

ANANIAS MONTEIRO MARIZ

MAGNETISMO DE SISTEMAS CLÁSSICOS E QUÂNTICOS
DE SPINS LOCALIZADOS

Tese de

DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro, 1985

- À minha família.

AGRADECIMENTOS

A Constantino Tsallis, cuja orientação competente e amigável tornou possível este trabalho, e também pelo exemplo de seriedade científica e amor à profissão.

A Evaldo M.F. Curado, Luciano R. da Silva, Paulo R. Hauser, Rita M.Z. dos Santos, e Uriel M.S. Costa, bem como aos demais participantes dos seminários semanais, em particular a Aglaê C. N. de Magalhães, Armando Y. Takeuchi, Affonso A.G. Gomes, Edson P. da Silva, G. Schwachheim e M. Conceição S. Vieira. A amizade, o espírito de cooperação e a qualidade das sugestões apresentadas nestes encontros, tornaram o aprendizado e as discussões atividades extremamente agradáveis.

A Vanda, Miriam, Zé Gordo, Elias, Valéria, Socorro, Conceição, Ivanilda, Baiano e outros funcionários do CBPF, pela atenção, amizade e boa vontade que sempre me dedicaram.

Aqueles alunos e professores deste Centro que nestes anos contribuíram para estabelecer um clima de companheirismo e cordialidade raramente igualado em instituições semelhantes.

À Glória pelo carinho e estímulo tão necessários em todos os momentos. Ao Dr. Garibaldi e família pela generosa hospitalidade.

À Helena S. Ferreira pela competência com que datilografou este trabalho.

À UFRN e à CAPES pelo apoio financeiro.

Aos colegas do Departamento de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN, na esperança de que consigamos, juntos, desenvolver um trabalho útil e de qualidade naquele estado.

RESUMO

A maior parte deste trabalho teórico, é dedicada ao estudo de propriedades críticas estáticas de sistemas de spins localizados. Vários sistemas são considerados: (a) o modelo quântico de Heisenberg anisotrópico ferromagnético na rede quadrada (com diluição de ligações e de anisotropias) e na rede cúbica; (b) o modelo Z(4) ferromagnético na rede quadrada; (c) o modelo de Ising com interações competitivas em uma árvore de Cayley.

Nos casos (a) e (b) utilizamos a técnica de Grupo de Renormalização (GR) no espaço real. Os traços parciais nos grafos renormalizados são feitos por métodos aqui desenvolvidos, os quais são superiores às técnicas existentes na literatura para estes fins. As fronteiras críticas obtidas, reproduzem todos os pontos críticos exatos conhecidos e, ao que tudo indica, se constituem em boas aproximações numéricas para as superfícies críticas reais, em todos os pontos ainda desconhecidos. Também calculamos os expoentes críticos do comprimento de correlação (ν) e de "crossover" (ϕ), que possuem valores iguais ou melhores que os resultados do GR de Migdal-Kadanoff.

O problema (c) é estudado por meio de relações iterativas (semelhantes ao GR), e o diagrama de fases (numericamente exato) exhibe um conjunto de fases moduladas, além das fases ferromagnética, antiferromagnética e paramagnética. Vale a pena destacar ainda, a presença de fenômenos de metaestabilidade e de fase paramagnética a temperaturas arbitrariamente baixas.

Além dos problemas mencionados, estudamos os níveis de energia e o calor específico de um sistema de osciladores anarmônicos desacoplados, utilizando as aproximações de Turschner e WKB. A comparação entre elas revela a superioridade da primeira.

SUMMARY

The main goal of the present theoretical work, is to study static critical properties of localized spin systems. Several models are discussed: (a) the anisotropic quantum Heisenberg ferromagnet on square lattice (with quenched bond-dilution and random anisotropy) and on simple cubic lattice; (b) the $Z(4)$ ferromagnetic model on square lattice; (c) the Ising model on the Cayley tree, in the presence of competing interactions.

The (a) and (b) problems are studied within a real-space Renormalisation Group (RG) approach. We have developed, in both cases, methods to perform the relevant partial tracings, that are better than those available in the literature. The critical frontiers we have obtained reproduce all known exact results, and we believe them to be high precision ones everywhere. We also calculate the correlation length critical exponents (ν) and the crossover exponents (ϕ). The values that we find are, in degree of approximation, equal or superior to those obtained using the Migdal-Kadanoff RG.

The (c) problem is investigated by constructing recursive relations (similar to RG); the resulting phase diagram (numerically exact) presents a set of modulated phases, besides the ferromagnetic, antiferromagnetic and paramagnetic ones. It is worth to stress the presence of metastability phenomena and the existence of the paramagnetic phase at arbitrary non-vanishing small temperatures.

In addition to the previous works we performed a study of the energy eigenvalues and the specific heat of a general anharmonic single quantum oscillator, by using the Turschner and WKB approximations. Comparisons between them, exhibit the superiority of the Turschner approximation.

SUMÁRIO

	<u>PÁG.</u>
AGRADECIMENTOS.....	iii
RESUMO	iv
SUMMARY	v
LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	x
<u>INTRODUÇÃO</u>	1
<u>CAPÍTULO 1 - RENORMALIZAÇÃO DE SISTEMAS DE SPINS LOCALIZADOS</u>	10
1.1 - Fenômenos Críticos	10
1.2 - D Grupo de Renormalização	14
1.3 - Renormalização em Sistemas Quânticos	22
1.4 - Efeitos Quânticos na Renormalização	31
1.4.1 - Cadeia Linear	31
1.4.2 - Grafos com Ligações Soltas	33
1.4.3 - Grafos Usados na Renormalização de Migdal-Kadanoff.	35
<u>CAPÍTULO 2 - CRITICALIDADE DO MODELO DE HEISENBERG QUÂNTICO ANISOTRÓPICO DE SPIN 1/2</u>	39
2.1 - Diluição de Ligações na Rede Quadrada	39
2.2 - Diluição de Anisotropias na Rede Quadrada	51
2.3 - O Sistema Puro na Rede Cúbica Simples	56
<u>CAPÍTULO 3 - GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO DE CDRTÉ-COLAPSO PARA O MODELO Z(4)</u>	61
3.1 - O Modelo Z(N)	61
3.2 - O Método de Corte-Colapso para o Modelo Z(4)	64
3.3 - Criticalidade do Modelo Z(4) Ferromagnético na Rede Quadrada	68
<u>CAPÍTULO 4 - O MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS EM UMA ÁRVORE DE CAYLEY</u>	72

4.1 - Modelo e Formalismo	72
4.2 - O Diagrama de Fases	76
<u>CAPÍTULO 5</u> - NÍVEIS DE ENERGIA E CALOR ESPECÍFICO DE OSCILADORES ANARMÔ- NICOS DESACOPLADOS	84
5.1 - O Espectro de Energia	84
5.2 - O Calor Específico	90
<u>CONCLUSÕES</u>	94
<u>APÊNDICE A</u> - RENORMALIZAÇÃO DE LIGAÇÕES EM SÉRIE E PARALELO	98
A.1 - Ligações em Paralelo	98
A.2 - Ligações em Série	99
<u>APÊNDICE B</u> - O MODELO $Z(4)$ TOTALMENTE ANISOTRÓPICO NA PONTE DE WHEAT- STONE	105
<u>BIBLIOGRAFIA</u>	107

LISTA DE FIGURAS

<u>FIG.</u>	<u>PÁG.</u>
1.1.1 - Variação térmica da magnetização em um ferromagneto	11
1.3.1 - Exemplos de grafos de 2 terminais	24
1.4.1.1 - Variação térmica do quociente R_S^K (eq.(1.4.1.1)).....	32
1.4.2.1 - Variação térmica dos quocientes $R^{(e)}, R^{(f)}$ e $R^{(h)}$ (eq.(1.4.2.1))	35
1.4.3.1 - Variação térmica do quociente R_d^K (eq.(1.4.3.1)).....	36
1.4.3.2 - Variação térmica do quociente R_d^Δ (eq.(1.4.3.2)).....	37
2.1.1(a)- Fronteira crítica do modelo de Heisenberg anisotrópico com di lução de ligações	43
2.1.1(b)- Cortes da fronteira crítica para Δ constante	44
2.1.1(c)- Cortes da fronteira crítica para p constante	45
2.1.2 - Gráfico da função $A(\Delta)$ (eq.(2.1.10))	48
2.1.3 - Gráfico da função $B(\Delta)$ (eq.(2.1.11))	49
2.1.4 - Gráfico da função $D(p)$ (eq.(2.1.12))	50
2.2.1 - Fronteira crítica do modelo de Heisenberg anisotrópico com di lução de anisotropias	54
2.2.2 - Gráfico da função $A(\Delta)$ (eq. (2.2.10))	55
2.2.3 - Gráfico das funções $B(p)$ e $C(p)$ (eq. (2.2.11))	55
2.3.1 - Grafos usados na renormalização da rede cúbica	57
2.3.2 - Fronteira crítica do modelo de Heisenberg anisotrópico na re de cúbica simples	58
3.2.1 - Grafos usados para ilustrar o método de corte-colapso	66
3.2.2 - Grafos cortado (a), colapsado (b) e semi-colapsado (c)	66
3.3.1 - Fronteira crítica do modelo $Z(4)$ ferromagnético na rede qua drada	70

4.1.1(a)-	Árvore de Cayley de ramificação 2	74
4.1.1(b)-	Diagrama que ilustra o procedimento de decimação	74
4.2.1 -	Exemplos de atratores no plano (X, K_1)	77
4.2.2 -	Diagrama de fases do modelo de Ising na árvore de Cayley para $H = 0$ e $q = J_3/J_2 = -1$	78
4.2.3 -	Diagrama de fases do modelo de Ising na árvore de Cayley para $H = 0$ e $q = 0.5$	79
4.2.4 -	Diagrama de fases do modelo de Ising na árvore de Cayley para $H = 0$ e $q = 3/2$	80
4.2.5 -	Parte do diagrama de fases para $H = 0$ e $q = 1.6$	80
4.2.6 -	Reentrâncias da região M na fase P	81
4.2.7 -	Diagrama de fases para $H = 0$ e $k_B T/J_1 = 0$	81
4.2.8 -	Diagramas de fases para $H \neq 0$	83
5.1.1 -	Variação dos 10s níveis de energia (na aproximação de Turschner) em relação a λ	89
5.2.1 -	Variação térmica do calor específico (Turschner)	91
A.1 -	Grafos de 2 ligações: (a) em paralelo; (b) em série	98

LISTA DE TABELAS

<u>TAB.</u>		<u>PÁG.</u>
1.1.1	- Valores típicos dos expoentes críticos	13
2.1.1	- Pontos críticos e expoentes do modelo de Heisenberg anisotrópico na rede quadrada com diluição de ligações	47
2.3.1	- Pontos críticos e expoentes do modelo de Heisenberg anisotrópico na rede cúbica	58
5.1.1	- Valores dos níveis de energia do oscilador anarmônico	89
5.2.1	- Valores do calor específico do oscilador anarmônico	91
5.2.2	- Valores do calor específico do oscilador anarmônico ($\nu = 4$)	93

Tudo deveria ser tornado tão simples
quanto possível, mas não mais simples
do que isso.

A. Einstein

INTRODUÇÃO

A existência de compostos de ferro capazes de exercer ação magnética *macroscópica* em outras substâncias, é conhecida há mais de 20 séculos. Esta notável propriedade propiciou diversas aplicações práticas (como a bússola), e desde sua descoberta despertou o interesse de inúmeros cientistas, que tentaram encontrar uma explicação racional para o fenômeno.

Entretanto, foi somente a partir do século passado e início deste, com o advento das teorias do Eletromagnetismo, da Mecânica Estatística, da Mecânica Quântica e com a descoberta do spin das partículas subatômicas, que tornou-se possível propor em bases satisfatórias, teorias *microscópicas* do magnetismo, capazes de oferecer uma interpretação correta dos fenômenos observados em nível *macroscópico*.

Paralelamente, a evolução de ciências dos materiais, e de técnicas experimentais sofisticadas, permitiu ampliar consideravelmente a classe de sistemas magnéticos conhecidos, com a descoberta de ordenamentos microscópicos cada vez mais sutis e complexos. Como exemplos de diferentes ordens magnéticas, podemos citar o ferromagnetismo, o antiferromagnetismo, ferrimagnetismo, helimagnetismo, vidros de spin, entre muitos outros.

A descrição da espantosa evolução desta área da Física, de seu nascimento aos dias atuais, está obviamente além dos objetivos deste trabalho. Um excelente resumo deste desenvolvimento histórico (que envolve nomes ilustres da ciência, como Gilbert ,

Descartes, Arago, Poisson, Oersted, Faraday, Maxwell, Curie) pode ser encontrado na referência (1). Uma exposição clara e atual sobre as diversas ordens magnéticas conhecidas é feita na referência (2).

Duas características principais fundamentam o conhecimento moderno do magnetismo: (i) É um fenômeno essencialmente *quântico*, que não pode ser explicado adequadamente com as leis da Física Clássica (como mostrou o teorema de Bohr-Van Leeuwen⁽¹⁾) ; (ii) Possui caráter *cooperativo*, envolvendo a participação de um grande número de graus de liberdade mutuamente correlacionados. É esta correlação que mantém a ordem face à agitação térmica.

Os sistemas magnéticos podem sofrer mudanças em suas ordens microscópicas, se são alteradas as condições externas a que são submetidos (como variações de temperatura) ou suas composições internas (substituição de um certo tipo de átomo por outro).

Esta mudança qualitativa da ordem magnética, ocorre para valores fixos dos parâmetros externos intensivos (temperatura, pressão, concentração, etc.) e caracteriza uma *transição de fase*, que é denominada respectivamente de 1ª ordem (descontínua) ou de 2ª ordem (contínua) conforme exista ou não um calor latente envolvido⁽³⁾. O fenômeno de transição de fase ocorre numa grande variedade de sistemas, além de magnetos, como por exemplo em fluidos⁽³⁾, ferroelétricos⁽⁴⁾, supercondutores⁽⁵⁾, superfluidos⁽⁶⁾, cristais líquidos⁽⁷⁾ e ligas binárias⁽⁸⁾.

Neste trabalho daremos maior ênfase ao estudo de transições de fase contínuas em sistemas magnéticos (para uma revisão dos conceitos básicos e um resumo das teorias clássicas, pode-se consultar a referência (9)).

A característica física predominante em uma transição

de fase, é a existência de correlações de longo alcance, que provocam o aparecimento de flutuações macroscópicas, responsáveis pela quebra da simetria global do sistema e pela singularidade de algumas funções termodinâmicas.

Entre as grandezas físicas relevantes no estudo destes fenômenos, estão: (i) *O comprimento de correlação* (ξ) que mede o alcance da função de correlação, divergindo em transições contínuas; (ii) *O tempo de vida médio* (τ) das flutuações, que é importante somente no estudo de fenômenos dinâmicos; (iii) *O parâmetro de ordem*, uma função de estado que assume valores diferentes nas diferentes fases, se anulando na mais desordenada; (iv) *funções resposta* (como a susceptibilidade); (v) *expoentes críticos* que indicam a forma como certas grandezas físicas se comportam na vizinhança da transição; (vi) *Os valores críticos das variáveis intensivas* (como a temperatura e o campo magnético) que fornecem o diagrama de fases do sistema.

A existência de correlações de longo alcance envolvendo grande número de graus de liberdade, constitui a principal dificuldade para uma abordagem teórica de transições de fase, já que a maioria dos métodos tradicionais de física são adequados para tratar problemas onde as correlações são da ordem das interações microscópicas (de curto alcance), e conseqüentemente envolvem poucos graus de liberdade.

As primeiras teorias microscópicas desta área, surgiram com Van der Waals⁽¹⁰⁾ (fluídos) em 1873, Weiss⁽¹¹⁾ (ferromagnetos) em 1907 e Ornstein e Zernicke⁽¹²⁾ (função de correlação) em 1914. Em 1937, Landau^(13,14) propôs uma teoria baseada em hipóteses gerais sobre a forma da energia livre na região de transição, que unificou as anteriores no que hoje chamamos de *teorias de campo médio*.

