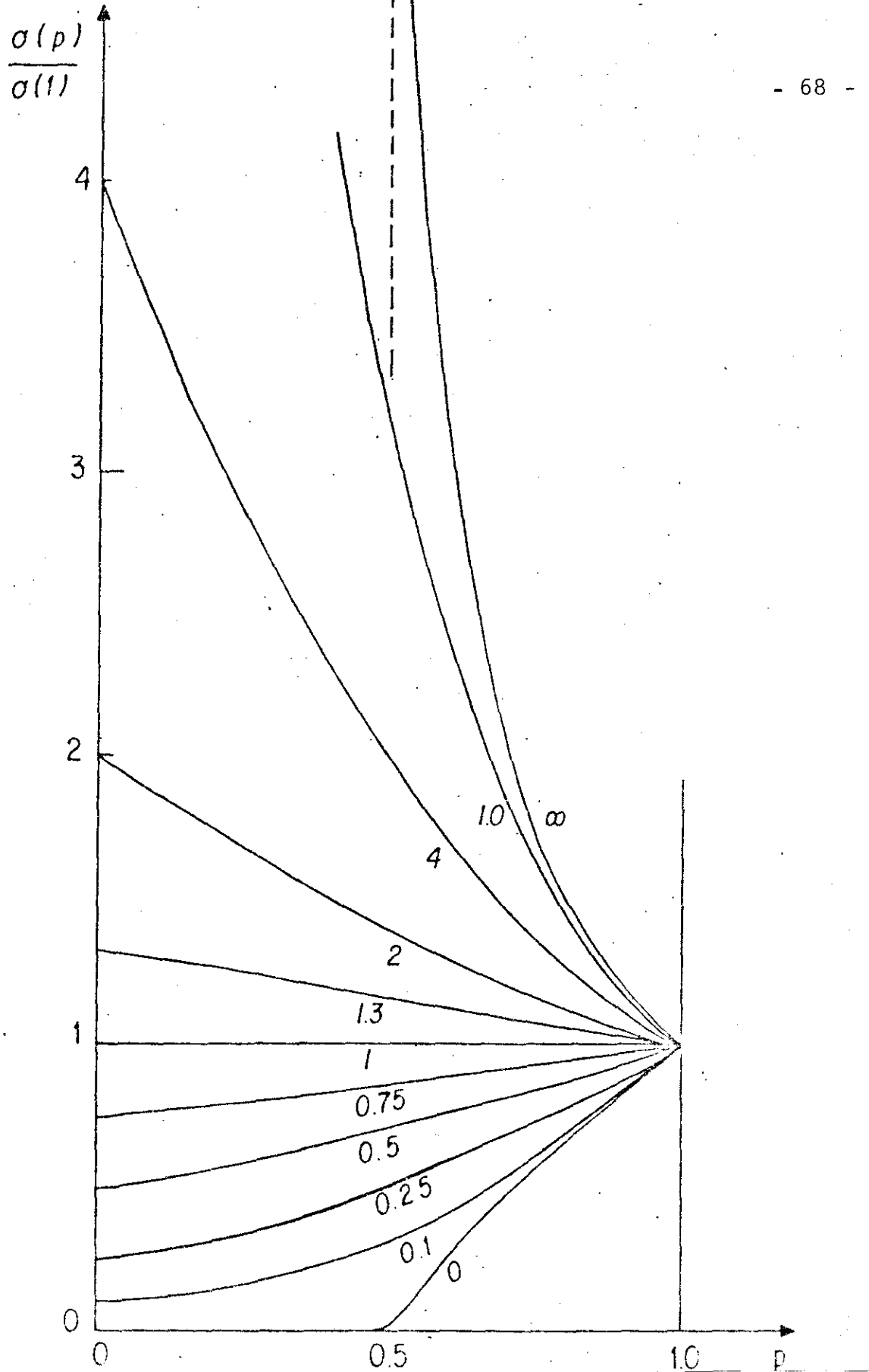


FIGURA 3.3.1 - Dependência da concentração da condutividade na rede quadrada de resistores com ligações mistas temperadas, para razões típicas  $g_1/g_2$  (números sobre as curvas).  $g_1/g_2=0$  e  $g_1/g_2=\infty$  corresponde, respectivamente, às misturas condutor-isolante e condutor-supercondutor. A linha tracejada indica a assintota  $p=\frac{1}{2}$ .

Cujos autovalores são  $\lambda_1=13/8$  e  $\lambda_2=\lambda_3=23/12$ . O expoente crítico térmico  $v=\ln b/\ln \lambda_1$ , bem como o expoente  $t=s=\ln \lambda_3/\ln \lambda_1$  estão indicados na TABELA 3.I. Antes de concluirmos esta seção, podemos dizer que os argumentos heurísticos propostos nas Refs. 72, 80, 81 e 84 sugerem a seguinte expressão analítica aproximada para  $\sigma(p)/\sigma(1)$ ; nós propomos:

$$\langle S \rangle_p = \frac{1}{2} \quad (3.22)$$

logo,

$$(1-p)S_1 + pS_2 = \frac{1}{2} \quad (3.23)$$

portanto,

$$\frac{(1-p)\alpha}{\alpha+\sigma(p)/\sigma(1)} + \frac{p}{1+\sigma(p)/\sigma(1)} = \frac{1}{2} \quad (3.24)$$

e conseqüentemente:

$$\frac{\sigma(p)}{\sigma(1)} = \frac{1}{2} \left[ \sqrt{(1-\alpha)^2 (1-2p)^2 + 4\alpha} - (1-\alpha)(1-2p) \right] \quad (3.25)$$

Podemos rapidamente verificar que esta expressão coincide com o caso particular  $Z=4$  da eq. (5.7) da Ref. 115 obtida por Kirkpatrick através de uma aproximação de Meio Efetivo.

TABELA 3.I - Valores dos expoentes críticos  $\nu$  e  $t=s$  fornecidos pelo presente GR e por outros métodos

	GR-g	GR-S	OUTROS
$\nu$	1,428	1,428	$4/3$ (exato) <sup>126</sup>
$t$	1,235	1,340	$1,26$ <sup>127</sup> $1,28 \pm 0,03$ <sup>128</sup> $1,30$ <sup>129</sup> $4/3$ <sup>130</sup> $1,237$ <sup>69</sup>

### 3.4 - Conclusões

Dentro do contexto do Grupo de Renormalização no Espaço Real calculamos, para concentrações arbitrárias e valores das (duas) possíveis condutâncias, a condutividade da rede quadrada com ligações mistas temperadas com uma distribuição binária de condutâncias. O resultado, fornecido pelo nosso melhor Grupo de Renormalização (RG-S), é deveras encorajante, uma vez que ele reproduz quase todos os resultados exatos disponíveis na literatura (probabilidade crítica de percolação, inclinações, relações de dualidade) e ainda fornece valores satisfatórios para os expoentes críticos das misturas condutor-isolante e condutor-supercondutor  $t=s=1,340$  (a ser comparado com outros resultados numéricos recentes tais como  $1,26$ <sup>127</sup>,  $1,28$ <sup>128</sup>,  $1,30$ <sup>129</sup>,  $1,33\dots$ <sup>130</sup>). De algum modo, esta alta precisão não é normalmente esperada para a aproximação de Grupo de Renormalização, usando um grafo tão pequeno ( $b=2$ ). Três razões contribuem para que este fato ocorra:

- (i) ambos os grafos da FIGURA 3.2.1 são auto duais (grafos de 2 terminais, uma escolha que já há algum tempo<sup>96, 131, 132</sup> sabe-se ser muito conveniente para a rede quadrada);
- (ii) o espaço de renormalização é relativamente grande, no sentido de que ele é tri-dimensional ( $p, S_1, S_2$ );
- (iii) finalmente, as médias são feitas sobre uma variável muito conveniente (a variável  $S$ ) que se transforma, sobre dualidade, simplesmente como uma probabilidade (veja eq. (3.7)).

É importante ressaltarmos um fator técnico interessante: a probabilidade crítica exata  $p_c = \frac{1}{2}$  foi obtida sem impor, "a priori", a relação de recorrência para a percolação do GR, como é usualmente feito (veja, por exemplo, a Ref. 69).

## CAPÍTULO 4 - CRITICALIDADE DO MODELO FERROMAGNÉTICO DE POTTS SE MI-INFINITO: UMA APROXIMAÇÃO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

### 4.1 - Introdução

O comportamento crítico do magnetismo de superfície é muito rico e tem sido objeto de estudo, tanto do ponto de vista dos físicos teóricos<sup>29-32,34,38,42,43,133,134,139-143,149-153</sup>, como dos experimentais<sup>51,52,148</sup>; veja a Ref. 47 para uma revisão, como também a presente introdução.

Sabe-se agora muito bem que, se considerarmos um sistema magnético tri-dimensional semi-infinito com volume e superfície livre ferromagnéticos com constantes de acoplamento (entre primeiros vizinhos), respectivamente  $J_B$  e  $J_S$  (a interação podendo ser Ising, Heisenberg anisotrópico, Potts, ou ainda mais complexa), vários tipos de transição de fase estarão presentes no diagrama de fase (veja FIGURA 4.1.1). Para temperaturas suficientemente baixas, mais precisamente para  $T < T_c^{3D} \equiv n^{3D} J_B / k_B$ , onde  $n^{3D}$  é um número puro ( $n^{3D} \approx 4.511$  para o modelo de Ising com spin  $\frac{1}{2}$  na rede cúbica simples), todas as camadas de spin (partindo da superfície livre, correspondente a cota  $Z=0$ , até a profundidade do volume, correspondente a cota  $Z \rightarrow \infty$ ) estão magneticamente ordenadas (fase volume - ferromagnético, denominada BF); o perfil  $Z$  da camada de magnetização aumenta ou diminui respectivamente com o aumento de  $Z$  para  $J_S/J_B \ll 1$  ou  $J_S/J_B \gg 1$ , e é achatada para valores intermediários de  $J_S/J_B$ .



Quando  $T$  cruza o valor  $T_C^{3D}$ , ocorrem dois importantes casos, de acordo com ambos  $\Delta \equiv J_S/J_{3D} - 1 < \Delta_c$  ou  $\Delta > \Delta_c$ , onde  $\Delta_c$  é um número puro satisfazendo  $0 < \Delta_c < \frac{n}{2D} - 1$  (a temperatura crítica estritamente bidimensional é dada por  $T_C^{2D} \equiv n^{2D} J_S/k_B$ , onde  $n^{2D}$  é um número puro,  $n^{2D} = 2,269$  para o modelo de Ising com spin  $\frac{1}{2}$  na rede quadrada, portanto, para uma rede cúbica simples semi-infinita, ele é  $0 < \Delta_c < \frac{4,511}{2,269} - 1 \approx 0,988$ ; de fato, os valores de séries e Monte-Carlo são da ordem de  $\Delta_c = 0,5 - 0,6$ ). No primeiro caso ( $\Delta < \Delta_c$ ), todo o magnetismo das camadas  $m(Z)$  anulam-se simultaneamente (veja Ref. 153 e outras aĩ inseridas) para  $T_C^{3D}(m_B \equiv m(Z \rightarrow \infty) \alpha (T_C^{3D} - T)^{\beta^{3D}}$ ,  $\beta^{3D}$  sendo o expoente crítico do sistema tridimensional;  $m_S \equiv m(Z=0) \alpha (T_C^{3D} - T)^{\beta_1}$  onde  $\beta_1$  é o novo expoente crítico e, em geral, é diferente dos valores de ambos os sistemas bi e tridimensional; a mesma lei  $(T_C^{3D} - T)^{\beta_1}$  se mantem para  $0 < Z < \infty$ , e a fase paramagnética (denominada P) aparece. No segundo caso ( $\Delta > \Delta_c$ ),  $m_B$  anula-se ( $m_B \alpha (T_C^{3D} - T)^{\beta^{3D}}$ ), enquanto  $m(0 \leq Z < \infty)$  (possivelmente) apresenta somente uma pequena singularidade, mantendo um valor finito (superfície ferromagnética, denominada SF) acima de  $T = T_C^S(\Delta)$ , quando ela, por sua vez, anula-se ( $m(0 \leq Z < \infty) \alpha (T_C^S - T)^{\beta^{2D}}$ ,  $\beta^{2D}$  sendo o expoente crítico bidimensional), logo restaurando a fase P; é intuitivo que  $T_C^S$  satisfaz necessariamente  $T_C^S > T_C^{2D}$  (de onde obtemos  $\Delta_c < n^{3D}/n^{2D} - 1$ , como exposto anteriormente). O caso marginal  $\Delta = \Delta_c$  corresponde a um ponto multicrítico (que é o ponto superfície-volume, denominado SB) e está associado a uma classe de universalidade ( $m_B \alpha (T_C^{3D} - T)^{\beta^{3D}}$ , mas  $m(0 \leq Z < \infty) \alpha (T_C^{3D} - T)^{\beta_1^{SB}}$ , onde o expoente crítico  $\beta_1^{SB}$  é em geral diferente dos três anteriormente mencionados, nominalmente  $\beta^{3D}$ ,  $\beta^{2D}$  e  $\beta_1$ ; observe que  $T_C^S(\Delta_c) = T_C^{3D}$ . Nas proximidades do ponto SB ( $\Delta \rightarrow \Delta_c + 0$ ), esperamos  $(T_C^S(\Delta)/T_C^{3D} - 1) \sim A(\Delta/\Delta_c - 1)^{1/\phi}$  (veja FIGURA 4.1.1), o que defi-

ne a amplitude crítica  $A$  e o expoente de "crossover"  $\phi$ .

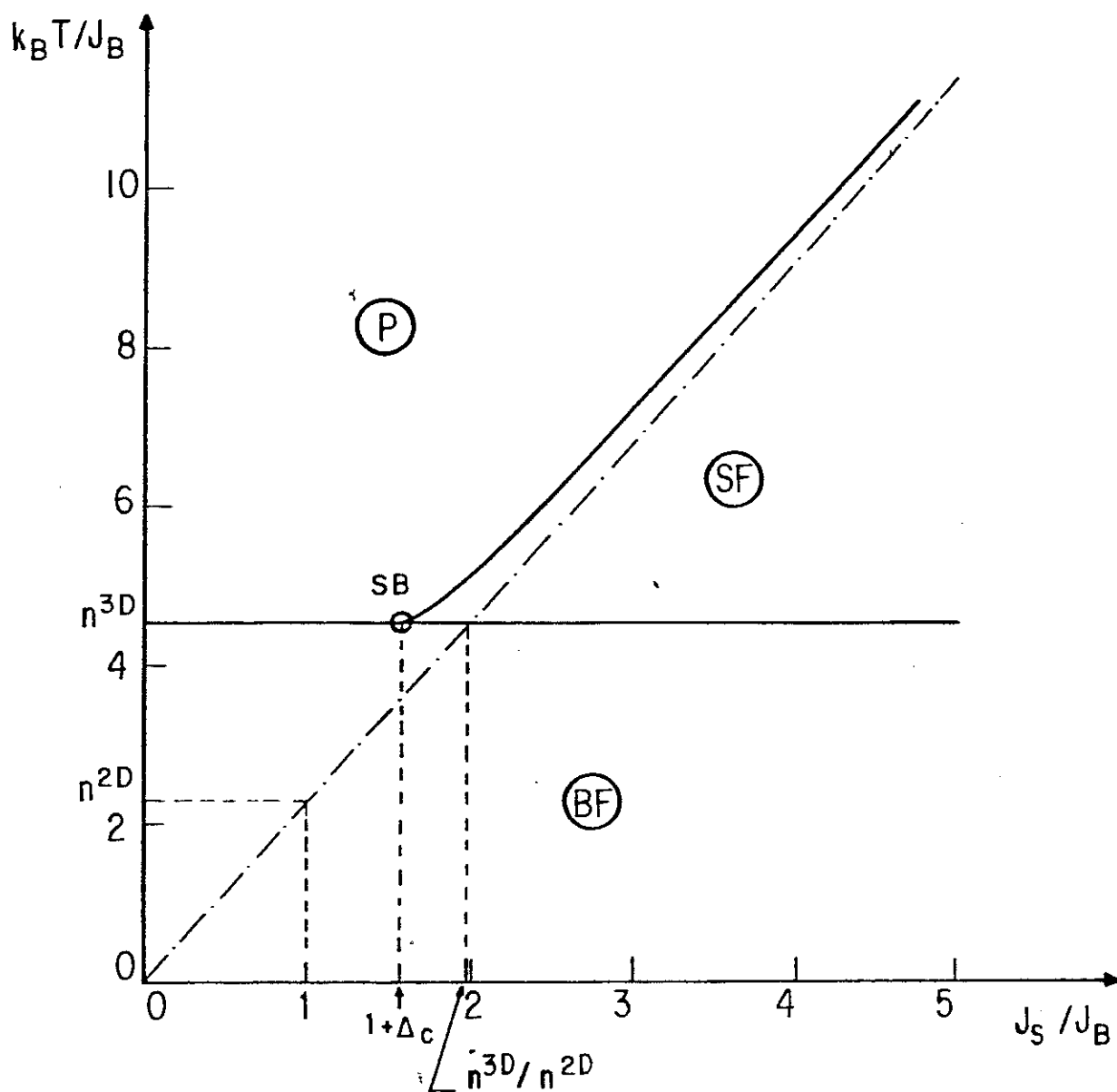


FIGURA 4.1.1 - Diagrama de fase do modelo de Ising ( $q=2$ ) na rede cúbica simples no espaço  $k_B T/J_B - J_S/J_B$ . BF, SF e P denotam respectivamente as fases volume-ferromagnético, superfície-ferromagnética e paramagnética. Todas as três fases se encontram no ponto multicrítico SB (superfície-volume). As linhas com pontos e traços correspondem ao caso limite onde a superfície ( $d=2$ ) está completamente desconectada do volume ( $d=3$ ).

Se em lugar da magnetização nós enfocamos o comprimento de correlação, esperamos, consistentemente com o que já foi dito, os seguintes expoentes críticos: enquanto o comprimento de correlação do volume diverge em  $T_c^{3D}$  como  $|T-T_c^{3D}|^{-\nu^{3D}}$  para todos os valores de  $\Delta$ , o comprimento de correlação da superfície diverge sobre a linha P-BF ( $\Delta < \Delta_c$ ), como  $|T-T_c^{3D}|^{-\nu_1}$ , e, sobre a linha P-SF ( $\Delta > \Delta_c$ ) como  $|T-T_c^S(\Delta)|^{-\nu^{2D}}$ . Para a criticalidade do volume o desvio do acoplamento da superfície determina um novo expoente crítico (no ponto multicrítico), denominado  $y_{t_1}^{SB}$  e inicialmente introduzido por Burkhardt e Eisenriegler<sup>31</sup> em 1977. De modo que pode aparecer uma suave singularidade no comprimento de correlação da superfície sobre a linha BS-SF ( $\Delta > \Delta_c$ ).

O quadro descrito acima já foi demonstrado satisfatoriamente (embora parcialmente) para o modelo de Ising com spin  $\frac{1}{2}$  na rede cúbica simples semi-infinita, em particular, os seguintes valores numéricos (confiáveis) já foram obtidos:  $\Delta_c = 0,6 \pm 0,1$  (séries, Ref. 135) e  $0,5 \pm 0,03$  (Monte Carlo, Ref. 153) e  $\phi = 0,68$  (expansão  $\epsilon$ , Ref. 139) e  $0,56 \pm 0,04$  (Monte Carlo, Ref. 153). De acordo com o que sabemos, não existem tais informações para o modelo de Potts com  $q$  estados, que reproduz o modelo de Ising para  $q=2$  e a percolação de ligações para  $q=1$ <sup>23</sup>. Algumas aproximações de Grupo de Renormalização no Espaço Real já foram feitas<sup>39,40,42,44</sup> mas elas enfatizam os aspectos qualitativos do problema mais do que os quantitativos.

Neste trabalho, desenvolvemos um cálculo de GR que segue a linha da Ref. 44; entretanto, nós utilizamos (em vez do grafo tipo Migdal-Kadanoff ali introduzido) um recente grafo<sup>136</sup> que

jã mostrou fornecer excelentes resultados para a rede cúbica simples. Como uma consequência da qualidade deste grafo (cujo tamanho é tal que envolve um grande trabalho computacional) foi possível se obter resultados bons do ponto de vista quantitativo para a dependência com  $q$  de  $\Delta_c, \phi, A, 1/y_{t_1}^{SB}$  e  $T_c^S(\Delta)$  (os resultados para  $T_c^S(\Delta)$ , e consequentemente para  $\Delta_c$  e  $A$ , foram melhorados a través de uma conveniente extrapolação do tratamento de GR).

Na seção 4.2 introduzimos o modelo e o formalismo; na seção 4.3 apresentamos os resultados, comparamos com outros trabalhos disponíveis e discutimos o problema de percolação de ligações; finalmente concluimos na seção 4.4.

#### 4.2 - Modelo e Formalismo

Consideremos o sistema cujo Hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = -q \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (\sigma_i = 1, 2, \dots, q, \neq_i) \quad (4.1)$$

onde  $\langle i,j \rangle$  representa a soma sobre todos os pares de sítios primeiros vizinhos de uma rede cúbica simples semi-infinita;  $J_{ij}$  é igual a  $J_S (J_S > 0)$  se ambos os sítios pertencem à superfície livre, do tipo (1,0,0), e igual a  $J_B (J_B > 0)$  de outro modo. Lembremos aqui a definição da variável  $t$  (transmissividade térmica, Ref. 54)

$$t_r \equiv \frac{1 - e^{-qJ_r/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ_r/k_B T}} \in [0, 1] \quad (r=B, S) \quad (4.2)$$

daí:

$$\Delta \equiv \frac{J_S}{J_B} - 1 = \frac{\ln \left[ \frac{1+(q-1)t_S}{1-t_S} \right]}{\ln \left[ \frac{1+(q-1)t_B}{1-t_B} \right]} - 1 \quad (4.3)$$

Construímos um GR seguindo ao longo da linha Ref. 44 (onde são utilizados grafos de dois terminais). A relação de recorrência para a transmissividade do volume é dada por:

$$t'_B = f(t_B) \quad (4.4)$$

onde  $f(t_B)$  é a transmissividade equivalente associada ao grafo da FIGURA 4.2.1 (veja Ref.136);  $f(t_B)$  é uma razão de polinômios (com aproximadamente 1000 termos nos numerador e denominador) na variável  $t_B$ , com coeficientes dependentes de  $q$ , a qual foi calculada através de implementação analítica (no computador) do BCM<sup>44</sup>.

Analogamente a relação de recorrência para a transmissividade da superfície é dada por:

$$t'_S = g(t_S, t_B) \quad (4.5)$$

onde  $g(t_S, t_B)$  é a transmissividade equivalente associada ao grafo da FIGURA 4.2.2; para calcular  $g(t_S, t_B)$  utilizamos o programa mencionado acima.

O fluxo, no espaço  $t_B$ - $t_S$ , associado com as eqs. (4.4) e (4.5), fornece para arbitrários valores de  $q$ , o diagrama de fase

(e portanto  $\Delta_c$ ,  $\phi$  e  $A$ ), bem como os expoentes críticos térmicos  $v^{2D}$ ,  $v^{3D}$  e  $1/y_{t_1}^{SB}$

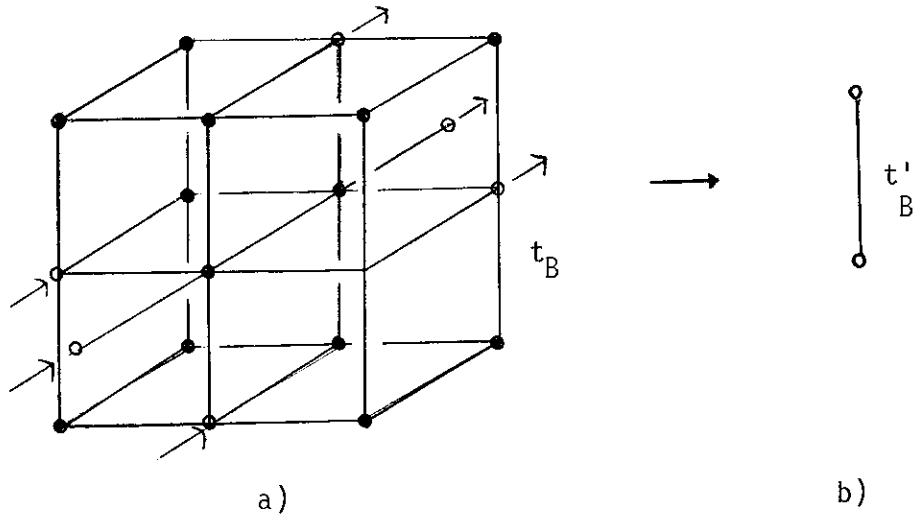


FIGURA 4.2.1 - Células do GR para o volume, cada ligação está associada a constante de acoplamento ao volume  $J_B$ , as setas indicam os nós terminais. a) para  $b=3$  b) para  $b=1$  (renormalizamos a) em b)).

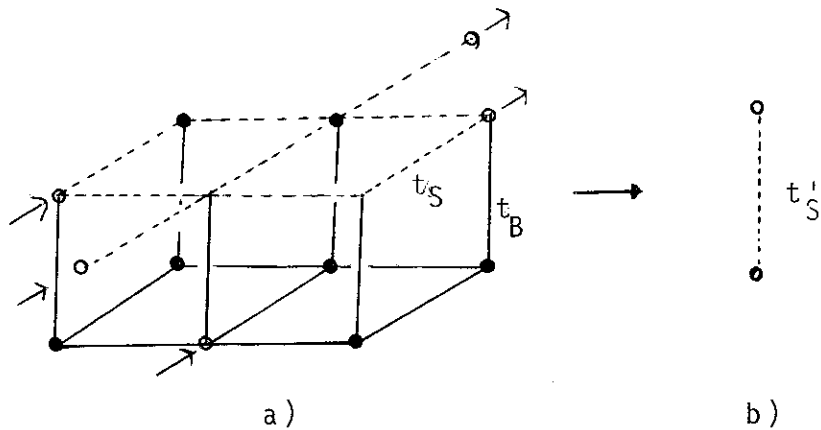


FIGURA 4.2.2 - Célula do GR para a superfície livre; as ligações tracejadas (cheias) estão associadas a constante de acoplamento  $J_S$  ( $J_B$ ) da superfície (volume); as setas indicam os nós terminais. (a) para  $b=3$ ; b) para  $b=1$  (renormalizamos a) em b)).

### 4.3 - Resultados

#### 4.3.1 - Diagrama de Fluxo

O diagrama de fluxo  $\vec{e}$ , para qualquer valor de  $q$ , do tipo indicado na FIGURA 4.3.1 (qualitativamente semelhante ao que aparece na Ref. 44). O qual apresenta os seguintes aspectos:

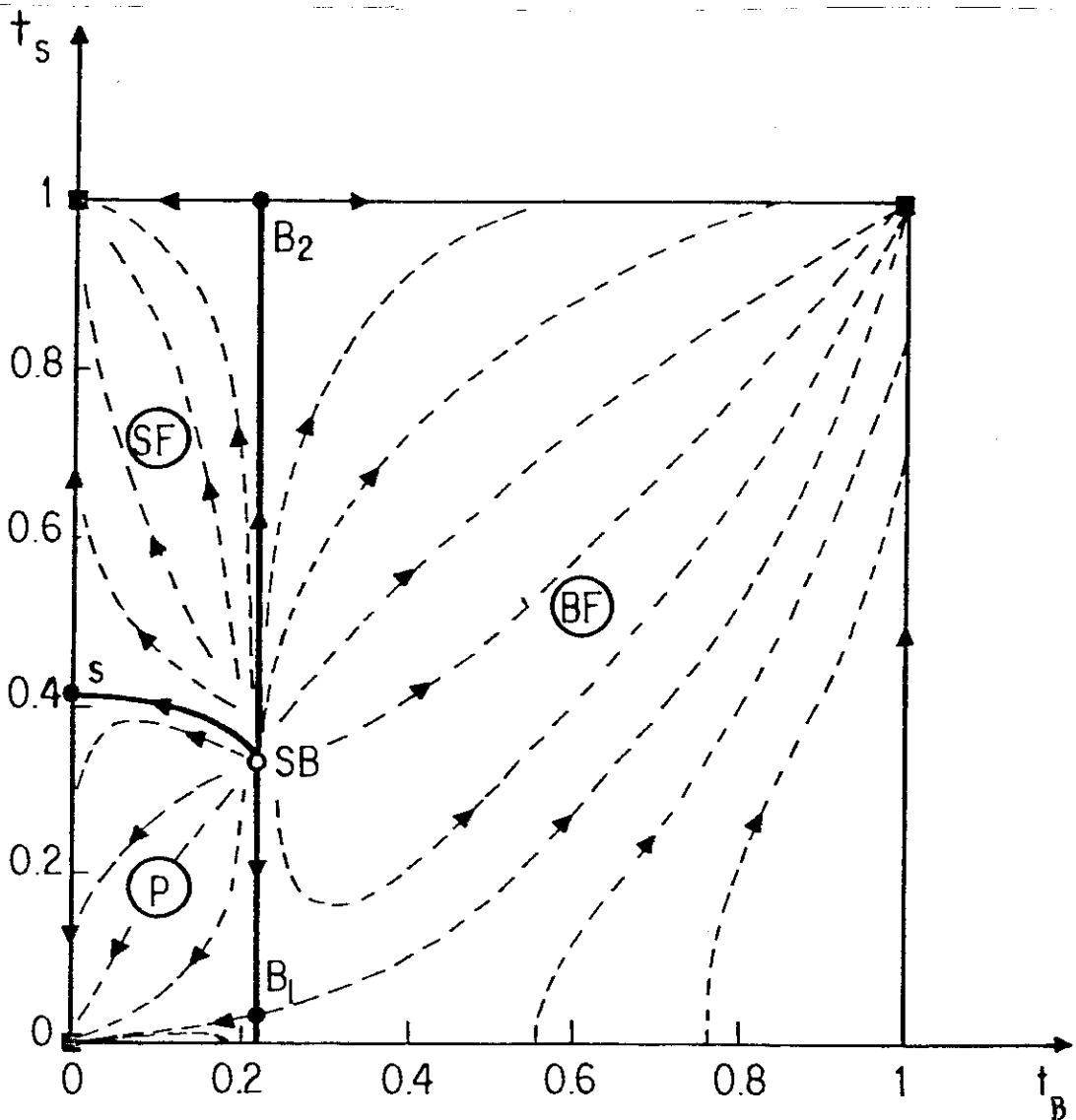


FIGURA 4.3.1 - Diagrama de fluxo para  $q=2$  no espaço  $t$  (transmissividade do volume) -  $t_s$  (transmissividade da superfície livre).  $\blacksquare$ ,  $\circ$  e  $\bullet$  denotam respectivamente os pontos fixos trivial (estável), multicrítico (instável) e crítico (semi-estável). As linhas tracejadas são indicativas. As três fases são volume ferromagnético (BF), superfície ferromagnética (SF) e paramagnética (P).

- i) os pontos fixos triviais (estáveis)  $(t_B, t_S) = (0,0), (0,1)$  e  $(1,1)$  correspondem respectivamente às fases P, SF e BF;
- ii) o ponto fixo crítico (semi-estável)  $(t_B, t_S) = (0, 1/(\sqrt{q}+1))$  reproduz o ponto crítico bidimensional exato;
- iii) os pontos fixos críticos (semi-estáveis)  $B_1 [(t_B, t_S) = (t_B^{3D}, t_S^{(1)})]$  e  $B_2 [(t_B, t_S) = (t_B^{3D}, 1)]$  correspondem respectivamente aos casos onde  $m_B$  e  $m_S$  anulam-se e não se anulam simultaneamente;  $t_B^{3D}$  é, para  $q \leq 4$ , cerca de 10% menor do que o melhor valor que se conhece. (Veja TABELA 4.1).
- iv) o ponto fixo multicrítico (totalmente instável)  $S_B [(t_B, t_S) = (t_B^{3D}, t_S^{SB})]$  constitui por si mesmo uma classe de universalidade.
- v) as linhas críticas P-SF, P-BF e SF-BF pertencem respectivamente às classes de universalidade associadas aos pontos fixos  $S, B_1$  e  $B_2$ .