Um defeito comum a todas elas, é o tratamento inadequado dado às flutuações, cujo efeito é subestimado. Em consequência, a fase ordenada é favorecida, havendo uma superestimativa da temperatura crítica. Além disso os expoentes críticos obtidos, em geral, não concordam com cálculos exatos e com resultados experimentais conhecidos⁽⁹⁾.

Um avanço significativo, ocorreu na década de 60 com as *hipóteses de escala* (feitas por Widom⁽¹⁵⁾, Domb e Hunter⁽¹⁶⁾ em 1965, e por Griffiths⁽¹⁷⁾ em 1967) segundo as quais, certas funções termodinâmicas, como a energia livre, são homogêneas na vizinhança da transição.

Em 1971, Kadanoff⁽¹⁸⁾ sugeriu um procedimento para a redução dos graus de liberdade (eliminando os de curto alcance), e finalmente, no mesmo ano, Wilson⁽¹⁹⁾ utilizou os argumentos intuitivos de Kadanoff e idéias já existentes em teoria de campos, para construir as bases teóricas e operacionais do *Grupo de Renormalização (GR)*. Esta teoria sistematiza o processo de redução de graus de liberdade, e constitui hoje a técnica mais adequada para o estudo de transições de fase (especialmente as contínuas), tanto pelos resultados quantitativos obtidos, como pela visão unificadora e abrangente que estabelece. Além disso, métodos computacionais sofisticados, como expansões em séries de altas e baixas temperaturas e cálculos de Monte Carlo, têm confirmado para modelos estatísticos os mais diversos, as previsões do Grupo de Renormalização (a referência ⁽²⁰⁾, contém a mais completa coleção de informações, sobre os principais resultados e métodos teóricos da área de transições de fase e fenômenos críticos).

As teorias e técnicas acima mencionadas, são aplicadas a modelos microscópicos, que descrevem as interações elementares

responsáveis pela ordem do sistema. No caso específico do magnetismo, foi Langevin⁽²¹⁾ (1905) quem primeiro postulou a existência de momentos magnéticos atômicos, e ressaltou a importância do efeito cooperativo no ferromagnetismo. Em 1920, Lenz⁽²²⁾ considerou o caso em que estes momentos magnéticos possuíam duas orientações (opostas) privilegiadas, sendo caracterizados por uma variável (σ) que assume somente 2 valores (± 1) correspondentes às duas orientações. Propôs então um modelo, em que a cada sítio i é associada uma variável σ_i , e onde sítios vizinhos (i, j) interagem entre si, com uma energia $E_{ij} = -J\sigma_i\sigma_j$. Por argumentos energéticos, é fácil notar que o sinal do parâmetro J determinará a orientação (preferencial) relativa dos momentos σ_i e σ_j . Assim para J positivo ou negativo a orientação favorecida será respectivamente paralela (ferromagnetismo) ou antiparalela (antiferromagnetismo).

Vale ressaltar que até esta época não era conhecida a existência do spin^(23,24) como origem dos momentos magnéticos atômicos, nem ainda a natureza do mecanismo responsável pela interação (a integral de troca J , tem origem na repulsão coulombiana entre elétrons⁽¹⁾, que sendo férmions obedecem ao princípio de exclusão de Pauli).

Em 1925, Ising⁽²⁵⁾ resolveu exatamente este modelo em uma cadeia linear ($d=1$) (calculando analiticamente a função de partição e a partir dela as funções termodinâmicas), mostrando que não havia magnetização espontânea a temperaturas (T) não nulas. Nascia o *modelo de Ising*, que apesar de sua aparente simplicidade, revelou-se desde então como um dos mais ricos e fecundos da Mecânica Estatística⁽²⁶⁾.

A existência de fase ordenada a $T \neq 0$ em dimensões superiores a 1 no modelo de Ising, foi evidenciada por Peierls⁽²⁷⁾ (1936),

e em 1941, usando argumentos de dualidade, Kramers e Wannier⁽²⁸⁾ obtiveram a temperatura crítica exata [T_c] na rede quadrada ($d=2$). Em um notável trabalho, Onsager⁽²⁹⁾ em 1944, encontrou a expressão analítica da função de partição do modelo de Ising (sem campo magnético externo) na mesma rede. Um dos resultados de Onsager a ser ressaltado, foi a existência de uma singularidade logarítmica do calor específico em T_c , ao contrário da descontinuidade prevista pela teoria do campo médio.

Trabalhos posteriores (como o cálculo de alguns expoentes críticos^(30,31)), mostraram a necessidade de resultados alternativos aos de campo médio. Esta necessidade estimulou a busca de soluções exatas do modelo de Ising em $d > 2$, mas até agora esta procura foi infrutífera. Infelizmente são poucos os modelos estatísticos com soluções exatas conhecidas^(32,33). O modelo de Ising descreve substâncias magnéticas *uniaxiais* (cuja interação privilegia uma direção no espaço dos spins) *isolantes* (onde os elétrons possuem pouca mobilidade) como os compostos $DyAlO_3$, Rb_2CoF_4 e K_2CoF_4 (a referência⁽³⁴⁾ contém uma extensa revisão de substâncias magnéticas descritas por modelos semelhantes ao de Ising). Este modelo também se aplica ao estudo de outros tipos de transição, como ordem-desordem em ligas-binárias⁽³⁵⁾, e transições gás-líquido⁽³⁶⁾.

O modelo de Ising pode ser generalizado de inúmeras maneiras, duas das quais são particularmente de interesse para o presente trabalho: (i) Uma generalização clássica que associa à variável σ , N valores ou orientações ($N = 2$ é o caso particular de Ising), mantendo no entanto o aspecto comutativo dos termos do Hamiltoniano; (ii) Uma extensão quântica, na qual σ é associado à componente S^z de um spin $1/2$ \vec{S} , cujas componentes S^x, S^y, S^z

não comutam entre si. Considerando a interação entre spins vizinhos caracterizada por acoplamentos nas componentes S^x, S^y além de S^z , obtemos um Hamiltoniano que contém parcelas não comutativas.

A generalização clássica inclui o modelo de Potts de N estados ^(37,38), no qual a variável σ assume N valores, e a interação entre σ_i e σ_j vizinhos, é da forma $E_{ij} = -J\delta_{\sigma_i\sigma_j}$, mantendo em comum com o modelo de Ising, o fato de só possuir 2 níveis de energia. Supondo que os valores de σ são associados a N orientações no plano, separadas por ângulos iguais $\theta = 2\pi/N$, e considerando a interação entre spins vizinhos dependente apenas do valor absoluto da diferença angular entre eles, obtemos o modelo $Z(N)$. Este modelo é igual ao de Potts para $N \leq 3$, e para $N \geq 4$ contém aquele como caso particular, sendo que em $N = 4$ reproduz o modelo de Ashkin-Teller ⁽³⁹⁾. As funções de partição dos modelos de Potts e $Z(N)$ ($N > 2$), em dimensões superiores a $d = 1$ não são ainda conhecidas, mas argumentos de dualidade têm permitido a obtenção de inúmeros resultados particulares, principalmente em duas dimensões ⁽⁴⁰⁾.

O caso quântico que estudamos, é representado pelo modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $1/2$ onde a interação entre spins vizinhos é dada por $E_{ij} = -J[a(\sigma_i^x\sigma_j^x + \sigma_i^y\sigma_j^y) + \sigma_i^z\sigma_j^z]$ (sendo σ^α ($\alpha = x, y, z$) os operadores de Pauli). Para $a = 0$, $a = 1$, e $a = \infty$, E_{ij} reproduz respectivamente os modelos de Ising, Heisenberg isotrópico e XY.

O modelo de Heisenberg isotrópico ⁽⁴¹⁾ descreve magnetos isolantes, nos quais há isotropia na interação entre spins (como EuO) e não possui solução exata mesmo em $d = 1$. Sabe-se, entretanto (teorema de Mermin-Wagner ⁽⁴²⁾) que só adquire ordem de longo alcance para $d > 2$ (uma revisão é feita na referência ⁽⁴³⁾). O modelo XY ⁽⁴⁴⁾, descreve magnetos cuja interação entre spins tem

simetria planar (como CoBr_2), possui solução exata somente em $d=1$ ⁽⁴⁵⁾, e em duas dimensões não apresenta magnetização espontânea ⁽⁴²⁾, apesar de exibir fenômenos característicos de uma transição de fase ^(46,47), como a divergência da susceptibilidade (a referência ⁽⁴⁸⁾ contém uma excelente revisão dos resultados conhecidos para o modelo XY).

O caso particular $1 > a \geq 0$ foi estudado inicialmente por Dalton e Wood ⁽⁴⁹⁾, e possui magnetização espontânea mesmo a $d = 2$, enquanto em dimensões superiores ($d > 2$) a fase ordenada existe a $T \neq 0$, para qualquer valor de $a \geq 0$.

Os modelos anteriormente mencionados, podem em sua formulação incorporar convenientemente efeitos randômicos, presentes em inúmeras substâncias magnéticas. Entre os vários tipos de desordem ^(50,51), destacamos os casos de desordem na estrutura cristalina, que podem ser classificados como: *Substitucional*, na qual alguns átomos da substância são retirados e em suas posições colocadas impurezas (átomos diferentes, elétrons, vacâncias, etc); *Intersticial*, onde as impurezas são introduzidas nos interstícios dos sítios cristalinos; *Estrutural*, caracterizada por uma distribuição espacial aleatória dos átomos da substância. A substância (e a desordem a ela associada) é dita *temperada* ("quenched") ou *recozida* ("annealed") conforme seja preparada por meio de um resfriamento rápido ou lento, respectivamente.

Ao longo deste trabalho, estudamos algumas propriedades críticas estáticas (fronteiras críticas, expoentes, classes de universalidade) de alguns modelos estatísticos acima mencionados (Ising, Heisenberg anisotrópico e $Z(4)$) em diferentes situações. Nos casos em que consideramos efeitos aleatórios, supomos que a desordem é *temperada* (onde as médias configuracionais são independentes das médias térmicas), *substitucional* e sempre associada a ligações e não a sítios.

No Capítulo 1, fazemos uma breve descrição dos conceitos e idéias básicas de fenômenos críticos e do Grupo de Renormalização. Descrevemos um método utilizado para a renormalização de sistemas quânticos, e analisamos alguns efeitos em que se manifesta o caráter quântico do sistema.

O método acima mencionado, é utilizado no Capítulo 2 para estudar a criticalidade do modelo de Heisenberg anisotrópico em 2 dimensões (com diluição de ligações e diluição de anisotropias) e em 3 dimensões (onde analisamos somente o caso puro).

O Capítulo 3 é dedicado ao desenvolvimento de um método que permite a realização de traços parciais no modelo $Z(4)$ (sem que seja necessário a contagem de configurações) usados em procedimentos de renormalização. Uma aplicação é feita para o caso ferromagnético (puro) na rede quadrada.

A presença de interações competitivas no modelo de Ising em uma árvore de Cayley é estudada no Capítulo 4. O diagrama de fases é obtido utilizando relações de recorrência iterativas (semelhantes às técnicas de Grupo de Renormalização).

No Capítulo 5 estudamos algumas propriedades de osciladores anarmônicos desacoplados (níveis de energia e calor específico) empregando certas aproximações analíticas conhecidas. Este problema, embora fuja à temática central desta tese, é aqui incluído, já que efeitos anarmônicos são essenciais na descrição de algumas propriedades macroscópicas de sólidos, como por exemplo a dilatação térmica.

Finalmente, nas Conclusões, fazemos um resumo dos resultados relevantes que foram obtidos, e indicamos possíveis generalizações a serem feitas posteriormente.

CAPÍTULO 1

RENORMALIZAÇÃO DE SISTEMAS DE SPINS LOCALIZADOS

Neste capítulo, apresentamos uma breve exposição dos conceitos básicos de fenômenos críticos (usando como protótipo um ferromagneto) e das idéias fundamentais do Grupo de Renormalização. Um método específico para renormalizar (no espaço real) sistemas de spins localizados é desenvolvido e são discutidos alguns efeitos cujas origens se devem ao caráter quântico do Hamiltoniano do sistema.

1.1 - FENÔMENOS CRÍTICOS

Em um ferromagneto típico a uma certa temperatura T , du as tendências opostas competem simultaneamente: (i) os momentos magnéticos atômicos tendem a se alinhar devido à interação microscópica entre eles (minimização da energia interna); (ii) a agitação térmica tende a destruir este alinhamento (maximização da entropia). É esta competição que faz com que o sistema mude de uma fase ferromagnética (em que existe ordem de longo alcance) para uma fase paramagnética (na qual esta ordem é destruída) e vice-versa.

A ordem de longo alcance provoca o aparecimento de uma magnetização espontânea (M) que atinge seu valor de saturação (M_0) em $T = 0$, e diminui quando T aumenta, até se anular em $T = T_c$

(ponto crítico) permanecendo nula para $T > T_c$. Se um campo magnético externo (H) é aplicado ao sistema, a transição de fase que ocorre em $T = T_c$ é destruída, e a magnetização se anula assintoticamente em $T \rightarrow \infty$ (Fig. 1.1.1).

No ponto crítico $T = T_c$, $H = 0$, ocorre uma transição de fase contínua. Este fenômeno crítico é caracterizado por correlações de alcance macroscópico (o que do ponto de vista estatístico corresponde a $\xi \rightarrow \infty$), e por singularidades em algumas grandezas físicas, que são descritas pelos expoentes críticos.

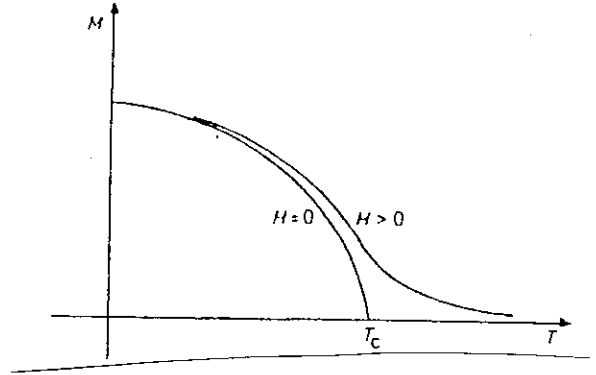


Figura 1.1.1 - Variação da magnetização (M) com a temperatura (T) para um ferromagneto típico.

Os principais expoentes são aqueles associados com :

(a) o parâmetro de ordem (M); (b) as funções respostas (calor específico C e susceptibilidade isotérmica χ_T); (c) a função de correlação $\Gamma(\vec{r}) \equiv \langle m(\vec{r})m(0) \rangle - \langle m(\vec{r}) \rangle \langle m(0) \rangle$ ($m(\vec{r})$ é o momento magnético no \vec{r} -ésimo sítio e $\langle \rangle$ é a média térmica); (d) o comprimento de correlação (ξ). Estes expoentes são definidos respectivamente pelas relações abaixo (onde $t = T - T_c$):

$$M \sim (-t)^\beta \quad ; \quad t < 0, H = 0 \quad (1.1.1)$$

$$M \sim H^{1/\delta} \quad ; \quad t = 0 \quad (1.1.2)$$

$$C \sim (-t)^{-\alpha'} \quad ; \quad t < 0, H = 0 \quad (1.1.3)$$

$$C \sim (t)^{-\alpha} \quad ; \quad t > 0, H = 0 \quad (1.1.4)$$

$$\chi_T \sim (-t)^{-\gamma'} \quad ; \quad t < 0, H = 0 \quad (1.1.5)$$

$$\chi_T \sim (t)^{-\gamma} \quad ; \quad t > 0, H = 0 \quad (1.1.6)$$

$$\Gamma(\vec{r}) \sim |\vec{r}|^{-(d-2+\eta)} \quad ; \quad t = H = 0, |\vec{r}| \rightarrow \infty \quad (1.1.7)$$

$$\xi \sim (-t)^{-\nu'} \quad ; \quad t < 0, H = 0 \quad (1.1.8)$$

$$\xi \sim (t)^{-\nu} \quad ; \quad t > 0, H = 0 \quad (1.1.9)$$

Usando argumentos gerais de Termodinâmica e Mecânica Estatística, pode-se estabelecer relações entre estes expoentes, tais como:

$$\begin{aligned} \alpha' + 2\beta + \gamma' &\geq 2 && [\text{Rushbrooke}^{(52)}] && \text{a)} \\ \alpha' + \beta(1+\delta) &\geq 2 && [\text{Griffiths}^{(53)}] && \text{b)} \\ (2-\eta)\nu &\geq \gamma && [\text{Fisher}^{(54)}] && \text{c)} \quad (1.1.10) \\ d\nu' &\geq 2-\alpha' && && \text{d)} \\ d\nu &\geq 2-\alpha && [\text{Josephson}^{(55)}] && \text{e)} \end{aligned}$$

Relações adicionais entre os expoentes, podem ser obtidas pelas *hipóteses de escala* ⁽¹⁵⁻¹⁷⁾, que exploram as propriedades de invariância do sistema na região crítica. Para exemplificá-las vamos considerar a energia livre de Gibbs (G) expressa como função das variáveis t e H. Podemos escrever

$$G(t,H) = G_r(t,H) + G_s(t,H) \quad (1.1.11)$$

onde os índices r e s se referem respectivamente às partes regular e singular de G(t,H). A hipótese de escala para G(t,H) afirma que a parte singular $G_s(t,H)$ é uma função homogênea ⁽⁹⁾ destas variáveis, isto é,

$$G_s(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda G_s(t,H) \quad (1.1.12)$$

sendo $\lambda \in \mathbb{R}$ e (a, b) são parâmetros que caracterizam o grau de homogeneidade da função.

As hipóteses de escala não fornecem valores numéricos para os expoentes, permitindo entretanto a obtenção de resultados bastante gerais, tais como: (i) os expoentes α' , γ' , ν' são respectivamente iguais a α , γ , ν ; (ii) as expressões (1.1.10) são satisfeitas como igualdades; (iii) definindo variáveis adequadas, é possível estabelecer equações de estado que independem da substância, como a lei de estados correspondentes para fluidos⁽³⁶⁾. Estas previsões possuem comprovação teórica e experimental.

Na referência (9) encontramos a definição dos expoentes acima mencionados para outros sistemas como fluidos, bem como a definição de outros expoentes e das inúmeras relações entre eles. Apresentamos na Tabela 1.1.1 alguns valores típicos (teóricos e experimentais) dos principais expoentes críticos.

TABELA 1.1.1 - Valores numéricos dos expoentes críticos (α' , γ' e ν' são respectivamente iguais a α , γ , ν). De Balescu⁽⁵⁶⁾.

MODELOS E SISTEMAS	α	β	γ	δ	ν	η
Campo Médio	0 (desc.)	1/2	1	3	1/2	0
Ising (d=2, exato)	0 (log.)	1/8	7/4	15	1	1/4
Esférico (d=3, exato)	-1	1/2	2	5	1	0
Ising (d=3, numérico)	0.125	0.313	1.250	5	0.638	0.041
Heisenberg (d=3, S=1/2, numérico)	0	0.345	1.375	5	0.702	0.043
Fluidos (d=3)	{ Xenônio Hélio-4 Co ₂	<0.2	0.35	1.26	4.4	0.57
			0.36	1.24		
		<0.1	0.35	1.26	4.2	
(Ferromagneto) Fe	<0.17	0.35	1.33		0.64	0.07

1.2 - O GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

As correlações relevantes em um sistema físico, tem seu alcance limitado à região $a \leq x \leq \xi$, sendo a um limite físico inferior que é da ordem do alcance da interação direta entre as variáveis microscópicas (como o parâmetro de rede).

Na região crítica o comprimento de correlação ξ atinge valores comparáveis com as dimensões lineares do sistema, que são distâncias *finitas*. Entretanto, os efeitos físicos provenientes dos graus de liberdade microscópicos são convenientemente estudados, supondo que o sistema macroscópico encontra-se no *limite termodinâmico*, onde o número de partículas (N) e o volume (V) divergem, mas a densidade (N/V) é finita. É no contexto desta idealização matemática que consideramos a divergência do comprimento de correlação ($\xi \rightarrow \infty$) no ponto crítico.

Esta divergência faz com que as correlações tenham alcance arbitrário ($a \leq x \leq \infty$), envolvendo um enorme número de graus de liberdade, o que dificulta a aplicação dos métodos tradicionais de física de sistemas de muitos corpos.

O grande avanço proporcionado pela teoria de Grupo de Renormalização (GR) foi precisamente a criação de procedimentos sistemáticos de redução dos graus de liberdade, até um limite em que é possível a aplicação de métodos aproximativos tradicionais.

Inúmeras revisões da teoria do GR estão disponíveis na literatura ⁽⁵⁷⁻⁶³⁾, de modo que neste trabalho somente um breve resumo dos conceitos fundamentais será dado.

A idéia básica que norteia o GR é a da eliminação das correlações de curto alcance que não são relevantes na região crítica. Isto é feito substituindo convenientemente o sistema origi-

ginal (de Hamiltoniano H_0 e parâmetro de rede a) por um sistema efetivo (com H_1 e $a_1 = ba$, $b > 1$), de modo a suprimir as correlações de alcance $a \lesssim x \lesssim ba$. É necessário que esta operação preserve tanto quanto possível, a simetria do sistema e outros aspectos físicos relevantes para o fenômeno crítico.

A renormalização pode ser interpretada geometricamente, como uma dilatação por um fator linear b . Esta transformação reduz o número de graus de liberdade de N para $N_1 = N/b^d$, e reescala as dimensões lineares de x para $x_1 = x/b$ e os momenta (no espaço recíproco) de q para $q_1 = bq$.

Formalmente, a renormalização é realizada por meio de uma transformação $R_b(H)$, tal que:

$$H_1 = R_b(H_0) \quad (1.2.1)$$

O conjunto de transformações $R_b(H)$ possui uma estrutura de semi-grupo ($R_{b_1} R_{b_2} = R_{b_1 b_2}$), não existindo a transformação inversa (o que corresponderia à criação de graus de liberdade). A escolha da transformação $R_b(H)$ conveniente é um dos elementos de arbitrariedade do GR, já que existem várias transformações possíveis e a escolha da mais adequada a determinado sistema é um problema que exige considerável intuição física.

Para que os aspectos físicos relevantes sejam preservados sob a transformação $R_b(H)$, impõe-se que seja mantida a invariância de alguns funcionais $F(H)$, isto é:

$$F(H_1) = F(H_0) \quad (1.2.2)$$

Em transições térmicas ($T_c \neq 0$) $F(H)$ pode ser a função

de correlação, ou a função de partição e em transições quânticas ($T_c = 0$), escolhe-se usualmente $F(H)$ como sendo a energia do estado fundamental, ou a diferença de energia entre os primeiros níveis do espectro.

Vista como uma dilatação, é fácil de observar que $R_b(H)$ reduz o comprimento de correlação por um fator b ,

$$\xi_1 = \xi_0/b \quad (1.2.3)$$

A aplicação repetida de $R_b(H)$, define uma família de Hamiltonianos $H_1 = R_b(H_0)$; $H_2 = R_b(H_1)$;; $H_L = R_b(H_{L-1}) = R_b^L(H_0)$, com comprimentos de correlação dados respectivamente por: $\xi_1 = \xi_0/b$; $\xi_2 = \xi_1/b$;; $\xi_L = \xi_{L-1}/b = \xi_0/b^L$. Efetuando a iteração até que $\xi_L \sim a_L$ (a_L é o parâmetro de rede de H_L), obtemos um sistema cujo comprimento de correlação é suficientemente reduzido, para ser estudado por métodos tradicionais de física.

Se considerarmos o espaço dos parâmetros do Hamiltoniano $\{K\} = \{K_1, K_2, \dots, K_N\}$, então a transformação $R_b(\{K\})$ que leva K_i em $K'_i = R_b^i(\{K\})$, pode ser analisada estudando-se o movimento dos pontos neste espaço sob a ação de $R_b(\{K\})$.

Os pontos de maior interesse são aqueles invariantes sob a transformação, que são caracterizados por:

$$\{K^*\} = R_b\{K^*\} \quad (1.2.4)$$

Da equação (1.2.3) podemos notar que o comprimento de correlação associado ao sistema em $\{K^*\}$ (que denotaremos ξ^*), satisfaz à seguinte relação:

$$\xi^* = \xi^*/b \quad (1.2.5)$$

Consequentemente $\xi^* = 0$ ou $\xi^* = \infty$. Os pontos de $\xi^* = 0$ (que correspondem usualmente a $T = 0$ ou $T = \infty$) são chamados pontos fixos triviais (que caracterizam as diferentes fases), enquanto aqueles de $\xi^* = \infty$ são os *pontos fixos críticos* do sistema.

Vamos imaginar que o espaço $\{K\}$ é dividido em superfícies de iso- ξ (que contêm todos os pontos de mesmo valor de ξ). Da equação (1.2.3) vemos que as superfícies com $\xi = 0$ e $\xi = \infty$ são invariantes sob a renormalização. Entretanto para qualquer superfície com $0 < \xi < \infty$, esta invariância não existe, já que o ponto move-se para uma superfície com $\xi' < \xi$, e portanto, se afasta da região de $\xi = \infty$ e se aproxima da superfície com $\xi = 0$. Baseando-nos nesta visualização geométrica podemos dizer que a superfície crítica ($\xi = \infty$) é instável sob a renormalização, enquanto a superfície com $\xi = 0$ é estável.

Se existem vários pontos fixos na superfície crítica, alguns deles atrairão os demais pontos críticos ($\xi = \infty$) desta superfície (excetuando-se casos mais complexos, como comportamentos caóticos). Isto permite dividir a superfície crítica em regiões distintas, que são as bacias atratoras de cada ponto fixo. Dois fenômenos interessantes podem ser então observados:

(i) Se um ponto está na região próxima ao contorno de duas ou mais bacias ele pode sentir a competição atrativa das mesmas, ser inicialmente atraído por um ponto fixo, até que o outro ponto fixo predomina e o atrai definitivamente. Este é o fenômeno de "cross over".

(ii) Pontos diferentes de uma mesma bacia atratora (e que representam sistemas diferentes) são atraídos pelo mesmo ponto fixo, e

portanto apresentam o mesmo comportamento crítico (expoentes iguais). Este é o aspecto de *Universalidade* (dizemos que os sistemas possuem a mesma classe de universalidade) que tem encontrado comprovação teórica e experimental. Tem-se hoje como um fato estabelecido, que em geral, os expoentes críticos dependem apenas dos aspectos mais globais do sistema, como a dimensionalidade do mesmo, o número de componentes do parâmetro de ordem, e o fato das interações microscópicas possuírem alcance finito ou infinito.

Consideremos um ponto fixo não trivial, dado por:

$$K_i^* = R_b^i(\{K^*\}) \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (1.2.6)$$

Na vizinhança deste ponto, fazemos uma análise linear, efetuando uma expansão de $R_b^i(\{K\})$

$$K_i' = R_b^i(\{K^*\}) + \sum_{j=1}^N M_{ij}(\{K^*\}) (K_j - K_j^*) + O(K - K^*)^2 \quad (1.2.7)$$

onde:

$$M_{ij}(\{K^*\}) = \left. \left(\frac{\partial R_b^i}{\partial K_j} \right) \right|_{\{K\}=\{K^*\}} \quad (1.2.8)$$

Usando a eq. (1.2.6) em (1.2.7) e desprezando termos não lineares, obtemos:

$$(K_i' - K_i^*) = \sum_{j=1}^N M_{ij}(\{K^*\}) (K_j - K_j^*) \quad (1.2.9)$$

A diagonalização da matriz M_{ij} permite encontrar seus autovalores (λ^a) e autovetores (V_j^a) que satisfazem à relação:

$$\sum_{j=1}^N V_j^a M_{ji} (\{K^*\}) = \lambda^a V_i^a \quad (a = 1, 2, \dots, N) \quad (1.2.10)$$

Definindo coordenadas normais X_a dadas por:

$$X_a = \sum_{j=1}^N V_j^a (K_j - K_j^*) \quad (1.2.11)$$

obtemos as seguintes transformações:

$$X_a' = \lambda_a X_a \quad (1.2.12)$$

Estas variáveis X_a que sob a renormalização sofrem uma simples mudança de escala e que se anulam no ponto fixo, são os *campos de escala*, que têm como exemplos (em um ferromagneto) as grandezas t e H .

A análise dos valores de λ_a permite concluir que:

- (i) se $\lambda_a > 1$, então a renormalização afasta o sistema do ponto crítico ($X_a' > X_a$). A interação associada ao campo de escala X_a é dita *relevante*;
- (ii) se $\lambda_a < 1$ então $X_a' < X_a$ e o sistema se aproxima do ponto crítico. A interação correspondente é *irrelevante*;
- (iii) quando $\lambda_a = 1$ então $X_a' = X_a$ e a análise linear é insuficiente para estabelecer critérios de estabilidade do ponto crítico (o campo de escala associado é denominado *marginal*).

O conhecimento dos autovalores (λ_a) do Jacobiano (M_{ij}) da transformação (R_b) calculados no ponto fixo crítico, permite a determinação dos expoentes críticos. Vamos exemplificar esta afirmativa, supondo um ferromagneto, cujos campos de escala são $t = T - T_c$ e H (no ponto crítico $t = H = 0$). Sejam λ_T e λ_H os autova

lores associados respectivamente as direções t e H . Fazendo inicialmente $H = 0$ e perturbando o sistema na direção t , a renormalização resultará em:

$$t' = \lambda_T t \quad (1.2.13)$$

$$\xi' = \xi/b \quad (1.2.14)$$

Como $\xi \sim (-t)^{-\nu_T}$ e $\xi' \sim (-t')^{-\nu_T}$ (ν_T é o expoente associado à divergência de ξ na direção t), as eqs. (1.2.13) e (1.2.14) permitem obter:

$$\nu_T = \ln b / \ln \lambda_T \quad (1.2.15)$$

Fazendo $t = 0$ e estudando o movimento na direção H , obtemos analogamente:

$$\nu_H = \ln b / \ln \lambda_H \quad (1.2.16)$$

onde ν_H é o expoente definido por $\xi \sim H^{-\nu_H}$ ($t=0$).

É possível mostrar também que sob a renormalização, a parte singular da densidade de energia livre se transforma como:

$$g(\{K\}) = b^{-d} g(\{K'\}) \quad (1.2.17)$$

Utilizando esta relação e expressões de transformação para a função de correlação, podemos determinar os demais expoentes críticos, e verifica-se que eles satisfazem às previsões das hipóteses de escala, mencionadas na seção anterior.

Duas divisões são usualmente feitas, no que tange ao

procedimento utilizado para a construção do GR:

(i) *renormalização no espaço recíproco* que considera uma distribuição contínua das variáveis e elimina os graus de liberdade efetuando integrações sobre os grandes comprimentos de onda. Este método fornece bons valores para os expoentes críticos (que são dados como expansões do parâmetro $\epsilon = 4-d$) em dimensões altas, mas falha no cálculo de grandezas que são sensíveis à estrutura da rede (como a temperatura crítica);

(ii) *renormalização no espaço real* que subdivide o sistema em blocos, e elimina graus de liberdade, efetuando traços parciais em alguns graus de liberdade internos dos blocos. Este método é de mais fácil visualização que o anterior e permite obter valores precisos para a temperatura crítica e em alguns casos também para os expoentes.

A escolha do tamanho e da simetria dos blocos que são renormalizados é em grande parte responsável pelo sucesso do método. Originalmente proposta por Niemeijer e Van Leeuwen⁽⁶⁴⁾, a renormalização no espaço real, tem sido generalizada de diversas maneiras (o que a grosso modo corresponde à escolha de diferentes R_b), e uma revisão atualizada destes métodos e das principais aplicações físicas é dada na referência (65).

Neste trabalho somente consideraremos a renormalização no espaço real. O procedimento básico que usaremos consiste na renormalização de blocos de spins, representados por grafos de 2 sítios terminais, sendo os spins dos sítios internos eliminados por meio da realização de traços parciais.