#### 4.3.2 - Extrapolação

A linha crítica P-SF no espaço  $(t_B, t_S)$  pode ser melhorada quantitativamente através de um procedimento muito simples que consiste em um deslocamento do eixo  $t_B$  (sem distorção do eixo  $t_S$  tal que  $t_B^{3D}$  coincide, por construção, com o melhor valor disponível (considerado como  $t_B^{3D}$  (exato)). Em outras palavras  $(t_B, t_S)$  fica  $(t_B \cdot t_B^{3D}(\text{exato})/t_B^{3D}, t_S)$ . Esta extrapolação melhora consistentemente  $T_C^S(\Delta)$ ,  $\Delta_C$  e  $A$  (veja FIGURAS 4.3.2 e 4.3.3). Por exemplo,  $\Delta_C$  é dado pela eq. (4.3), onde  $t_B$  é substituído por  $t_B^{3D}(\text{exato})$ , e  $t_S$  é substituído por  $t_S^{SB}$ .



q	1/2	1	2	3
$t_B$	0.25102 0.2668 <sup>a</sup>	0.22604 0.247 <sup>b</sup>	0.19492 0.21811 <sup>c</sup>	0.17505 0.1966 <sup>d</sup>
$t_S$	0.58579	0.50000	0.41421	0.36602
$v^{2D}$	2.035 1.772 <sup>e</sup>	1.651 4/3 <sup>e</sup>	1.369 1 <sup>e</sup>	1.244 5/6 <sup>e</sup>
$v^{3D}$	1.361 -	1.198 0.88 <sup>f</sup>	1.041 0.630 <sup>g</sup>	0.960 0.40 ± 0.13
$1/y_{t_1}^{SB}$	2.531	2.008	1.623	1.452
$\phi$	0.538 - -	0.597 - -	0.641 0.68 <sup>h</sup> 0.56 ± 0.04 <sup>i</sup>	0.661 - -
A	1.3 1.1*	0.7 0.6*	0.5 0.4*	0.4 0.3*
$\Delta_C$	1.668 1.473* - -	1.103 0.899* - -	0.762 0.569* 0.6 ± 0.1 <sup>j</sup> 0.5 ± 0.03 <sup>i</sup>	0.630 0.458* - -

TABELA 4.I - Resultados do GR e resultados exatos (ou de s̄eries) para os pontos cr̄iticos  $t_B$  e  $t_S$  (o GR reproduz o resultado exato para todo q), expoentes  $v^{2D}$  (d=2),  $v^{3D}$  (d=3),  $1/y_{t_1}^{SB}$  (para o ponto multicr̄itico (SB)) e  $\phi$  (expoente de "crossover"), a amplitude cr̄itica A e o parâmetro adimensional  $\Delta_C \equiv J_S/J_B - 1$  o qual localiza o ponto multicr̄itico SB. \* representa a nossa melhor proposta (extrapolada); (a) Ref. 137; (b) Refs.138, 154; (d) Ref. 145; (e) Ref. 126; (f) Ref. 144; (g) Ref. 155; (h) Ref. 139; (i) Ref. 153; (j) Ref. 134; (l) Ref. 179; c) Ref. 154.

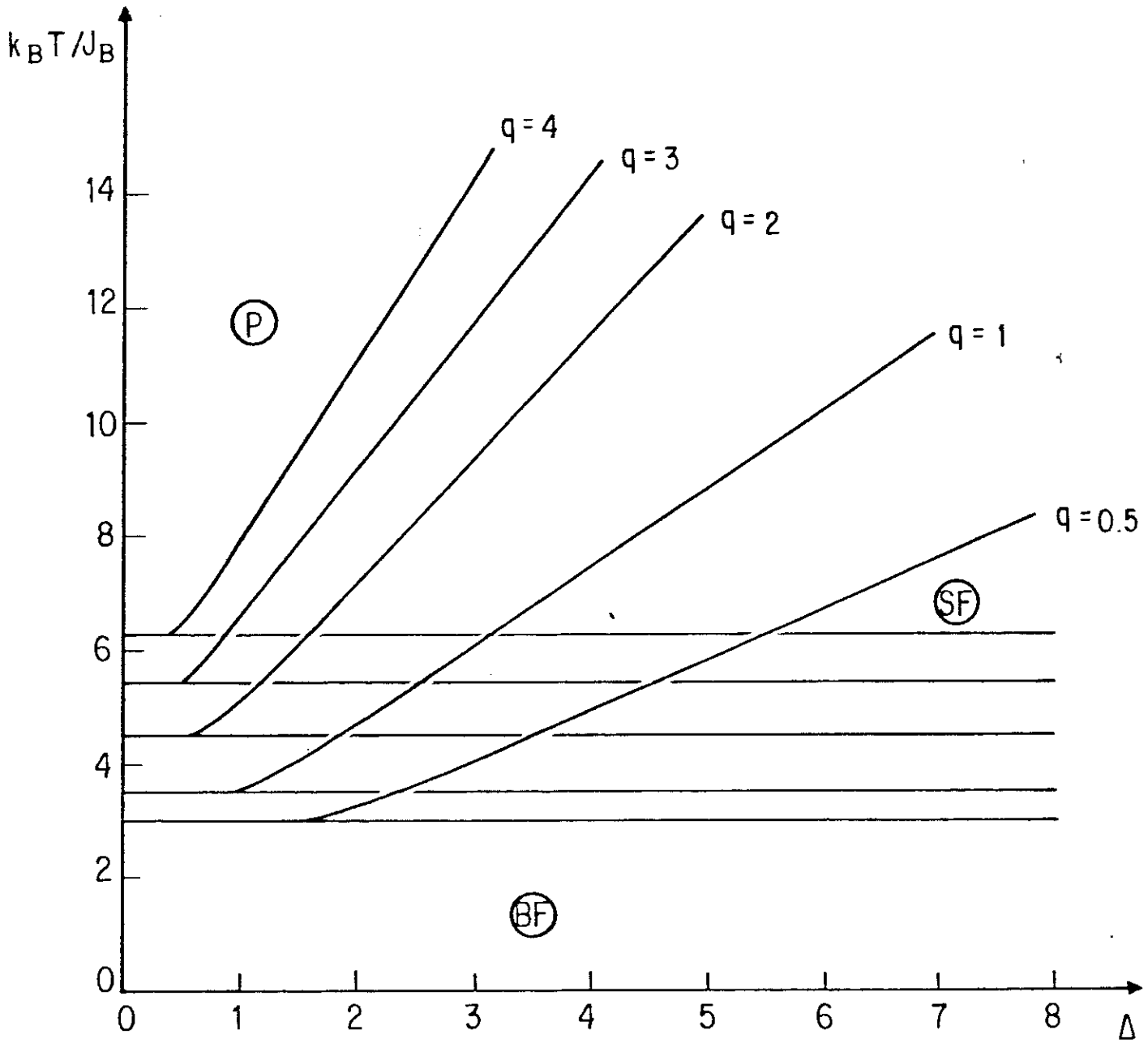


FIGURA 4.3.2 - Evolução de  $\Delta$  com  $q$  do diagrama de fase  $\Delta$ - $T$  indicado na FIGURA 4.1.1.

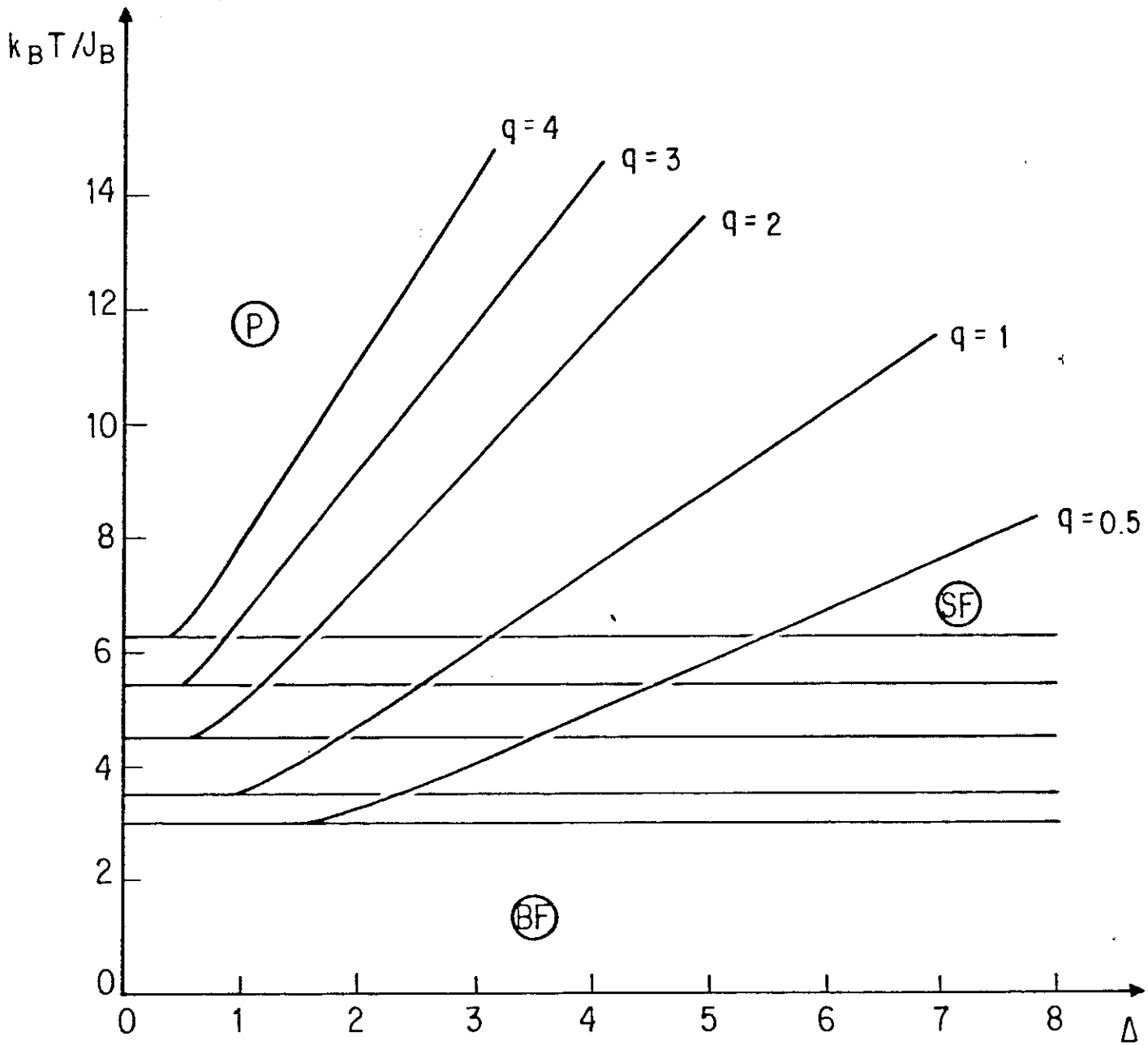


FIGURA 4.3.2 - Evolução de  $\Delta$  com  $q$  do diagrama de fase  $\Delta$ - $T$  indicado na FIGURA 4.1.1.

### 4.3.3 - Expoentes Críticos

A matriz jacobiana  $M \equiv \partial(t'_B, t'_S) / \partial(t_B, t_S)$  calculada para um ponto fixo particular da presente recorrência, do GR é dada por:

$$M = \begin{pmatrix} \lambda_B & 0 \\ \mu & \lambda_S \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

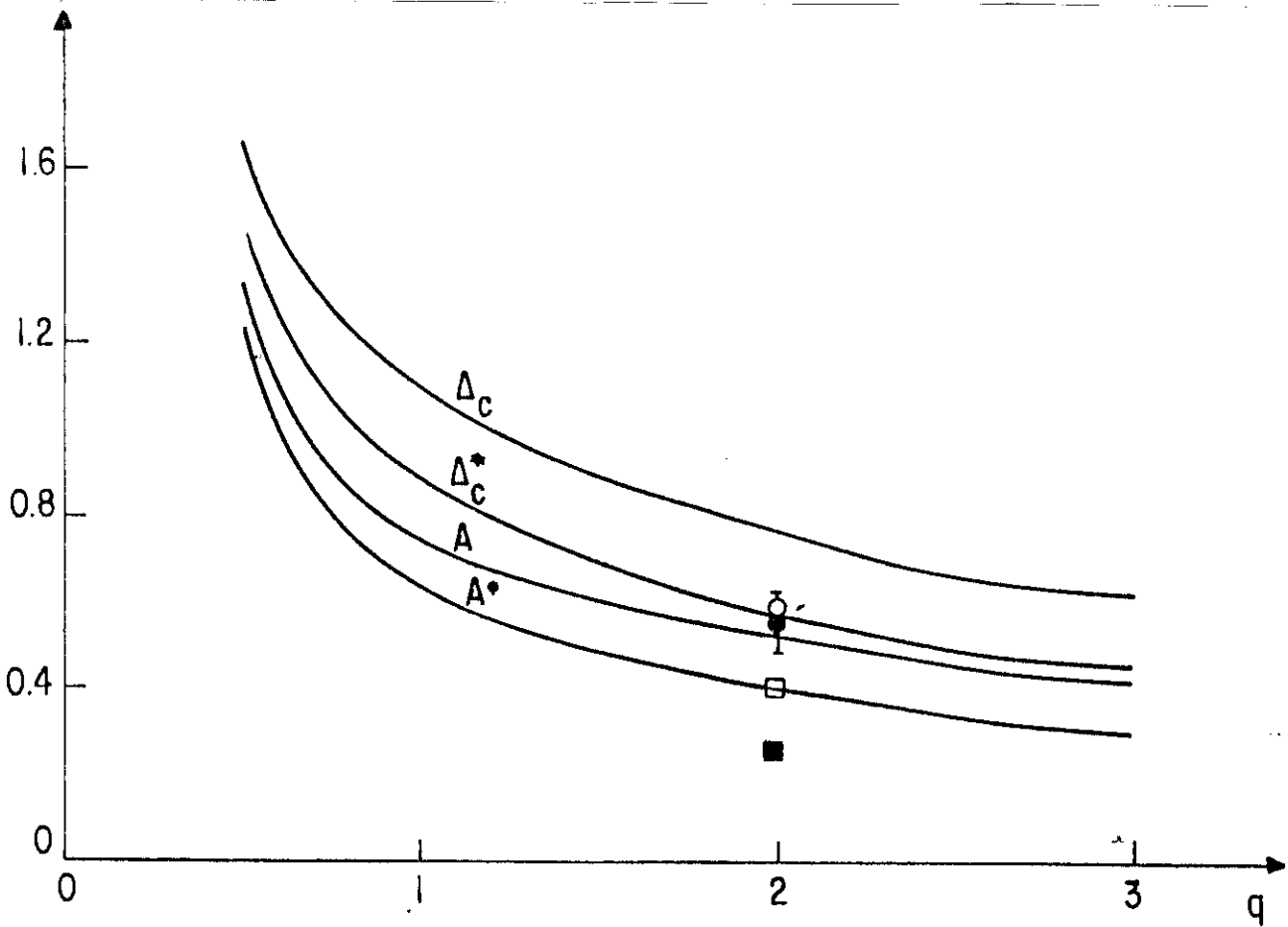


FIGURA 4.3.3 - Evolução com q de  $\Delta_c$  e A (bem como de seus respectivos valores extrapolados,  $\Delta_c^*$  e  $A^*$ ) obtido pelo presente GR.  $\bullet$ ,  $\square$  com linha vertical, e  $\blacksquare$  denotam respectivamente os resultados para  $\Delta_c$  e  $q=2$  (Ising) fornecidos pelas referências 135, 153, 152 e através da aproximação de campo médio.

### 4.3.3 - Expoentes Críticos

A matriz jacobiana  $M \equiv \partial(t'_B, t'_S) / \partial(t_B, t_S)$  calculada para um ponto fixo particular da presente recorrência, do GR é dada por:

$$M = \begin{pmatrix} \lambda_B & 0 \\ \mu & \lambda_S \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

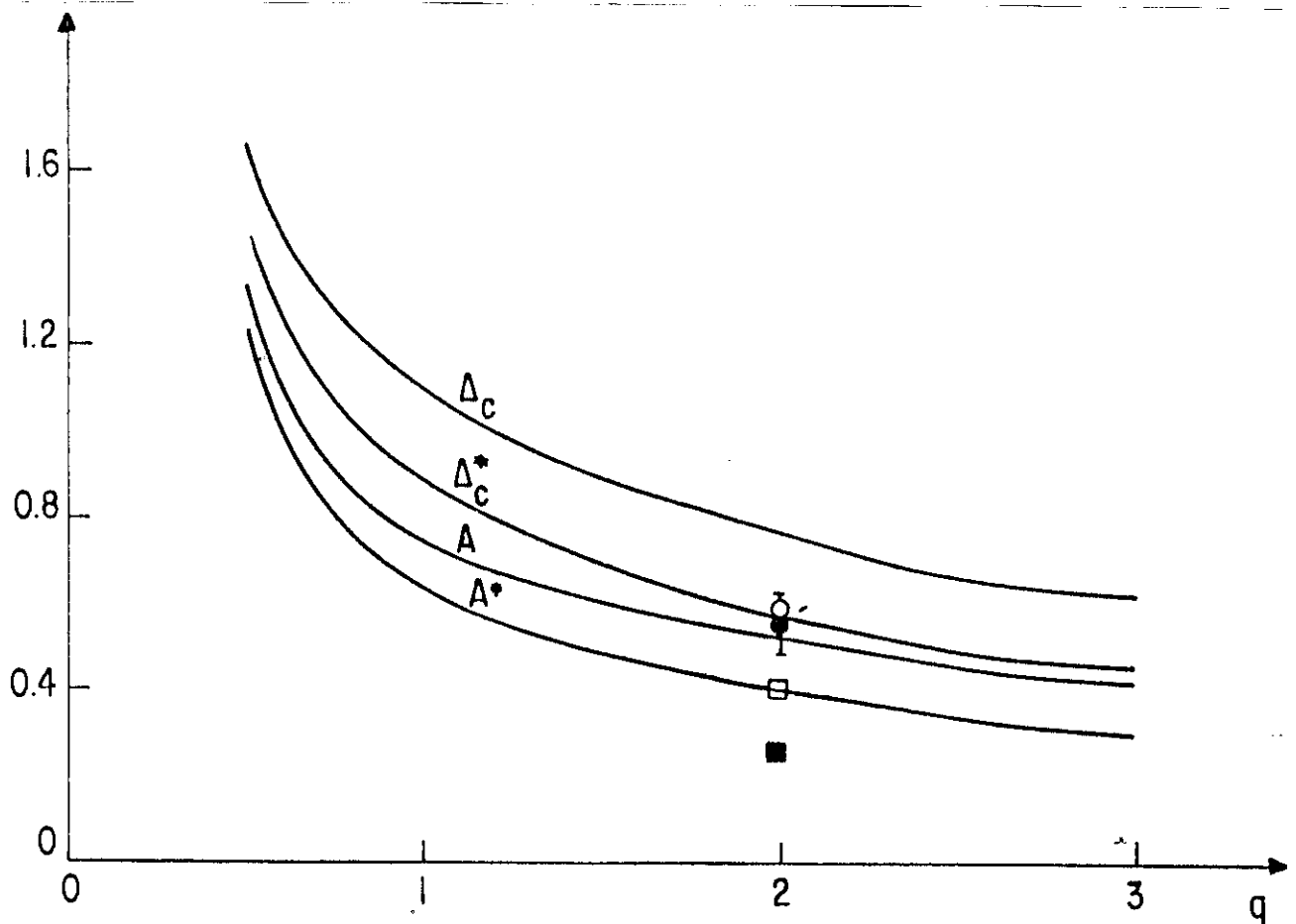


FIGURA 4.3.3 - Evolução com  $q$  de  $\Delta_c$  e  $A$  (bem como de seus respectivos valores extrapolados,  $\Delta_c^*$  e  $A^*$ ) obtido pelo presente GR.  $\bullet$ ,  $\circ$ ,  $\square$ , e  $\blacksquare$  denotam respectivamente os resultados para  $\Delta_c$  e  $q=2$  (Ising) fornecidos pelas referências 135, 153, 152 e através da aproximação de campo médio.

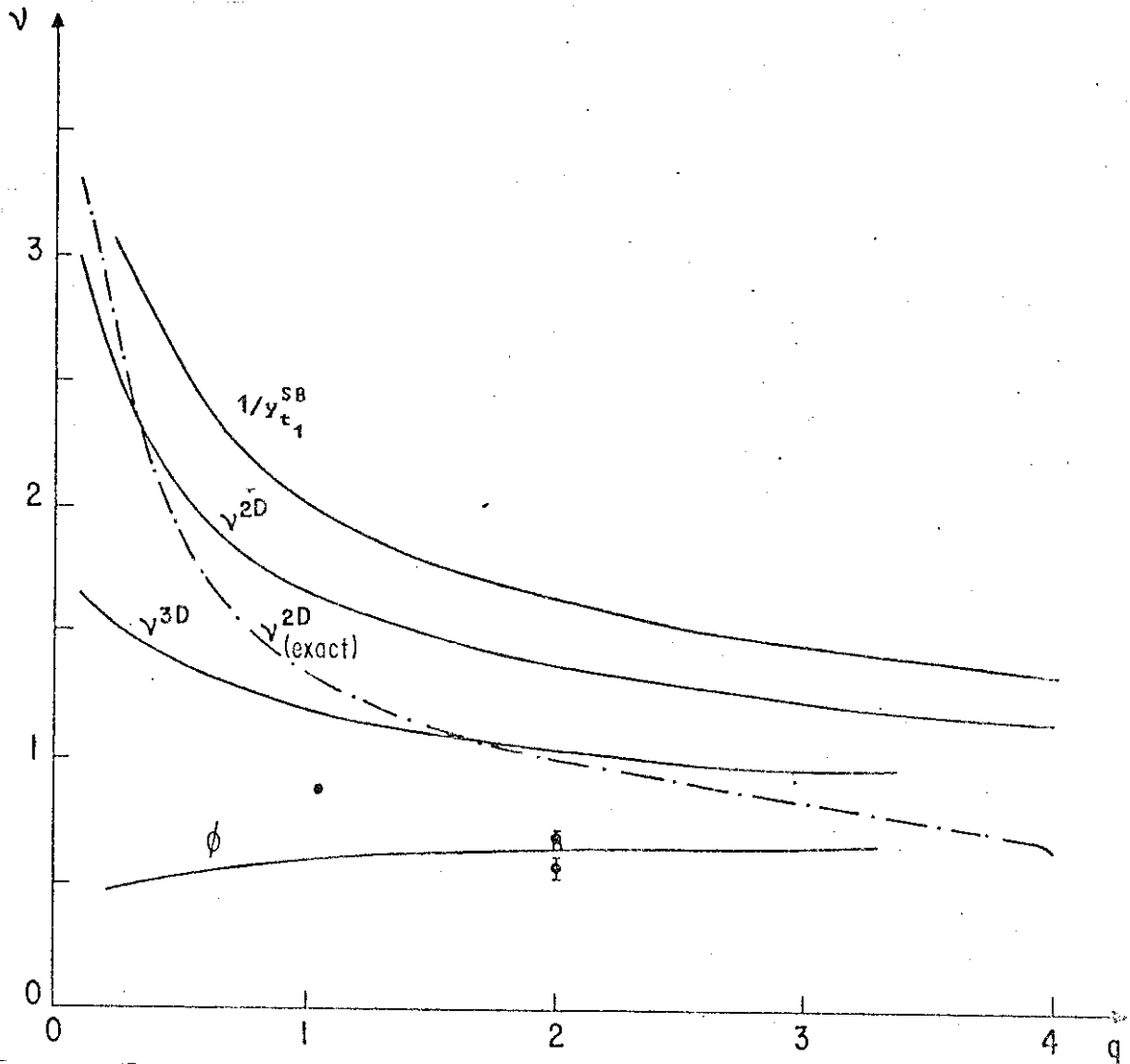


FIGURA 4.3.4 - Dependência em  $q$  dos expoentes críticos do comprimento de correlação,  $v^{2D}$  ( $d=2$ ) e  $v^{3D}$  ( $d=3$ ) do expoente crítico  $1/y_{t_1}^{SB}$  (no ponto multicrítico superfície-volume), bem como o expoente de "crossover"  $\phi$ . A linha com traços e pontos indica o resultado exato de den Nijs para  $v^{2D}$ .  $\bullet$  e  $\circ$  indicam os resultados obtidos nas Refs. 10 e 153 para  $\phi$ , enquanto que  $\circ$  e  $\bullet$  são, respectivamente, os resultados das Refs. 155 ( $q=2$ ) e 144 ( $q=1$ ) para o valor de  $v^{3D}$ .

existe percolação no volume, mas existe na superfície. Para  $p_S > 0.417$ , a percolação na superfície é possível, mesmo na ausência de percolação no volume (i. e.,  $p_B < 0.247$ ): neste caso, o volume ajuda a superfície a percolar, embora ele mesmo não percole.

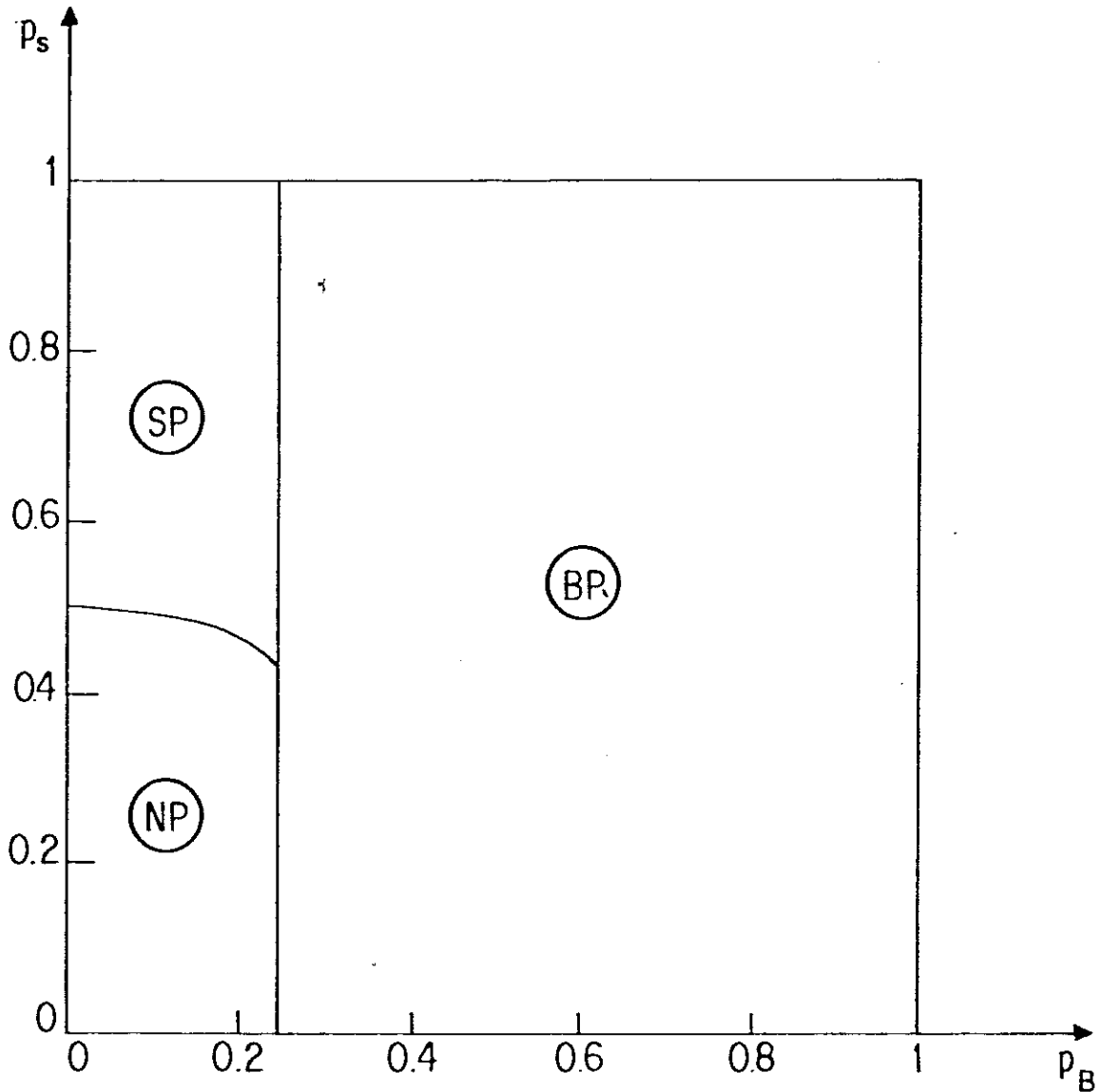


FIGURA 4.3.5 - Diagrama de fase para percolação de ligações no espaço  $p_S$  (probabilidade da superfície) -  $p_B$  (probabilidade do volume). São possíveis três fases, nominalmente a não percolante (NP), a percolante no volume (BP) e a percolante na superfície (SP).

#### 4.4 - Conclusões

No contexto do Grupo de Renormalização no Espaço Real utilizando grafos sofisticados, nós melhoramos substancialmente e completamos os resultados obtidos recentemente por Tsallis e Sarmiento<sup>44</sup> para a criticalidade do modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados na rede cúbica simples semi infinita. O ponto crítico exato é reproduzido no limite assintótico bidimensional ( $\Delta \equiv J_S/J_B - 1 \rightarrow \infty$ ) para todos os valores de  $q$ .

Este GR fornece os pontos críticos tridimensional com uma discrepância da ordem de 10% em relação aos melhores resultados disponíveis (série, entre outros). Esta diferença é eliminada através de uma extrapolação simples. Conseqüentemente, acreditamos que os diagramas de fase ( $k_B T/J_B \times \Delta$ ) são do ponto de vista quantitativo, bem fidedignos. Destes diagramas de fase obtemos  $\Delta_c(q)$  (valor de  $\Delta$  acima do qual é possível a fase de superfície mesmo na ausência da fase de volume) e  $A(q)$  (amplitude crítica no ponto multicrítico superfície-volume). Para o caso particular de Ising obtivemos  $\Delta_c(2) = 0,569$ , a ser comparado com os resultados de série<sup>135</sup>  $0,6 \pm 0,1$ , e com o de Monte Carlo<sup>153</sup>  $0,5 \pm 0,03$ , também obtivemos  $A(2) \approx 0,4$  (tanto quanto sabemos, não existem resultados na literatura, tal que possamos comparar; o mesmo acontece para  $\Delta_c(q)$  e  $A(q)$  para  $q \neq 2$ ). Este tratamento leva, no limite  $q \rightarrow 0$ ,  $\Delta_c(q) \approx 2/\sqrt{q}$ .

No ponto multicrítico superfície-volume, esta teoria fornece também o expoente de "crossover"  $\phi(q)$ , e o expoente crítico  $1/y_{t_1}^{SB}(q)$  (estas quantidades não foram extrapoladas). Para o



caso de Ising, obtivemos  $1/y_{t_1}^{SB}(2) = 1,623$  e  $\phi(2) = 0,641$ ; este último pode ser comparado com o resultado da expansão  $\epsilon^{139} 0,68$ , e de Monte Carlo<sup>153</sup>  $0,56 \pm 0,04$ .

Em contradição com a teoria de Lipowsky<sup>39,40</sup>, nosso tratamento não apresenta indicação de novas fases para valores de  $q$  bastante altos. Isto pode ser uma evidência real ou um artefato matemático da aproximação: não temos argumentos suficientes para discriminar entre estas duas possibilidades.

Todos os resultados acima se referem à rede cúbica simples e mantêm-se somente para transições de fase de 2ª ordem. Conseqüentemente,  $q$  tem que ser menor do que um valor crítico  $q_c$  ( $q_c=4$  para sistemas estritamente bidimensionais (ver Refs. 91 e 156;  $q_c \approx 3$  para sistemas tridimensionais (ver Refs. 145 e 157)). Entretanto o calor latente é pequeno para  $q \geq q_c$ , e conseqüentemente a descrição total pode ser mantida até  $q = 4$ .