1.3 - RENORMALIZAÇÃO EM SISTEMAS QUÂNTICOS

As transições de fase que ocorrem em sistemas quânticos, são caracterizadas pela existência de flutuações de origem quântica, que se superpõem às flutuações térmicas, podendo mesmo se tornarem predominantes a baixas temperaturas. Outro aspecto que torna particularmente interessante o estudo destas transições, é a correspondência que existe entre certos sistemas clássicos d-dimensionais e sistemas quânticos de dimensões inferiores ⁽⁶⁶⁻⁷⁰⁾.

A não comutatividade dos termos do Hamiltoniano introduz enormes dificuldades operacionais, que tornam o estudo de propriedades estatísticas extremamente difícil. Consequentemente poucas soluções exatas ^(42,45) são conhecidas e o uso de técnicas aproximativas analíticas ^(71,72) e numéricas ^(43,48,73) torna-se necessário.

O método de renormalização no espaço real, tem sido generalizado a partir da década passada, para estudar a criticalidade de sistemas quânticos ⁽⁷⁴⁾. Transições térmicas ($T_c \neq 0$) e quânticas ($T_c = 0$) foram examinadas por meio de diversas técnicas (decimação, Migdal-Kadanoff, renormalização de campo médio, etc) aplicadas a vários modelos, como o de Ising com campo transversal ⁽⁷⁵⁻⁸¹⁾, XY ⁽⁸²⁻⁸⁴⁾, Heisenberg com ou sem anisotropia ⁽⁸⁵⁻⁹⁵⁾ e Hubbard ⁽⁹⁶⁻⁹⁹⁾. Um problema comum a quase todos estes métodos é a dificuldade para a realização de traços parciais, de modo que em geral este traço é feito somente aproximadamente, ou exatamente apenas em blocos muito especiais (como uma cadeia de 3 spins).

Em 1983 ⁽⁹⁵⁾ foi proposto um método para o modelo de Heisenberg anisotrópico de spin 1/2, que permitiu a realização do traço parcial exato em um bloco representado pelo grafo da ponte de

Wheatstone (que devido à sua auto-dualidade é comumente usado para renormalização na rede quadrada). Posteriormente este método foi generalizado ⁽¹⁰⁰⁾ para a renormalização em um grafo *arbitrário* de 2 terminais, considerando o cálculo *exato* do traço parcial nos spins localizados nos sítios internos. Para desenvolver este método, vamos considerar o seguinte Hamiltoniano (adimensional) do modelo de Heisenberg anisotrópico de spin 1/2,

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} [(1-\Delta_{ij})(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] \quad (1.3.1)$$

sendo $K_{ij} = J_{ij}/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann), Δ_{ij} é o parâmetro de anisotropia no espaço dos spins, σ_i^α ($\alpha = x, y, z$) são as matrizes de Pauli e $\langle i, j \rangle$ sítios primeiros vizinhos. Notemos que o fator térmico $-1/k_B T$ já está incluído em H , que tem ligações ferromagnéticas (antiferromagnéticas) se $K_{ij} > 0$ ($K_{ij} < 0$).

Os casos particulares $\Delta_{ij} = 1, 0, -\infty$ correspondem respectivamente a interações de Ising, Heisenberg isotrópica e XY, sendo que para $\Delta_{ij} \neq 1$ o Hamiltoniano contém termos não comutativos.

Consideremos um grafo arbitrário de 2 terminais conectados (alguns exemplos são dados na Figura 1.3.1) contendo N sítios, dos quais 2 terminais (sítios 1 e 2) e $N-2$ sítios internos (3, 4, ..., N). Depois de substituir as ligações em paralelo (se existirem) por suas equivalentes, conforme é feito no Apêndice A.1, haverá no máximo $N(N-1)/2$ ligações, cada uma delas caracterizada pelos parâmetros (K_{ij}, Δ_{ij}) . $K_{ij} = 0$ define uma ligação ausente.

A renormalização consiste em substituir o grafo de N sítios por um grafo de uma ligação (Figura 1.3.1(a)) e 2 terminais,

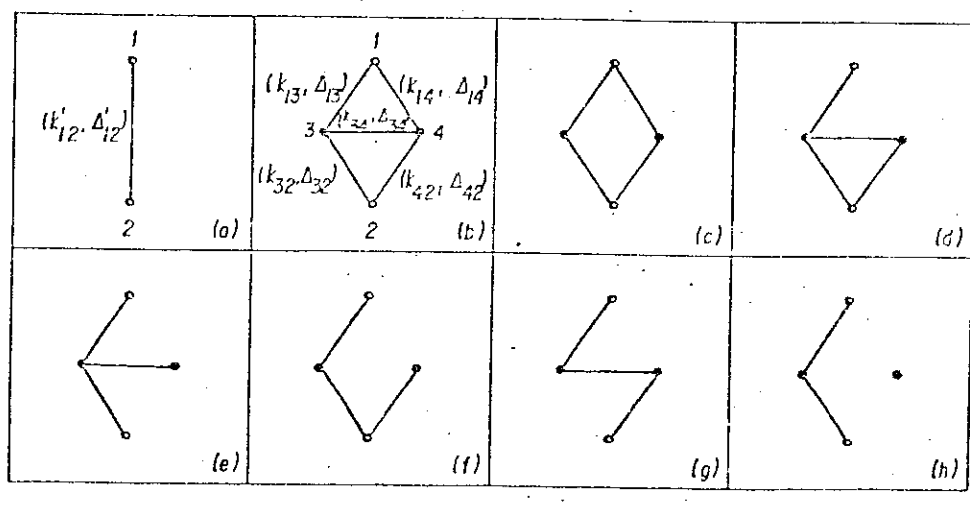


FIGURA 1.3.1 - Exemplos de grafos de 2 terminais. (a) e (b): grafos autoduais , usados no Capítulo 2 para renormalização da rede quadrada; (c) -(h): todos os subgrafos inequivalentes do grafo (b) (gerados por diluição de ligações), que mantêm os terminais conectados.

cujos Hamiltonianos são dados por:

$$H' = K'_0 + K' [(1-\Delta') (\sigma_1^X \sigma_2^X + \sigma_1^Y \sigma_2^Y) + \sigma_1^Z \sigma_2^Z] \quad (1.3.2)$$

Nesta operação, a redução dos graus de liberdade é feita com a eliminação dos sítios internos, por meio de traços parciais efetuados sobre as configurações dos mesmos. Os aspectos físicos relevantes são preservados impondo-se a invariância da função de correlação entre os dois terminais (e a invariância da função de partição):

$$e^{H'} = \text{Tr}_{3,4,\dots,N} e^H \quad (1.3.3)$$

onde $\text{Tr}_{3,4,\dots,N}$ indica o traço a ser feito sobre as configurações dos spins internos. Observemos ainda, que H' possui uma constante aditiva (K'_0) cuja inclusão é necessária em procedimentos de

renormalização ⁽⁶⁴⁾, para possibilitar o correto balanceamento da energia do sistema.

Com a realização do traço parcial (eq. (1.3.3)), podemos em princípio, obter K'_0 , K' e Δ' como funções de $\{K_{ij}, \Delta_{ij}\}$. Estas funções são as relações iterativas a que serão aplicados os procedimentos sistemáticos do GR.

Para a obtenção destas funções, vamos inicialmente expandir ambos os lados da eq. (1.3.3):

$$e^{H'} = a' + b'_{12} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + c'_{12} \sigma_1^z \sigma_2^z \quad (1.3.4)$$

(a' , b'_{12} e c'_{12} são funções de K'_0 , K' e Δ').

Analogamente:

$$e^H = a + \sum_{i < j} \left[b_{ij} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + c_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \right] +$$

$$+ \sum_{\substack{(i < j) \neq (k < \ell) \\ (\alpha, \beta) = (x, y, z)}} d_{ij, k\ell}^{\alpha\beta} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \sigma_k^\beta \sigma_\ell^\beta + \sum_{\substack{(i < j) \neq (k < \ell) \neq (m < n) \\ (\alpha, \beta, \gamma) = (x, y, z)}} e_{ij, k\ell, mn}^{\alpha\beta\gamma} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \sigma_k^\beta \sigma_\ell^\beta \sigma_m^\gamma \sigma_n^\gamma + \dots \quad (1.3.5)$$

onde os índices superiores ($\alpha, \beta, \gamma, \dots$) referem-se às componentes (x, y, z) podendo ou não serem iguais. Os índices inferiores (i, j, k, ℓ, \dots) referem-se a sítios diferentes (todas as combinações possíveis) e os somatórios só acoplam um número par de sítios, até um máximo de N (ou $N-1$) sítios, conforme N seja par (ou ímpar). Os coeficientes a , b_{ij} , c_{ij}, \dots , são funções do conjunto de parâmetros

do grafo $\{K_{ij}, \Delta_{ij}\}$. Efetuando o traço parcial (eq. (1.3.3)) em (1.3.5), obtemos:

$$\begin{aligned} a' &= 2^{N-2} a & \text{a)} \\ b'_{12} &= 2^{N-2} b_{12} & \text{b)} \\ c'_{12} &= 2^{N-2} c_{12} & \text{c)} \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

Observemos que apesar da expansão de e^H conter um grande número de termos (para $N > 2$), com vários coeficientes, somente 3 deles (a, b_{12}, c_{12}) permanecem após a realização do traço parcial. Isto nos assegura a *não proliferação de interações*. Esta proliferação ocorre quando surgem na renormalização termos novos que originalmente não existiam no Hamiltoniano (por exemplo, isto ocorreria no presente problema se os termos de 4 corpos não se anulassem sob o traço parcial).

O próximo passo do método, consiste na diagonalização de H' e H .

Para a diagonalização de H' , vamos escolher a base $|\sigma_1^Z \sigma_2^Z\rangle = \{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$ de autovetores do operador $\sigma^Z = \sum_{i=1}^2 \sigma_i^Z$ que comuta com H' .

Nesta base, a matriz que representa H' tem a forma:

$$H' = \begin{pmatrix} K'_0 + K' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & K'_0 - K' & 2W' & 0 \\ 0 & 2W' & K'_0 - K' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K'_0 + K' \end{pmatrix} \quad (1.3.7)$$

(sendo $W' = K'(1 - \Delta')$).

Os autovalores de H' são:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_1' &= K_0' + K' & \text{a)} \\
 \varepsilon_2' &= K_0' - K' + 2W' & \text{b)} \\
 \varepsilon_3' &= K_0' - K' - 2W' & \text{c)} \\
 \varepsilon_4' &= \varepsilon_1' & \text{d)}
 \end{aligned}
 \tag{1.3.8}$$

Os autovetores normalizados, dispostos em colunas, formam a matriz unitária U' dada por:

$$U' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \tag{1.3.9}$$

Pode-se mostrar ⁽¹⁰¹⁾ que:

$$U'^{\dagger} H' U' = H_D'
 \tag{1.3.10}$$

onde $(H_D')_{ij} = (\varepsilon_i') \delta_{ij}$ é a representação diagonal de H' , e U'^{\dagger} é a conjugada hermitiana de U' ($U'_{ij}{}^{\dagger} = U'_{ji}^*$). δ_{ij} é a delta de Kroenecker.

Usando a eq. (1.3.10) temos ⁽¹⁰¹⁾:

$$e^{H'} = e^{U' H_D' U'^{\dagger}} = U' e^{H_D'} U'^{\dagger}
 \tag{1.3.11}$$

Como $\left(e^{H_D'} \right)_{ij} = \left(e^{\varepsilon_i'} \right) \delta_{ij}$, obtemos finalmente:

$$e^{H'} = \begin{pmatrix} e^{\varepsilon'_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{e^{\varepsilon'_2} + e^{\varepsilon'_3}}{2} & \frac{e^{\varepsilon'_2} - e^{\varepsilon'_3}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{e^{\varepsilon'_2} - e^{\varepsilon'_3}}{2} & \frac{e^{\varepsilon'_2} + e^{\varepsilon'_3}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{\varepsilon'_1} \end{pmatrix} \quad (1.3.12)$$

Expressando o lado direito da eq. (1.3.4) na mesma base, obtemos a seguinte matriz:

$$e^{H'} = \begin{pmatrix} a' + c'_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a' - c'_{12} & 2b'_{12} & 0 \\ 0 & 2b'_{12} & a' - c'_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a' + c'_{12} \end{pmatrix} \quad (1.3.13)$$

Igualando as eqs. (1.3.12) e (1.3.13), e usando as eqs. (1.3.8) e (1.3.6), encontramos as seguintes relações:

$$K' = \frac{1}{4} \ell n \left[\frac{(a' + c'_{12})^2}{(a' - c'_{12})^2 - 4b'^2_{12}} \right] = \frac{1}{4} \ell n \left[\frac{(a + c_{12})^2}{(a - c_{12})^2 - 4b^2_{12}} \right] \quad (1.3.14)$$

$$W' = K' (1 - \Delta') = \frac{1}{4} \ell n \left[\frac{a' - c'_{12} + 2b'_{12}}{a' - c'_{12} - 2b'_{12}} \right] = \frac{1}{4} \ell n \left[\frac{a - c_{12} + 2b_{12}}{a - c_{12} - 2b_{12}} \right] \quad (1.3.15)$$

$$K'_0 = \frac{1}{4} \ell n \left[(a' + c'_{12})^2 ((a' - c'_{12})^2 - 4b'^2_{12}) \right] = \frac{1}{4} \left\{ (2N - 4) \ell n 2 + \ell n \left[(a + c_{12})^2 ((a - c_{12})^2 - 4b^2_{12}) \right] \right\} \quad (1.3.16)$$

A diagonalização (analítica ou numérica) de H pode ser feita na base de autovetores do operador $\sigma^z = \sum_{i=1}^N \sigma_i^z$ que é constante de movimento. Nesta base $|\sigma_1^z \sigma_2^z \dots \sigma_N^z\rangle = \{|+\dots+\rangle, |+\dots-\rangle, \dots, |-\dots+\rangle, |-\dots-\rangle\}$ H possui a seguinte estrutura de blocos:

$$H = \left(\begin{array}{ccccccc} A_{(0)}^{(N)} & & & & & & \\ & A_{(1)}^{(N)} & & & & & \\ & & \dots & & & & \\ & & & A_{(r)}^{(N)} & & & \\ & & & & \dots & & \\ & & & & & & A_{(N-1)}^{(N)} \\ & & & & & & & A_{(N)}^{(N)} \end{array} \right) \quad (1.3.17)$$

onde $A_{(r)}^{(N)} = A_{(N-r)}^{(N)}$ ($r = 0, 1, \dots, N$) é uma matriz de ordem $\binom{N}{r} \times \binom{N}{r}$ definida nos subespaços onde existem r spins em uma direção e $N-r$ na direção oposta. A diagonalização de H , pode ser feita separadamente em cada bloco, resultando os autovalores ϵ_i ($i=1, 2, 3, \dots, 2^N$) e autovetores que dispostos em colunas, formam a matriz U de ordem $2^N \times 2^N$ (possuindo a mesma estrutura de blocos de H). Utilizando relações análogas às eqs. (1.3.10) e (1.3.11) obtemos:

$$e^H = U e^{H^D} U^\dagger \quad (1.3.18)$$

Expressando U e H^D como funções dos autovalores ϵ_i , que por sua vez dependem dos parâmetros $\{K_{ij}, \Delta_{ij}\}$, encontramos:

$$e^H = F(\{K_{ij}, \Delta_{ij}\}) \quad (1.3.19)$$

Representando na mesma base o lado direito da equação (1.3.5), temos:

$$e^H = G(a, b_{12}, c_{12}, b_{13}, \dots) \quad (1.3.20)$$

Finalmente, igualando as eqs. (1.3.19) e (1.3.20), encontramos a dependência funcional de a, b_{12} e c_{12} com $\{K_{ij}, \Delta_{ij}\}$. Usando estas relações nas expressões (1.3.14), (1.3.15) e (1.3.16), obtemos K'_0, K' e Δ' como funções do conjunto de parâmetros $\{K_{ij}, \Delta_{ij}\}$ do grafo.