Um ponto de vista alternativo (ver Ref. 158) é a rede hierárquica associada dos grafos (de dois terminais; Ref. 136) das FIGURAS 4.2.1 e 4.2.2 (veja também Ref. 44). Para esta rede, todos os resultados anteriores (não extrapolados) neste trabalho são exatos e se mantêm para  $q \geq 0$ .

## CAPÍTULO 5 - INTERFACE E SUPERFÍCIE LIVRE NO MODELO FERROMAGNÉTICO DE POTTTS: DIAGRAMA DE FASES E EXPOENTES CRÍTICOS

### 5.1 - Introdução

Fenômenos críticos associados com o magnetismo de interfaces (defeitos) têm sido recentemente objeto de estudo através da transformação de Grupo de Renormalização (GR). Em particular podemos destacar, entre outros, os trabalhos de Burkhardt e Eisenriegler<sup>41</sup> (1981), Lam e Zhang<sup>43</sup> (1983), da Silva e Col<sup>46</sup> (1985) e dos Santos e Col<sup>160</sup> (1985). Neste trabalho utilizaremos um Grupo de Renormalização semelhante aos das Refs. 45 e 46 para tratar do problema de interface no modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados, tendo como caso particular o problema de superfície livre.

Supomos ser o sistema constituído por dois volumes cúbicos simples ferromagnéticos de Potts separados por uma interface  $(1,0,0)$  também ferromagnética de Potts com  $q$  estados. Todos os pares de primeiros vizinhos em cada um dos volumes semi-infinitos interagem respectivamente com constantes de acoplamentos  $J_1$  e  $J_2$ , exceto pelas interações perpendiculares  $J_{\perp 1}$  e  $J_{\perp 2}$  que conectam os volumes à interface (constante de acoplamento  $J_5$ ).

O presente Capítulo é organizado como segue: na seção 5.2 introduzimos o modelo e o formalismo do GR. A evolução do diagrama de fase com o número de estados  $q$  e os expoentes críticos para ambos os problemas de superfície livre e de interfa

ce são apresentados na seção 5.3. As conclusões são resumidas na seção 5.4.

## 5.2 - Modelo e Formalismo do GR

O Hamiltoniano do modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados e interações entre primeiros vizinhos é dado por:

$$\mathcal{H} = -q \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad (\sigma_i = 1, 2, \dots, q, \forall i) \quad (5.1)$$

onde  $\delta_{\sigma_i \sigma_j}$  é a delta de Kronecker e  $J_{ij}$  é igual a  $J_s$  na interface,  $J_{11}$  ( $J_{12}$ ) para os acoplamentos entre a interface e a primeira camada do volume semi-infinito e  $J_1$  ( $J_2$ ) no restante do volume. (ver FIGURA 5.2.1)

Desenvolvemos um cálculo de GR baseado no grafo introduzido por da Silva e Col<sup>136</sup> (1984) que já demonstrou ser apropriado a rede cúbica simples semi-infinita<sup>45</sup>. Vamos lembrar a definição da "transmissividade térmica"<sup>54</sup>, ou seja:

$$t_r = \frac{1 - e^{-qJ_r/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ_r/k_B T}} \quad (5.2)$$

onde  $r$  pode assumir todos os cinco valores permitidos  $T$  é a temperatura e  $k_B$  a constante de Boltzmann.

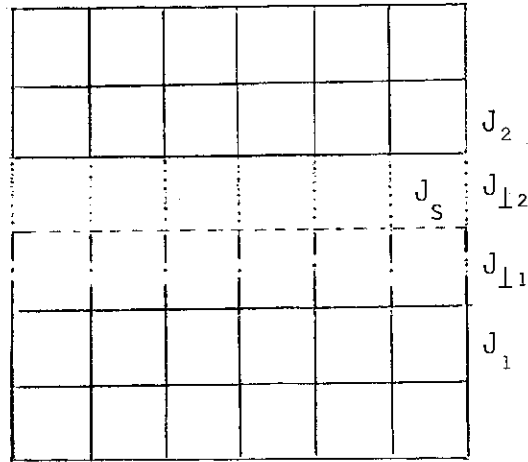


FIGURA 5.2.1 - Corte do modelo discutido no texto. Ele consiste de dois volumes semi-infinitos com constantes de acoplamento  $J_1$  e  $J_2$  separados por uma interface  $J_s$ ; ligando a interface aos volumes, temos respectivamente as constantes de acoplamento  $J_{\perp 1}$  e  $J_{\perp 2}$ .

A seguinte definição também será útil:

$$\Delta \equiv \frac{J_s}{J_1} - 1 = \frac{\ln \left[ \frac{1+(q-1)t_s}{1-t_s} \right]}{\ln \left[ \frac{1+(q-1)t_1}{1-t_1} \right]} - 1 \quad (5.3)$$

As relações de recorrência para as FIGURAS 5.2.2a-c podem ser obtidas através do método do corte colapso<sup>54</sup> (BCM). A recorrência para ambos os volumes é obtida associando  $t_1(t_2)$  a cada ligação da célula da FIGURA 5.2.2a sendo dada

$$t'_1 = f_1(t_1) \quad e \quad t'_2 = f_2(t_2) \quad (5.4)$$

estas equações possuem a mesma forma funcional ( $f_1=f_2$ ) e são muito extensas para serem reproduzidas aqui. Para a transmissi-

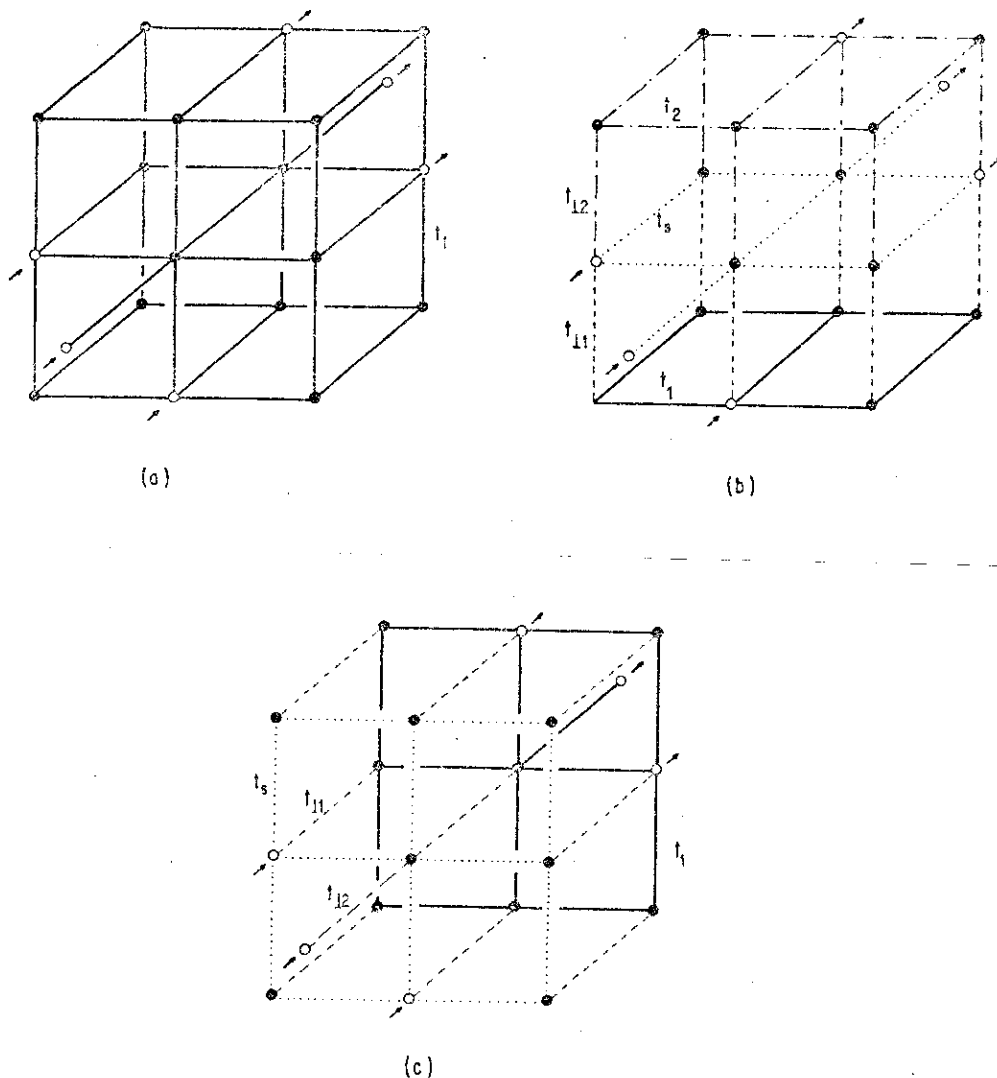


FIGURA 5.2.2 - Células do GR:

- a) para a transmissividade do volume ( $t_1$  ou  $t_2$ )
- b) para a transmissividade da superfície ( $t_s$ )
- c) para a transmissividade perpendicular  $t_{\perp 1}$  ou  $t_{\perp 2}$  pela transformação  $1 \rightleftharpoons 2$ ;  $\cdots\cdots\cdots$ ,  $\text{-----}$ ,  $\text{-----}$  e  $\text{-----}$  denotam respectivamente  $t_s$ ,  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_{\perp 1}$  e  $t_{\perp 2}$ , enquanto o  $\circ$  e  $\bullet$  denotam respectivamente os terminais e os nós internos.

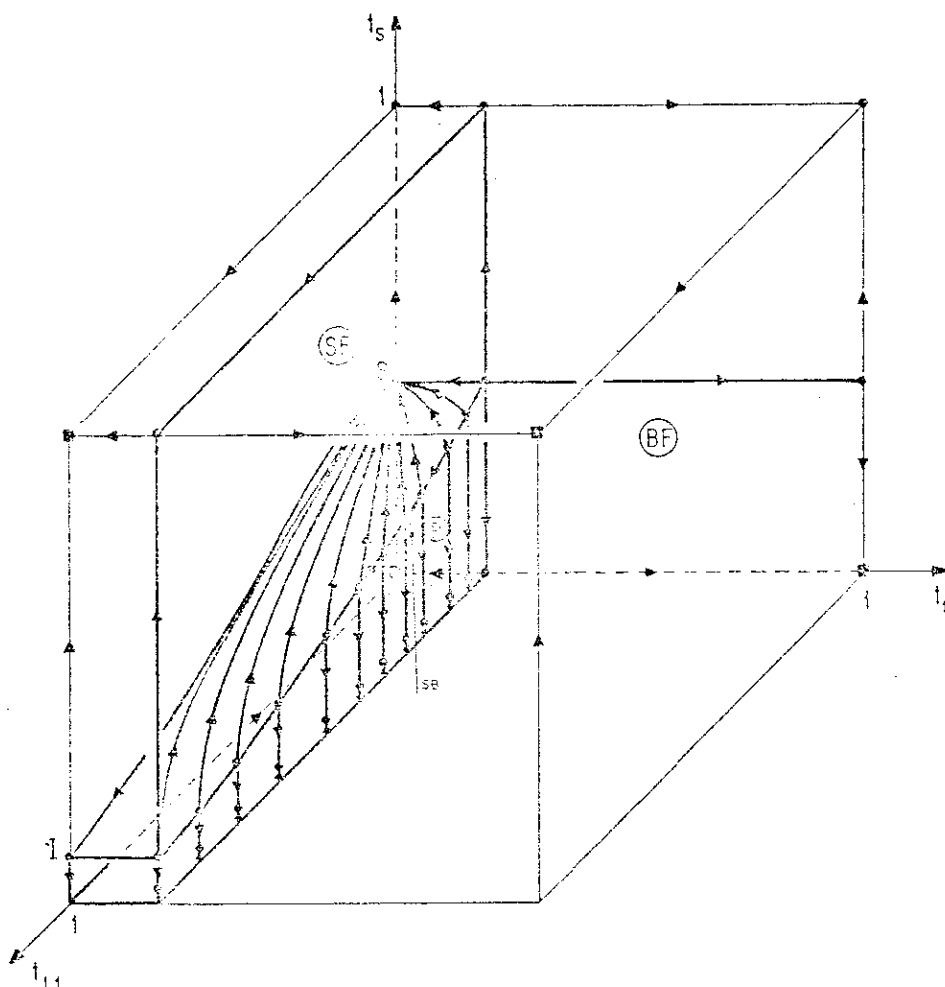


FIGURA 5.3.2 - Diagrama de fluxo no espaço  $t_1 - t_{11} - t_s$ . ■, ● e ○ denotam, respectivamente: os pontos fixos triviais (totalmente estáveis); os pontos multicríticos e críticos e o ponto multicrítico de ordem mais alta SB. As três fases SB, BF e P são indicadas.

Verificamos no diagrama de fluxo as seguintes características:

- (i) três fases distintas, caracterizadas pelos pontos fixos triviais  $(t_1, t_{11}, t_s) = (0, 0, 0)$  (fase paramagnética (P)),  $(1, 1, 1)$  (fase ferromagnética de volume, (BF)) e  $(0, 1, 1)$  (fase ferromagnética de superfície; (SF); a superfície está ordenada, enquanto o volume está desordenado).

- (ii) a linha de pontos multicríticos que separa as três fases, nominalmente:  $(t_1, t_{11}, t_s) = (t_1^B(q), t_{11}, t_s^{SB}(q))$ , possuindo o ponto multicrítico de ordem mais alta para  $J_{11}/J_1=2$ , para todos os valores de  $q$ .
- (iii) seis pontos fixos semi-estáveis, ou seja  $(t_1, t_{11}, t_s) = (0, 0, t_1^S(q))$  (caracterizando a transição de fase ferromagnética de superfície - paramagnética);  $(0, 1, t_s^{SB}(q))$ . ((I), o qual é um defeito do "grafo" utilizado para renormalização; sendo que, o que deveria ser obtido era uma linha de pontos fixos para  $(0, t_{11}, t_s^S(q))$ ;  $(t_1^B(q), 0, 1)$  e  $(t_1^B(q), 1, 1)$  (caracterizando a transição de fase ferromagnética do volume - paramagnética);  $(1, t_s^S(q), 0)$ ,  $(1, 0, 0)$  e  $(1, 1, 0)$  (caracterizando a transição de fase da superfície livre).

Na FIGURA 5.3.4 representamos no espaço  $t_1 - t_s$  a variação da fronteira crítica com a razão  $J_{11}/J_1$ ; podemos observar a mudança de comportamento quando esta razão tende a infinito. Enquanto que na FIGURA 5.3.5 mostramos a localização do ponto multicrítico  $((J_s/J_1)_c \equiv \Delta_c + 1)$  como função de  $J_{11}/J_1$ .

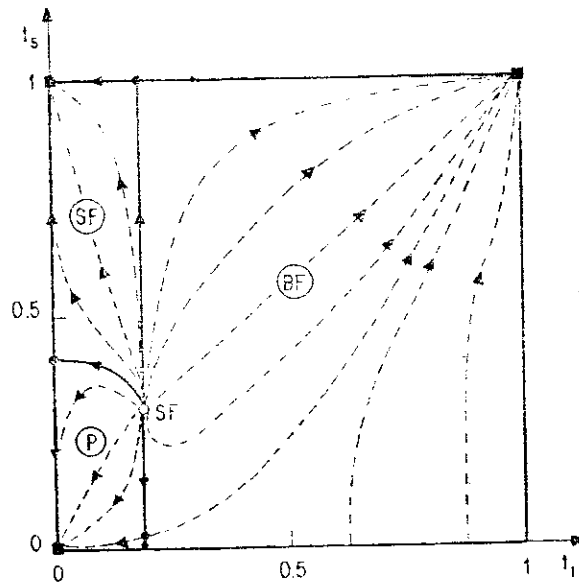


FIGURA 5.3.3 - Diagrama de fluxo no plano  $t_1-t_5$  para  $J_{11}/J_1=1$ .  
As setas são indicativas

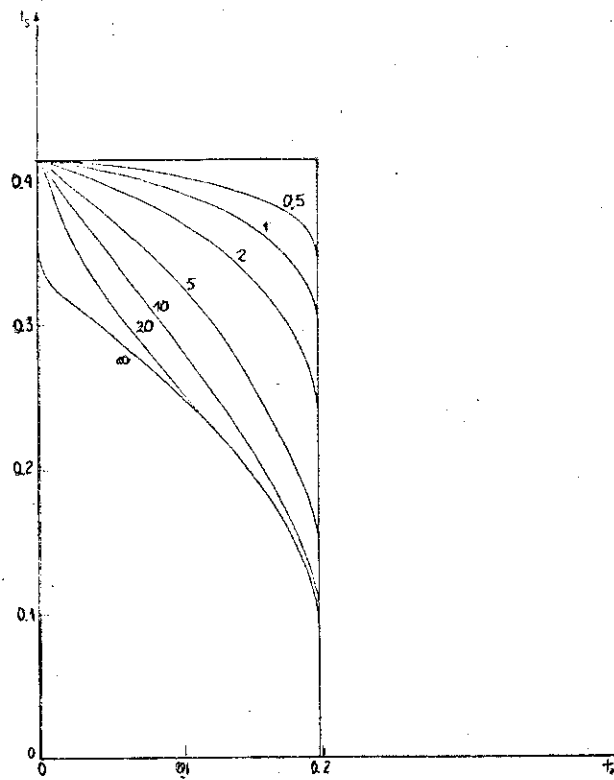


FIGURA 5.3.4 - Fronteira crítica no plano  $t_1-t_5$  para várias razões  $J_{11}/J_1$  (números sobre as curvas).



Na FIGURA 5.3.6 mostramos a variação da temperatura crítica do volume em função de  $J_S/J_1$  para várias razões  $J_{\perp 1}/J_1$ .

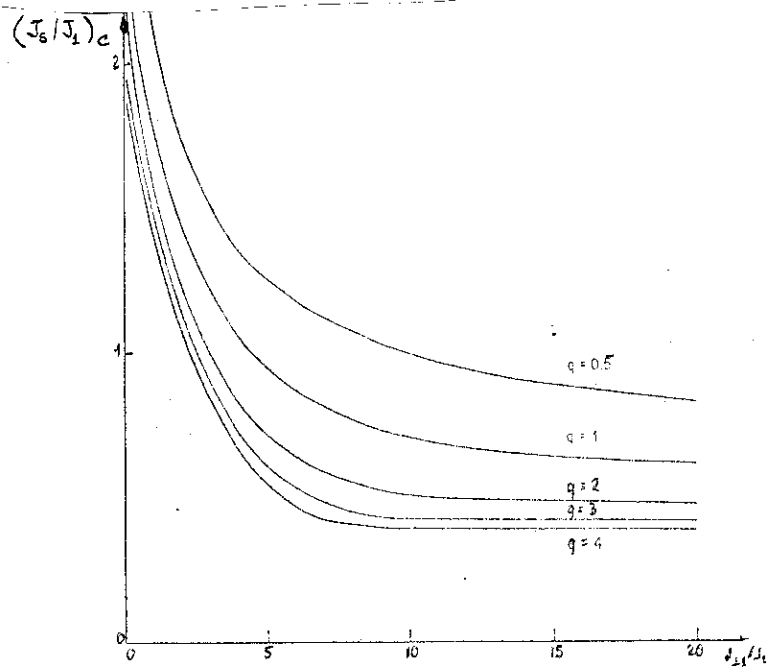


FIGURA 5.3.5 - Dependência de  $(J_S/J_1)_c$  com a razão  $J_{\perp 1}/J_1$  para vários  $q$ .

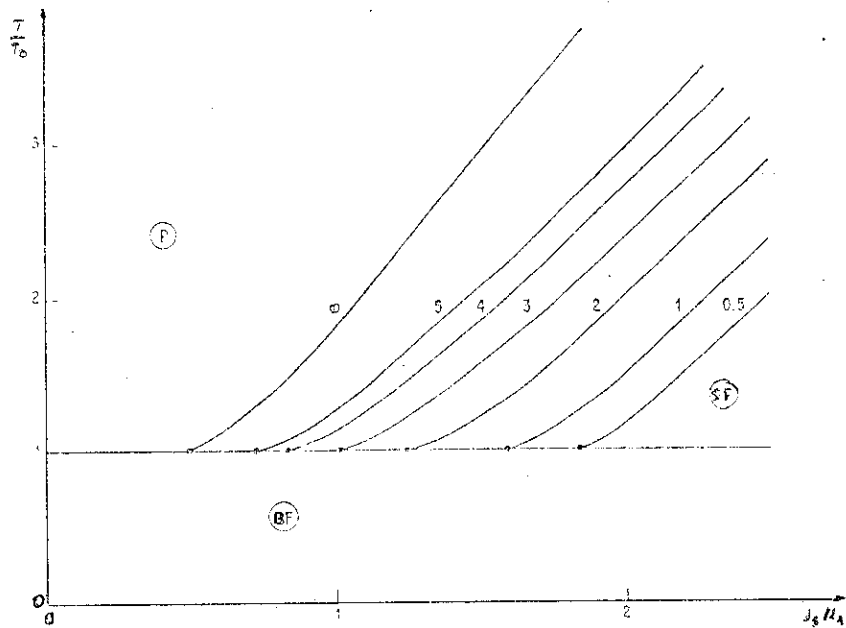


FIGURA 5.3.6 - Variação de  $\Delta+1$  com a temperatura reduzida  $T/T_0$  para varias razões  $J_{\perp 1}/J_1$  (números sobre as curvas) e  $q=2$ . ● representa o valor de  $\Delta_c+1$ .

$$\lambda_1 = a(q) \quad (5.10a)$$

$$\lambda_2 = \frac{c(q)+g(q)+\sqrt{[c(q)-g(q)]^2-4f(q)d(q)}}{2} \quad (5.10b)$$

$$\lambda_3 = \frac{c(q)+g(q)-\sqrt{[c(q)-g(q)]^2-4f(q)d(q)}}{2} \quad (5.10c)$$

Podemos rapidamente relembrar os vários tipos de pontos fixos que aparecem em nosso problema. Para o ponto  $(t_1, t_s, t_{\perp 1}) = (t_p(q), 1, 1)$  temos:  $b=c=d=e=f=g=0$  e o expoente crítico para o sistema tridimensional é dado por:

$$v^{3D}(q) = \ln 3 / \ln a(q) \quad (5.11)$$

onde 3 é o fator linear de escala do GR. Para o ponto fixo em  $(t_1, t_s, t_{\perp 1}) = (0, t_s^S, 0)$  temos:  $a=e=f=g=0$  e o expoente crítico para o sistema bidimensional é dado por:

$$v^{2D}(q) = \ln 3 / \ln c(q) \quad (5.12)$$

Para o ponto fixo  $(t_1^B(q), t_s^{SB}(q), t_{\perp 1}^*(q))$ , onde  $t_{\perp 1}^*(q)$  é tal que  $J_{\perp 1}^B / J_1 = 2$ , os expoentes crítico e de "crossover" correspondentes são dados por:

$$1/y_{t_1}^{SB} = \ln 3 / \ln \lambda_2 \quad (5.13)$$

$$\phi^{SB}(q) = \ln \lambda_2 / \ln \lambda_1 \quad (5.14)$$

onde  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são dados pelas equações (5.10a) e (5.10b).

Todos estes resultados se mantêm estritamente para transições de 2ª ordem, isto é, para  $0 \leq q \leq 4$  em duas dimensões e  $0 \leq q \leq q_c$  (com  $q_c \approx 3$ ) a três dimensões. Entretanto, sempre que a transição é de primeira ordem, o calor latente é muito pequeno no intervalo  $q \in [0,4]$ ; e é devido a isto que apresentamos nossos resultados até  $q=4$ . Na TABELA 5.I mostramos os nossos resultados comparados a vários outros resultados disponíveis.

TABELA 5.I - Resultado do GR (valores na parte superior) comparados com resultados de outros GR, resultados exatos, de séries e de Monte Carlo. a) Ref. 82, b) 138, c) 154, d) 145, e) 46, f) calculado a partir dos valores das Refs. 154 e 135 g) calculado a partir dos valores das Refs. 154 e 153, h) 126, i) 144, j) 155, k) 139, l) 153, m) 45, n) 135

\* resultado exato

q	1/2	1	2	3	4
$t_B$	0,2510 0,2668 <sup>a</sup>	0,2260 0,247 <sup>b</sup>	0,1949 0,21811 <sup>c</sup>	0,1750 0,1966 <sup>c</sup>	0,1607 -
$t_s$	0,58578 <sup>*</sup>	1/2 <sup>*</sup>	0,41421 <sup>*</sup>	0,36602 <sup>*</sup>	1/3 <sup>*</sup>
$t_s^{SB}$ ( $J_{\perp 1}/J_1=1$ )	0,43615 0,5058 <sup>e</sup> -	0,36885 0,4166 <sup>e</sup> -	0,30319 0,3345 <sup>e</sup> 0,3405 <sup>f</sup> 0,32089	0,26792 0,2911 <sup>e</sup> - -	0,24319 0,2626 <sup>e</sup> - -
$v^{2D}$	2,0481 1,7823 <sup>h</sup>	1,6510 3/4 <sup>h</sup>	1,3692 1 <sup>h</sup>	1,2440 5/6 <sup>h</sup>	1,1692 2/3 <sup>h</sup>
$v^{3D}$	1,3622 -	1,1988 0,88 <sup>i</sup>	1,0410 0,630 <sup>j</sup>	0,9599 -	0,9092 -
$1/v_c^{SB}$ ( $J_{\perp 1}=2J_1$ )	2,3465 2,5320 <sup>e</sup>	1,8443 2,0071	1,4977 1,6236 <sup>e</sup>	1,3406 1,4518 <sup>e</sup>	1,2489 1,3497 <sup>e</sup>
$\phi^{SB}$	0,580 0,5380 <sup>e</sup> - -	0,650 0,5973 <sup>e</sup> - -	0,695 0,6412 <sup>e</sup> 0,68 <sup>k</sup> 0,56±0,4 <sup>e</sup>	0,716 0,6612 <sup>e</sup> - -	0,728 0,6736 <sup>e</sup> - -
$\Delta_c$ ( $J_{\perp 1}=J_1$ ) $J_2=J_{\perp 2}=0$	1,1105 1,6678 <sup>e</sup> 1,473 <sup>m</sup> - -	0,7961 1,1032 <sup>e</sup> 0,899 <sup>m</sup> - -	0,5850 0,7620 <sup>e</sup> 0,569 <sup>n</sup> 0,6±0,1 <sup>n</sup> 0,56±0,03 <sup>j</sup>	0,5045 0,6298 <sup>e</sup> 0,458 <sup>m</sup> - -	0,4535 0,5574 <sup>e</sup> - - -

### 5.3.2 - Interface

O modelo particular que vamos estudar agora é obtido do caso geral fazendo  $J_{\perp 1} = J_{\perp 2}$  e  $J_1 = J_2$  e corresponde a dois volumes semi-infinitos com iguais constantes de acoplamento separados por uma interface com constante de acoplamento  $J_S$ , ligadas aos volumes através de uma outra constante de acoplamento  $J_{\perp 1}$ . Nossas equações de recorrência são:

$$t_1' = f(t_1) \quad (5.14a)$$

$$t_S' = f(t_1, t_{\perp 1}, t_S) \quad (5.14b)$$

$$t_{\perp 1}' = f(t_1, t_{\perp 1}, t_S) \quad (5.14c)$$

Novamente, através do uso destas equações, obtemos o diagrama de fases e as outras informações com relação à criticalidade do sistema. Na FIGURA 5.3.8 mostramos o diagrama de fases no espaço  $t_1 - t_S - t_{\perp 1}$ . Este diagrama apresenta três fases, nominalmente ferromagnética de volume (BF), ferromagnética de superfície (SF, a interface está ordenada embora o volume não esteja) e paramagnética (P). O comportamento crítico do sistema é muito semelhante ao da superfície livre (caso particular anterior) e tudo o que foi dito na seção 5.3.1 com respeito aos pontos críticos é válido aqui. Gostaríamos, entretanto, de ressaltar que a escolha dos grafos, prejudica muito mais os nossos resultados para o caso da interface, tanto que os comportamentos de  $J_S/J_1$  vs.  $J_{\perp 1}/J_1$ , de  $(J_S/J_1)_C$  vs.  $q$  e de  $k_B T/J_B$  vs.  $J_S/J_B$  mostrados respectivamente nas FIGURAS 5.3.9, 5.3.10 e 5.3.11 não são os que deveríamos esperar, veja FIGURAS 5.3.5, 5.3.6 e 5.3.7

como também a Ref. 46. Apesar disto, os nossos resultados para  $q = 2$  são melhores do que os apresentados pela teoria de campo médio<sup>135,159</sup> uma vez que os mesmos encontram  $t_S^S = 0$  para  $J_{\perp 1} = 0$  e  $J_{\perp 1} \rightarrow \infty$  quando nós encontramos  $t_S^S = 0,24$  embora, muito menor do que o resultado exato  $t_S^S = 0.41421$ .

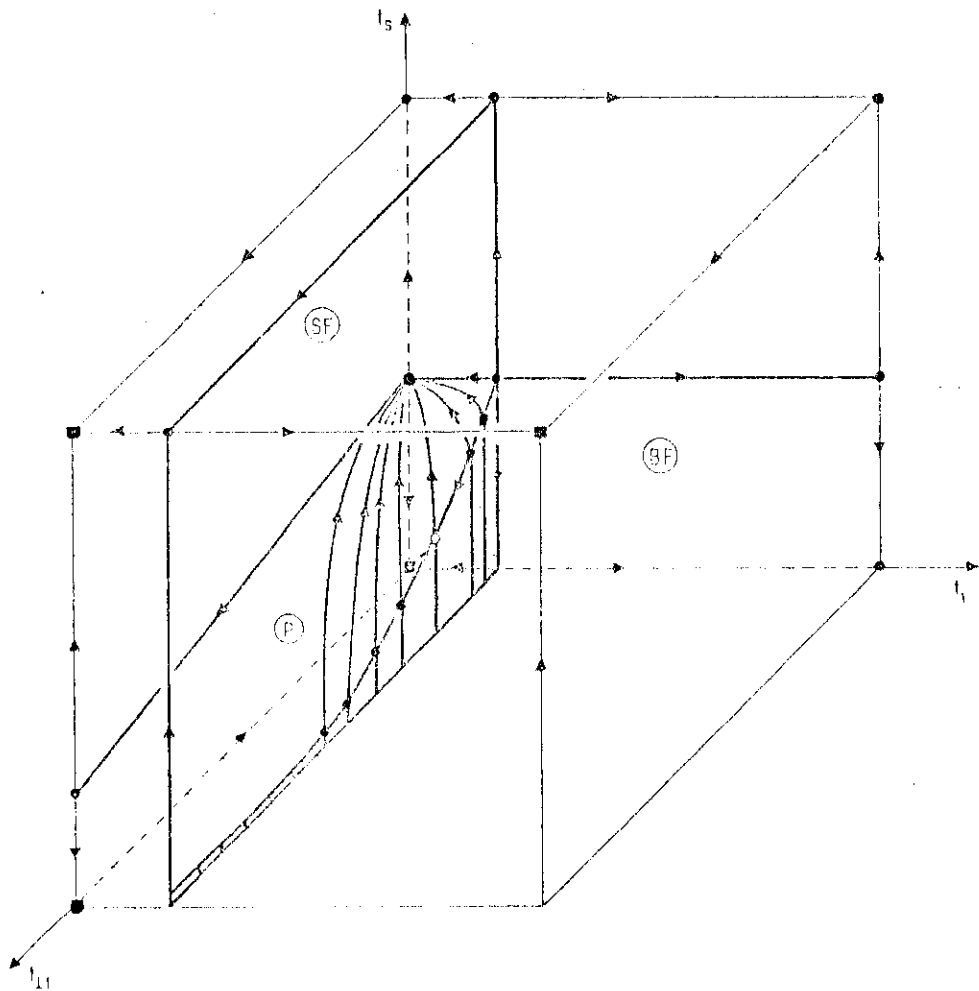


FIGURA 5.3.8 - Diagrama de fase do GR, para  $q = 2$ , nas variáveis  $t_1 - t_S - t_{\perp 1}$ . SF, BF e P denotam, respectivamente, as fases ferromagnética de superfície, ferromagnética de volume e paramagnética. ■, ● e ○ denotam respectivamente os pontos fixos triviais, os pontos críticos e multicríticos e o ponto multicrítico de ordem mais alta.