Estas funções serão obtidas explicitamente ou numericamente, conforme seja possível diagonalizar analiticamente ou numericamente, respectivamente, a matriz que representa H (o que vai depender do tamanho e simetria do grafo, e da distribuição dos parâmetros $\{K_{ij}, \Delta_{ij}\}$).

No Apêndice A, apresentamos fórmulas analíticas para a renormalização de um grafo com N ligações em paralelo, e um grafo com 2 ligações em série (Fig. 1.3.1(h)). Obtivemos também fórmulas explícitas para a renormalização de todos os grafos da Fig. 1.3.1 (com $(K_{ij}, \Delta_{ij}) = (K, \Delta)$), que são bastante longas para serem aqui exibidas. Em particular, a fórmula correspondente ao grafo da Fig. 1.3.1(b) encontra-se na referência (95).

A principal vantagem do presente método, é que a média térmica no grafo é realizada *exatamente*, e independe da base, ao contrário de outros métodos de renormalização (81).

Vale a pena ressaltar, que a renormalização de grafos de 2 terminais gera, por iteração, uma rede hierárquica (102) e não uma rede de Bravais, embora certas redes hierárquicas simulem surpreendentemente bem (para efeitos de fenômenos críticos) redes regulares.

No contexto de redes hierárquicas o método anterior fornece soluções *exatas* para sistemas clássicos (102) ($\Delta = 1$ no presente modelo). Em sistemas quânticos o método não é exato, já que despreza a não comutatividade entre os grafos (95, 103), mas ape -

sar disso, é capaz de fornecer excelentes resultados, conforme veremos no próximo capítulo.

1.4 - EFEITOS QUÂNTICOS NA RENORMALIZAÇÃO

Analizamos nesta seção, alguns efeitos que se manifestam na renormalização, e que tem origem no caráter quântico do Hamiltoniano. Nos limitamos ao estudo do intervalo $0 \leq K_{ij}$ e $0 \leq \Delta_{ij} \leq 1$, embora os efeitos aqui apresentados ocorram também para outros valores de K_{ij}, Δ_{ij} .

1.4.1 - CADEIA LINEAR

Em um sistema clássico de spins, a resolução de uma cadeia linear pode ser obtida exatamente "por partes", isto é, decompos a cadeia em blocos finitos de N sítios, resolvemos estes blocos e obtemos a solução geral por superposição direta das partes. Este procedimento deixa de ser exato em sistemas quânticos ⁽⁸⁷⁾, pois não considera a não comutatividade entre os blocos de spins, quando superpostos para formar a cadeia.

Vamos ilustrar este fato, considerando a renormalização do grafo da Figura 1.3.1(g) (que consiste de 3 ligações em série), empregando o método descrito na seção anterior. A renormalização do grafo considerado globalmente, resulta em $K'_1(K, \Delta)$ e $\Delta'_1(K, \Delta)$ (cujas fórmulas analíticas são bastante extensas para serem apresentadas aqui). A renormalização por partes, inicialmente compõe

2 ligações em série, obtendo $\tilde{K}(K, \Delta)$ e $\tilde{\Delta}(K, \Delta)$, e a seguir renormaliza o grafo resultante desta ligação com a ligação (K, Δ) restante, obtendo finalmente $K'_2(\tilde{K}, \tilde{\Delta}, K, \Delta)$ e $\Delta'_2(\tilde{K}, \tilde{\Delta}, K, \Delta)$ (ver fórmulas explícitas no Apêndice A.2). Vamos definir os quocientes:

$$R_S^K = \frac{K'_2}{K'_1} \quad \text{a)}$$

$$R_S^\Delta = \frac{\Delta'_2}{\Delta'_1} \quad \text{b)}$$

(1.4.1.1)

A análise de R_S^K e R_S^Δ mostra (a Fig. 1.4.1.1 exibe a variação de

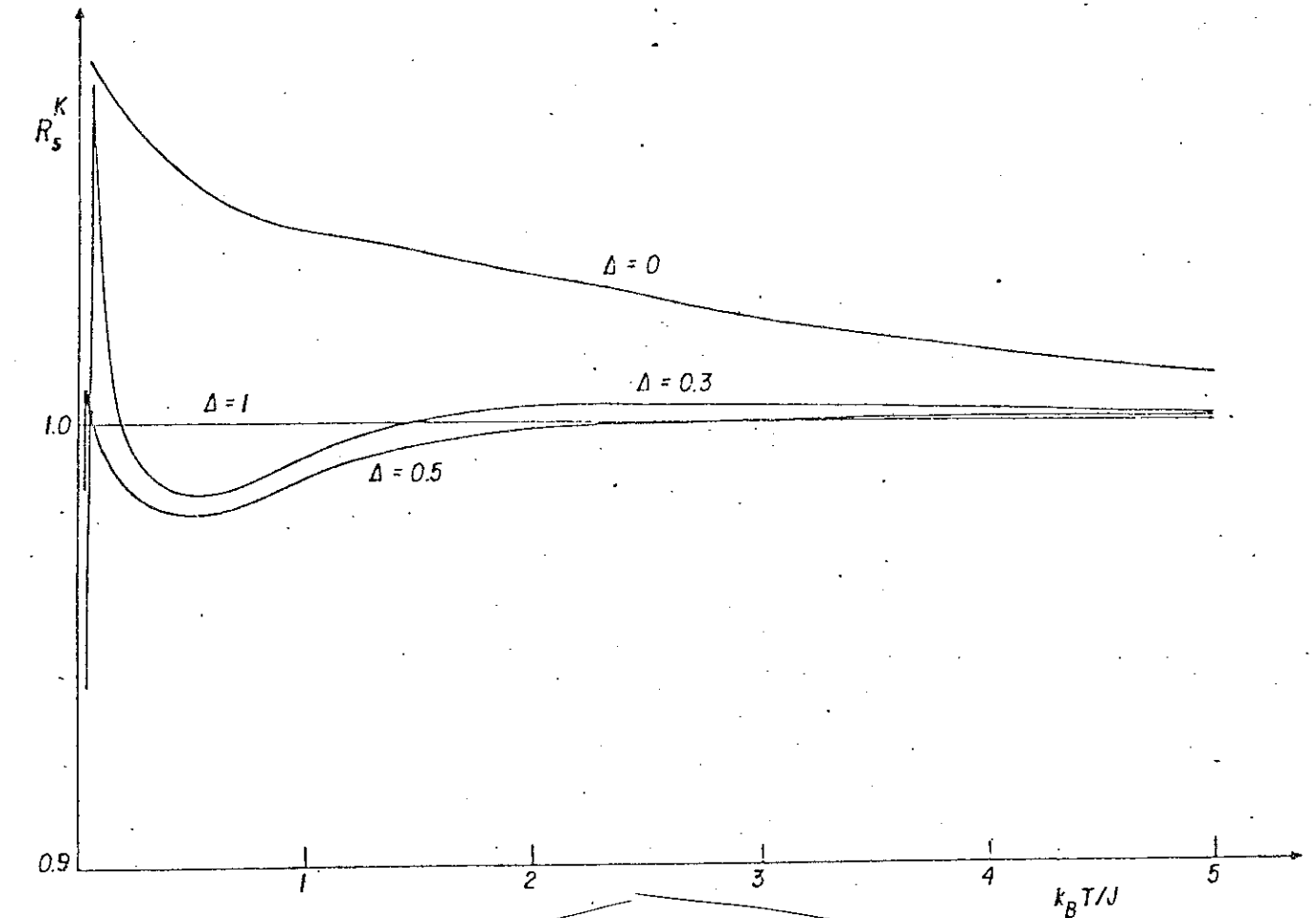


FIGURA 1.4.1.1 - Variação térmica de R_S^K para valores típicos de Δ . $R_S^K = 1$ é o valor clássico ($\Delta = 1$ e/ou $k_B T/J \rightarrow \infty$).

R_S^K com $1/K$, para vários valores de Δ) os seguintes aspectos :
 (i) se $\Delta = 1$ ($\forall K$), $R_S^K = R_S^\Delta = 1$ (resultado clássico); (ii) se $K \rightarrow 0$ ($T \rightarrow \infty$) então $R_S^K \cong 1$ e $R_S^\Delta \cong 1$ pois em altas temperaturas os efeitos quânticos são irrelevantes; (iii) para $K \gg 0$ (T finito) R_S^K e R_S^Δ flutuam em torno do valor clássico, com amplitudes que aumentam à medida que a temperatura diminui.

1.4.2 - GRAFOS COM LIGAÇÕES SOLTAS

Um subgrafo de um determinado grafo, é dito solto ("dangling") se ele é conectado a algum terminal por meio de um único sítio. Para o cálculo da correlação entre os terminais, os subgrafos soltos são irrelevantes se o sistema é clássico. Assim os grafos das Figuras 1.3.1(e), (f) e (h) têm a mesma conectividade se $\Delta_{ij} = \Delta = 1 \forall (ij)$. Em sistemas quânticos os grafos soltos (cujo exemplo mais simples é uma ligação) alteram a conectividade entre os terminais, como mostraremos nesta secção.

A renormalização dos grafos 1.3.1(e), (f) e (h), com $(K_{ij}, \Delta_{ij} = K, \Delta)$ tem como parâmetros renormalizados, as respectivas funções $K'_e(K, \Delta)$, $\Delta'_e(K, \Delta)$; $K'_f(K, \Delta)$, $\Delta'_f(K, \Delta)$; $K'_h(K, \Delta)$, $\Delta'_h(K, \Delta)$, cujas expressões não são reproduzidas aqui, por serem demasiadamente extensas. No caso clássico $\Delta = 1$, $K'_e = K'_f = K'_h \equiv K'_c(K)$ e $\Delta'_e = \Delta'_f = \Delta'_h = 1$. Para analisar os efeitos quânticos, vamos introduzir os quocientes:

$$R^{(i)} = \frac{K'_i(K, \Delta)}{K'_c(K)} \quad (i = e, f, h) \quad (1.4.2.1)$$

Os seguintes comportamentos foram observados (Fig. 1.4.2.1) :

(i) No limite de altas temperaturas ($T \rightarrow \infty$), $R^{(e)}$, $R^{(f)}$ e $R^{(h)}$ tendem para o valor clássico $R_c = 1$ (com correções em $1/T$) para qualquer Δ ; (ii) No limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$) observamos os seguintes comportamentos assintóticos:

$$R^{(e)} \cong \frac{1}{2} (3 - \sqrt{3\Delta^2 - 6\Delta + 4}) \in [\frac{1}{2}, 1] \quad (1.4.2.2)$$

$$R^{(f)} \cong \begin{cases} \frac{1}{2} (2 + \Delta - \sqrt{5\Delta^2 - 8\Delta + 4}) \in (0, 1] & , \Delta > 0 \quad \text{a)} \\ 1 - \sqrt{2}/2 & , \Delta = 0 \quad \text{b)} \end{cases} \quad (1.4.2.3)$$

$$R^{(h)} \cong \frac{1}{4} (5 - \sqrt{8\Delta^2 - 16\Delta + 9}) \quad (1.4.2.4)$$

Notemos da equação (1.4.2.3) que $R^{(f)}$ apresenta uma interessante convergência não uniforme (em $T \cong 0$ e $\Delta \cong 0$), já que $R^{(f)} \approx \frac{3}{2} \Delta$ se $\Delta > 0$ ($R^{(f)} \rightarrow 0$ se $\Delta \rightarrow 0$) e em $\Delta = 0$ $R^{(f)}$ cresce abruptamente para o valor assintótico $R^{(f)} = 1 - \sqrt{2}/2$; (iii) $R^{(e)}$, $R^{(f)}$ e $R^{(h)}$ são sempre menores que 1, indicando que a natureza quântica do sistema diminui a conectividade entre os terminais.

A análise do comportamento do parâmetro de anisotropia mostra que: (i) Se $\Delta = 1$ (ou 0) então $\Delta_e = \Delta_f = \Delta_h = 1$ (ou 0); (ii) Para $0 < \Delta < 1$ a seguinte desigualdade é observada para qualquer temperatura $\Delta_f \geq \Delta_e \geq \Delta_h$; (iii) Quando $T \rightarrow \infty$, Δ_i ($i = e, f, h$) decresce monotonicamente para o valor assintótico: $\Delta_i \cong (2 - \Delta)\Delta$ ($i = e, h, f$).

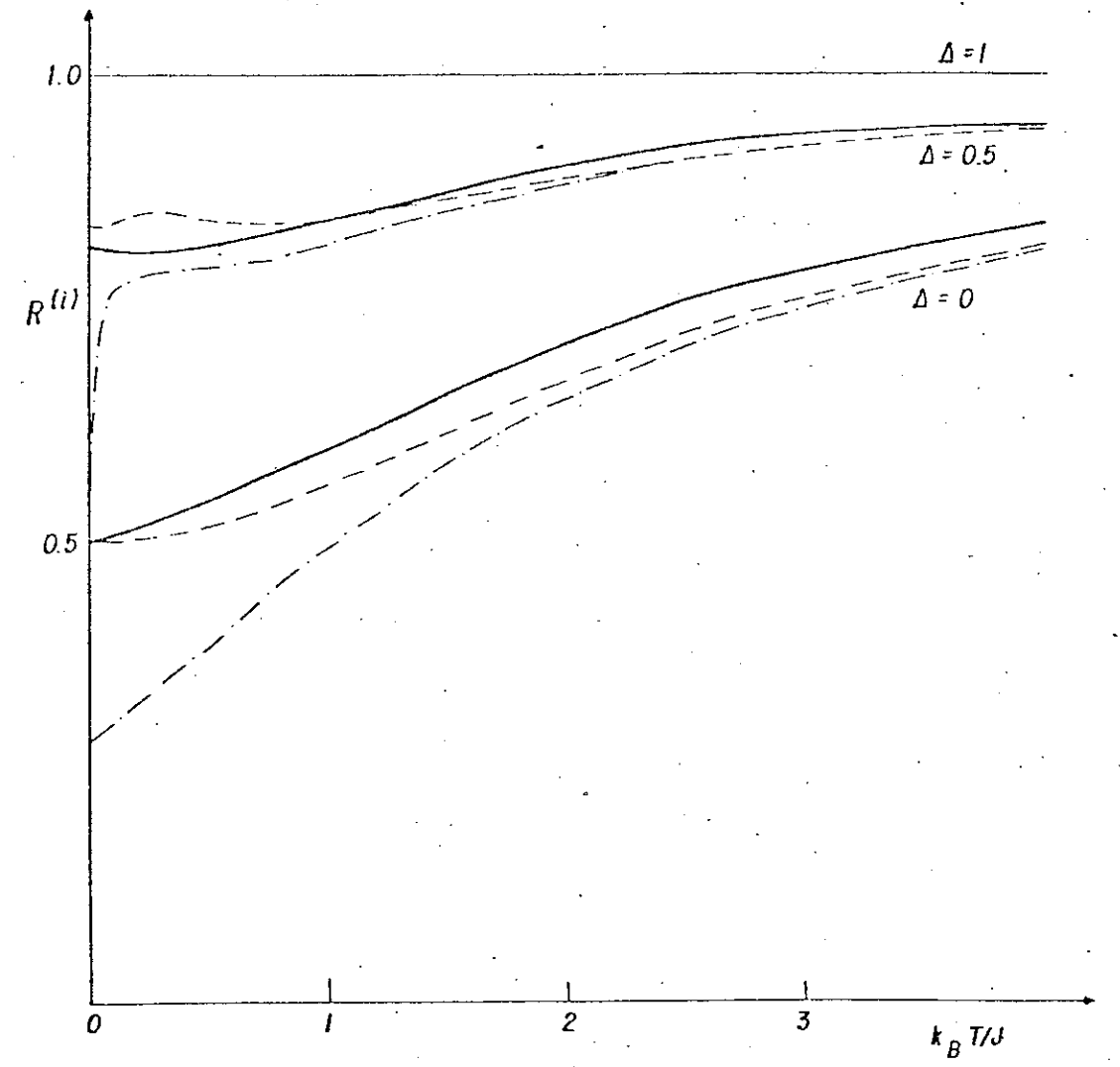


FIGURA 1.4.2.1 - Gráfico dos quocientes $R^{(e)}$ (-----), $R^{(f)}$ (-.-.-.-) e $R^{(h)}$ (—) em função da temperatura para valores típicos de Δ . $R^{(e)} = R^{(f)} = R^{(h)} = 1$ é o limite clássico.

1.4.3 - GRAFOS USADOS NA RENORMALIZAÇÃO DE MIGDAL-KADANOFF

Examinaremos agora os efeitos quânticos na renormalização do grafo da Figura 1.3.1(c) comumente usado em procedimentos do tipo Migdal-Kadanoff ^(104,105).

A renormalização global do grafo (com $K_{ij}, \Delta_{ij} = K, \Delta$) tem como resultado os parâmetros $K'_M(K, \Delta)$ e $\Delta'_M(K, \Delta)$. A renormaliza -

ção por partes, primeiro trata de 2 ligações em série cujo resultado é $K'_S(K, \Delta)$, $\Delta'_S(K, \Delta)$ (ver Apêndice A.2), e depois compõe as ligações resultantes em paralelo (ver Apêndice A.1), obtendo K'_p e Δ'_p . Vamos definir os quocientes:

$$R_d^K = \frac{K'_p}{K'_M} \quad (1.4.3.1)$$

$$R_d^\Delta = \frac{\Delta'_p}{\Delta'_M} \quad (1.4.3.2)$$

Uma estimativa do erro cometido na aproximação por partes pode ser feita pelo exame das Figuras 1.4.3.1 e 1.4.3.2.

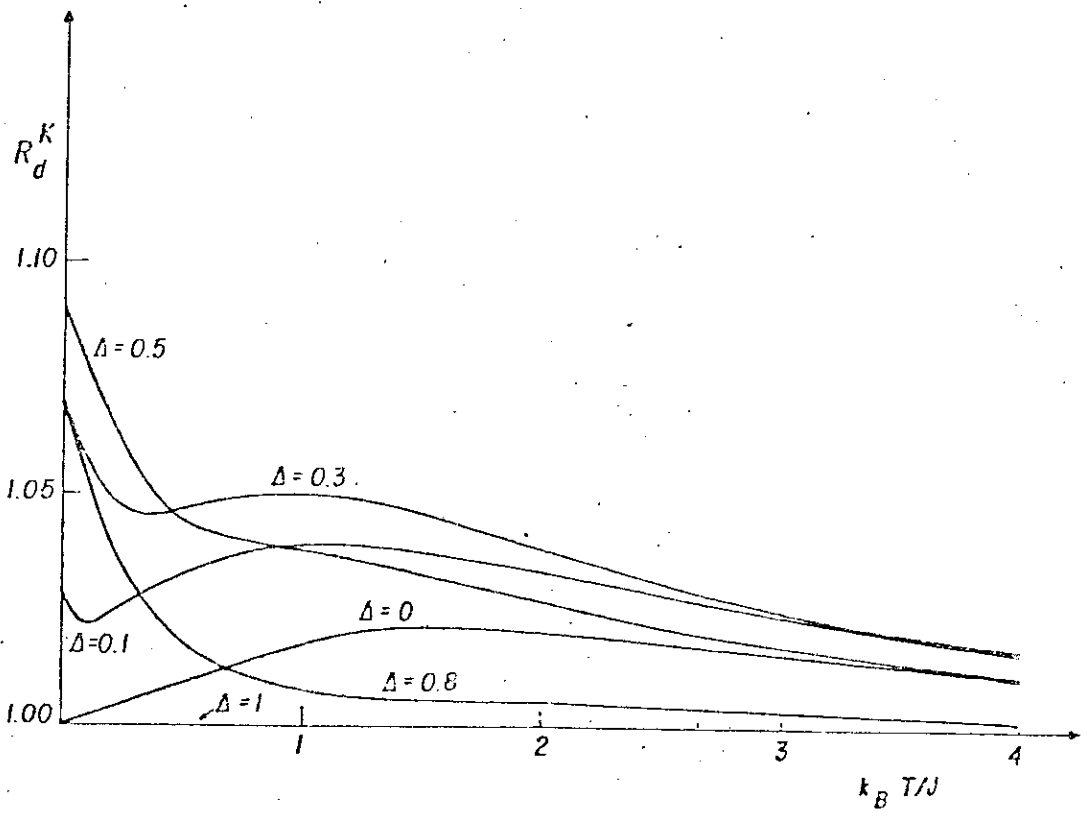


FIGURA 1.4.3.1 - Variação de R_d^K com a temperatura para valores seleccionados de Δ .

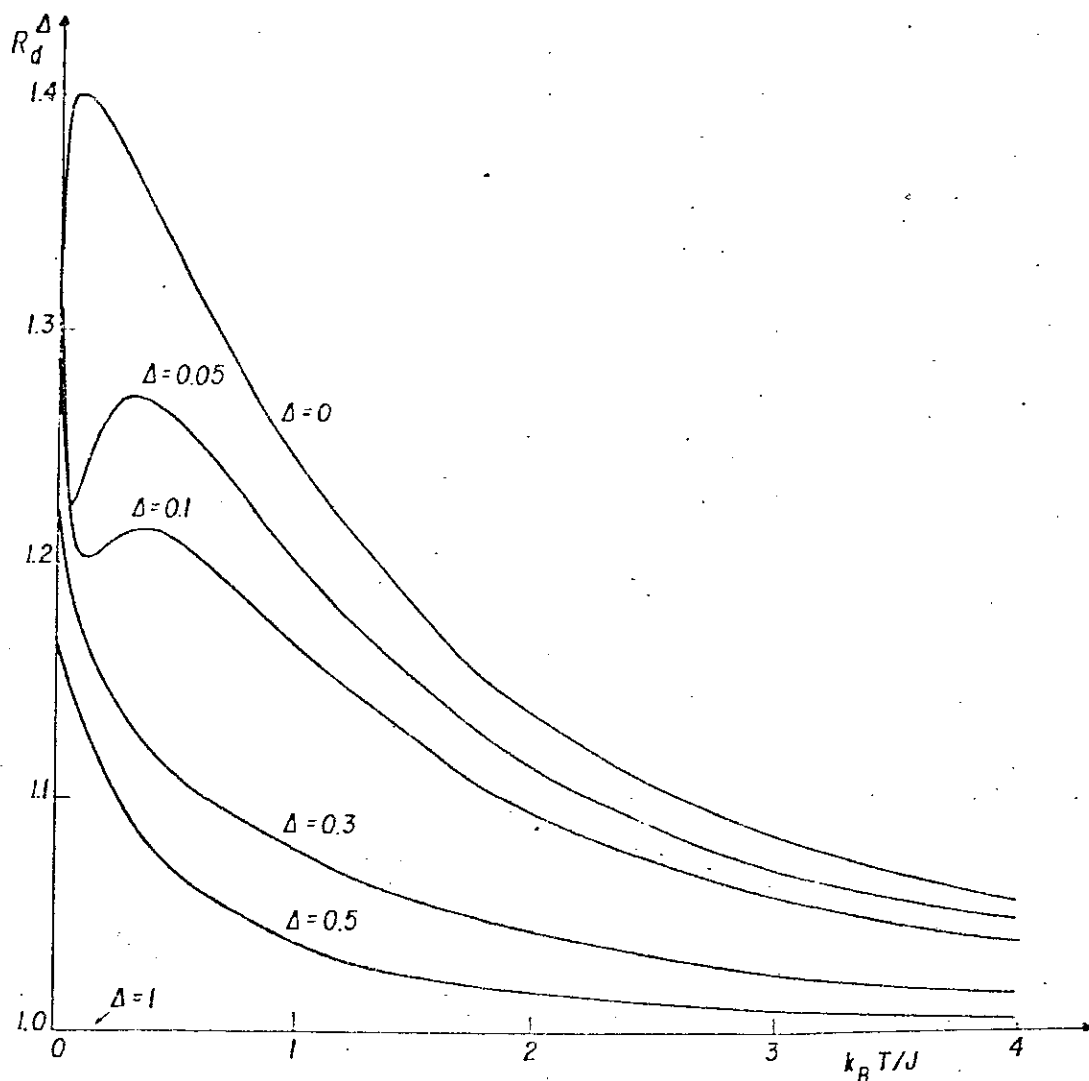


FIGURA 1.4.3.2 - Variação de R_d^Δ com a temperatura para valores selecionados de Δ .

No limite $T \rightarrow \infty$, R_d^K e R_d^Δ tendem para o valor clássico $R_d^K = R_d^\Delta = 1$ como esperado, com correções em $1/T^2$. No limite de baixas temperaturas, obtemos os seguintes limites assintóticos:

$$R_d^K \cong \frac{5 - \sqrt{8\Delta^2 - 16\Delta + 9}}{2(1+\Delta)} \in [1, 1.10) \quad (1.4.3.3)$$

$$R_d^\Delta \cong \frac{(1+\Delta)(6 - 2\sqrt{8\Delta^2 - 16\Delta + 9})}{2\Delta(5 - \sqrt{8\Delta^2 - 16\Delta + 9})} \in [1, 4/3] \quad (1.4.3.4)$$

Para temperaturas intermediárias, R_d^K e R_d^Δ , permanecem aproximadamente no mesmo intervalo de valores observados em $T = 0$. Este fato justifica "a posteriori" o procedimento por partes como uma boa aproximação para renormalizar sistemas quânticos pelo método de Migdal-Kadanoff (85,87,89,91).

CAPÍTULO 2

CRITICALIDADE DO MODELO DE HEISENBERG QUÂNTICO ANISOTRÓPICO DE SPIN 1/2

Utilizando o método de renormalização apresentado no capítulo anterior, estudamos as propriedades críticas do modelo de Heisenberg quântico anisotrópico de spin 1/2, em diferentes situações. No caso bidimensional, consideramos as desordens (temperadas) de diluição de ligações e diluição de anisotropias, e em três dimensões estudamos o modelo puro (sem desordem).

2.1 - DILUIÇÃO DE LIGAÇÕES NA REDE QUADRADA

Um dos aspectos aleatórios de maior interesse em magnetismo, é a diluição de sítios ou ligações, que existe em inúmeras substâncias, como os magnetos *bidimensionais* $K_2Co_pMg_{1-p}F_4$ ⁽¹⁰⁶⁾ (Ising), $Rb_2Mn_pMg_{1-p}F_4$ ⁽¹⁰⁷⁾ (Heisenberg isotrópico), $Rb_2Co_pMg_{1-p}F_4$ ^(108,109) (Heisenberg anisotrópico) e *tridimensionais* $Co_pZn_{1-p}Cs_3Cl_5$ ⁽¹¹⁰⁾, $Co(S_pSe_{1-p})_2$ ⁽¹¹¹⁾ (Ising), $KMn_pMg_{1-p}F_3$ ⁽¹¹²⁾ (Heisenberg isotrópico) e $Co_pZn_{1-p}L_6(ClO_4)_2$ ⁽¹¹³⁾ (XY, sendo L o radical C_5H_5NO).

O estudo teórico de sistemas similares, tem sido feito através de várias técnicas ⁽¹¹⁴⁾, como simulação de Monte Carlo, CPA, expansões em séries e Grupo de Renormalização. Este últi-

mo método (GR) tem se revelado particularmente conveniente para estudar a criticalidade de sistemas com o tipo de desordem mencionado. Assim diversos modelos foram estudados com resultados satisfatórios, como os modelos de Ising diluído (115-117) e misto (118, 119), Potts diluído (120,121), misto (122) e anisotrópico (123,124), Heisenberg isotrópico diluído (85,88), XY diluído (125,126) e Heisenberg anisotrópico diluído (89,100,127) entre outros.

Vamos considerar nesta seção somente a desordem (temperada) de ligações na rede quadrada, que também simula apropriadamente a diluição de sítios (a qual pode ser vista como uma diluição correlacionada de ligações). A principal característica da diluição é a existência de uma concentração mínima de ligações (ou sítios) abaixo da qual não existem "clusters" macroscópicos correlacionados e conseqüentemente não há ordem de longo alcance. Esta concentração mínima é chamada de ponto de percolação ($p = p_c$) (128,129).

Consideremos um sistema ferromagnético com anisotropia uniaxial, cujo Hamiltoniano (adimensional) é dado por:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} [(1-\Delta_{ij})(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] \quad (2.1.1)$$

onde K_{ij} ($K_{ij} \geq 0$), Δ_{ij} ($0 \leq \Delta_{ij} \leq 1$) e σ_i^α ($\alpha = x, y, z$) foram definidos no capítulo anterior.

A desordem é introduzida, admitindo ser K_{ij} uma variável aleatória que pode assumir os valores \underline{K} e $\underline{0}$ (ligação ausente) com probabilidades p e $1-p$ ($0 \leq p \leq 1$) respectivamente, cuja distribuição é dada pela seguinte lei de probabilidades:

$$P(K_{ij}, K_{ij}\Delta_{ij}) = p^{\delta(K_{ij}-K)}\delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K\Delta) + (1-p)\delta(K_{ij})\delta(K_{ij}\Delta_{ij}) \quad (2.1.2)$$

onde usamos a variável $\underline{K_{ij}\Delta_{ij}}$ para evitar a indeterminação de Δ_{ij} nas ligações ausentes ($K_{ij} = 0$).

Para representar a renormalização na rede quadrada, vamos usar o grafo da Figura 1.3.1(b) ⁽⁹⁵⁾. A aplicação da equação (2.1.2) ao referido grafo, consiste em considerar todos os subgrafos gerados a partir do mesmo, por diluição de ligações. A distribuição de probabilidades, toma então a seguinte forma:

$$\begin{aligned} P_H(K_{ij}, K_{ij}\Delta_{ij}) = & p^5 \delta(K_{ij}-K'_b)\delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K'_b\Delta'_b) + p^4(1-p)[\delta(K_{ij}-K'_c) \\ & \delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K'_c\Delta'_c) + 4\delta(K_{ij}-K'_d)\delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K'_d\Delta'_d)] + 2p^3(1-p)^2[\delta(K_{ij}-K'_e) \\ & \delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K'_e\Delta'_e) + 2\delta(K_{ij}-K'_f)\delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K'_f\Delta'_f) + \delta(K_{ij}-K'_g)\delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K'_g\Delta'_g)] \\ & + 2p^2(1-p)^3 \delta(K_{ij}-K'_h)\delta(K_{ij}\Delta_{ij}-K'_h\Delta'_h) + [2p^3(1-p)^2 + 8p^2(1-p)^3 + \\ & 5p(1-p)^4 + (1-p)^5] \delta(K_{ij})\delta(K_{ij}\Delta_{ij}) \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

sendo K'_i, Δ'_i ($i = b, c, d, e, f, g, h$) os parâmetros renormalizados dos grafos das Figs. 1.3.1(b), (c)...(h), respectivamente, que são os únicos subgrafos que mantêm os terminais conectados.