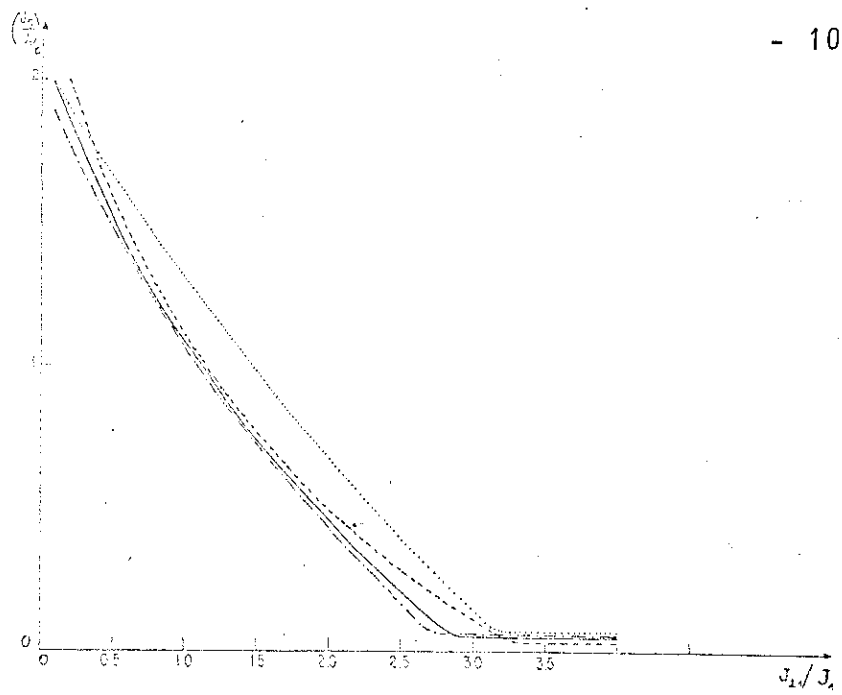


FIGURA 5.3.9 - Variação de  $(J_S/J_1)_C$  com a razão  $J_{11}/J_1$  para vários valores de  $q$ ; — , - · - · - , - - - e ····· representam respectivamente  $q = 2, 3, 1$  e  $4$ .

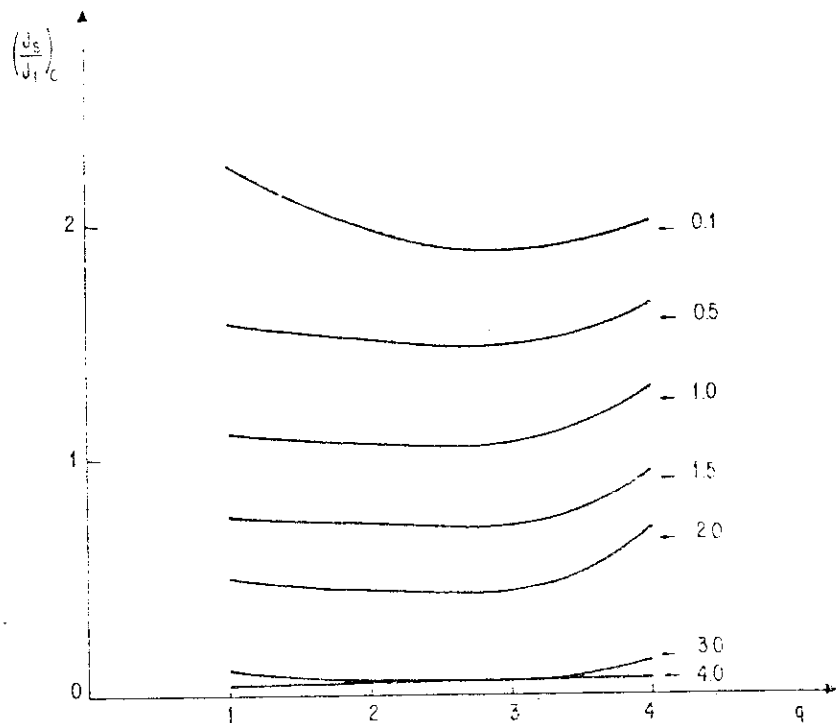


FIGURA 5.3.10 - Variação de  $(J_S/J_1)_C$  com  $q$  para várias razões  $J_{11}/J_1$  (números sobre as curvas).

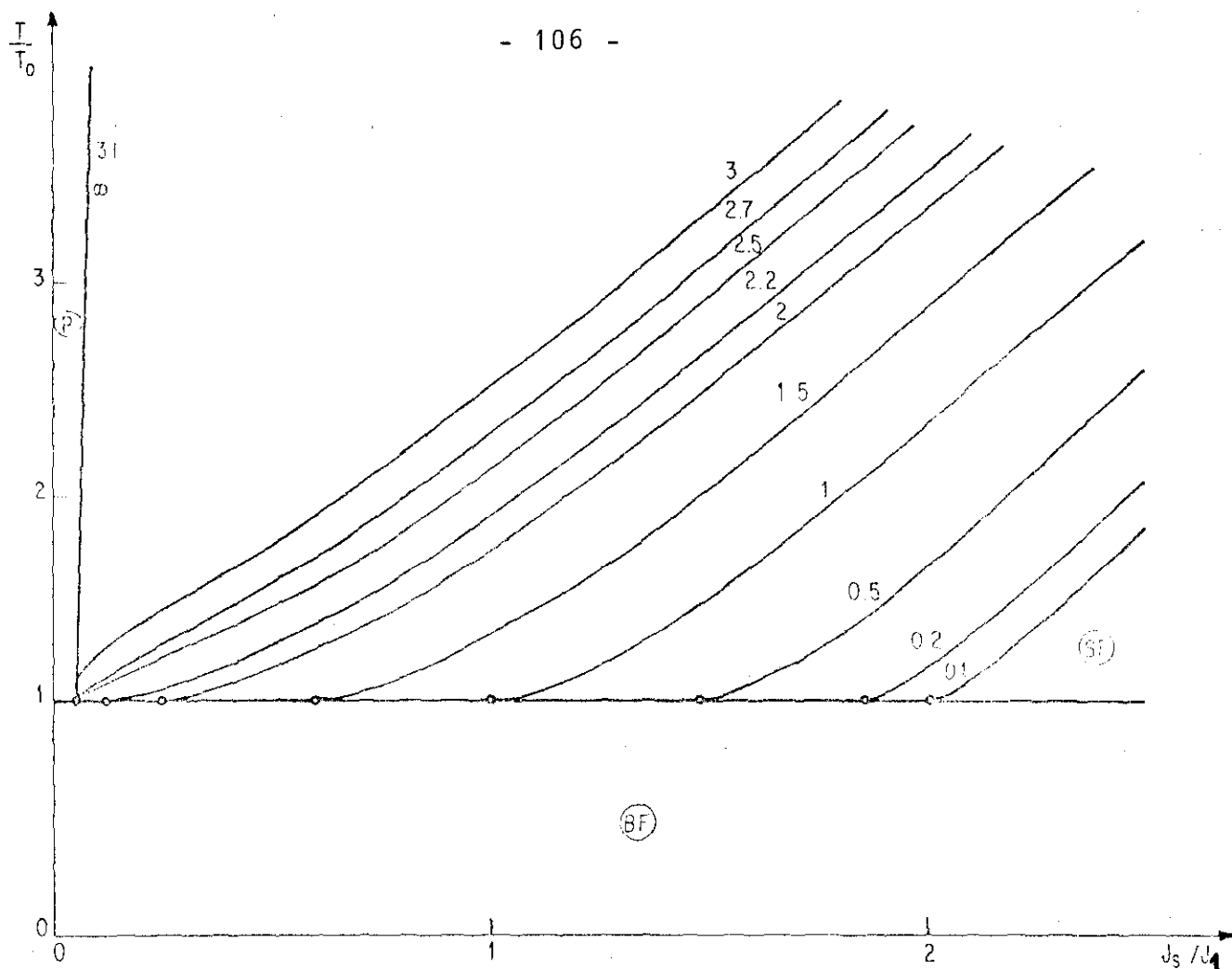


FIGURA 5.3.11 - Variação da temperatura com  $J_S/J_1$  para várias razões  $J_{\perp 1}/J_1$ .

#### 5.4 - Conclusões

Utilizamos a aproximação de Grupo de Renormalização no Espaço Real para tratar a criticalidade do modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados em uma rede não homogênea constituída por dois volumes cúbicos simples semi-infinitos (caracterizado pelas constantes de acoplamento  $J_1$  e  $J_2$ ) separados por uma interface quadrada  $(1,0,0)$  (caracterizada pela constante de acoplamento  $J_S$ ) através de duas constantes de acoplamento  $J_{\perp 1}$  e  $J_{\perp 2}$ . A aproximação estende os grafos utilizados nas Refs. 45 e 46 que usam os grafos introduzidos na Ref. 136 para o sistema

homogeneo ( $J_{1\perp} = J_2 = J_S = J_{\perp 1} = J_{\perp 2}$ ). No entanto a escolha não foi muito adequada, pois contraria a equação 5.8b ( $K_S(K_{\perp 1}, 0) = K_S(0, 0)$ ), onde deveríamos obter o resultado para a rede quadrada independente de  $J_{\perp 1}$  e  $J_{\perp 2}$ , apesar dos resultados obtidos serem melhores do que os de campo médio<sup>135,189</sup>, que obtêm para este caso  $J_S = 0$  quando  $J_{\perp 1}$  tende a infinito. Entretanto, estamos trabalhando no sentido de resolvermos este defeito em nosso GR. O diagrama de fases apresenta, para os dois casos particulares estudados, ( $J_2 = J_{\perp 2} = 0$ , superfície livre e  $J_1 = J_2$ ,  $J_{\perp 1} = J_{\perp 2}$ , interface) três fases fisicamente diferentes, nominalmente a paramagnética, a ferromagnética de volume e a ferromagnética de superfície. Estas três fases se juntam em uma linha multicrítica, cuja localização é caracterizada pelo valor  $\Delta \equiv J_S/J_1 - 1$  acima do qual pode existir a fase ferromagnética de superfície, embora o volume seja paramagnético. Nós apresentamos a evolução de  $\Delta$  com  $q$  e com  $J_{\perp 1}/J_1$ . Para o modelo de Ising ( $q=2$ ) nós obtemos, para o caso da superfície livre  $\Delta = 0,5850$  valor este que está entre os resultados de série<sup>135</sup>  $\Delta = 0,6 \pm 0,1$  e de Monte Carlos<sup>155</sup>; para o caso de igual volume ( $J_1 = J_2$ ,  $J_{\perp 1} = J_{\perp 2}$ ) obtemos  $\Delta \approx 0.022$  a ser comparado com o valor de campo médio,  $\Delta = 0$ .



## CAPÍTULO 6 - MODELO FERROMAGNÉTICO DE ISING SEMI-INFINITO COM UMA SUPERFÍCIE HEISENBERG ANISOTRÔPICA

### 6.1 - Introdução

Continuando o estudo dos efeitos de superfície, estamos agora interessados em uma situação particular bem realista em que as interações magnéticas da superfície diferem das do volume. Uma implementação experimental pode ser feita através de adsorção, no alto da camada do volume, de uma camada de átomos diferentes. Entre as várias aproximações teóricas que podem ser usadas para discutir este tipo de sistema, o Grupo de Renormalização no Espaço Real (GR) é bem conveniente, e como vimos nos Capítulos anteriores, fornece uma boa descrição de sua criticidade<sup>30,31,34,44,45 e 162</sup>.

Nesta trabalho discutimos o modelo ferromagnético de Ising com spin  $\frac{1}{2}$  em uma rede cúbica simples semi-infinita com uma superfície livre (1,0,0) (rede quadrada) cujas interações são do tipo Heisenberg anisotrópico. Nossa aproximação é a de GR do tipo Migdal-Kadanoff e segue ao longo das linhas das Refs. 44, 73 e 106. Na seção 6.2 introduzimos o modelo e o formalismo na seção 6.3 apresentamos os resultados e finalmente, concluimos na seção 6.4. Os detalhes operacionais estão no Apêndice C.

### 6.2 - Modelo e Formalismo

Consideramos o seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ J_{ij} (1-\eta_{ij}) (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z \right] \quad (6.1)$$

onde  $\langle i,j \rangle$  representa todas as interações entre pares de sítios primeiros vizinhos na rede cúbica simples semi-infinita com uma superfície  $(1,0,0)$  livre (veja FIGURA 6.2.1); os  $\sigma$  são as matrizes de Pauli;  $(J_{ij}, \eta_{ij})$  é igual a  $(J_B, 1)$  no volume ( $J_B \geq 0$ ), e

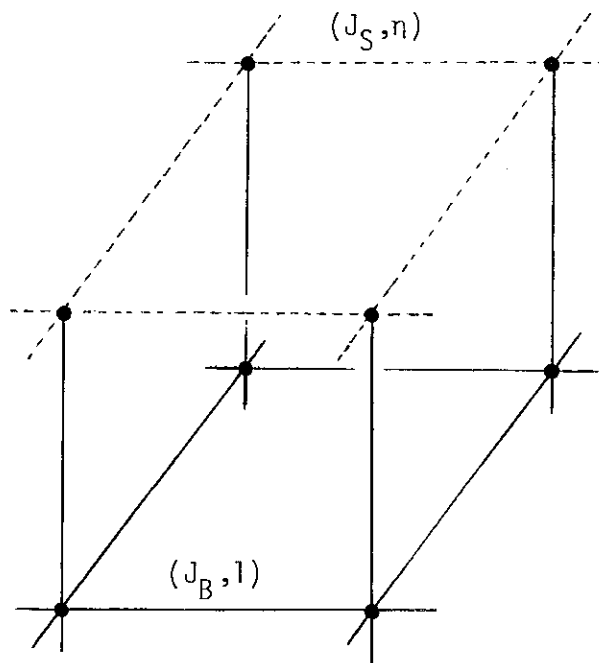


FIGURA 6.2.1 - Rede cúbica simples semi-infinita. As linhas traçadas (cheias) representam as ligações da superfície (do volume) associadas com  $(J_S, \eta)$  (com  $(J_B, 1)$ ).

igual a  $(J_S, \eta)$  na superfície livre ( $J_S \geq 0, 0 < \eta < 1$ ). Os limites  $\eta=1$  e  $\eta=0$  correspondem respectivamente aos modelos de Ising e Heisenberg isotrópico. Introduzimos aqui as seguintes variáveis:

$$K_r \equiv J_r / k_B T \quad (r=B, S) \quad (6.2)$$

$$t_r \equiv \tanh K_r \quad (r=B,S) \quad (6.3)$$

$$\Delta \equiv J_S/J_B - 1 = K_S/K_B - 1 \quad (6.4)$$

onde  $T$  é a temperatura e  $k_B$  é a constante de Boltzman.

O diagrama de fase para o caso puro de Ising ( $n=1$ ) apresenta três fases (ver Cap. 4 e 5 e Refs. 32,39,44-46,135,136 e 153), nominalmente o volume ferromagnético (BF, ambos o volume e a superfície estão magnetizados), superfície ferromagnética (SF; magnetização finita na superfície e nula no volume) e a paramagnética (P; não existe magnetização espontânea). Pretendemos estudar a evolução do diagrama de fase quando são introduzidos na superfície os aspectos quânticos ( $n \neq 1$ ). Para fazer esta análise nós acompanhamos o desenvolvimento da Ref. 44 e construímos um GR com grafos tipo Migdal-Kadanoff<sup>55,68</sup> (veja FIGURA 6.2.2) tanto para as ligações da superfície como para as do volume. A função de partição de cada grafo é preservada sob renormalização. Os grafos da FIGURA 6.2.2 são reduzíveis a operações seqüenciais série e paralelo. Este fato permite um cálculo rápido e exato para o grafo da FIGURA 6.2.2a, onde todas as ligações são interações de Ising (isto é, clássicas). Levamos este fato em consideração para facilitar o cálculo do grafo da FIGURA 6.2.2b. Neste caso, entretanto, os efeitos quânticos estão presentes e portanto o resultado não é exato; entretanto, ele é uma excelente aproximação<sup>73,106</sup>.

Para o volume nós obtemos a seguinte relação de recorrência: (ver Apêndice C para os detalhes de cálculo).

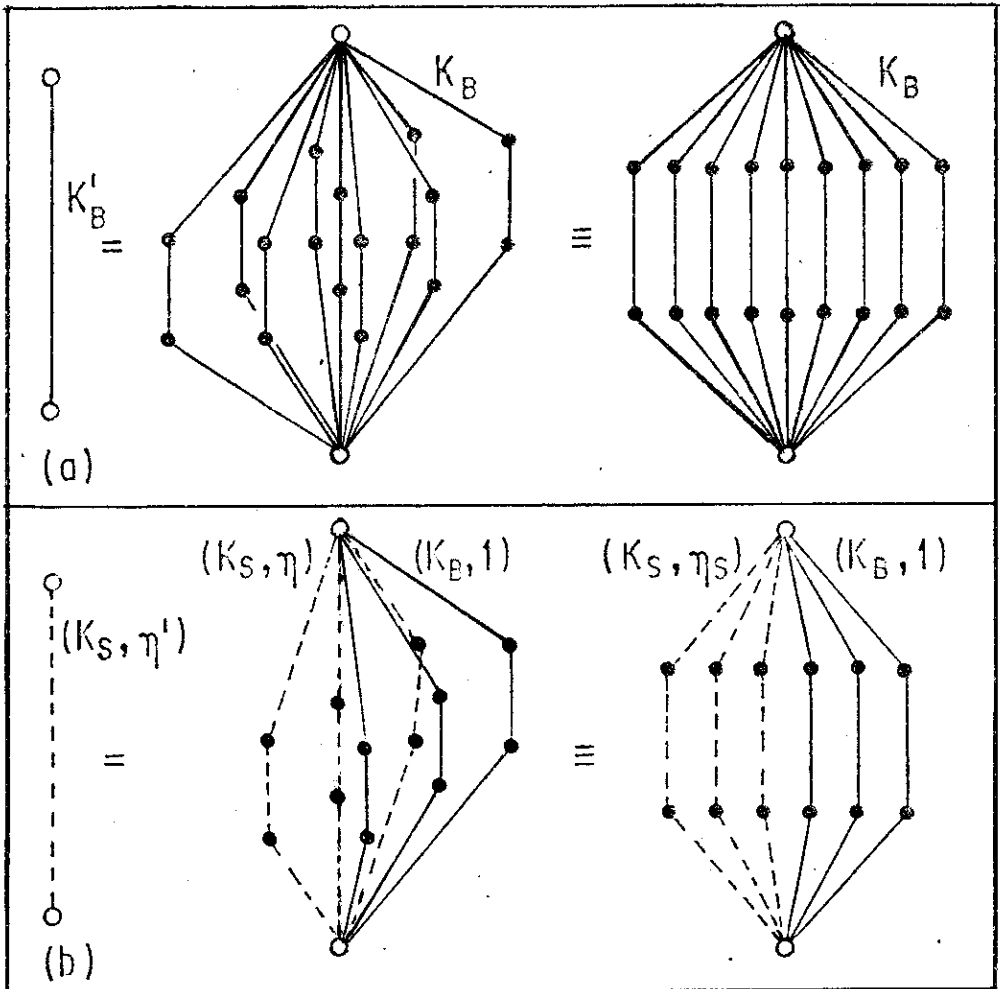


FIGURA 6.2.2 - Célula de transformação do GR; (a) para o volume ( $K_B \equiv J_B/k_B T$ ); (b) para a superfície livre ( $K_S \equiv J_S/k_B T$ ).  $\circ$  e  $\bullet$  denotam respectivamente os terminais e os nós internos (os quais são decimados).

$$K'_B = \frac{9}{2} \ln \frac{3 e^{-K_B} + e^{3K_B}}{3 e^{K_B} + e^{-3K_B}} \quad (6.5)$$

a qual é equivalente à eq.(7) da Ref. 44. Esta equação admite dois pontos fixos (estáveis) triviais (para  $K_B=0$  e  $K_B=\infty$ ), bem como um ponto crítico (instável) não trivial (para um valor finito de  $K_B$ ).

O cálculo da recorrência para a superfície é mais complexo. Primeiro resolvemos um arranjo de três ligações em série (veja o Apêndice C) estando cada uma delas associada a  $(K_S, \eta)$ , e obtemos os parâmetros equivalentes denominados  $K_3^S(K_B, \eta)$  e  $\eta_3^S(K_S, \eta)$ . Se as três ligações são as do volume (isto é interações de Ising), os parâmetros equivalentes são  $K_3^S(K_B, 1)$  e  $\eta_3^S(K_B, 1) = 1$ . Aproximamos agora o grafo da FIGURA 6.2.2b por seis ramos em paralelo (sendo três do tipo  $(K_3^S(K_B, 1), 1)$  e obtemos<sup>73,106</sup> as seguintes relações de recorrência:

$$K'_S = 3 [K_3^S(K_S, \eta) + K_3^S(K_B, 1)] \quad (6.6)$$

$$\eta' = \frac{3 [K_3^S(K_S, \eta) \eta_3^S(K_S, \eta) + K_3^S(K_B, 1)]}{K'_S} \quad (6.7)$$

As eqs. (6.5)-(6.7) completam formalmente a construção da transformação GR: o fluxo determinado por elas (por exemplo, no espaço  $(K_B, K_S, \eta)$ ) nos fornece o diagrama de fase e exhibe as classes de universalidade relevantes.

### 6.3 - Resultados

Este GR fornece o diagrama de fluxo indicado nas FIGURAS 6.3.1a e 6.3.1b (no espaço  $(t_B, t_S, \eta)$ , onde podemos observar dois sub-espacos invariantes, nominalmente  $\eta=1$  (problema de Ising puro) e  $\eta=t_B=0$  (superfície livre de Heisenberg isotrópico totalmente desconectada). Observemos também os seguintes fatos:

- (i) três pontos fixos (totalmente estáveis) triviais, nominalmente para  $(t_B, t_S, \eta) = (0, 0, 1)$ ,  $(1, 1, 1)$  e  $(0, 1, 1)$ , caracterizando as três fases do sistema, respectivamente P, BF e SF;
- (ii) existem cinco pontos fixos principais semi-estáveis, nominalmente para  $(t_B, t_S, \eta) = (t_B^{3D}, 1, 1)$  (caracterizando a classe de universalidade  $D=3$ ;  $t_B^{3D}$  corresponde à temperatura crítica finita para o modelo de Ising  $D=3$ ),  $(t_B^{3D}, t_S^1, 1)$  (caracterizando a classe de universalidade não trivial associada à transição de fase da superfície que ocorre simultaneamente com a do volume;  $t_S^1$  é uma constante finita),  $(0, t_S^{2D}, 1)$  (caracterizando a classe de universalidade  $D=2$ ;  $t_S^{2D}$  corresponde à temperatura crítica finita para  $D=2$  do modelo de Ising),  $(t_B^{3D}, t_S^{SB}, 1)$  (caracterizando a classe de universalidade da linha multicrítica, onde todas as três fases P, BF e SF se unem) e  $(0, 1, 0)$  (caracterizando a classe de universalidade do modelo de Heisenberg isotrópico para  $D=2$ , cuja temperatura crítica é nula);
- (iii) um ponto fixo totalmente instável para  $(t_B, t_S, \eta) = (t_B^{3D}, 1, 0)$  que é um ponto especial na linha multicrítica acima mencionada, e determina, por si mesmo, uma nova classe de universalidade. Em resumo, as classes de universalidade do

problema são dominadas pela classe do modelo puro de Ising, e a natureza Heisenberg isotrópica prevalece apenas quando não existem fontes de simetria de Ising.

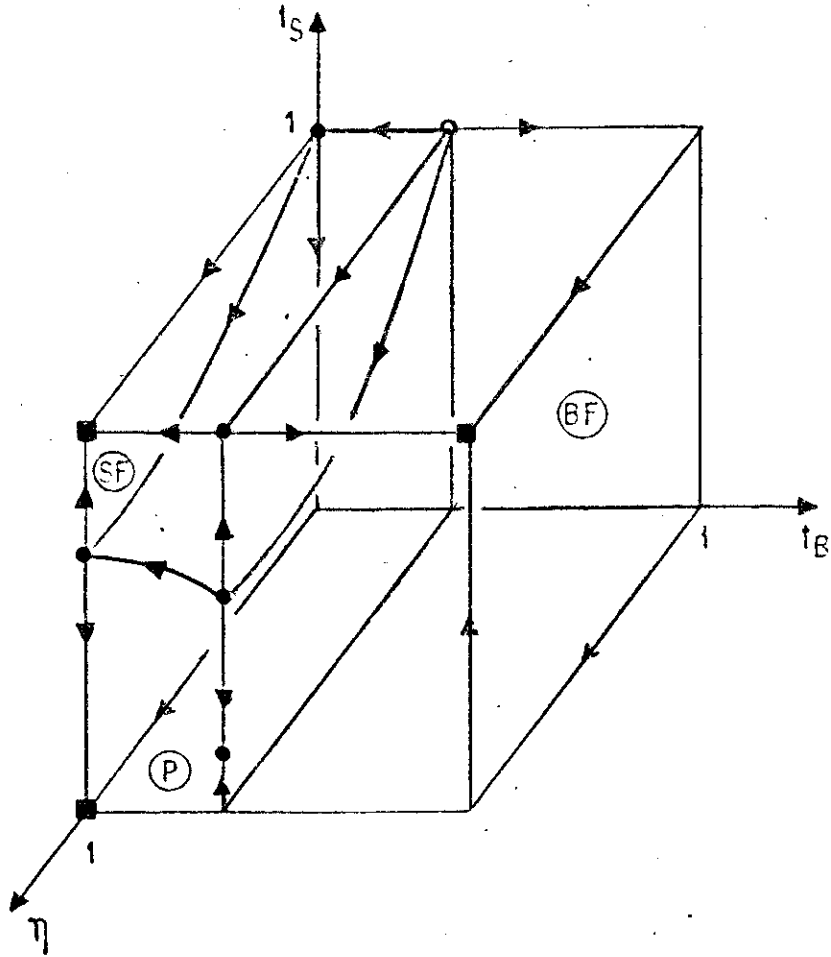


FIGURA 6.3.1a - Diagrama de fluxo e superfície crítica no espaço  $(t_B, t_S, \eta)$ .  $(t_r \equiv \tanh K_r \text{ (} r=B, S \text{)})$

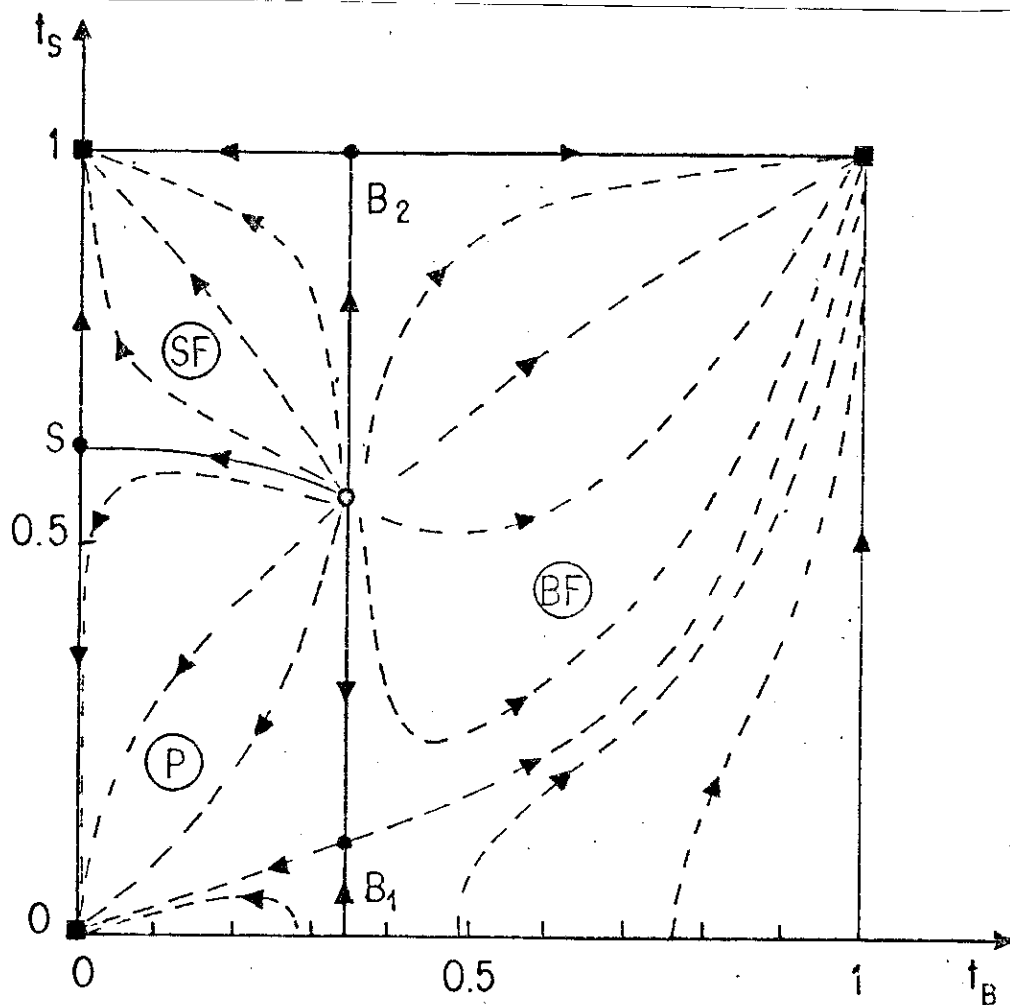


FIGURA 6.3.1b - Diagrama de fluxo e superfície crítica no sub espaço  $\eta=1$  (problema de Ising puro).

- denota os pontos fixos triviais (totalmente estáveis);
- denota os pontos fixos críticos (semi-estáveis);
- denota o ponto fixo multicrítico (totalmente instável).

P, SF e BF denotam respectivamente as fases paramagnética, superfície ferromagnética e volume ferromagnético.

As linhas tracejadas são indicativas.



Na FIGURA 6.3.2 apresentamos cortes da superfície crítica (no espaço  $(\Delta, T)$ ) para valores típicos da anisotropia  $\eta$ .