Podemos observar, que sob a renormalização, o caráter binário da distribuição de probabilidades original (eq.(2.1.2)) não é mantido. Este problema pode ser satisfatoriamente contornado ⁽¹³⁰⁾, se aproximarmos $P_H(K_{ij}, K_{ij}\Delta_{ij})$ pela distribuição binária -

ria $P'(K_{ij}, K_{ij}\Delta_{ij})$ dada pela expressão:

$$P'(K_{ij}, K_{ij}\Delta_{ij}) = p' \delta(K_{ij} - K') \delta(K_{ij}\Delta_{ij} - K'\Delta') + (1-p') \delta(K_{ij}) \delta(K_{ij}\Delta_{ij}) \quad (2.1.4)$$

As equações $p'(p, K, \Delta)$, $K'(p, K, \Delta)$ e $\Delta'(p, K, \Delta)$ que caracterizam a renormalização, podem ser obtidas escolhendo-se apropriadamente 3 funções de $(p, K_{ij}, K_{ij}\Delta_{ij})$ e igualando-se suas respectivas médias tomadas nas distribuições P' e P_H . No presente problema, a primeira equação escolhida foi a de percolação ⁽¹³¹⁾ que incorpora somente os aspectos geométricos do problema

$$p' = p^5 + 5p^4(1-p) + 8p^3(1-p)^2 + 2p^2(1-p)^3 \quad (2.1.5)$$

Para a 2ª equação escolhemos a função $S(K_{ij})$ que tem se revelado apropriada para os modelos de Ising e Potts (ver por exemplo a referência ⁽¹³²⁾)

$$S(K_{ij}) = \frac{\ln[1 + \tanh(K_{ij})]}{\ln 2} \quad (2.1.6)$$

igualamos então:

$$\langle S(K_{ij}) \rangle_{P'} = \langle S(K_{ij}) \rangle_{P_H} \quad (2.1.7)$$

Na obtenção da 3ª equação usamos a função $S(K_{ij}\Delta_{ij})$ que é uma extensão natural de $S(K_{ij})$.

$$\langle S(K_{ij}\Delta_{ij}) \rangle_{P'} = \langle S(K_{ij}\Delta_{ij}) \rangle_{P_H} \quad (2.1.8)$$

Conseqüentemente as eqs. (2.1.5), (2.1.7) e (2.1.8) nos permitem obter (p', K', Δ') como funções de (p, K, Δ) , e com o uso do formalismo da teoria de GR estudar a criticalidade do sistema.

Na Fig. 2.1.1 apresentamos a fronteira crítica em função das variáveis $(p, 1/K = k_B T/J, \Delta)$.

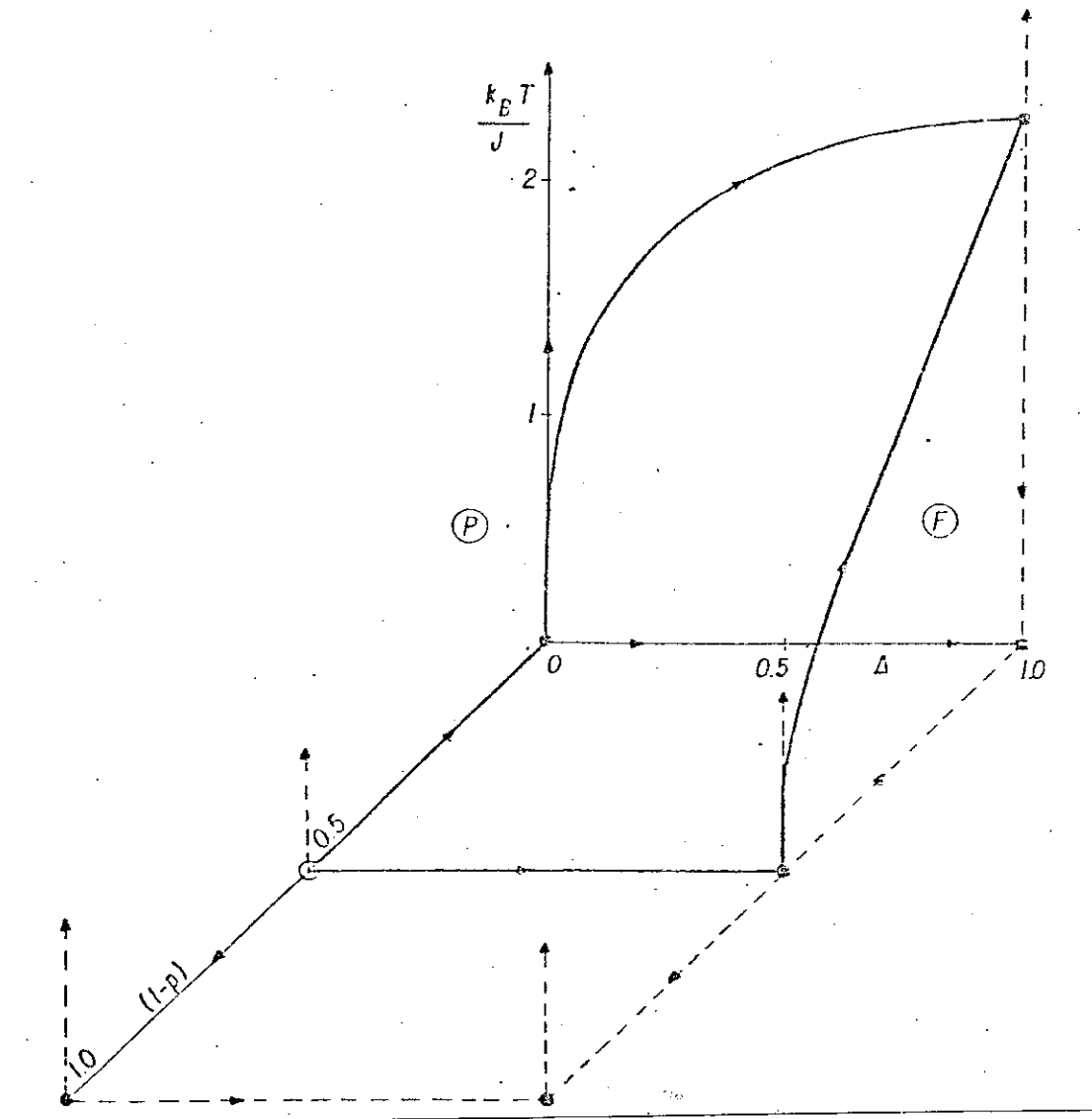


FIGURA 2.1.1(a) - Fronteira crítica, diagrama de fluxos e pontos fixos. F e P designam respectivamente as fases ferromagnética e paramagnética. Todos os pontos críticos com $k_B T/J > 0$ fluem para o ponto fixo do modelo de Ising puro ($p = 1, k_B T/J = 2.27\dots, \Delta = 1$).

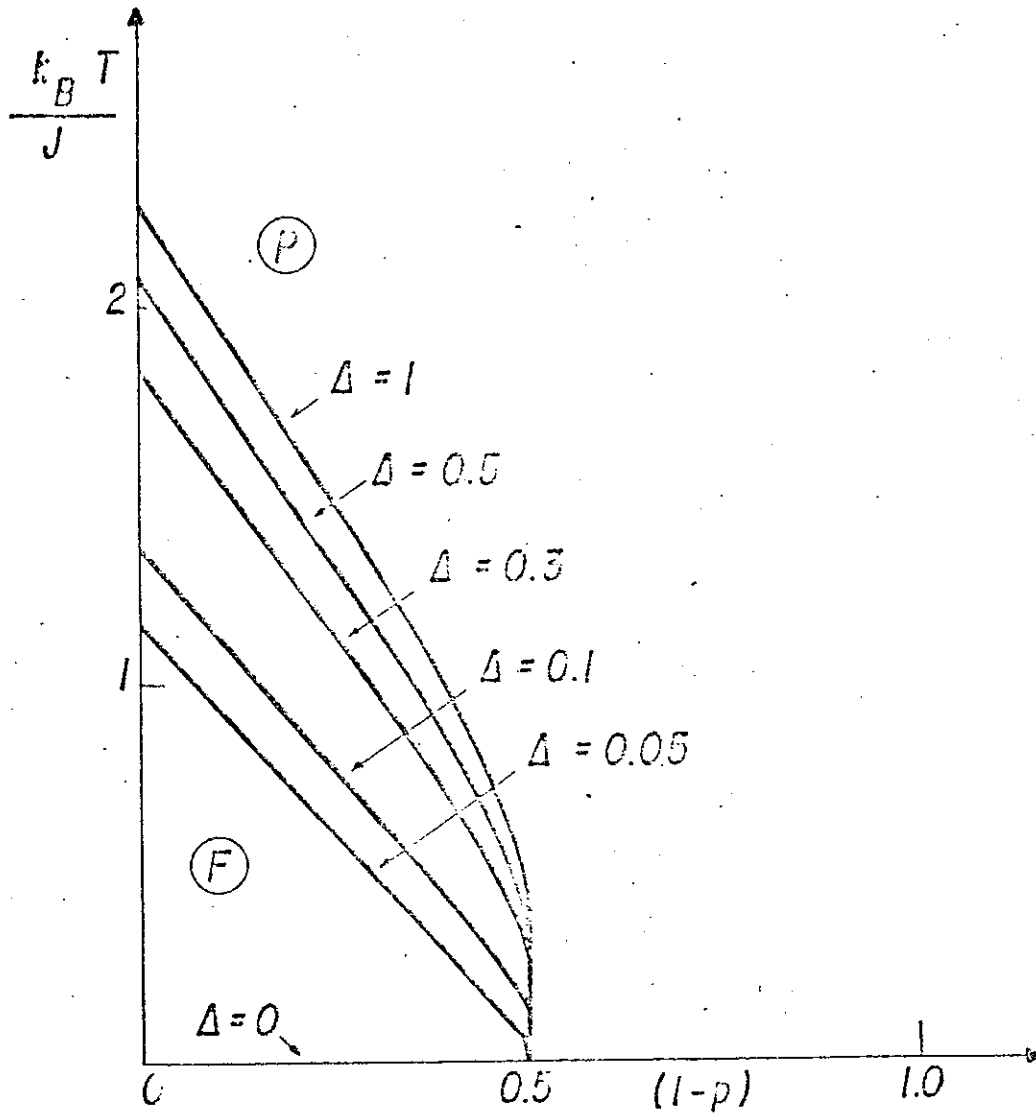


FIGURA 2.1.1. (b) - Cortes da fronteira crítica para valores típicos Δ .

Os pontos fixos mais importantes obtidos foram os seguintes: (i) cinco pontos fixos triviais localizados nos seguintes valores das variáveis $(p, k_B T/J, \Delta)$: $\{(1, 0, 1)$ (fase ferromagnética) e $\{(1, \infty, 1), (1, \infty, 0), (0.5, \infty, 1), (0.5, \infty, 0)$ (fase paramagnética)); (ii) três pontos fixos críticos (semi-estáveis) localizados em $(p, k_B T/J, \Delta) = \{(1, 2.269\dots, 1)$ (Ising puro), $(1, 0, 0)$ (Heisenberg isotrópico puro), e $(0.5, 0, 1)$ (percolação de ligações de Ising)} que são *resultados exatos*; (iii) um ponto fixo crítico

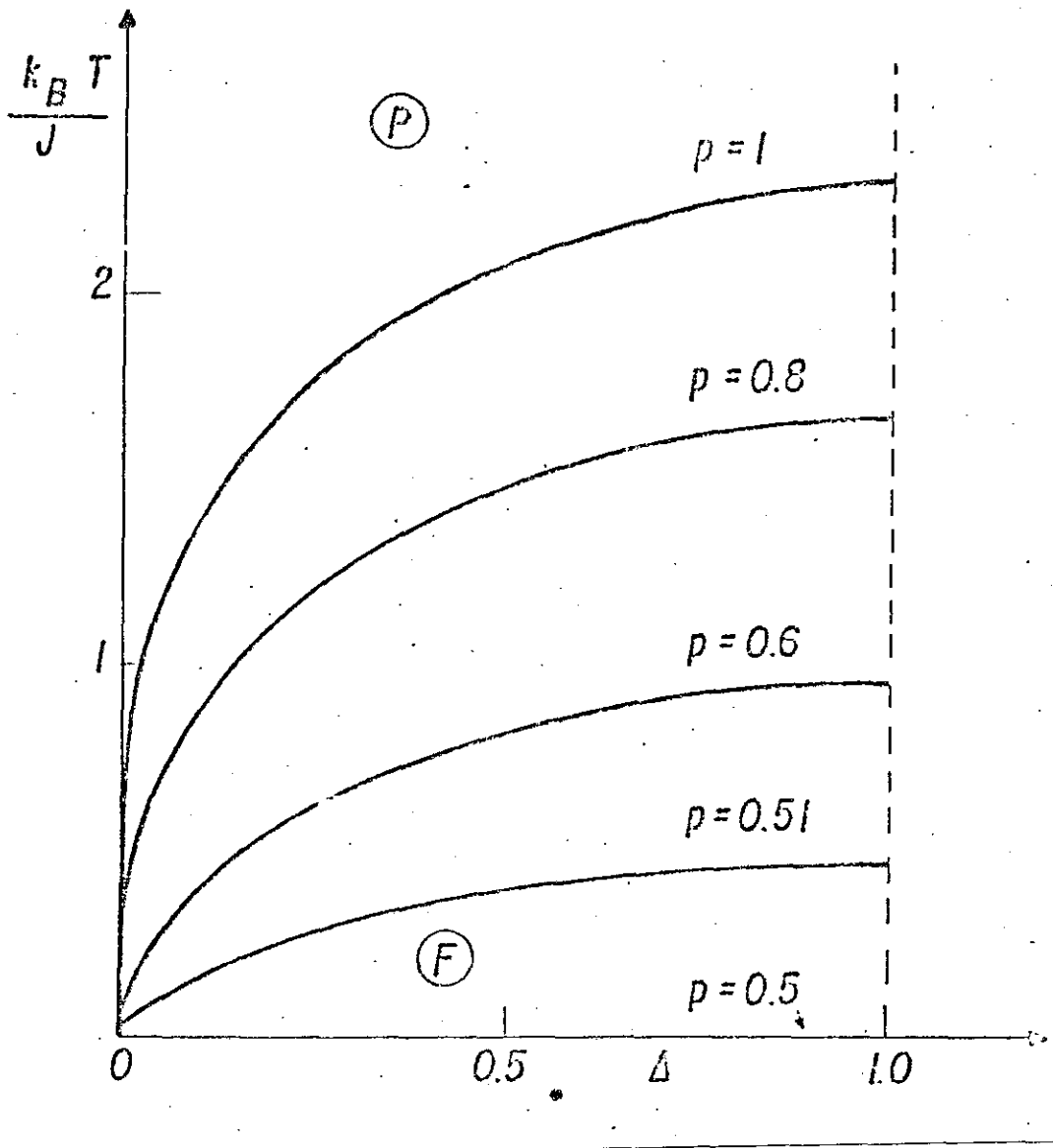


FIGURA 2.1.1(c) - Cortes da fronteira crítica para valores típicos de p .

(instável) localizado em $(p, k_B T/J, \Delta) = (0.5, 0, 0)$ que corresponde à percolação de ligações do modelo de Heisenberg isotrópico. Não é conhecido ainda o valor exato deste ponto de percolação, e existem na literatura ^(88,114,127) controvérsias sobre se ele representa também o ponto em que a ordem magnética de longo alcance desaparece. Alguns autores ^(88,127) argumentam que a magnetização espontânea do modelo de Heisenberg isotrópico diluído deve se anular para

um valor da concentração $p_0 > p_c$ (p_c é a concentração crítica de percolação).

O diagrama de fluxos apresentado na Figura 2.1.1(a) evidencia a existência de 4 classes de universalidade no sistema :

(a) Todos os pontos críticos com $k_B T/J > 0$ são da mesma classe do modelo de Ising puro; (b) Para $k_B T/J = 0$, $\Delta = 0$ e $\frac{1}{2} < p \leq 1$ a criticalidade é a mesma do modelo de Heisenberg isotrópico puro ; (c) Para $k_B T/J = 0$, $0 < \Delta \leq 1$ e $p = \frac{1}{2}$, a classe de universalidade é a mesma do ponto de percolação de Ising; (d) O ponto de percolação de Heisenberg isotrópico possui uma classe de universalidade diferente das anteriores.

Para o cálculo dos expoentes críticos associados a estas classes de universalidades, vamos considerar o Jacobiano $\partial(p', k_B T'/J', \Delta') / \partial(p, k_B T/J, \Delta)$ e seus auto-valores (λ_p, λ_T e λ_Δ) calculados nos 4 pontos fixos não triviais. Usando a definição do Capítulo 1, obtemos os expoentes ν pela expressão:

$$\nu_i = \ln b / \ln \lambda_i \quad (i = p, T, \Delta) \quad (2.1.9)$$

sendo b o fator de escala, que para o presente grafo (Fig.1.3.1(b)) vale $b = 2$.