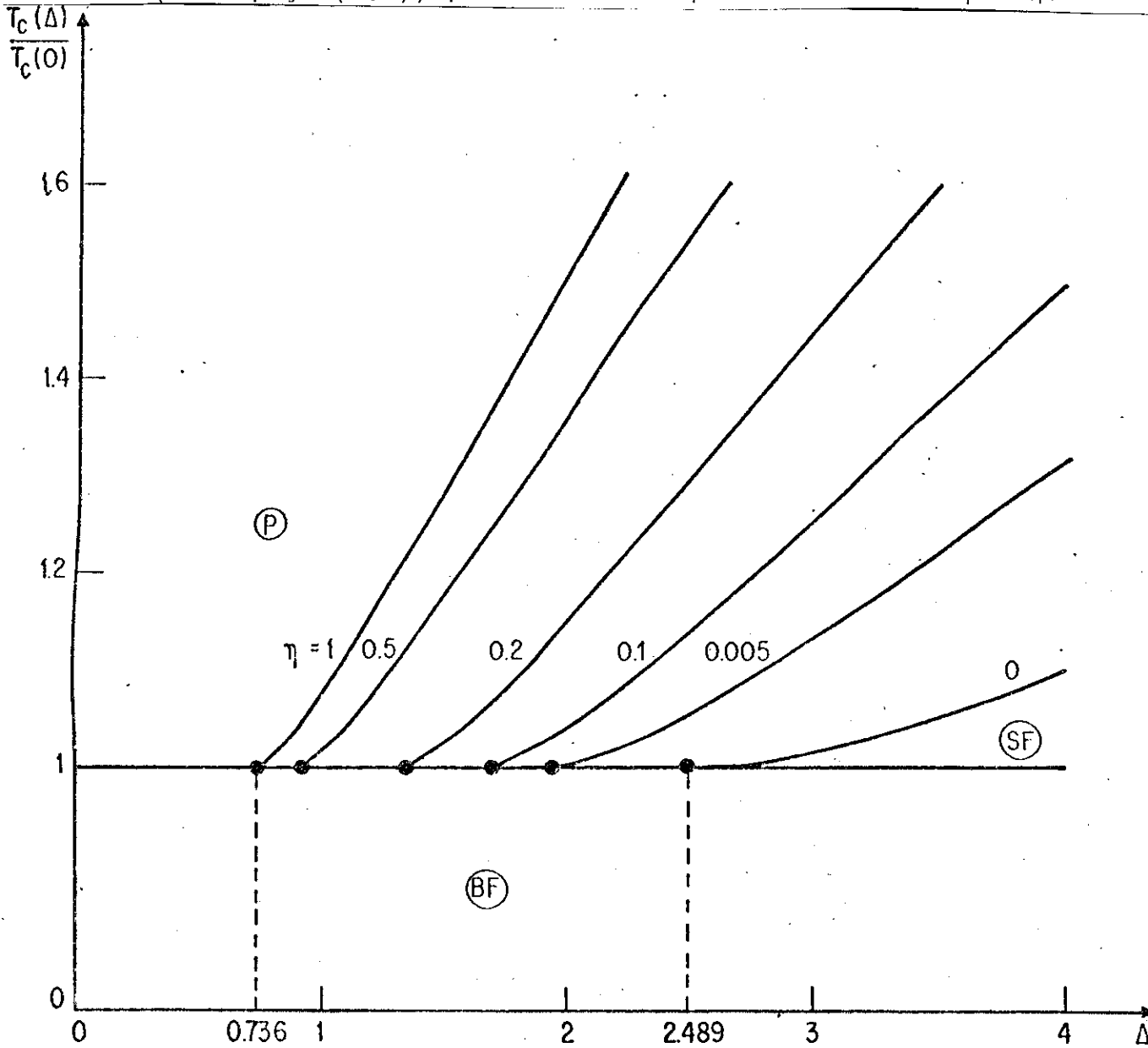


FIGURA 6.3.2 - Cortes, para  $\eta$  fixo, da superfície crítica no espaço  $\Delta$ -T ( $\Delta \equiv J_S/J_B - 1$ )

A localização do ponto multicrítico como função de  $\eta$  é indicada na FIGURA 6.3.3;  $\Delta_c$  é o valor de  $\Delta$  acima do qual existe ordem magnética na superfície, mesmo que o volume esteja desordenado. Para  $\eta=1$  nós reobtemos o resultado da Ref. 44, isto é  $\Delta_c \approx 0,74$ , que pode ser comparado razoavelmente com o resultado de

séries <sup>135,136</sup>  $0,6 \pm 0,1$ , o de Monte Carlo <sup>153</sup>  $0,50 \pm 0,03$  e outro  
GR <sup>45</sup>  $0,569$ .

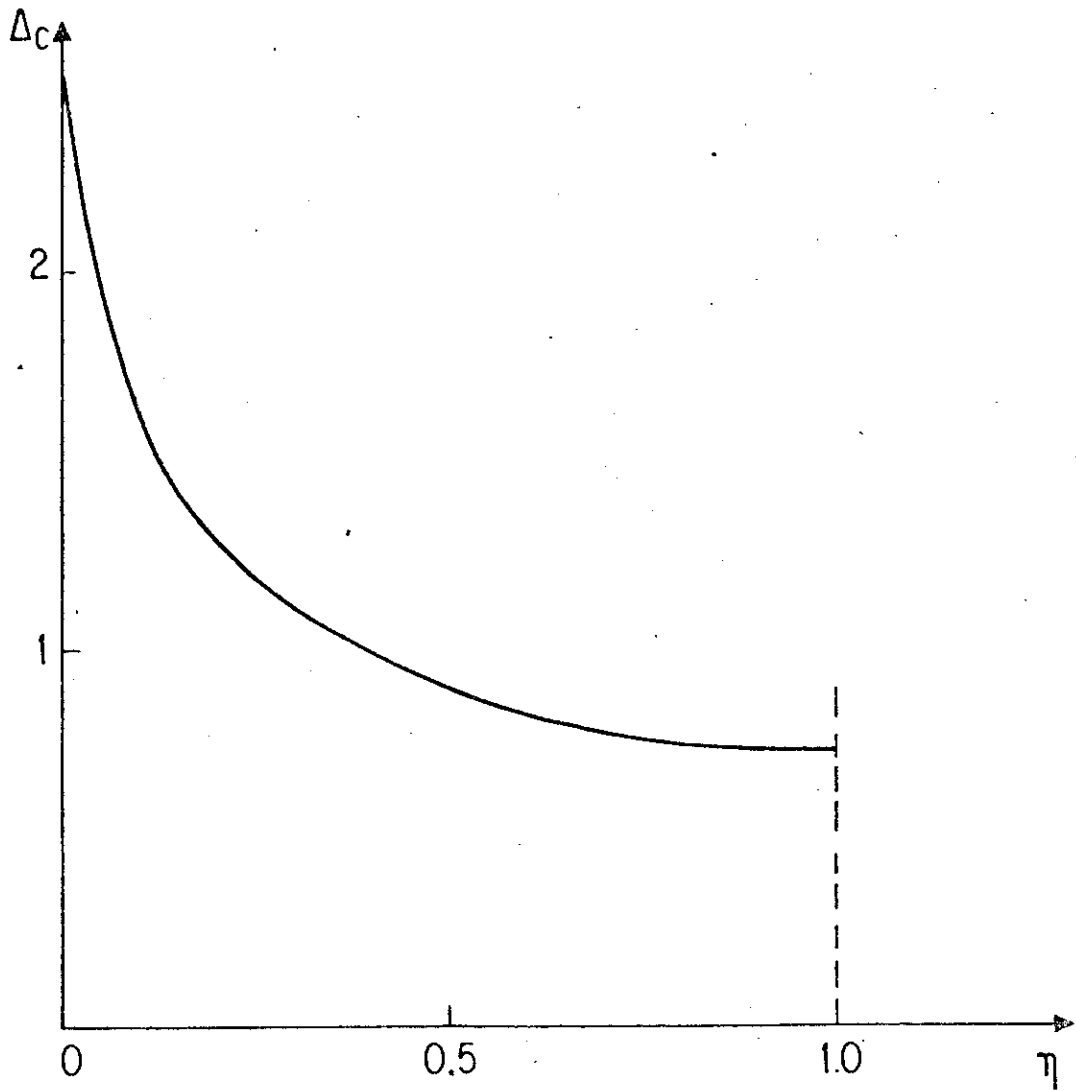


FIGURA 6.3.3 -  $\Delta_c$  em função de  $\eta$ .

#### 6.4 - Conclusões

Utilizamos uma aproximação simples de GR, com grafos tipo Migdal-Kadanoff, para estudar os efeitos de superfície crítica em redes de spins  $\frac{1}{2}$  semi-infinitas as quais interagem através de acoplamentos padrões de Ising ferromagnético no volume, e através de acoplamentos Heisenberg anisotrópico ferromagnético na superfície livre. A anisotropia  $\eta$  é suposta variar entre 0 (superfície livre Heisenberg isotrópica) e 1 (problema puro de Ising, relativamente bem discutido na literatura). Estes resultados podem ser alternativamente aplicados às redes hierárquicas determinada, pelas relações de recorrência das FIGURAS 6.2.2, sendo que para tais sistemas elas são estritamente exatas para  $\eta=1$ <sup>158</sup> e aproximadas para os outros valores de  $\eta$ <sup>73,106</sup>, ou ser aplicada a redes de Bravais cúbicas simples semi-infinitas com uma superfície livre (1,0,0), e para tais sistemas são, para todos os valores de  $\eta$ , aproximadas (embora qualitativamente corretas). O diagrama de fase apresenta três fases, nominalmente a paramagnética, a volume ferromagnético e a superfície ferromagnética. Todas as três fase possuem um ponto em comum, para um dado valor de  $\eta$ , ou seja o ponto multicrítico, cuja localização pode ser caracterizada por  $\Delta_c$  (definido como o valor particular de  $\Delta \equiv J_S/J_B - 1$  acima do qual pode existir ordenamento na superfície, mesmo sem que o volume esteja ordenado).  $\Delta_c$  decresce monotonamente e continuamente enquanto  $\eta$  aumenta de 0 a 1. Ele atinge o seu valor mínimo para  $\eta=1$ , onde obtemos  $\Delta_c \approx 0,74$  o qual pode ser comparado de modo satisfatório com os resultados disponíveis na literatura. Por outro lado, ele alcança o seu valor máximo para  $\eta=0$ , onde apresenta um valor finito ( $\Delta_c \approx 2,5$ ).

Em outras palavras, para  $J_S/J_B$  bastante grande, é possível ter uma transição de fase de superfície ocorrendo para temperaturas superiores à temperatura crítica do volume, mesmo para o modelo Heisenberg isotrópico, cuja versão estritamente bi-dimensional é acreditada possuir uma temperatura crítica nula. Entretanto, o paradoxo é somente aparente porque nosso sistema não é bidimensional, um volume (longe da superfície) paramagnético é diferente de um volume disconectado da superfície; de fato, os spins da superfície estão conectados através das interações, tanto da superfície como das primeiras camadas do volume. O volume foi suposto neste trabalho como sendo Ising, o que claramente constitui uma situação favorável para ter um ordenamento na superfície ajudado pelo volume. É intuitivo que modelos com o volume cada vez mais próximos do modelo de Heisenberg isotrópico irão requerer valores da razão  $J_S/J_B$  cada vez mais altos, para que exista uma fase superfície ferromagnética. É possível que para  $\eta_{\text{superfície}} = 0$  o valor crítico  $\Delta_c$  irá divergir quando o modelo do volume for estritamente o modelo Heisenberg isotrópico ( $\eta_{\text{volume}} = 0$ ). Estamos presentemente trabalhando neste interessante problema, de modo a ver, em particular, se a aproximação de GR concorda ou não com um resultado recente<sup>161</sup> de aproximação de fase randômica obtido para a rede FCC que sugere a existência de um valor crítico finito  $\eta_c$  abaixo do qual não existe a fase superfície ferromagnética.

Como era intuitivamente esperado, muitas regiões da superfície crítica pertencem à classe de universalidade de mais baixa simetria do problema, o modelo de Ising em nosso caso. Em particular, todos os pontos, menos um (correspondente a  $\eta = 0$ )

da linha multicrítica (sobre a qual coexistem as três fases) pertencem à classe de universalidade do volume-superfície Ising; o ponto  $\eta = 0$  constitui por si próprio uma classe de universalidade não trivial.

## CAPÍTULO 7 - MODELO DE POTTS NO TAPETE DE SIERPINSKI

### 7.1 - Introdução

O problema de fenômenos críticos em redes fractais é por si próprio interessante e, nos últimos anos, têm surgido vários trabalhos a respeito deste assunto (ver as Refs. 163-166). Além disso, um outro problema, que tem sido objeto de estudo, é o de estruturas de defeitos (interfaces) em redes hierárquicas<sup>167</sup> para sistemas de spins.

Como foi mostrado por Gefen e Col<sup>163</sup> em 1980, o modelo de Ising em redes fractais, com dimensionalidade fractal entre 1 e 2, apresenta uma temperatura crítica finita (não nula) se a ordem de ramificação<sup>168</sup> é infinita. Esta é a razão pela qual os Tapetes de Sierpinski (SC, cuja ordem de ramificação é infinita) são apropriados para estudar os fenômenos críticos em sistemas com dimensões menores que 2. No mesmo trabalho, eles mostram que os expoentes críticos do SC dependem, não somente da dimensionalidade fractal e da dimensão do spin, mas também de alguns parâmetros topológicos como a conectividade  $Q$ , a lacunabilidade  $L$ , etc. (veja Ref. 168). Uma outra característica interessante dos fractais é que eles são invariantes sob transformação de escala mas não são invariantes sob translação.

Neste Capítulo pretendemos analisar o modelo de Potts com  $q$  estados no SC, estudando qualitativamente, como as fronteiras críticas de alguns SC variam com o número de estados  $q$ . Para simular o SC, utilizamos redes hierárquicas (HL) adequa-

das<sup>169-171,147</sup> que, como tem sido mostrado, fornecem resultados bem precisos com respeito às fronteiras críticas (ver Refs. 72, 74,101,136,137,172,175) e também levam a limites de alta e baixa temperatura, que concordam, muito bem, com os limites correspondentes das redes hipercúbicas (ver Refs. 104, 174 e 176).

Nós usamos a transformação de Grupo de Renormalização no Espaço Real, que, como é muito bem conhecido, é exata nestas redes hierárquicas (modelo de Potts) sendo, portanto, uma técnica apropriada para o que desejamos estudar.

Este Capítulo é organizado como se segue: na seção 6.2 construímos o modelo de Potts em redes hierárquicas adequadas de modo a simular o SC. De cada uma dessas redes hierárquicas nós obtemos os dois grafos (que também geram redes hierárquicas) que contribuem para o seu limite de alta e baixa temperaturas. Verificamos que estes grafos são os mesmos que poderíamos obter se fizéssemos os esquemas de movimento de ligações (Migdal<sup>68</sup> e Kadanoff<sup>55</sup>) no tapete de Sierpinski. Na seção 6.3 calculamos as fronteiras críticas de três SC, através do uso do HL e de dos outros dois grafos que denominaremos grafos tipo M e K. Verificamos quantitativamente o quanto estas fronteiras variam com  $q$  e comparamos as fronteiras obtidas através dos três diferentes grafos (HL, M e K). As conclusões são apresentadas na seção 6.4.

### 7.2 - Esquema de Grupo de Renormalização para o Tapete de Sierpinski

De modo a entendermos melhor o SC, definiremos um dos mais simples. Começamos com um quadrado unitário; então, em 1ª ordem, o dividimos em  $b^2$  pequenos quadrados e "eliminamos" simetricamente  $\ell^2$  quadrados centrais. Logo, em 2ª ordem, tomamos os  $b^2 - \ell^2$  quadrados restantes e dividimos cada um deles em  $b^2$  quadrados menores, "eliminamos"  $\ell^2$  quadrados e o processo é repetido para todas as ordens (veja FIGURA 7.2.1).

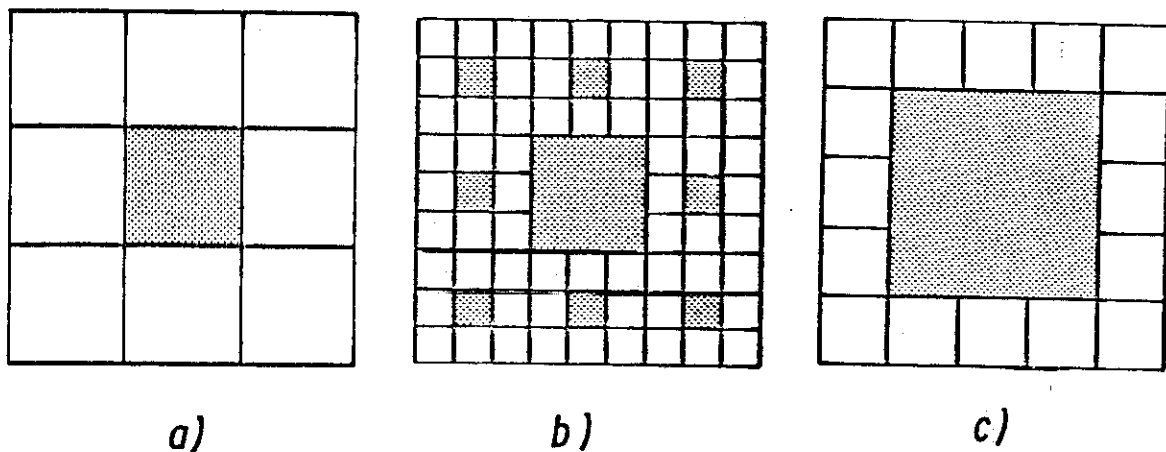


FIGURA 7.2.1 - (a) 1ª interação do SC para  $b=3$ ,  $\ell=1$ ; (b) 2ª interação para  $b=3$ ,  $\ell=1$ ; (c) 1ª interação do SC para  $b=5$ ,  $\ell=3$ .

A dimensionalidade fractal deste objeto geométrico é dada por (ver Refs. 163, 166 e 168):

$$D = \frac{\ln(b^2 - \ell^2)}{\ln b} \quad (7.1a)$$



Antes de construirmos o grupo de renormalização, iremos definir alguns parâmetros topológicos importantes em sistemas fractais.

A Ordem de ramificação ( $R$ ), em um ponto  $P$ , é igual ao número de ligações significativas que devemos cortar, de modo a isolarmos um conjunto limitado, arbitrariamente grande, de pontos conetados a  $P$ . Para o tapete de Sierpinski, este número cresce como uma potência, de expoente maior que um, do número de pontos do conjunto limitado, de modo que  $R = \infty$ . Neste caso, para caracterizarmos fractais com  $R = \infty$ , definimos um outro parâmetro que está relacionado com a dimensionalidade fractal do conjunto de pontos isolado  $\{D'\}$ . A conectividade ( $Q$ ) é definida como o menor valor de  $D'$ ,  $Q = \min\{D'\}$ . Para os SC bidimensionais (no espaço Euclidiano) a "superfície" de um conjunto isolado tem a dimensão Euclidiana de uma linha,  $d = 1$ . Neste caso a superfície de menor dimensionalidade fractal corresponde a  $\ell^2$  quadrados, cujos lados são linhas retas horizontais e verticais que passam através de  $\ell$  pequenos quadrados, de modo que

$$Q = \ell u (b - \ell) / \ell n b \quad (7.1b)$$

Na FIGURA 7.2.1a temos  $Q = \ell n 2 / \ell n 3 \approx 0.631$ .

Podemos construir dois tapetes de Sierpinski com mesma ordem de ramificação e mesma conectividade. Precisamos portanto, de um outro parâmetro capaz de distinguir entre estes SC, este parâmetro é a lacunaridade ( $L$ ) e determina a maneira pela qual as áreas eliminadas estão espalhadas.  $L$  mede

o grau de não homogeneidade da rede no espaço Euclidiano, ou as flutuações em torno da lei de distribuição de "massa"  $M \sim r^d$ , onde  $M$  é a "massa" (número de sítios) de uma parte do sistema cujo comprimento é  $r$ . Não existe uma definição rigorosa para  $L$ , entretanto, Gefen e col<sup>166</sup> fizeram um cálculo aproximado para o valor de  $L$  no tapete de Sierpinski. Dada a primeira interação no processo de construção do SC e considerando as  $n$  possíveis células quadradas formadas por  $\ell^2$  quadrados do conjunto dos  $b^2$  quadrados formados, conta-se o número de quadrados não eliminados. A lacunaridade é aproximada pelo desvio quadrático médio de  $n_i$  em relação ao seu valor médio  $\left( \bar{n} = \frac{\sum_i n_i}{n} \right)$

$$L = \frac{1}{n} \sum_i (n_i - \bar{n})^2 \quad (7.1c)$$

A definição (7.1c) fornece valores que dependem do tamanho da célula escolhida, como também do número de interações no processo de construção da rede, logo, só se pode comparar a lacunaridade de redes calculadas para um mesmo tamanho da célula e mesma etapa de construção.

Podemos construir o modelo de Potts no tapete de Sierpinski, colocando a variável de Potts com  $q$  estados  $\sigma$  sobre cada sítio "microscópico" da rede. O Hamiltoniano é igual a:

$$H = -q \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j - q \sum_{\langle \ell,m \rangle'} J_W \sigma_\ell \sigma_m \quad (7.2)$$

onde  $\langle \ell,m \rangle'$  significa a interação entre os sítios primeiros vizinhos, cujas ligações estão nas margens de uma área eliminada e  $\langle ij \rangle$  significa os sítios 1<sup>os</sup> vizinhos restantes.

Como já foi mostrado em vários trabalhos, redes hierárquicas (HL) adequadas, fornecem bons resultados para a rede quadrada (veja Refs. 74, 104, 172 e 175) e outras redes hipercúbicas (Refs. 136 e 174). Deste modo acreditamos que redes hierárquicas (HL) adequadas serão boas aproximantes para redes com dimensões não inteiras, tais como o Tapete de Sierpinski (SC). Temos dois procedimentos de agregação correspondentes às constantes de acoplamento  $K \equiv J/k_B T$  e  $K_W \equiv J_W/k_B T$  (veja Ref. 169) para comentários a respeito de procedimento de agregação). Estes são mostrados na FIGURA 7.2.2 para o SC correspondendo a  $b=3$ ,  $\ell=1$ . De modo que temos duas redes hierárquicas: uma delas simula a vizinhança da interface entre dois quadrados com os da FIGURA 7.2.2a e o outro simula a vizinhança da interface entre, um quadrado e um quadrado eliminado como é mostrado na FIGURA 7.2.2d. Observe que estas redes são uma classe de HL chamadas de não uniforme por Griffiths e Kaufman<sup>169</sup> (1982); (veja FIGURA 4 do trabalho deles; e FIGURA 7.2.3 deste trabalho).

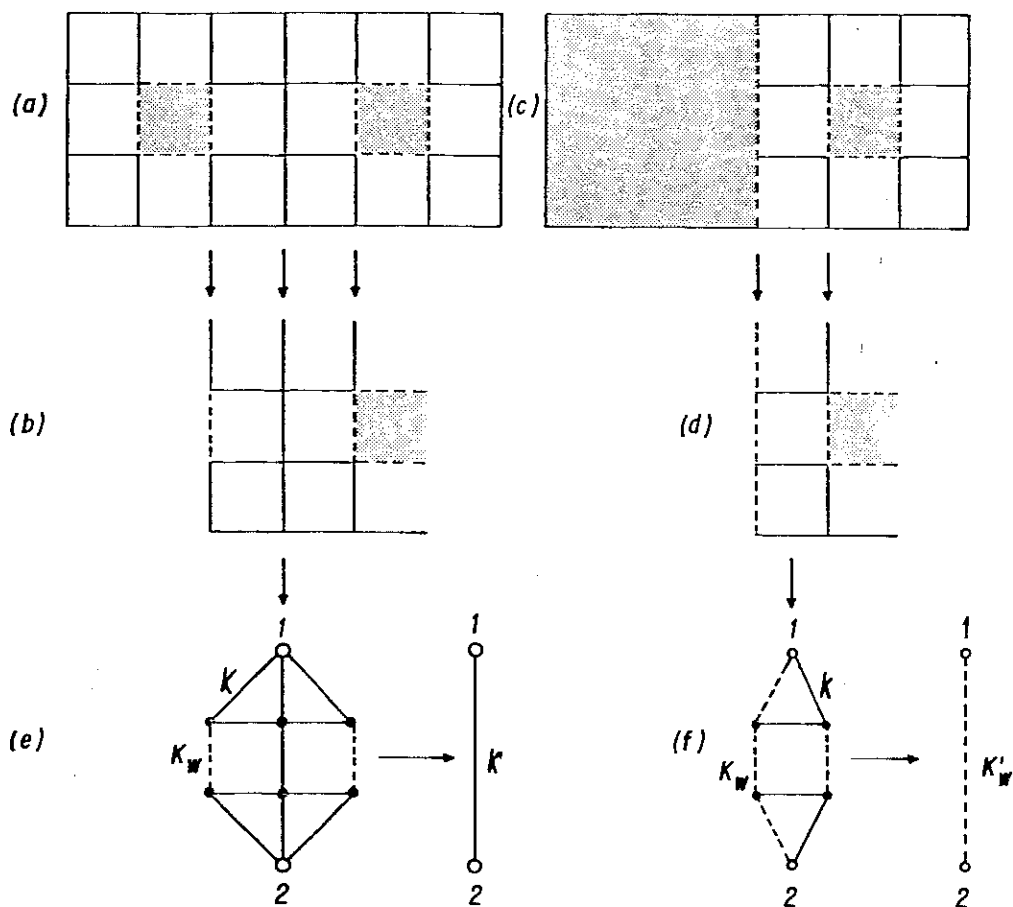


FIGURA 7.2.2 - Construção da rede hierárquica (HL) para simular o tapete de Sierpinski com  $b=3$ ,  $l=1$ . (a), (b) e (c) mostram como  $K'$  é obtido em função de  $K$  e  $K_w$ . (d), (e) e (f) mostram como obtemos  $K'_w = f(K_w, K)$ . As linhas cheias denotam  $K$  e as tracejadas  $K_w$ .

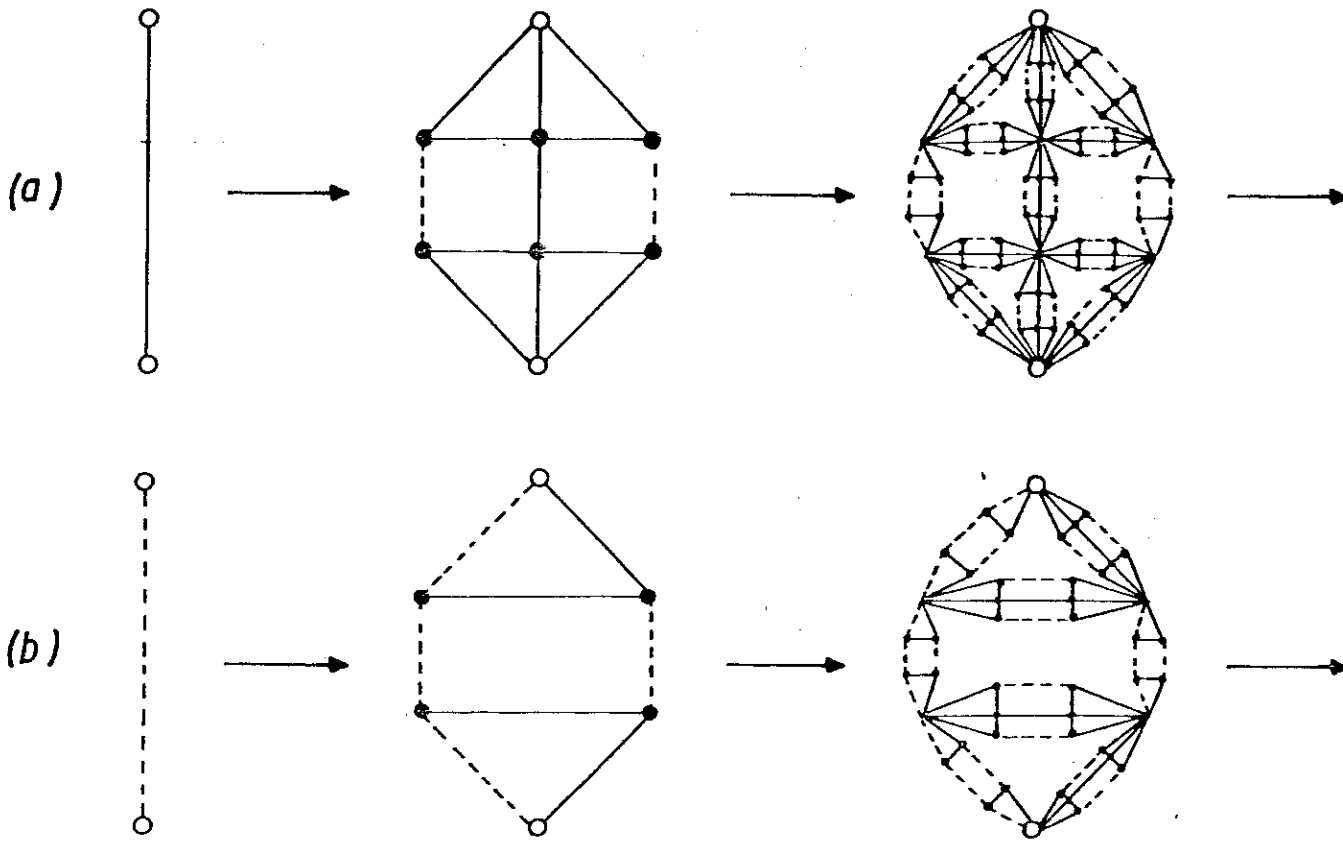


FIGURA 7.2.3 - Redes hierárquicas não uniformes correspondentes a (a) linhas cheias (constante de acoplamento  $K$ ) e (b) linhas tracejadas ( $K_W$ ). A "estrutura interna" das linhas cheias é do tipo (a), sendo para as linhas tracejadas do tipo (b).

Podemos também dizer que a rede do "diamante", mostrada no mesmo trabalho<sup>169</sup>, com ligações que não interagem é um tipo de rede hierárquica não uniforme se o esquema da FIGURA 7.2.4 é adotado. Esta classe de redes hierárquicas mistura dois (ou mais) tipos de ligações, cada uma delas com o seu próprio esquema de agregação. Em outras palavras, a estrutura interna de uma ligação contém, além da mesma ligação, outras ligações com estruturas internas diferentes. A dimensionalidade e o número de agregação desta classe de redes hierárquicas são questões interessantes que, sem dúvida merecem atenção.

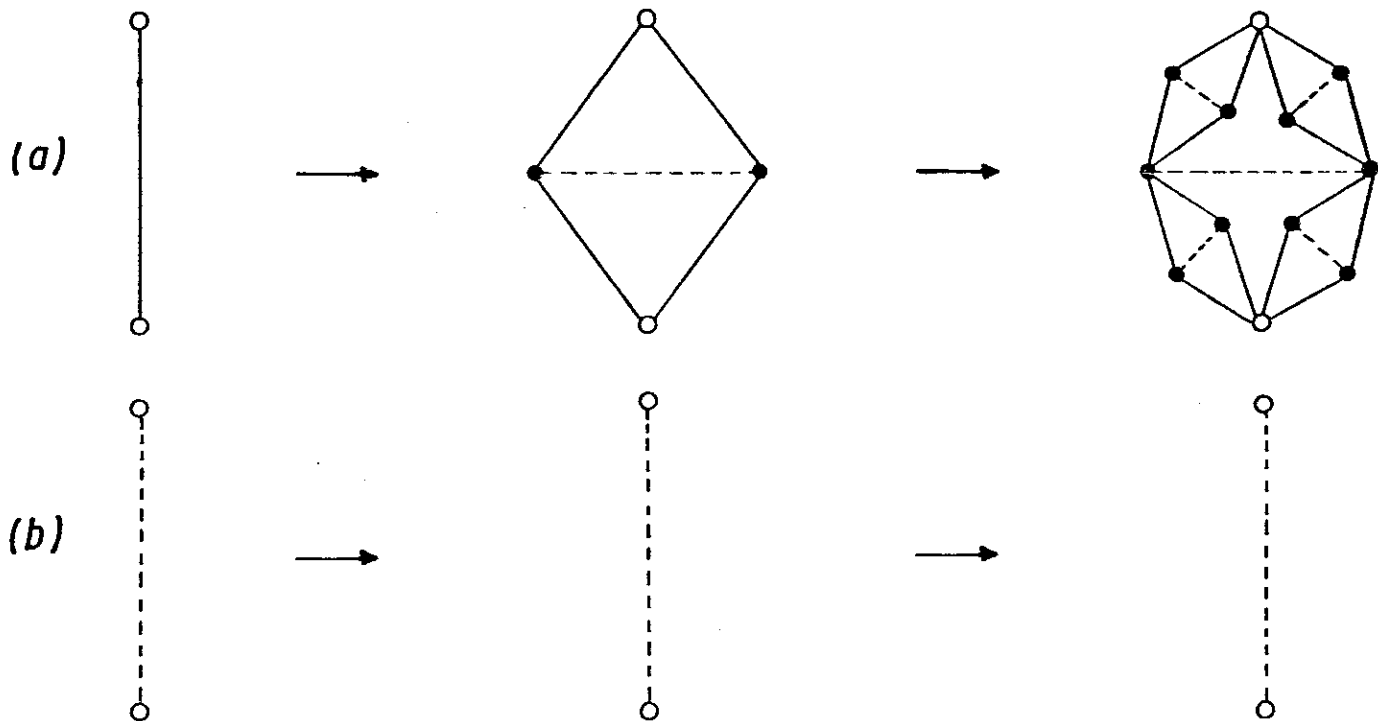


FIGURA 7.2.4 - Rede hierárquica do diamante com ligações que não interagem, considerada como uma rede não uniforme. Claramente os esquemas de agregação (ou estruturas internas) para as linhas cheias e quebradas são diferentes. O esquema em (a) mistura ambas as linhas.

O procedimento é semelhante para outros valores de  $b$  e  $\ell$  (outros SC). Introduziremos agora uma variável mais conveniente, ou seja  $t$  e  $t_W$  (estas variáveis são mais adequadas para tratar com o modelo de Potts):

$$t \equiv \frac{1 - e^{-qJ/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ/k_B T}} \quad (7.3a)$$

$$t_W \equiv \frac{1 - e^{-qJ_W/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ_W/k_B T}} \quad (7.3b)$$

Com estas variáveis, as equações de renormalização (por simplicidade para  $q=2$ ) correspondentes às FIGURAS 7.2.2e e 7.2.2f obtidas pelo método do corte colapso<sup>54</sup>, são:

$$\begin{aligned} t' = & (2t^2 t_W + t^3 + 4t^3 t_W + 4t^4 + 6t^4 t_W + 4t^5 + 8t^5 t_W + 4t^5 t_W^2 \\ & + 6t^6 t_W + 8t^6 t_W^2 + 2t^7 + 4t^7 t_W + 4t^7 t_W^2 + 4t^8 + 2t^8 t_W \\ & + t^{11}) / (1 + 4t^3 + 2t^3 t_W + 2t^4 + 4t^4 t_W + 4t^4 t_W^2 + 6t^5 t_W \\ & + 8t^5 t_W^2 + 4t^6 + 8t^6 t_W + 4t^6 t_W^2 + 4t^7 t_W + t^8 + 4t^8 t_W \\ & + 2t^9 t_W). \end{aligned} \quad (7.4a)$$

$$\begin{aligned} t'_W = & (t^2 t_W + t^4 t_W + 4t^2 t_W + t_W^3 + t^2 t_W^3) / (1 + 2t^2 t_W + \\ & t^2 t_W^2 + t^4 t_W^2 + 2t^2 t_W^3 + t^2 t_W^4) \end{aligned} \quad (7.4b)$$

Estas equações nos dão as fronteiras críticas (e expoentes críticos) correspondentes ao caso  $b=3$ ,  $\ell=1$ . É importante observar que a aplicação do método do corte-colapso a

um grafo G sempre leva a funções  $X' = f_G(x)$ , onde  $f_G(x)$  pode ser escrito como:

$$f_G = \frac{N_G(x)}{D_G(x)} \quad (7.5)$$

onde  $N_G(x)$  (e  $D_G(x)$ ) são polinômios de X (veja equações (7.4a) e (7.4b) e o Capítulo 1) de modo que as equações (7.4a) e (7.4b) podem também ser escritas com:

$$\begin{aligned} t' = & \{t^4 N[G_1] + 4t^3(1-t)N[G_2] + 2t^2(1-t)^2 N[G_3] + \\ & + 2t^2(1-t)^2 N[G_4] + 2t^2(1-t)^2 N[G_5] + 4t(1-t)^3 N[G_6] + \\ & (1-t)^4 N[G_7]\} / \{t^4 D[G_1] + 4t^3(1-t)D[G_2] + 2t^2(1-t)^2 \\ & D[G_3] + 2t^2(1-t)^2 D[G_4] + 2t^2(1-t)^2 D[G_5] + 4t(1-t)^3 D[G_6] \\ & + (1-t)^4 D[G_7]\} \end{aligned} \quad (7.6a)$$

e

$$\begin{aligned} t'_W = & \{t^2 N[G_8] + 2t(1-t)N[G_9] + (1-t)^2 N[G_{10}]\} / \\ & \{t^2 D[G_8] + 2t(1-t)D[G_9] + (1-t)^2 D[G_{10}]\} \end{aligned} \quad (7.6b)$$

onde  $N[G_i]$  ( $D[G_i]$ ) são os polinômios dos numeradores (denominadores) de  $t$  e  $t_W$  correspondentes aos grafos  $[G_i]$  da FIGURA 7.2.5. Quando  $t \rightarrow 0$  ( $k_B T / J \rightarrow \infty$ ) as equações (7.6a) e (7.6b) levam a:

$$t' \approx N \frac{N[G_7]}{D[G_7]} \left\{ 1 + 4t \frac{N[G_6]}{N[G_7]} - \frac{D[G_6]}{D[G_7]} + \dots \right\} \quad (7.7a)$$



$$t'_W \sim \frac{N[G_{10}]}{D[G_{10}]} \left\{ 1 + 2t \frac{N[G_9]}{N[G_{10}]} - \frac{D[G_9]}{D[G_{10}]} + \dots \right\} \quad (7.7b)$$

mostrando que os grafos  $G_7(G_{10})$  (grafos do tipo M) dão os termos dominantes de  $t'(t'_W)$  para alta temperatura

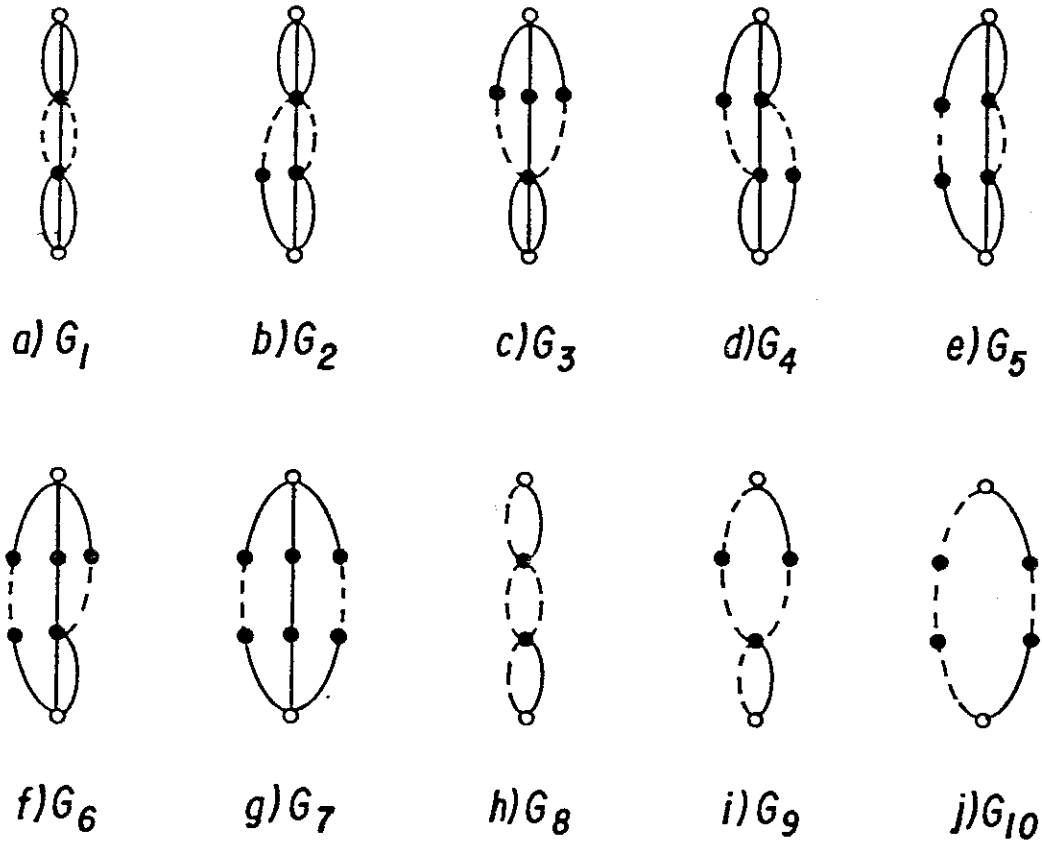


FIGURA 7.2.5 - Grafos que obtemos quando fazemos o método do corte-colapso. (a)-(g) sobre a rede hierárquica dada pela FIGURA 7.2.2c; (h)-(j) sobre a rede hierárquica dada pela FIGURA 7.2.2f.

No caso de  $t \rightarrow 1$  ( $k_B T/J \rightarrow 0$ ) uma análise semelhante mostra que os termos dominantes de  $t'(t_W)$  são dados pelos grafos  $G_1(G_8)$  (grafos do tipo K). Observemos que os grafos do tipo K correspondentes a  $t'(t_W)$  são os mesmos usados por Gefen e Col<sup>166</sup> (1984) (veja suas FIGURAS 2 e 3), obtidos através do esquema de deslocamento de ligações. Para outros valores de  $b$  nossa construção "sempre" obtém, no limite  $t \rightarrow 1$ , seus grafos correspondentes. Notemos também que os grafos do tipo M correspondem à aproximação de Migdal<sup>68</sup> respectivamente para as FIGURAS 7.2.5a e 7.2.5d. O esquema anisotrópico de movimento de ligações (ver Capítulo 1) (decimação-x, Kadanoff<sup>55</sup> (1976)) sobre os grafos das FIGURAS 7.2.2a e 7.2.2c fornecem os grafos do tipo K correspondentes à renormalização da constante de acoplamento na direção  $y$ ; através de uma rotação de  $\Pi/2$  nestas FIGURAS a decimação-x fornece agora os grafos tipo M correspondentes às constantes de acoplamento na direção  $y$ .

Portanto, é importante observar que nossa aproximação, através de redes hierárquicas, dá grafos tipo Migdal (esquema de movimento de ligações adotado por Gefen e Col<sup>166</sup>, (1984)) para os principais termos do limite de alta (baixa) temperatura.

### 7.3 - Fronteiras Críticas do Modelo de Potts no Tapete de Sierpinski

Existem três situações básicas para as fronteiras críticas do tapete de Sierpinski definido no início da seção 7.2. Estas situações são (os mesmos resultados são obtidos por Gefen e Col<sup>166</sup> para  $q = 2$ ):

i)  $b = 3, \ell = 1$ ; ii)  $b = \ell + 2, \ell > 2$ ; iii)  $b > \ell + 2$ . Vamos aqui analisar as fronteiras críticas para estes três casos e verificar a sua variação com  $q$ .

As FIGURAS 7.3.1a, b, c e d correspondem ao caso  $b = 3, \ell = 1$ , enquanto as FIGURAS 7.3.2a,b,c e d correspondem ao caso  $b = 5, \ell = 3$  ( $b = \ell + 2; \ell > 2$ ), nestes dois casos o ponto D é um ponto fixo e o eixo  $t$  ( $t_W = 0$ ) é um sub-espço invariante com relação a renormalização, sendo o ponto A um ponto totalmente estável. O caso  $b = 3, \ell = 1$  é um caso especial, uma vez que  $t_W = 0$  para  $t = 1$ ; enquanto que, para  $b = \ell + 2$  ( $\ell > 2$ ) existe transição de fase à temperatura finita ( $t = 1, t_W \neq 0$ ). Finalmente, para  $b > \ell + 2$  (FIGURA 7.3.4;  $b = 7, \ell = 3$ ), o ponto D não é um ponto fixo e o eixo  $t$  ( $t_W = 0$ ) não é sub-espço invariante.

De modo a compararmos nossos resultados com os obtidos por Gefen e Col<sup>166</sup> em 1984, estudamos as fronteiras correspondentes aos grafos da HL, tipo K (limite da HL para  $t \rightarrow 1$ ) e tipo M (limite da HL para  $t \rightarrow 0$ ). As fronteiras críticas correspondentes ao caso  $b = 3, \ell = 1$  são mostradas nas FIGURAS 7.3.1. Na FIGURA 7.3.1a é utilizada a HL (esquemas representados pelas FIGURAS 7.2.2c e 7.2.2f).

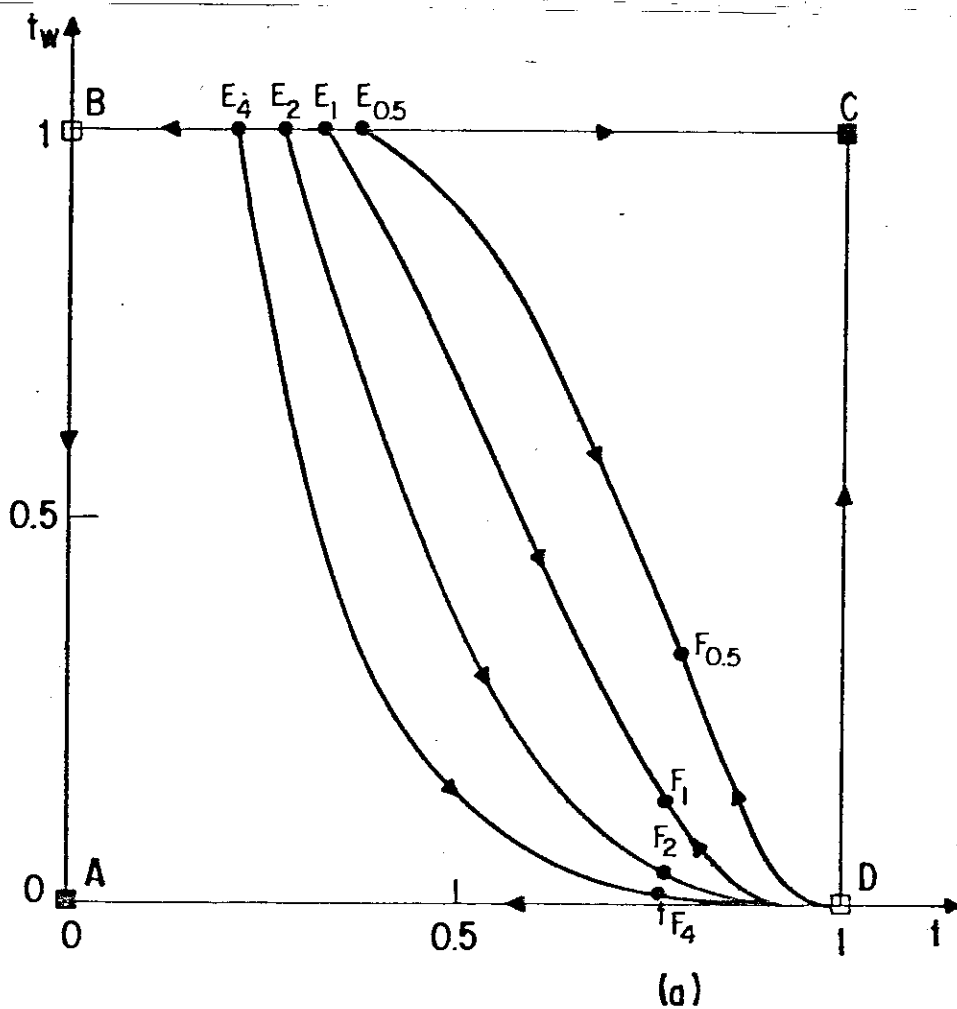


FIGURA 7.3.1a- Fronteiras críticas do tapete de Sierpinski ( $b=3, \ell=1$ ) no espaço  $t-t_w$ . Rede hierárquica da FIGURA 7.2.2. Os sub-índices das letras E e F correspondem aos valores de  $q$ .

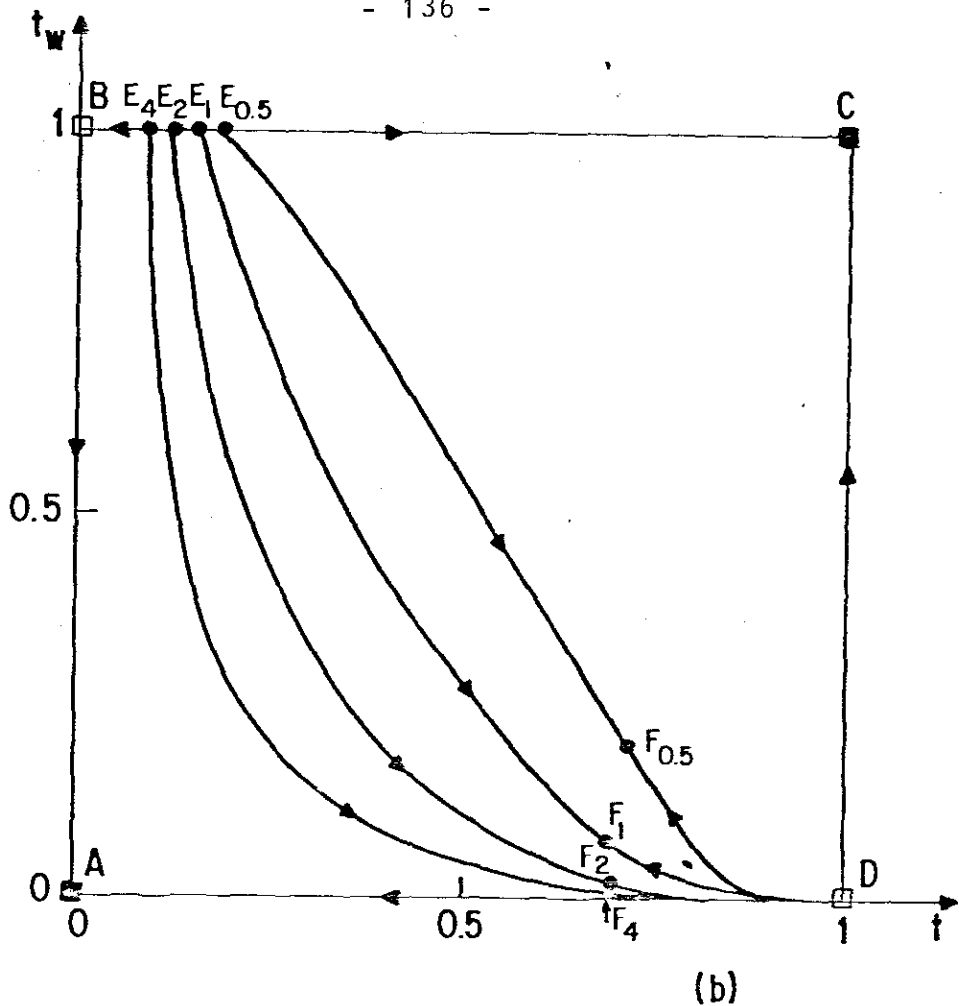


FIGURA 7.3.1b - Fronteira crítica do SC obtida através do grafo tipo K.

Na FIGURA 7.3.1b são usadas as redes hierárquicas correspondentes aos grafos tipo K (grafos  $G_1$  e  $G_8$ ; que são os mesmos utilizados por Gefen e Col<sup>166</sup> (1984)); na FIGURA 7.3.1c são usados os grafos tipo M (grafos  $G_7$  e  $G_{10}$ ; tipo Migdal).  $G_1(G_7)$  corresponde a  $t'$  e  $G_8(G_{10})$  corresponde a  $t'_W$ . Como era esperado, a fase ordenada em todos eles aumenta com o aumento de  $q$ . Acreditamos que nossa aproximação de HL para os tapetes de Sierpinski forneça resultados qualitativamente melhores do que os fornecidos pelos grafos tipos K e M. Como um exemplo quantitativo, podemos ver o problema de percolação de ligações ( $q=1$ ) no SC. A dimensionalidade fractal deste SC ( $b=3, \ell=1$ ) é  $D_1 \approx 1,893$ . Então é razoável esperar-se que seu ponto crítico seja um pouco maior do que o ponto crítico de percolação de ligações da rede quadra

da ( $p_c=0,5$ ), porque neste caso (SC) existem buracos na rede. Na FIGURA 7.3.1a vemos que a interseção da fronteira crítica  $q=1$  com a linha  $t=t_W$  leva a  $p_c \cong 0,53$  (que é certamente uma boa aproximação para o valor exato  $p_c$  da percolação de ligações para o tapete de Sierpinski). Enquanto que os grafos utilizados por Gefen e col<sup>166</sup> fornecem  $p_c \cong 0,41$ .

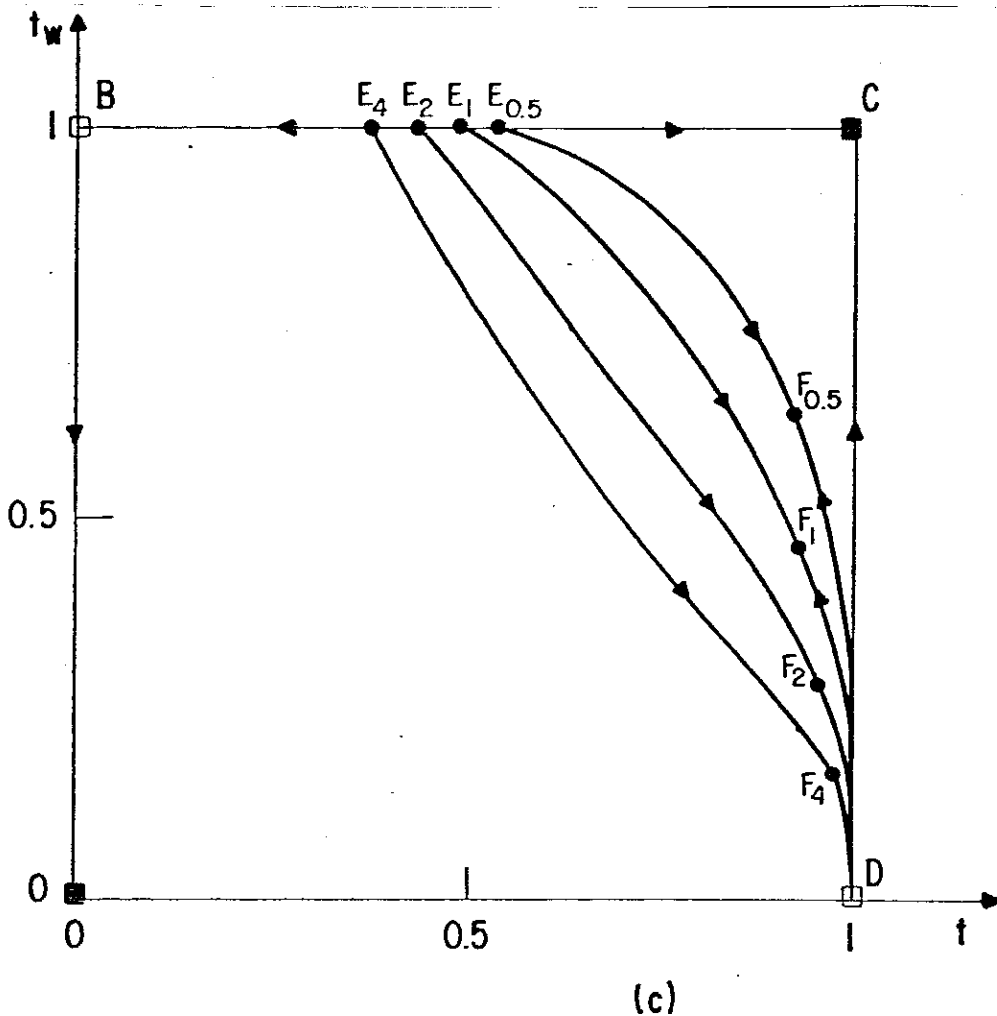
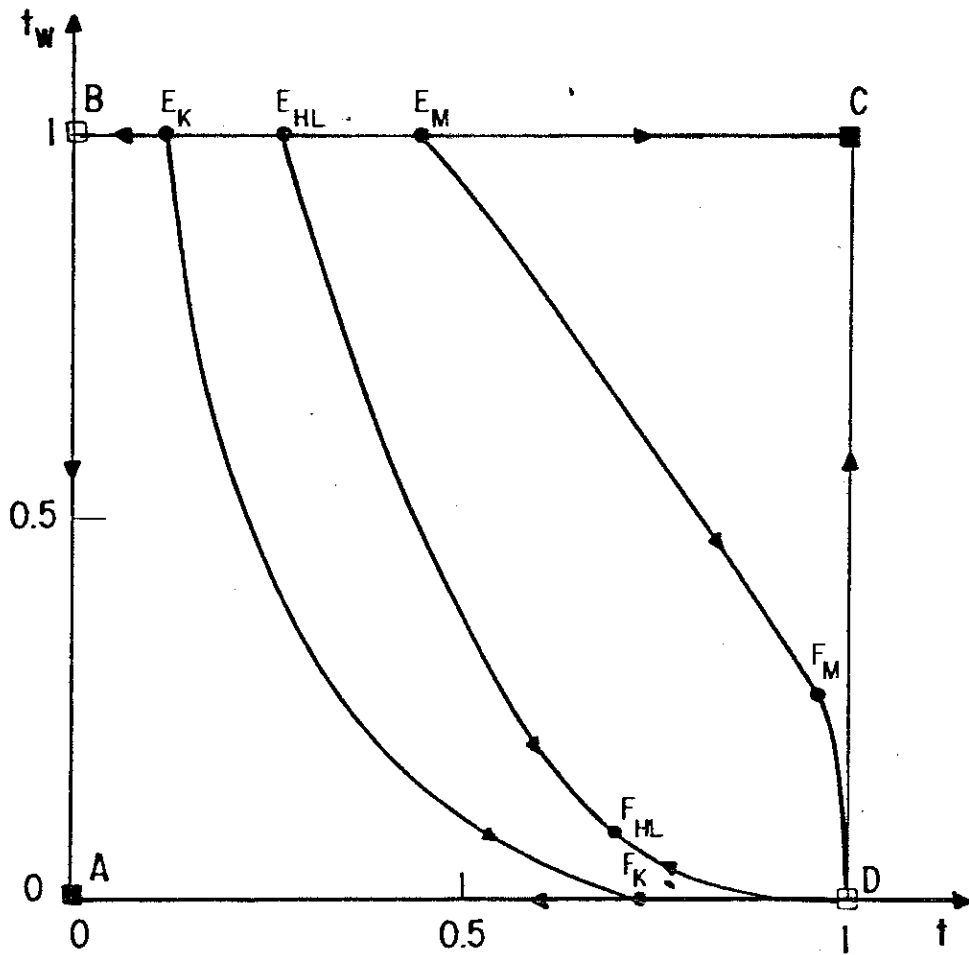


FIGURA 7.3.1c - Fronteira crítica para o SC obtido através dos grafos tipo M.



(d)

FIGURA 7.3.1d - Fronteira crítica do SC para  $q=2$  obtida através das três aproximações HL, grafo tipo K e grafo tipo M. Os pontos A,B,C,D,E e F são pontos fixos cuja estabilidade é dada pelas setas.

Os valores de  $p_c$  das FIGURAS 7.3.1b e 7.3.1c são, respectivamente  $p_c \approx 0,33$  e  $p_c \approx 0,75$ . Pontos críticos para outros valores de  $q$  (obtidos de maneira similar) são mostrados na TABELA 7.I. As condições de estabilidade dos pontos fixos são as mesmas obtidas por Gefen e Col<sup>166</sup> (através do esquema do movimento de ligações para  $q=2$ ) para todos os valores de  $q$  e para as duas outras aproximações (veja FIGURAS 7.3.1a e 7.3.1c). Para a localização dos pontos fixos E e F (que dependem de  $q$ ) veja a TABELA 7.I.

b	l	q	1/2			1			2			4			
			Met. Apr.	$t_E^*$	$(t_F^*, t_W^*, F)$	$t^*$	$t_E^*$	$(t_F^*, t_W^*, F)$	$t^*$	$t_E^*$	$(t_F^*, t_W^*, F)$	$t^*$	$t_E^*$	$(t_F^*, t_W^*, F)$	$t^*$
3	1	88	HL	0,3733	0,7927 0,3174	0,65	0,3224	0,7718 0,1354	0,53	0,2679	0,7746 0,0328	0,45	0,2145	0,7814 0,0055	0,36
			K	0,1818	0,7201 0,1893	0,41	0,1516	0,6990 0,0683	0,33	0,1197	0,6995 0,0156	0,23	0,897	0,7037 0,0027	0,17
			M	0,5379	0,9266 0,6232	0,81	0,4893	0,9341 0,4620	0,75	0,4354	0,9603 0,2994	0,69	0,3795	0,9838 0,1610	0,61
5	3	72	HL	0,1405	0,7291	0,82	0,1269	0,6106	0,73	0,1043	0,4859	0,62	0,0894	0,3684	0,51
			K	0,0542	0,7291	0,76	0,0486	0,6106	0,64	0,0411	0,4859	0,52	0,0326	0,3680	0,40
			M	0,6238	0,7291	0,96	0,5676	0,9135	0,94	0,5064	0,8688	0,90	0,4432	0,8154	0,86
7	3	98	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
			K	0,1537	0,4775 0,0650	0,39	0,1186	0,3678 0,0193	0,28	0,0866	0,2682 0,0045	0,19	0,0601	0,1866 0,0009	0,13
			M	0,8263	0,9315 0,7048	0,92	0,7814	0,9063 0,5752	0,89	0,7326	0,8762 0,4407	0,86	0,6817	0,8408 0,3182	0,82

TABELA 7.1 - Pontos críticos para o modelo de Potts em alguns Tapetes de Sierpinski obtidos por três classes de aproximação (HL, K e M).  $t_E^*$ ,  $(t_F^*, t_W^*, F)$  e  $t^*$  dando, respectivamente a localização dos pontos E, F e aquele obtido pela interseção da fronteira crítica com a linha  $t = t_W^*$ .



Na FIGURA 7.3.1d fazemos uma comparação entre os três esquemas de aproximação. Observemos que no limite de baixa temperatura ( $t \rightarrow 1$ ) nosso tratamento de HL tem o mesmo comportamento que os grafos tipo K, como foi dito na seção 7.2.

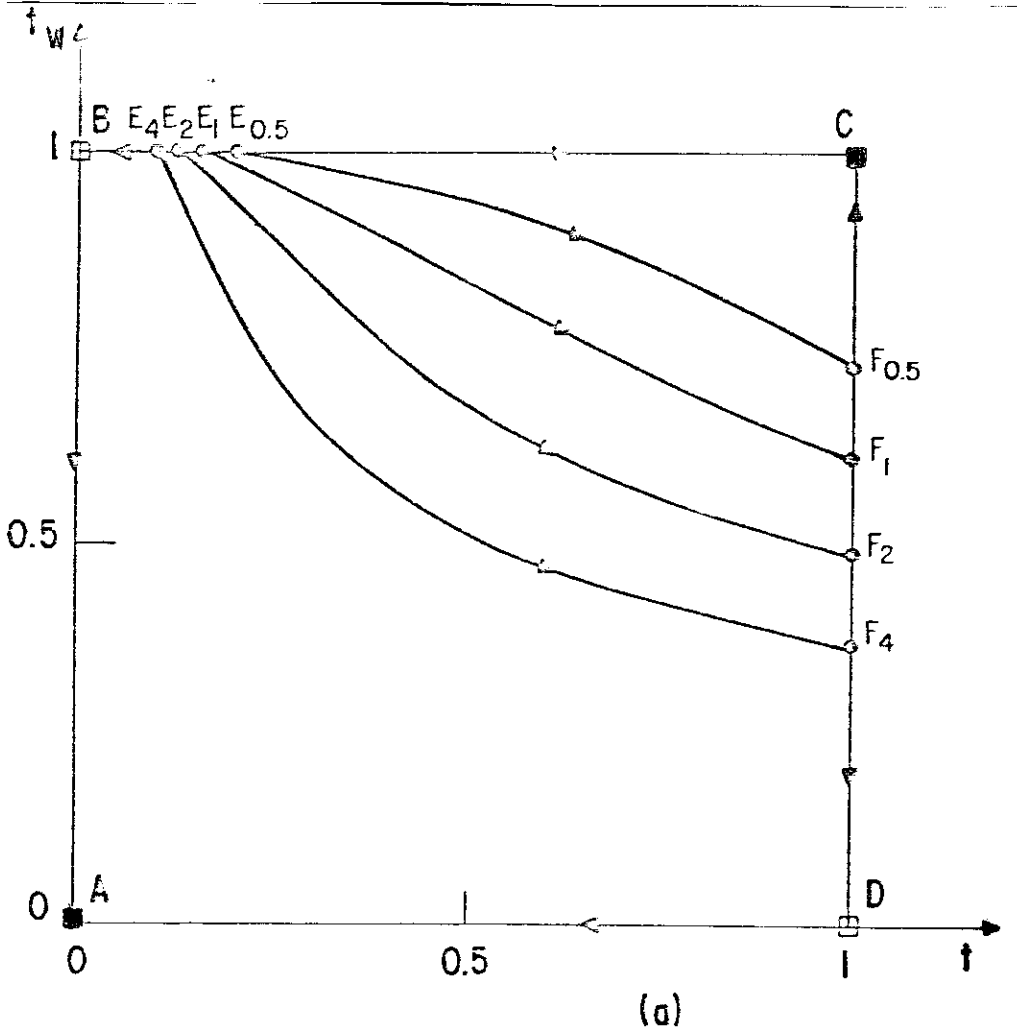


FIGURA 7.3.2a - Fronteiras críticas do SC com  $b=5$ ,  $\lambda=3$  no espaço  $t-t_W$  obtido com a HL da FIGURA 7.3.3 ( $E_4 \rightarrow q=4$ ,  $E_2 \rightarrow q=2$ ,  $E_1 \rightarrow q=1$  e  $E_{0.5} \rightarrow q=0,5$ )

Apresentamos na FIGURA 7.3.2 o diagrama de fase para o SC com  $b=5$ ,  $\lambda=3$ , para alguns valores de  $q$  correspondentes às aproximações de HL (veja FIGURA 7.3.3) e aos grafos tipos K e M.

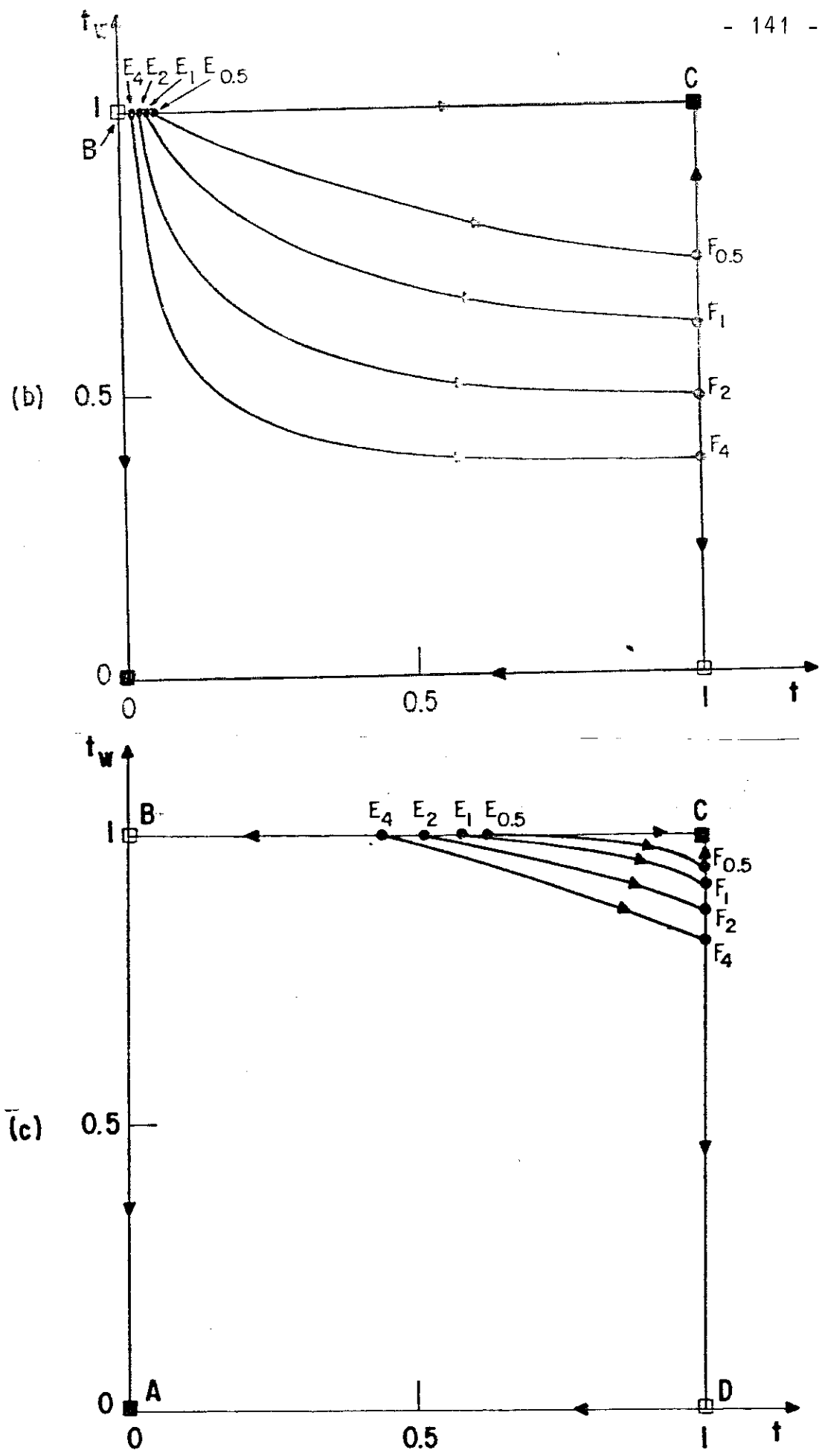


FIGURA 7.3.2 - Fronteiras cr ticas do SC para  $b=5, \lambda=3$  no espa o  $t-t_w$ ; (b) para grafos tipo K; (c) para grafos tipo M.



Na FIGURA 7.3.4 é apresentado o caso  $b=7$ ,  $\ell=3$ . Devido à dificuldade de cálculo não mostramos o diagrama de fase correspondente a HL. Alguns resultados quantitativos das FIGURAS 7.3.3 e 7.3.4 estão na TABELA 7.I.

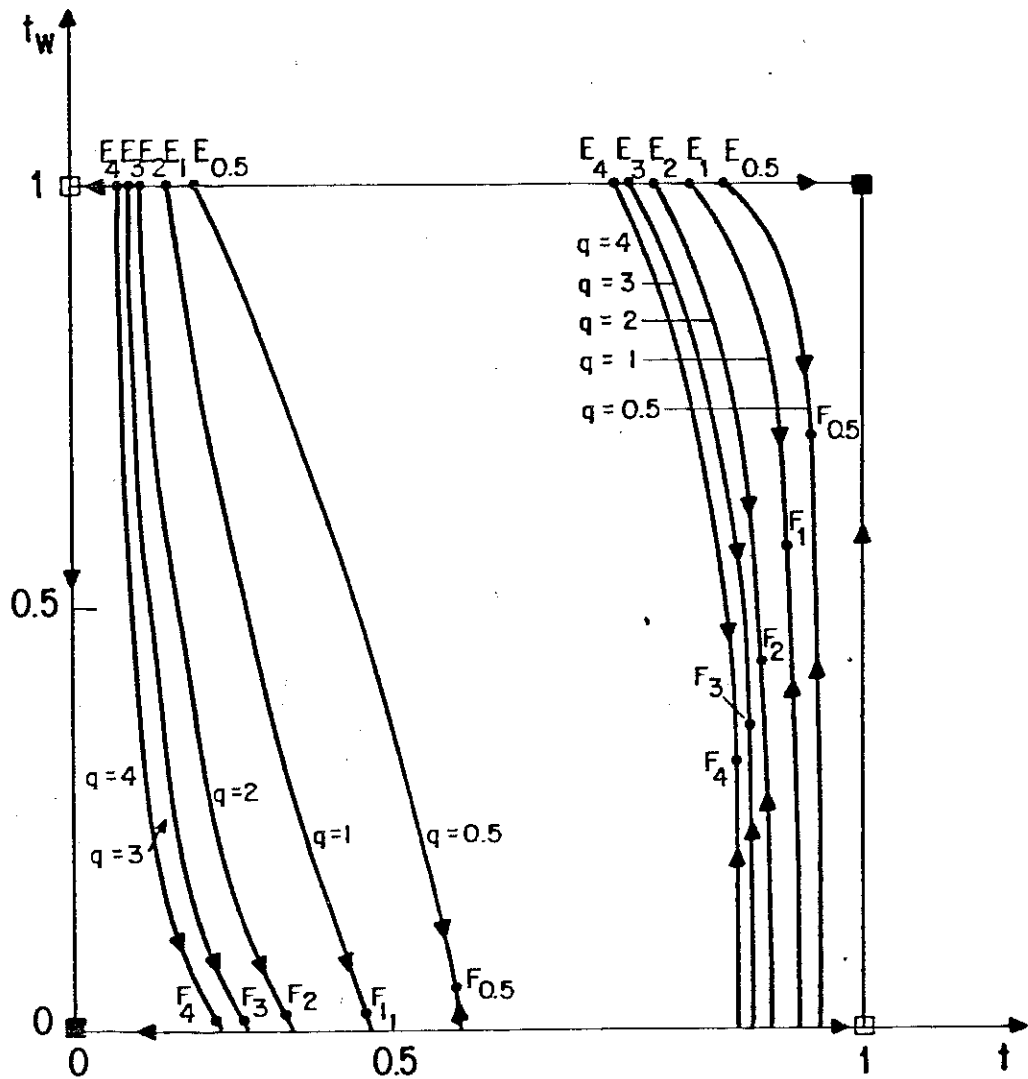


FIGURA 7.3.4 - Fronteira crítica do SC ( $b=7$ ,  $\ell=3$ ) no espaço  $t-t_w$  obtida através dos grafos do tipo K (lado esquerdo) e do tipo M (lado direito)

## 7.4 - Conclusões

Neste trabalho estudamos o comportamento crítico do modelo de Potts com  $q$  estados no tapete de Sierpinski (SC). Construímos uma rede hierárquica que mostrou ser conveniente, do ponto de vista quantitativo, para simular o tapete de Sierpinski. Analisamos as três classes especiais de tapete de Sierpinski (nominalmente (i)  $b = 3$ ,  $\ell = 1$ ; (ii)  $b = \ell + 2$ ,  $\ell \geq 2$  e (iii)  $b > \ell + 2$ ) que fornecem fronteiras críticas fisicamente diferentes; sendo que as nossas conclusões estão em perfeito acordo com as de Gefen e col<sup>166</sup>. Se observarmos as FIGURAS 7.3.1, 7.3.2 e 7.3.4, verificaremos que em todos os três casos o ponto A corresponde a  $t = t_W = 0$ , logo, sua temperatura é infinita e A é o ponto fixo paramagnético. O ponto B corresponde a  $t = 0$  e  $t_W = 1$ , e descreve uma situação anisotrópica, onde os sítios na borda dos buracos têm acoplamento infinito. O terceiro ponto C é o ponto isotrópico ferromagnético ( $T = 0$ ). O ponto D é também um ponto de temperatura nula com interações nulas nas bordas dos buracos. Para o caso  $b = \ell + 2$ , D é um ponto fixo e o eixo  $t(t_W = 0)$  forma um sub-espço invariante. Neste caso, fazendo  $t_W = 0$  a ordem de ramificação cai de  $R = \infty$  a um valor finito, isto é,  $R = 2, 3$  ou  $4$ , sem variar a dimensionalidade fractal. Portanto, não existe transição de fase à temperatura finita. Entretanto, se  $b > \ell + 2$ ,  $R$  é infinito e a situação é completamente diferente. Obtemos as fronteiras críticas para vários valores de  $q$  e observamos que seu comportamento qualitativo não se modifica ao variarmos o número de estados  $q$ . Nossos resultados são comparados (para  $q = 2$ ) com aqueles resultantes da

aproximação de movimento de ligações, obtidos por Gefen e col<sup>166</sup>, verificando que os da nossa HL devem ser muito melhores, no sentido de que a fronteira crítica exata deve estar muito próxima da nossa. Atualmente estamos estudando estas redes hierárquicas (HL) nos limites de baixa e alta temperaturas, com o objetivo de compararmos estes limites com os comportamentos assintóticos correspondentes à extensão analítica de redes hipercúbicas de dimensão não inteira  $D$ .

## CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES

Ao longo desta dissertação utilizamos a transformação de Grupo de Renormalização no Espaço Real, para estudar algumas consequências de defeitos da rede na criticalidade do modelo de Potts com  $q$  estados em redes hipercúbicas ( $d = 2, 3$ ). Nos capítulos 2 e 3 analisaram-se defeitos distribuídos uniformemente (invariantes sob translação) na rede; nos capítulos 4, 5 e 6 foram estudados defeitos concentrados em um plano. Finalmente, no capítulo 7, investigaram-se defeitos distribuídos de modo semelhante (invariantes por dilatação, mas não por translação).

A duas dimensões, na rede quadrada, conhece-se a temperatura crítica exata deste modelo, em função do número de estados  $q$ , sendo a "transmissividade térmica" crítica  $t_c$ , dada por  $1/(1 + \sqrt{q})$ . O nosso grupo de renormalização reproduz para o modelo de Potts puro com  $q$  estados, na rede quadrada, este resultado exato para a "transmissividade térmica". Considerando este modelo com ligações mistas temperadas na rede quadrada, conseguimos reproduzir vários resultados exatos conhecidos na literatura, tais como os pontos críticos correspondentes à percolação de ligações aos modelos de Potts puro e de igual concentração, bem como o comportamento assintótico da linha crítica associada ao caso de diluição de ligações no limite  $T \rightarrow 0$ , o expoente crítico de "crossover"  $\phi_p$  e o ponto crítico no limite  $q \rightarrow 1$  (isto é, satisfazendo ao teorema de Kasteleijn e Fortuin). Quando tomamos no limite  $p \rightarrow 1$ , a deriva

da da linha crítica associada com o caso particular de diluição de ligações, o presente tratamento de GR (com redes cujo fator linear de escala  $\tilde{b}=2$ ) leva a um erro que cresce de 0 a 1,5% quando  $q$  varia de 1 a 4. Entretanto, tal erro já era de se esperar, uma vez que este GR não reproduz o aparecimento da transição de fase de 1ª ordem (para o modelo de Potts puro, a duas dimensões, isto deve acontecer para  $q>4$ ). Em resumo, no que se refere ao estudo do modelo ferromagnético de Potts com  $q$  estados e ligações mistas na rede quadrada vale a pena destacar as seguintes melhorias apresentadas por este GR:

- (i) alta precisão na obtenção da temperatura crítica associada a valores arbitrários da concentração de ligações e da razão entre as mesmas.
- (ii) quando  $q$  ultrapassa um valor crítico  $q^*$  (para sistemas macroscópicos espera-se  $q^* = 2$ ), aparece um novo tipo de ponto fixo (nominalmente o ponto fixo randômico) através de uma bifurcação em forma de garfo, e conseqüentemente, o modelo randômico entra em uma nova classe de universalidade (desde que não se tenha atingido uma transição de 1ª ordem), a bifurcação ocorre para um valor de  $q$  diferente daquele para o qual o expoente crítico do calor específico  $\alpha_t$  é nulo, e portanto, o critério de Harris parece estar intimamente relacionado com o limite termodinâmico, e só poderia ser obtido no limite  $b \rightarrow \infty$ ;
- (iii) consistência com a teoria de Monte Carlo e resultados experimentais para o valor nulo do expoente crítico randômico quando  $q>q^*$ .



(iv) para  $q > q^*$  estabelecemos aproximadamente a dependência do expoente crítico de "crossover"  $\phi_t$  com o valor de  $q$ .

Continuando o trabalho sobre sistemas randômicos, estudamos a criticalidade do resistor (limite  $q \rightarrow 0$  do modelo de Potts) com ligações mistas ( $g_1$  e  $g_2$ ) na rede quadrada. Este trabalho foi muito estimulante, pois conseguimos reproduzir todos os resultados exatos conhecidos, com exceção das duas derivadas com respeito a  $g_1$  no limite  $g_1 = g_2$ , as quais, não dependem do tipo de rede (devido à complexidade das equações, não conseguimos obter estas derivadas). Com relação à condutividade para concentrações e razões  $g_1/g_2$  arbitrárias, acreditamos ser nossa proposta numérica uma excelente aproximação.

No que se refere ao tratamento de superfície livre e interface, melhoramos e completamos os resultados anteriormente obtidos com a técnica de GR. Inicialmente trabalhando com apenas dois parâmetros  $J_S$  (constante de acoplamento na superfície) e  $J_B$  (constante de acoplamento no restante do volume) e com o volume semi-infinito ferromagnético de Potts com  $q$  estados na rede cúbica simples, reproduzimos para  $\Delta \equiv J_S/J_B - 1$  (valor acima do qual existe ordem na superfície, mesmo que o volume esteja desordenado) um valor comparável com os resultados obtidos, para  $q = 2$ , pelos métodos de Monte Carlo e de séries. Entretanto, este resultado foi consideravelmente melhorado quando introduzimos um terceiro parâmetro  $J_I$  (constante de acoplamento entre a superfície e a primeira camada de volume). Obtemos ( $q = 2$ ) um resultado para  $\Delta_c$  que está

entre os valores de Sêrie e de Monte Carlo, o que é excelente levando-se em consideração a simplicidade do nosso GR. É importante ressaltar que em ambos os casos os pontos críticos exatos, no limite bidimensional, são reproduzidos, enquanto que no limite tridimensional eles são obtidos com um erro da ordem de 10% em relação aos melhores resultados disponíveis; além disso propomos valores para a fronteira crítica, que, acreditamos ser muito próximos dos valores reais. Apresentamos também a evolução de  $\Delta_C$  com  $q$ : resultados que acreditamos serem melhores do que os obtidos por Tsallis e Sarmento<sup>44</sup>.

No tratamento do problema de interface, ou seja, quando temos dois volumes semi-infinitos separados por uma superfície, obtemos para  $q = 2$   $\Delta_C = 0.07$  no caso em que os dois volumes tenham iguais constantes de acoplamento; este valor é muito próximo do obtido pela aproximação de campo médio. Neste problema (para constantes de acoplamentos diferentes nos volumes)<sup>46</sup> o diagrama de fases apresenta, para todos os valores de  $q$ , quatro fases fisicamente diferentes, ou seja, a ferromagnética em um dos volumes, a ferromagnética em ambos os volumes, a ferromagnética apenas na interface e a paramagnética. As fases paramagnética, volume simples ferromagnético e superfície ferromagnética juntam-se em uma linha multicrítica, cuja classe de universalidade é a correspondente à superfície livre (se as constantes de acoplamento são diferentes nos volumes). Todos os resultados se mantêm estritamente para transições de segunda ordem (ou no mínimo contínuas, isto é, para  $0 < q < 4$  para duas dimensões, e  $0 < q < q_C$  (com  $q_C \approx 3$ ))

para três dimensões. Entretanto, sempre que a transição é de primeira ordem, o calor latente é bem pequeno no intervalo  $q \in [0,4]$ , por isso, vale a pena estendermos nossa discussão até  $q = 4$ . Para  $q \neq 2$ , pelo que sabemos, é a primeira vez que o diagrama de fases é apresentado com três diferentes constantes de acoplamento, não temos portanto, como comparar nossos resultados. No caso  $J_{\perp 1} = J_1 = J_2 = J_{\perp 2}$ , nossos resultados apresentam uma diferença de ordem de 0,1% em relação aos valores obtidos por da Silva e col<sup>46</sup>.

Estudamos ainda uma situação particularmente interessante, onde temos um volume semi-infinito cúbico simples ferromagnético de Ising, limitado por uma superfície quadrada Heisenberg anisotrópica. O diagrama de fase é semelhante ao obtido quando, tanto a superfície livre quanto o volume semi-infinito são ferromagnetos de Ising. Mas agora, o ponto crítico  $\Delta_c$ , comum às três fases, decresce lenta e gradualmente com a variação da constante de anisotropia  $\eta$  no intervalo de 0 a 1, sendo que o seu mínimo corresponde ao caso de Ising ( $\eta=1$ ). Por outro lado, apresenta um valor máximo quando a superfície é totalmente isotrópica ( $\eta=0$ ). Isto significa que, apesar do volume estar desordenado, existe uma temperatura crítica finita não nula abaixo da qual a superfície Heisenberg isotrópica está ordenada e o volume está desordenado. Isto aparentemente parece contrariar o teorema de Mermin e Wagner<sup>178</sup>; gostaríamos, entretanto, de ressaltar que o mesmo é válido somente se a superfície não estiver

conectada ao volume, cuja simetria magnética corresponde a um grupo discreto de simetria (interação de Ising), no nosso caso, os spins da superfície podem interagir entre si através das primeiras camadas do volume. Um problema por si próprio interessante é a investigação do que acontece, no caso do volume ser também Heisenberg anisotrópico; particularmente quando ambos forem isotrópicos ( $\eta = 0$ ); existe fase de superfície? Atualmente estamos estudando este problema e seus resultados serão publicados oportunamente.

Finalmente estudamos o modelo de Potts em redes fractais que possuem ordens de ramificação,  $R$ , infinita. A rede fractal escolhida foi o tapete de Sierpinski. Construímos, a partir do tapete de Sierpinski, uma rede hierárquica (HL) que foi renormalizada, de modo a obtermos as fronteiras críticas e os  pontos críticos. Além desta HL foram utilizadas duas outras redes hierárquicas que resultam do emprego do movimento de ligações de Migdal Kadanoff<sup>55</sup>, estas foram denominadas tipo M e K (sendo esta última utilizada para o modelo de Ising no tapete de Sierpinski (SC) por Gefen e col<sup>166</sup>). Mostramos que os limites de alta e baixa temperaturas de nossa HL fornecem exatamente os grafos tipo M e K. Analisamos e comparamos as fronteiras críticas obtidas com os três tipos de rede e fazemos a previsão de que o resultado real para a fronteira crítica do SC deva estar muito próximo do obtido pela HL. Deste trabalho inicial, sobressaem-se duas interessantes questões, ou sejam: a análise dos limites de alta e baixa temperatu

ras da HL quando o tamanho dela vai para o infinito, verificando se eles coincidem com os comportamentos de alta e baixa temperaturas obtidos por extensão analítica para  $d < 2$  da rede hipercubica; finalmente verificaremos o que acontece com a fronteira crítica do SC quando fazemos diluição das ligações.

Com relação ao estudo do Modelo de Potts em superfície e interfaces gostaríamos de ressaltar que como extensões naturais deste trabalho estariam:

- i) Estudar o caso em que dois volumes semi-infinitos com constantes de acoplamentos  $J_1$  e  $J_2$  estão separados por uma interface com constante de acoplamento  $J_S$  (ver Ref. 46).
- ii) Estudar o problema de diluição na superfície livre, enquanto que o volume não está diluído; como também com o volume diluído.
- iii) Estudar o caso (i) onde as ligações na interface estão diluídas.

Alguns destes estudos já estão sendo feitos em nosso grupo.

Finalmente, cálculos semelhantes podem ser feitos para outros tipos de Hamiltoniano ou ainda, estudar os efeitos de um campo externo aplicado.

APÊNDICE A

Cálculo da transmissividade equivalente da ponte de Wheatstone com cinco ligações diferentes.

Seja o grafo da FIGURA A1, nós desejamos aqui, calcular a transmissividade equivalente  $t'$  utilizando o método do corte-colapso (BCM)

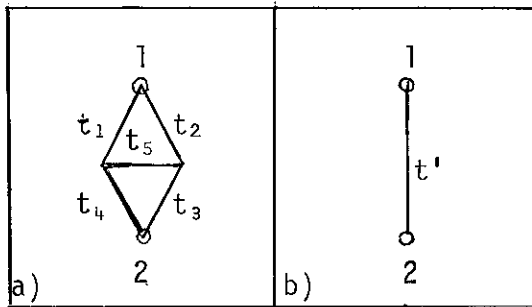


FIGURA A1 - Grafos com dois terminais:  
(a) ponte de Wheatstone,  $b=2$ ;  
(b)  $b=1$

O método BCM consiste em se reduzir o grafo dado a grafos onde aparecem apenas ligações em série e paralelo. Para fazermos isto, vamos eliminar e colapsar a ligação  $t_5$ , os grafos resultantes são os da FIGURA A2.

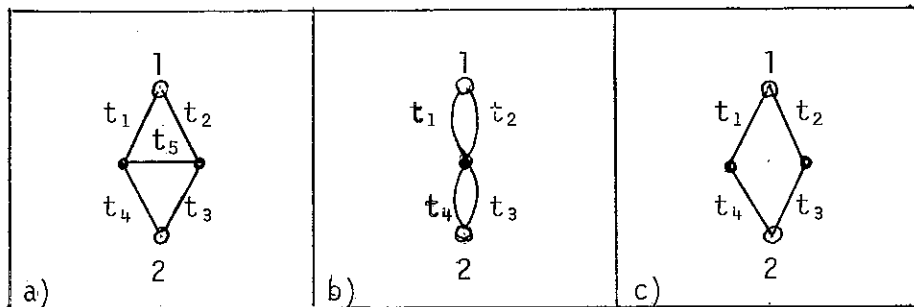


FIGURA A2 - Grafos com dois terminais resultante do colapso da ligação  $t_5$ (b) e de sua eliminação (c), no grafo da Ponte de Wheatstone (a).

Para resolvermos o grafo da FIGURA A 2 b somamos inicialmente as ligações ( $t_1$  e  $t_2$  ,  $t_3$  e  $t_4$ ) em paralelo; isto nos dá (FIGURA A 3) (Empregamos para isto as eq. (1.2.27) e (1.2.28)):

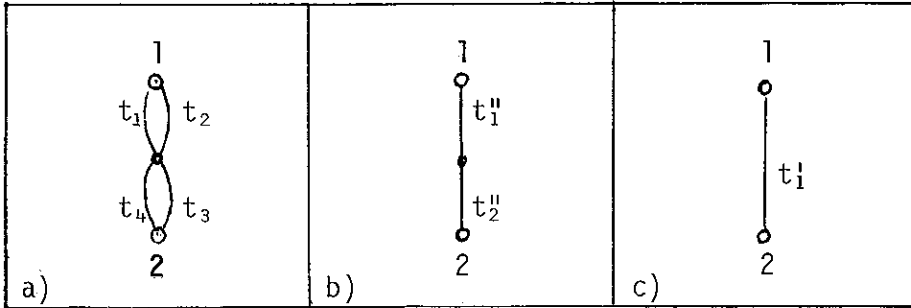


FIGURA A 3 - Passos sucessivos na resolução do grafo (a)

$$t_1'' = \frac{t_1+t_2+ (q-2) t_1 t_2}{1+(q-1) t_1 t_2} \quad (A.1)$$

$$t_2'' = \frac{t_3+t_4+ (q-2) t_3 t_4}{1+(q-1) t_3 t_4} \quad (A.2)$$

E agora, resolvemos as ligações ( $t_1''$  e  $t_2''$ ) em série: eq. (1.2.26).

$$t_1' = t_1'' t_2'' = [t_1 t_4 + t_1 t_3 + t_2 t_4 + t_3 t_4 + (q-2)(t_1 t_2 t_4 + t_1 t_2 t_3 + t_1 t_3 t_4 + t_2 t_3 t_4 + (q-2)^2 t_1 t_2 t_3 t_4)] / [1+(q-1)(t_1 t_2 + t_3 t_4 + (q-1)^2 t_1 t_2 t_3 t_4)] \quad (A.3)$$

Vamos resolver agora o grafo da FIGURA A 2 c, para isto somamos inicialmente as ligações em série: (FIGURA A 4).

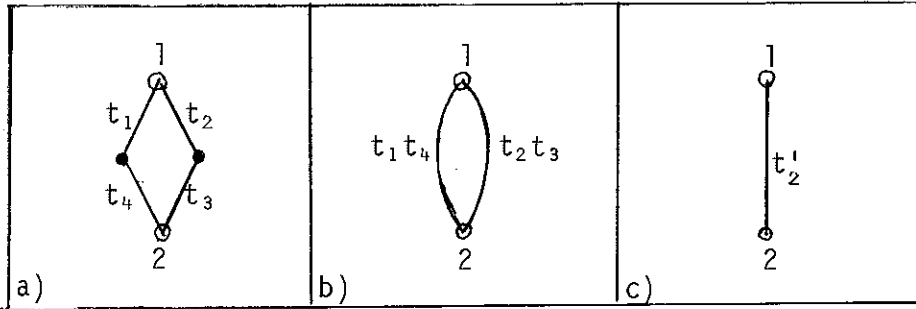


FIGURA A4 - Passos sucessivos na resolução do grafo (a)

e depois resolvemos as ligações em paralelo FIGURA A4b, o que nos dá:

$$t'_2 = \frac{t_1 t_4 + t_2 t_3 + (q-2) t_1 t_2 t_3 t_4}{1 + (q-1) t_1 t_2 t_3 t_4} \quad (A.4)$$

O numerador da transmissividade equivalente de acordo com a eq. (1.2.32) será dado por:

$$\begin{aligned} N\{t\} = & (1-t_3) [t_1 t_4 t_2 t_3 + (q-2) t_1 t_2 t_3 t_4] + t_5 [t_1 t_3 \\ & + t_2 t_3 + t_1 t_4 + t_2 t_4 + (q-2)(t_1 t_2 t_4 + t_1 t_2 t_3 + t_1 t_3 t_4 + t_2 t_3 t_4) + \\ & (q-2)^2 t_1 t_2 t_3 t_4] \end{aligned} \quad (A.5)$$

operando convenientemente nesta equação, podemos colocá-la na forma mais simplificada:

$$\begin{aligned} N\{t\} = & t_1 t_2 + t_3 t_4 + t_1 t_3 t_5 + t_2 t_4 t_5 + (q-2)(t_1 t_2 t_3 t_4 \\ & + t_1 t_2 t_3 t_5 + t_1 t_2 t_4 t_5 + t_1 t_3 t_4 t_5 + t_2 t_3 t_4 t_5) + (q-2)(q-3) \\ & \times t_1 t_2 t_3 t_4 t_5 \end{aligned} \quad (A.6)$$



e de acordo com a eq. (1.2.33) o denominador da transmissividade equivalente será:

$$D\{t\} = (1-t_5) [1+(q-1)t_1 t_2 t_3 t_4] + t_5 [1+(q-1)(t_1 t_2 + t_3 t_4 + (q-2)^2 t_1 t_2 t_3 t_4)] \quad (A.7)$$

Reduzindo os termos semelhantes, obtemos

$$D\{t\} = 1+(q-1)(t_1 t_3 t_5 + t_2 t_4 t_5 + t_1 t_2 t_3 t_4) + (q-1)(q-2)t_1 t_2 t_3 t_4 t_5 \quad (A.8)$$

Logo, a transmissividade equivalente do grafo da Fig. A.1 será:  
Eq.(1.2.29)

$$t' = \frac{N\{t\}}{D\{t\}}$$

ou seja:

$$t' = \frac{[t_1 t_2 + t_3 t_4 + t_1 t_3 t_4 + t_2 t_4 t_5 + (q-2)(t_1 t_2 t_3 t_4 + t_1 t_2 t_3 t_5 + t_1 t_2 t_4 t_5 + t_1 t_3 t_4 t_5 + t_2 t_3 t_4 t_5) + (q-2)(q-3)t_1 t_2 t_3 t_4 t_5]}{[1+(q-1)(t_1 t_3 t_5 + t_2 t_4 t_5 + t_1 t_2 t_3 t_4) + (q-1)(q-2)t_1 t_2 t_3 t_4 t_5]} \quad (A.9)$$

que é a eq. (2.20) substituindo t por r.

APÊNDICE B

Cálculo da condutância equivalente da ponte de Wheatstone totalmente anisotrópica.

Consideremos a ponte de Wheatstone (FIGURA B1), nosso objetivo é calcular a condutância equivalente deste grafo utilizando o método BCM.

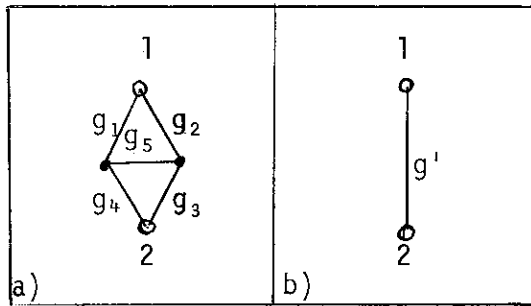


FIGURA B1 - Grafos de dois terminais  
(a) Ponte de Wheatstone ( $b=2$ )  
(b) Condutância equivalente ( $b-1$ )

Inicialmente nós cortamos e colapsamos a condutância  $g_5$  (equivalente a fazer  $g_5 = 0$  e  $g_5 = \infty$ ), e obtemos os grafos da FIGURA B2. Ficamos, portanto, reduzidos à soma de condutâncias em série e paralelo. A condutância equivalente do grafo da FIGURA B2a é dada por:

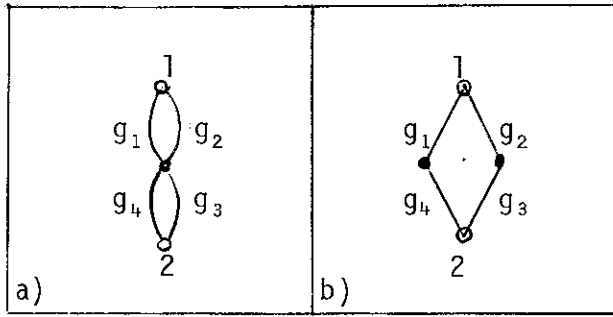


FIGURA B2 - (a) Ponte de Wheatstone colapsada  
(b) Cortada

$$g_c = \frac{g_1 g_3 + g_1 g_4 + g_2 g_3 + g_2 g_4}{g_1 + g_2 + g_3 + g_4} \quad (B.1)$$

enquanto a condutância equivalente do grafo da FIGURA B.2b é dada por:

$$g_b = \frac{g_1 g_2 g_3 + g_1 g_2 g_4 + g_1 g_3 g_4 + g_2 g_3 g_4}{g_1 g_2 + g_1 g_3 + g_2 g_4 + g_3 g_4} \quad (B.2)$$

O numerador da condutância equivalente será dado por:

$$N \{ g \} = N^b \{ g' \} + g_5 N^c \{ g' \} \quad (B.3)$$

logo temos:

$$N \{ g \} = g_1 g_2 g_3 + g_1 g_2 g_4 + g_1 g_3 g_4 + g_2 g_3 g_4 + g_5 (g_1 g_3 + g_1 g_4 + g_2 g_3 + g_2 g_4) \quad (B.4)$$

O denominador da condutividade equivalente será dado por:

$$D \{ g \} = D^b \{ g' \} + g_5 D^c \{ g' \} \quad (B.5)$$

Logo, usando as equações (B.1) e (B.3), temos:

$$D \{ g \} = g_1 g_2 + g_1 g_3 + g_2 g_4 + g_3 g_4 + g_5 (g_1 + g_2 + g_3 + g_4) \quad (B.6)$$

Finalmente a condutância equivalente será:

$$g_{eq} = \frac{N \{ g \}}{D \{ g \}} \quad (B.7)$$

Usando as equações (B.6) e (B.4) temos:

$$g_{eq} = \frac{g_1 g_2 g_3 + g_1 g_2 g_4 + g_1 g_3 g_4 + g_2 g_3 g_4 + g_5 (g_1 g_3 + g_1 g_4 + g_2 g_3 + g_2 g_4)}{g_1 g_2 + g_1 g_3 + g_2 g_4 + g_3 g_4 + g_5 (g_1 + g_2 + g_3 + g_4)} \quad (B.8)$$

Observemos que a eq. (B.8) é igual a que obteríamos se resolvíssemos a ponte de Wheatstone utilizando as leis de Kirchhoff e a eq. (3.8) do Cap. 3.

Esta equação é a eq. (3.8) do Capítulo 3.

APÊNDICE C

Consideremos um arranjo em série de três ligações  $(K, \eta)$  e quatro sítios (veja FIGURA C1), que é caracterizado pelo Hamiltoniano (sem dimensão):

$$\mathcal{H}_{1234} = K[(1-\eta)(\sigma_1^X \sigma_3^X + \sigma_1^Y \sigma_3^Y + \sigma_3^X \sigma_4^X + \sigma_3^Y \sigma_4^Y + \sigma_4^X \sigma_2^X + \sigma_4^Y \sigma_2^Y) + (\sigma_1^Z \sigma_3^Z + \sigma_3^Z \sigma_4^Z + \sigma_4^Z \sigma_2^Z)] \quad (C.1)$$

Este arranjo será renormalizado em uma ligação simples, cujo Hamiltoniano sem dimensão é dado por:

$$\mathcal{H}_{12}^S = K_0^S + K^S [(1-\eta^S)(\sigma_1^X \sigma_2^X + \sigma_1^Y \sigma_2^Y) + \sigma_1^Z \sigma_2^Z] \quad (C.2)$$

onde  $K_0^S$ ,  $K^S$  e  $\eta^S$  são as funções de  $(K, \eta)$  que nós queremos determinar, impondo a condição de que

$$e^{\mathcal{H}_{12}^S} = \text{Tr}_{34} e^{\mathcal{H}_{1234}} \quad (C.3)$$

o  $\text{Tr}_{34}$  é o traço sobre os sítios internos do arranjo em série.

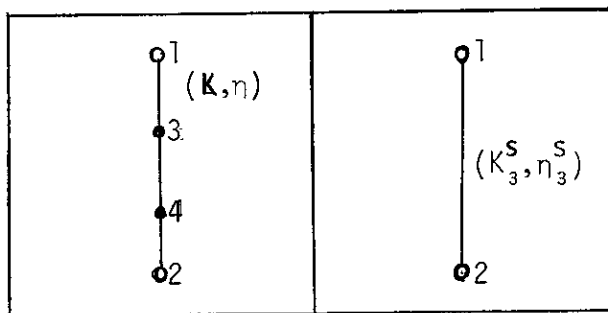


FIGURA C1 - Transformação de grupo de renormalização para um arranjo de três ligações em série.

Mostraremos os passos intermediários para o cálculo que segue ao longo da linha das Refs. 73 e 106. Primeiro expandimos ambos os lados da eq. (C.3), e obtemos:

$$e \mathcal{H}_{12}^S = a^S + b_{12}^S (\sigma_1^X \sigma_2^X + \sigma_1^Y \sigma_2^Y) + c_{12}^S \sigma_1^Z \sigma_2^Z \quad (C.4)$$

e

$$e \mathcal{H}_{1234} = a + \sum_{i < j} [b_{ij} (\sigma_i^X \sigma_j^X + \sigma_i^Y \sigma_j^Y) + c_{ij} \sigma_i^Z \sigma_j^Z] + \sum_{\substack{i < j \\ k < \ell \\ (i,j) \neq (k,\ell)}} [d_{ij} (\sigma_i^X \sigma_j^X + \sigma_i^Y \sigma_j^Y) \sigma_k^Z \sigma_\ell^Z] + e (\sigma_1^X \sigma_2^X + \sigma_1^Y \sigma_2^Y) (\sigma_3^X \sigma_4^X + \sigma_3^Y \sigma_4^Y) + f \sigma_1^Z \sigma_2^Z \sigma_3^Z \sigma_4^Z \quad (C.5)$$

Substituindo estas expressões na eq.(C.3), obtemos

$$a^S = 4a \quad (C.6)$$

$$b_{12}^S = 4b_{12} \quad (C.7)$$

$$c_{12}^S = 4c_{12} \quad (C.8)$$

Expressando  $\mathcal{H}_{12}^S$  na base que o diagonaliza., podemos facilmente encontrar  $K_0^S = K_0^S(a^S, b_{12}^S, c_{12}^S)$ ,  $K_3^S = K_3^S(a^S, b_{12}^S, c_{12}^S)$  e  $\eta_3^S = \eta_3^S(a^S, b_{12}^S, c_{12}^S)$ . Diagonalizando  $\mathcal{H}_{1234}$  podemos, de modo similar, achar  $a = a(K, \eta)$ ,  $b_{12} = b_{12}(K, \eta)$  e  $c_{12} = c_{12}(K, \eta)$ . Todas estas relações e mais as eqs. (C.6)-(C.8) fornecem as relações  $K_0^S = K_0^S(K, \eta)$ ,  $K_3^S = K_3^S(K, \eta)$  e  $\eta_3^S = \eta_3^S(K, \eta)$  que estamos procurando. As expressões assim obtidas são:

$$k^S = \frac{1}{4} \ln \frac{F_3^2}{F_1 F_2} \quad (C.9)$$

$$\eta^S = 1 - \frac{\ln(F_1/F_2)}{\ln(F_3^2/F_1 F_2)} \quad (C.10)$$

onde:

$$F_1 = \frac{1}{\lambda_1} \left[ (\lambda_1 - \omega + K) e^{\omega + \lambda_1} + (\lambda_1 + \omega - K) e^{\omega - \lambda_1} \right] + \frac{(\lambda_2 - K - \omega)^2}{4\lambda_2 (\lambda_2 - K)} e^{-K + 2\lambda_2} + \frac{(\lambda_2 + K + \omega)^2}{4\lambda_2 (\lambda_2 + K)} e^{-K - 2\lambda_2} + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{b_i + 1}{x_i} \right)^2 e^{E_i} \quad (C.11)$$

$$F_2 = \frac{1}{\lambda_1} \left[ (\lambda_1 + \omega + K) e^{\omega + \lambda_1} + (\lambda_1 - \omega - K) e^{\omega - \lambda_1} \right] + \frac{(\lambda_2 - K + \omega)^2}{4\lambda_2 (\lambda_2 - K)} e^{-K + 2\lambda_2} + \frac{(\lambda_2 + K - \omega)^2}{4\lambda_2 (\lambda_2 + K)} e^{-K - 2\lambda_2} + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{b_i - 1}{x_i} \right)^2 e^{E_i} \quad (C.12)$$

$$F_3 = \frac{\lambda_3 - \omega - K}{2\lambda_3} e^{-\omega + \lambda_3} + \frac{\lambda_3 + \omega + K}{2\lambda_3} e^{-\omega - \lambda_3} + \frac{\lambda_1 + \omega - K}{2\lambda_1} e^{\omega + \lambda_1} + \frac{\lambda_1 - \omega - K}{2\lambda_1} e^{\omega - \lambda_1} + \frac{e^{-K}}{2} + \sum_{i=1}^3 \left( \frac{a_i}{x_i} \right)^2 e^{E_i} \quad (C.13)$$

onde:

$$\omega \equiv K(1 - \eta) \quad (C.14)$$

$$\lambda_1 = \left[ (K - \omega)^2 + K \omega^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (C.15)$$

$$\lambda_2 = [K^2 + \omega^2]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{C.16})$$

$$\lambda_3 = [(K + \omega)^2 + 4\omega^2]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{C.17})$$

$$a_i = 2 \left( \frac{E_i - K}{E_i + K} \right) \quad (i=1,2,3) \quad (\text{C.18})$$

$$b_i = \frac{E_i - K}{2\omega} \quad (i=1,2,3) \quad (\text{C.19})$$

$$x_i = [2(1 + a_i^2 + b_i^2)]^{\frac{1}{2}} \quad (i=1,2,3) \quad (\text{C.20})$$

onde os  $E_i$  são as raízes de uma equação cúbica, e são dadas por:

$$E_1 = \alpha \cos \frac{\phi}{3} - K \quad (\text{C.21})$$

$$E_2 = -\alpha \cos \frac{\phi + \pi}{3} - K \quad (\text{C.22})$$

$$E_3 = -\alpha \cos \frac{\phi - \pi}{3} - K \quad (\text{C.23})$$

onde

$$\alpha \equiv 4 \left[ (K^2 - 5\omega^2) / 3 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{C.24})$$

e

$$\phi \equiv \arccos \left[ \frac{-2 \times 3^{3/2} K \omega^2}{(K^2 + 5\omega^2)^{3/2}} \right] \quad (\text{C.25})$$



REFERÊNCIAS

- 1 - Lucrécio Canes: De Rarum Natura, Sec. IAC versão Inglesa por Th. Creech, Londres, (1714) 906.
- 2 - Plínio, citado em W. Gilbert: De Magnet, tradução, Gilbert Club, Londres, (1900), ed. revisada, Basic Books, Nova Iorque, (1958)8.
- 3 - Curie P., Ann. Chem. Phys., 5, (1895) 289.
- 4 - Langevin P., J. Physique Theo. Appl., 4, (1905) 678.
- 5 - Weiss P., Comptes Rendus, 143, (1906) 1136; J. Physique Theo. Appl., 6, (1907) 661
- 6 - Lenz W., Physikz, 21, (1920) 613
- 7 - Brush S.C., Rev. Mod. Phys., 39, (1967) 883
- 8 - Ising E., Z. Physik, 31, (1925) 253
- 9 - Peierls R., Proc. Cambridge Phyl. Soc., 32, (1936) 477
- 10 - Onsager L., Phys. Rev., 65, (1944) 117
- 11 - Potts R.B., Proc. Cambridge Phyl. Soc., 48, (1952) 106
- 12 - de Jongh L.J. e Miedema A.R., Adv. Phys., 23, (1974) I.
- 13 - Wielinga R.F., Blöte H.W.J., Roest J.A. e Huiskamp W.J., Physika, 34, (1967) 223
- 14 - Mess K.W., Langendij K.E., Curtis D.A. e Huiskamp W.J., Physika, 34, (1967) 126
- 15 - Wright J.C., Moos H.W., Colwell J.H., Magnum B.W. e Thornton D.D., Phys. Rev. B, 3, (1971) 843
- 16 - Mukamel D., Fisher M.E. e Domany E., Phys. Rev. Lett., 37, (1976) 565
- 17 - Domany E., Schick M., Walter J.S. e Griffiths R.B., Phys. Rev. B, 18, (1978) 2209.
- 18 - Domany E. e Riedel E.K., J. Appl. Phys., 49, (1978) 1315
- 19 - Domany E. e Schick M., Phys. Rev. B, 20, (1979) 3828
- 20 - Domany E., Schnidman Y. e Mukamel D., J. Phys. C. 15, (1982)L1495

- 21 - Lubensky T.C. e Isaacson J., Phys. Rev. Lett., 41, (1978) 829
- 22 - Wu F. Y., Rev. Mod. Phys., 54, (1982) 235
- 23 - Kasteleyn P.W. e Fortuin C.M., J. Phys. Soc. Jap. (suppl.).  
26, (1969) 11.
- 24 - Fortuin C.M. e Kasteleyn P.W., Physica, 57, (1972) 536
- 25 - Mills D.L., Phys. Rev. B, 3, (1971) 3887.
- 26 - Mills D.L., Phys. Rev. B, 8, (1973) 4424
- 27 - Weiner R.A., Phys. Rev. B, 8, (1973) 4427
- 28 - Sarmiento E.F., Honmura R., Fittipaldi I.P. e Kaneyoshi T.,  
in Proc. of the Latin-American Colloquium of Surface  
Physics, Brasil (1981)
- 29 - Binder K. e Landau D.P., Surf. Sci., 61, (1976) 577
- 30 - Svrakic N. M. e Wortis M., Phys. Rev. B, 15, (1977) 396
- 31 - Burkhardt T.W. e Eisenriegler E., Phys. Rev. B, 16, (1977) 3213
- 32 - Burkhardt T.W. e Eisenriegler E., Phys. Rev. B, 17, (1978) 3181
- 33 - Bray A.J. e Moore M.A., J. Phys. A, 10, (1977) 1927
- 34 - Svrakic N.M., Pandit R. e Wortis M., Phys. Rev. B, 22,  
(1980) 1286
- 35 - Dunfield L.G. e Noolandi J., Phys. Rev. B, 22, (1980) 2586
- 36 - Lipowsky R. e Wagner H., Z. Phys. B, 42, (1981) 355
- 37 - Nagai O. e Toyonaga M., J. Phys. C, 14, (1981) L545
- 38 - Wortis M. e Svrakic N.M., IEE Trans. Mag., 18, (1982) 721
- 39 - Lipowsky R., Z. Phys. B, 45, (1982) 229
- 40 - Lipowsky R., J. Phys. A, 15, (1982) L195
- 41 - Burkhardt T.W. e Eisenriegler E., Phys. Rev. B, 24, (1981)  
1236
- 42 - Lam P.M. e Zhang Z.Q., Z. Phys. B, 52, (1983) 315
- 43 - Lam P.M. e Zhang Z.Q., Z. Phys. B, 55, (1984) 371
- 44 - Tsallis C. e Sarmiento E.F., J. Phys. C, 8, (1985) 2777

- 45 - Costa U.M.S., Tsallis C. e Sarmiento E.F., J.Phys.C (1985), em impressão
- 46 - da Silva L.R., Costa U.M.S. e Tsallis C., J.Phys.C (1985), em impressão
- 47 - Binder K., em "Phase Transition and Critical Phenomena",  
(Academic Press Inc., London) Vol. 8, (1983) 1; editado  
por C. Domb e J.L. Lebowitz.
- 48 - Rau C., J. Magn. Mag. Mat., 30, (1982) 141
- 49 - Rau C. e Eichner S., Phys. Rev. Lett., 47, (1981) 939
- 50 - Gidley D.W., Köymen A.R. e Capehart T.W., Phys. Rev. Lett.,  
49, (1982) 24.
- 51 - Alvarado S.F., Campagna M. e Hopster H., Phys. Rev. Lett.,  
48, (1982a) 51
- 52 - Alvarado S.F., Campagna M., Ciccacci F. e Hopster H., J.  
Appl. Phys., 53, (1982b) 7920
- 53 - Felcher G.P., Phys. Rev. B, 24, (1981) 1595
- 54 - Tsallis C. e Levy S.V.F., Phys. Rev. Lett., 47, (1981) 950;  
Tsallis C., Physics Reports (em preparação).
- 55 - Kadanoff L.P., Ann. Phys. (N.Y.) 100, (1976) 359
- 56 - Starling S.G. e Woodall A.J. "Electricity and Magnetism".  
Longman, London (1953)
- 57 - Landau L.D. e Lifshitz E.M. "Statistical Physics", Pergamon,  
London (1958)
- 58 - Stanley E.H. "Introduction to Phase Transitions and Critical  
Phenomena" Clarendon Press - Oxford - (1971)
- 59 - Pfeuty P. e Toulouse G. "Introduction to the Renormalization  
Group and to Critical Phenomena", John Wiley & Sons,  
London (1977)
- 60 - Gibbs J.W. (1902), "Elementary Principles in Statistical  
Mechanics". Reproduzido por Dover, New York, 1960
- 61 - Wilson K.G., Phys. Rev. B, 4, (1971a,b) 3174, 3184
- 62 - Fisher M.E., Rev. Mod. Phys., 46, (1974) 597
- 63 - Ma S.K., Rev. Mod. Phys., 45, (1973) 589

- 64 - Wegner F.J.. "Critical Phenomena and the Renormalization Group", VIII Finish Summer School in Theoretical Solid State Physics, University of Helsinki. (1973); "Lecture Notes in Physics", Springer - Verlag Berlin, 37, (1975), 171.
- 65 - Wilson K.G. e Kogut J., Phys. Rep., 12, (1974) 75
- 66 - Vários autores, "Phase Transition and Critical Phenomena", 6, (Academic Press Inc., London) editado por C. Domb e M.S. Green (1976)
- 67 - Kadanoff L.P., Physics, 2, (1966) 263
- 68 - Migdal A.A., Sov. Phys. JETP, 42, (1976) 743; Kadanoff L.P., Ann. Phys. (NY), 100, (1976) 359
- 69 - Tsallis C., Coniglio A. e Redner S., J. Phys. C: Solid State Phys., 16, (1983) 4339
- 70 - Mariz A.M., Tsallis C. e Fulco P., Phys.Rev. B (1985), em impressão  
Tsallis C. e Souletie J., submetido ao J.Phys. A (1985)
- 71 - de Magalhães A.C.N., tese de doutorado em Física (1983)-  
C.B.P.F.
- 72 - Levy S.V.F., Tsallis C. e Curado E.M.F., Phys. Rev. B, 21,  
(1980) 2991
- 73 - Mariz A.M., Tsallis C. e Caride A.O., J.Phys. C, 18 (1985) 4189
- 74 - Costa U.M.S. e Tsallis C., Physica, 128A (1984) 207
- 75 - Adachi K., Sato K., Matsuura M. e Ohashi M., P. Phys. Soc. Jap., 29, (1970) 323
- 76 - Bevaart L., Frikkee E., Lebesque J.V. e de Jongh L.J., Phys. Rev. B, 18, (1978) 3376
- 77 - Wood T.E. e Day P., J. Phys. C, 10, (1977) L 333
- 78 - Southern B.W. e Thorpe M.F., J. Phys. C, 12, (1979) 5351
- 79 - Turban L., J. Phys. C, 13, (1980) L13
- 80 - Tsallis C. e de Magalhães A.C.N., J. Physique, 42, (1981)  
L227
- 81 - Tsallis C., J. Phys. C, 14, (1981) L85

- 82 - de Magalhães A.C.N. e Tsallis C., J. Phys., 42, (1981) 1515
- 83 - Sarbach S. e Wu F.Y., Z. Phys. B, 44, (1981) 309
- 84 - Tsallis C. e dos Santos R.J.V., J.Phys. A, 16 (1983) 360
- 85 - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., J. Phys. C, 13, (1979) L239
- 86 - Kinzel W. e Domany E., Phys. Rev. B, 23, (1981) 3421
- 87 - Harris A.B., J. Phys. C, 17, (1974) 1671
- 88 - Novotny M.A. e Landau D.P., Phys. Rev. B, 24, (1981) 1468
- 89 - Roelofs L.D., Bartelt N.C. e Einstein T.L., Phys. Rev. Lett.,  
47, (1981) 1348
- 90 - Family F., Phys. Rev. Lett., 48, (1982) 367
- 91 - Baxter R.J., J. Phys. C, 6, (1973) L445  
Nienhuis B., Berker A.N., Riedel E.K. e Schick M., Phys.  
Rev. Lett., 43, (1979) 737
- 92 - den Nijs M.P.M., J.Phys. A, 12, (1979) 1857  
Black J. e Emery V.J., Phys. Rev. B, 23, (1981) 429  
Cardy J.L., Navenberg M. e Scalapino D.J., Phys. Rev. B,  
22, (1980) 2560
- 93 - Wallace D.J. e Young A.P., Phys. Rev. B, 17, (1977) 2384  
Coniglio A., Phys. Rev. Lett, 46, (1981) 250
- 94 - Domb C., J. Phys. A, 7, (1974) 1335
- 95 - de Magalhães A.C.N., Schwachheim G. e Tsallis C., J. Phys.  
C, 15, (1982) 6791
- 96 - Bernasconi J., Phys. Rev. B, 1B, (1978) 2185
- 97 - Lobb C.J., Frank D.J. e Tinkham, Phys. Rev. B, 23, (1981)  
2262
- 98 - Kenkel S.W. e Straley J.P., Phys. Rev. Lett., 49, (1982) 767
- 99 - Luck J.M., J.Phys. A, 18 (1985) 2061.
- 100 - Costa U.M.S., Tsallis C. e Schwachheim G., Phys. Rev. B,  
(1985), em impressão
- 101 - Reynolds P.J., Klein W. e Stanley H.E., J.Phys. C, 10, (1977)  
L167

- 102 - de Magalhães A.C.N., Tsallis C. e Schwachheim G., J.Phys. C, 13, (1980) 321
- 103 - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., J. Phys. C, 12, (1979) L169, 347
- 104 - Curado E.M.F., Tsallis C., Levy S.V.F. e de Oliveira M.J., Phys. Rev. B, 23, (1981) 1419
- 105 - Martín H.O. e Tsallis C., J.Phys. C, 14, (1981) 5645
- 106 - Caride A.O., Tsallis C. e Zanette S.I., Phys. Rev. Lett., 51, (1983) 145 e Phys. Rev. Lett., 51, (1983) 616
- 107 - Martín H.O. e Tsallis C., J. Phys. C, 16, (1983) 2787
- 108 - Essam J.M., preprint (1982)
- 109 - Young A.P. e Stinchcombe R.B., J.Phys. C, 9, (1976) 4419
- 110 - Roelofs L.D., Kortan A.R., Einstein T.L. e Park R.L., Phys. Rev. Lett., 46, (1961) 1465
- 111 - Guyon E., Clerc J., Giraud G. e Roussenq J., J. Physique, 42, (1981) 1553
- 112 - Sarichev A.K. e Vinogradoff A.P., J. Phys: C, 16, (1983) L1073
- 113 - Stinchcombe R.B. e Watson B.P., J. Phys. C, 9, (1976) 3221
- 114 - Kirkpatrick S., Phys. Rev. Lett., 27, (1971) 1722
- 115 - Kirkpatrick S., Rev. Mod Phys., 45, (1973) 574
- 116 - Kirkpatrick S., Phys. Rev. B, 15, (1973) 1533
- 117 - Straley J.P., J. Phys. C, 9, (1976) 783
- 118 - Straley J.P., Phys Rev. B, 15, (1977) 5733
- 119 - Harris A.B. e Fish R., Phys. Rev. Lett., 38, (1977) 796
- 120 - Turban L., J. Phys. C, 11, (1978) 449
- 121 - Last B.J. e Thouless D.J., Phys. Rev. Lett., 27, (1971) 1719
- 122 - Alcaraz F.C. e Tsallis C., J.Phys. A, 15, (1982) 587
- 123 - Tsallis C. e Redner S., Phys. Rev. B, 28, (1983) 6603
- 124 - Tsallis C., Coniglio A. e Schwachheim G., Phys.Rev. B, 31, (1985), em impressão

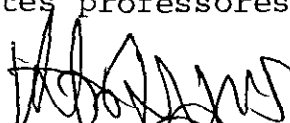
- 125 - da Silva L.R., Almeida N.S. e Tsallis C., Phys.Rev.B (1985), em impressão
- 126 - den Nijs M.P.M., Physica A, 95, (1979) 449
- 127 - Alexander S. e Orbach R., J.Phys. Lett., 43, (1982) L625
- 128 - Derrida B. e Vannimenus J., J.Phys. A, 15, (1982) L557
- 129 - Herrmann H.J., Derrida B. e Vannimenus J., Phys. Rev. B, 30, (1984) 408
- 130 - Coniglio A. e Stanley H.E., "preprint" (1984)
- 131 - Reynolds P.J., Klein W. e Stanley H.E., J. Phys. C, 10, (1977) L 167
- 132 - Straley J.P., Phys. Rev. Lett., 49, (1982) 767
- 133 - Aguilera-Gravja F., Morán López J.L. e Urías J., Phys.Rev. B, 28, (1983) 3909
- 134 - Binder K e Hohenberg P.C., Phys. Rev. B, 6, (1972) 3461
- 135 - Binder K e Hohenberg P.C., Phys.Rev. B, 9, (1974) 2194
- 136 - da Silva L.R., Tsallis C. e Schwachheim G., J. Phys. A, 17, (1984) 32D9
- 137 - de Magalhães A.C.N., Tsallis C. e Schwachheim G., J.Phys. C, 14, (1981) 1393
- 138 - Gaunt D.S. e Rustin M., J. Phys. A, 11, (1978) 1369
- 139 - Diehl H.W. e Dietrich S., Phys. Lett. A, 80, (1980) 408
- 140 - Diehl H.W. e Dietrich S., Z. Phys. B, 42, (1981) 65
- 141 - Diehl H.W. e Dietrich S., Phys. Rev. B, 24, (1981) 2878
- 142 - Diehl H.W. e Dietrich S., Z. Phys. B, 50, (1983) 117
- 143 - Diehl H.W., Dietrich S. e Eisenriegler E., Phys. Rev. B, 27, (1982) 2937
- 144 - Heermann D.W. e Stauffer D., Z. Physik B, 44, (1981) 339
- 145 - Jensen S.J.K. e Mouritsen D.G., Phys. Rev. Lett., 43, (1979) 1736
- 146 - Melrose J.R., J. Phys. A, 16, (1983) 1041
- 147 - Melrose J.R., J.Phys. A, 16, (1983) 3D77
- 148 - Pierce D.T. e Meier F., Phys. Rev. B, 13, 5484

- 149 - Reeve J.S., Phys. Lett. A, 81, (1981) 237
- 150 - Reeve J.S. e Guttman A.J., Phys.Rev. Lett.,45, (1980) 1581
- 151 - Reeve J.S. e Guttman A.J., J. Phys. A, 14, (1981) 3357
- 152 - Sarmiento E.F., Tamura I e Kaneyoshi T., Z. Phys. B, 54,  
(1984) 241
- 153 - Binder K. e Landau D.P., Phys. Rev.Lett.,52, (1984) 318
- 154 - Zinn-Justin J., J. Physique, 40, (1979) 969
- 155 - Le Guillou J.C. e Zinn-Justin J., Phys.Rev. B, 21, (1980) 3976
- 156 - Straley J.P. e Fisher M.E., J. Phys. A, 6, (1973) 1310
- 157 - Pitty E., Phys. Rev. B, 22, (1980) 4450
- 158 - Berker A.N. e Ostlund S., J. Phys. C, 12, 4961
- 159 - Honmura R., Sarmiento E.F., Fittipaldi I.P. e Kaneyoshi T.,  
Phys. Stat. Sol. (b), 121, (1984) 197
- 160 - dos Santos R.J.V., Sarmiento E.F., Tsallis C. e Costa U.M.S. (1985)  
"preprint" , submetido para publicação (Phys.Rev. B)
- 161 - Selzer S. e Majlis N., Phys. Rev. B, 27, (1983) 544
- 162 - Costa U.M.S., Mariz A.M. e Tsallis C., J. de Physique /  
Lettres (1985), em impressão
- 163 - Gefen Y., Mandelbrot B.B. e Aharony A, Phys. Rev. Lett.,  
45, (1980) 855
- 164 - Gefen Y., Aharony A., Mandelbrot B.B. e Kirpatrick S.,  
Phys. Rev. Lett., 47, (1981) 1771
- 165 - Gefen Y., Aharony A. e Mandelbrot B.B., J. Phys. A, 16,  
(1983) 1267
- 166 - Gefen Y., Aharony A. e Mandelbrot B.B., J. Phys. A, 17,  
(1984) 1277
- 167 - Kaufman M. e Griffiths R.B., Phys. Rev. B, 26,(1982) S282
- 168 - Mandelbrot B.B., "The Fractal Geometry of Nature" ed. por  
Freeman, São Francisco (1982)
- 169 - Griffiths R.B. e Kaufman M., Phys.Rev. B, 26,(1982) 5022
- 170 - Melrose J.R., J. Phys. A, 16, (1983) L407

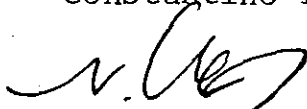


- 171 - Kaufman M. e Griffiths R.B., Phys. Rev. B, 30, (1984) 244
- 172 - Stinchcombe R.B., J. Phys. C, 12, (1979) 4533
- 173 - Havlin S., Ben-Avraham e Movshovitz D., Phys. Rev. Lett.,  
51, (1983) 2347
- 174 - Curado E.M.F. e Hauser P.R. (1984) preprint
- 175 - Oliveira P.M.C. e Tsallis C., J.Phys. A, 15,(1982) 2B65
- 176 - Martin H.O. e Tsallis C., J. Phys C, 14, (1981) 5645
- 177 - Curado E.M.F., Costa U.M.S. e Roditi J., (1985) a ser pu-  
blicado.
- 178 - Mermin N.D. e Wagner H., Phys. Rev. Lett., 17, (1966)  
1133
- 179 - Herrmann H.J., Z.Physik B, 35 (1979) 171.

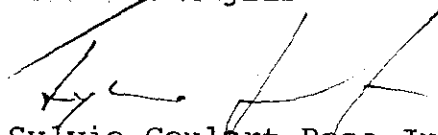
Tese apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



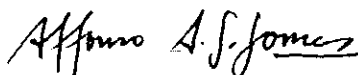
Constantino Tsallis - Presidente



Norberto Majlis



Sylvio Goulart Rosa Junior



Affonso Augusto Guidão Gomes



Jorge Silvio Helman



Hans Jurgen Herrmann

Rio de Janeiro, 23 de outubro de 1985