Os valores obtidos para os pontos fixos críticos e para os expoentes ν_i são apresentados na Tabela 2.1.1 (onde $\phi_j = \nu_j / \nu_T$ ($j=p, \Delta$) são os expoentes de "crossover"), e a comparação com os resultados obtidos pela renormalização de Migdal-Kadanoff mostra a superioridade do método aqui usado. A quantidade de resultados exatos reproduzidos, fazem-nos acreditar que a fronteira crítica apresentada na Fig. 2.1.1 constitui uma excelente aproximação numérica da superfície crítica real (ainda desconhecida).

TABELA 2.1.1 - Pontos críticos e expoentes, obtidos pelo presente método e pelo método de Migdal-Kadanoff (M.K.) comparados com resultados exatos disponíveis.

MODELOS		EXATO	M.K. (85,89)	PRESENTE R.G.	
ISING ($\Delta=1$)	PURO ($p=1$)	$k_B T_c / J$	2.269... (28)	1.64...	2.269...
		ν_T	1 (133)	1.34	1.15
	PERCOLAÇÃO ($k_B T_c / J=0$)	p_c	0.5 (128)	0.62	0.5
		ν_p	1.33... (134)	1.64	1.43
$\phi_p = \nu_p / \nu_T$		1 (135)	1	1	
HEISENBERG ISOTRÓPICO ($\Delta=0$)	PURO ($p=1$)	$k_B T_c / J$	0 (42)	0	0
		ν_Δ	-	-	1.22
		ν_T	∞ (136)	∞	∞
	PERCOLAÇÃO ($k_B T_c / J=0$)	p_c	0.5 (?)	0.62	0.5
		ν_p	1.33 (?)	1.64	1.43
		ν_Δ	-	0.71	0.69
		$\phi_p = \nu_p / \nu_T$	-	1.13	1.81
		$\phi_\Delta = \nu_\Delta / \nu_T$	-	0.49	0.87

Analisamos também os comportamentos assintóticos da fronteira crítica nas regiões de maior interesse. Consideremos inicialmente os cortes da fronteira crítica para valores de Δ constante (Fig. 2.1.1(b)).

a) No limite $p \rightarrow 1$, temos:

$$\frac{T_c(1, \Delta) - T_c(p, \Delta)}{T_c(1, \Delta)} \sim A(\Delta)(1-p) \quad (2.1.10)$$

onde $A(\Delta)$ tem o comportamento exibido na Fig. 2.1.2. Em particu -

lar, nós obtivemos $A(1) \approx 1.3314$, que é bastante próximo do valor exato $A_e(1) \approx 1.3293$ ⁽¹³⁷⁾.

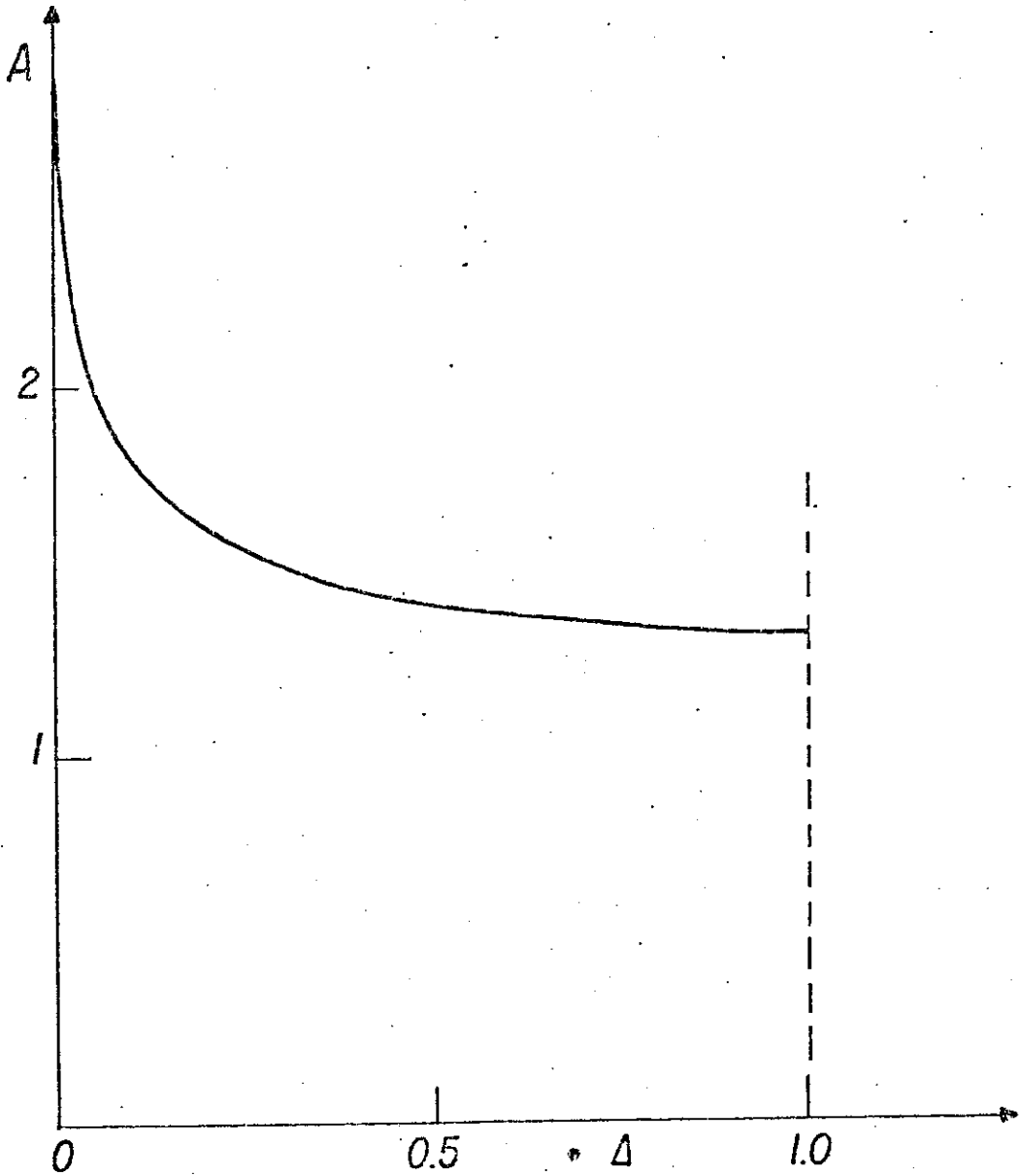


FIGURA 2.1.2 - Variação do coeficiente $A(\Delta)$. $A(1) \approx 1.3314$ e $A(0) \approx 3$.

b) No limite $p \rightarrow p_c = 1/2$ o comportamento assintótico é dado por:

$$e^{-[B(\Delta)J/k_B T_c(p, \Delta)]} \sim C(\Delta)(p-p_c) \quad (2.1.11)$$

O coeficiente $B(\Delta)$ varia conforme a Fig. 2.1.3 e $C(\Delta)$ praticamente independe de Δ , no intervalo $0.3 \lesssim \Delta \leq 1$. Para $\Delta < 0.3$ dificuldades numéricas associadas com baixas temperaturas impossibilitaram uma verificação precisa. Em $\Delta = 1$, $B(1) = 2$ (que reproduz o

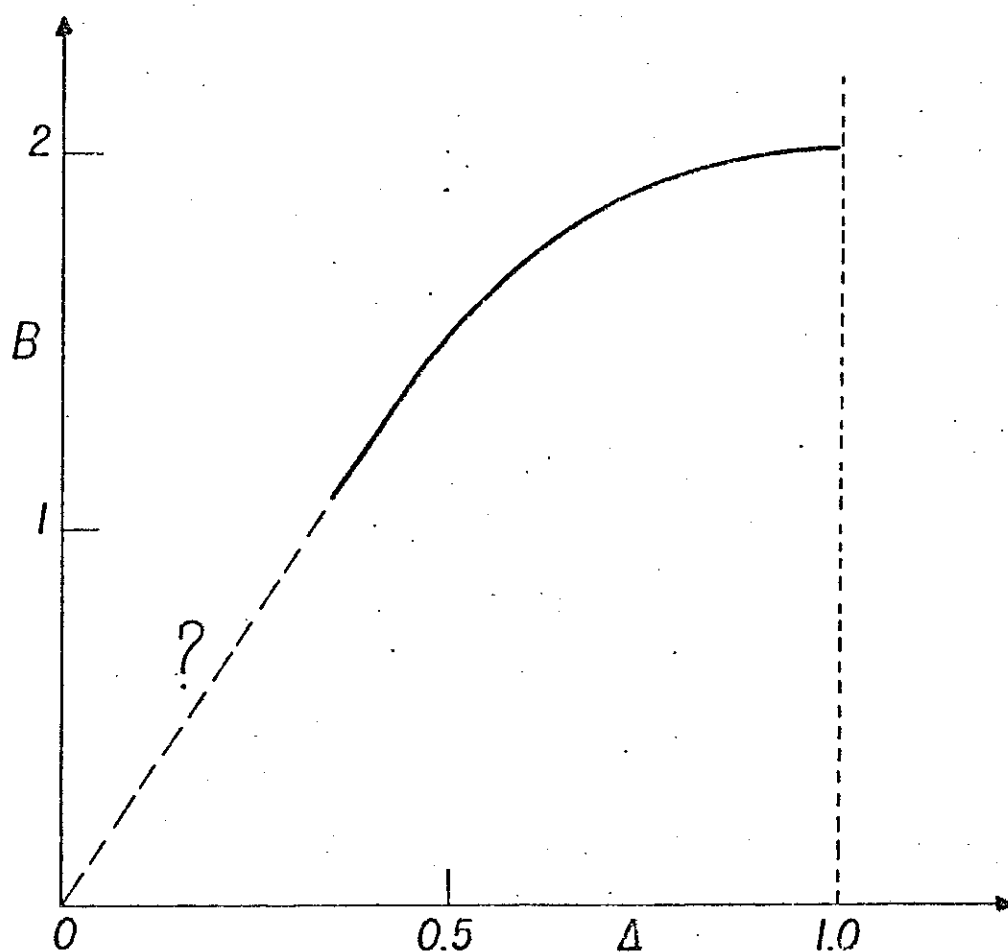


FIGURA 2.1.3 - Gráfico do coeficiente $B(\Delta)$. A linha tracejada é apenas indicativa.

resultado exato), e $C(1) \cong 1.395$ o que é uma excelente aproximação do valor exato ⁽¹³⁸⁾ $C_e(1) = 2 \ln 2 \cong 1.386$.

Os cortes da fronteira crítica para p constante (Figura 2.1.1(c)) mostram os seguintes comportamentos assintóticos :

a) Para $\Delta \rightarrow 1$, temos:

$$\frac{T_c(p,1) - T_c(p,\Delta)}{T_c(p,1)} \sim D(p)(1-\Delta)^2 \quad (2.1.12)$$

com $D(p)$ representado na Fig. 2.1.4. $D(1) = 0.295$, que difere do valor obtido por renormalização de Migdal-Kadanoff ⁽⁸⁹⁾ que é 0.32.

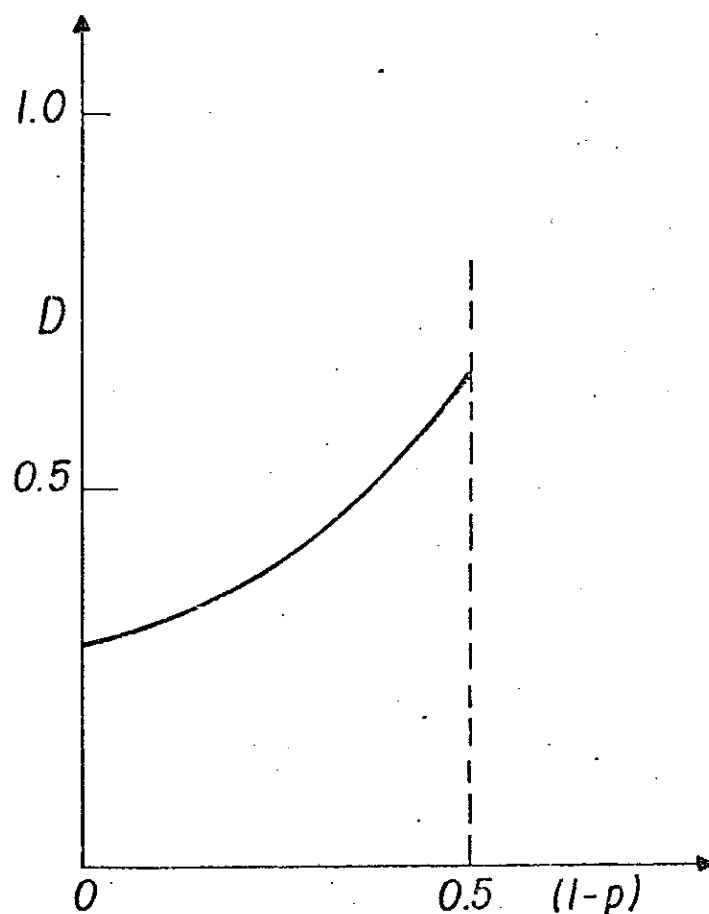


FIGURA 2.1.4 - Variação de $D(p)$. $D(1) \cong 0.295$ e $D(0.5) \cong 0.65$.

b) O limite $\Delta \rightarrow 0$ é particularmente difícil de ser analisado numericamente, já que para $\Delta \approx 0$, a fronteira crítica de - cresce muito rapidamente. Neste limite verificamos que:

$$\frac{J}{k_B T_c(p, \Delta)} e^{-E(p)J/k_B T_c(p, \Delta)} \sim F(p)\Delta \quad (2.1.13)$$

Para $p = 1$, $E(1) = F(1) \approx 4$ ⁽⁹⁵⁾ resultado que difere daquele obtido na referência (89) que foi $e^{-J/k_B T_c(1, \Delta)} \sim \Delta^a$, $a \approx 0.21$. Quando p diminui, $E(p)$ decresce e $F(p)$ aumenta, de modo que $E(p)F(p) \approx 16$. Esta variação não possui uma verificação numérica precisa, sendo apenas uma indicação do comportamento qualitativo dos coeficientes $E(p)$ e $F(p)$.

2.2 - DILUIÇÃO DE ANISOTROPIAS NA REDE QUADRADA

Nos últimos anos, uma desordem que vem sendo estudada extensivamente, é aquela associada à presença de interações com simetrias diferentes em um mesmo sistema (revisões atualizadas dos principais trabalhos teóricos e experimentais desta área são dadas nas referências (139), (140), (141)). Realizações experimentais destes sistemas são encontradas nos antiferromagnetos $\text{Fe}_{1-p}\text{Co}_p\text{Br}_2$ (142) (interações de simetria Ising e XY) e $\text{Rb}_2\text{Co}_p\text{Mn}_{1-p}\text{F}_4$ (143, 144) (simetrias de Ising e Heisenberg).

No caso particular de simetrias de Ising e Heisenberg, trabalhos teóricos realizados usando técnicas de campo efetivo (145), expansões em séries de altas temperaturas (146) e renormalização de campo médio (147), apresentam como resultado mais marcante, a

variação *contínua* de expoentes críticos com a concentração (p) de ligações do tipo Ising. Este comportamento contraria argumentos de simetria que sugerem fortemente ser a classe de universalidade do modelo de Ising puro, dominante em quase toda a fronteira crítica ($0 < p \leq 1$).

O principal objetivo deste trabalho ⁽¹⁴⁸⁾, foi examinar este aspecto, utilizando o método de renormalização apresentado no Capítulo 1. Estudamos um sistema ferromagnético na rede quadrada, descrito pelo modelo de Heisenberg anisotrópico, cujas ligações podem possuir duas simetrias diferentes, ou seja, simetria esférica ($\Delta_{ij} = 0$, Heisenberg isotrópico) ou simetria uniaxial ($0 < \Delta_{ij} \leq 1$, Heisenberg anisotrópico).

O Hamiltoniano é o mesmo da seção anterior (eq. (2.1.1)) e a desordem (temperada) na simetria das ligações, é introduzida pela lei de probabilidade:

$$P(K_{ij}, \Delta_{ij}) = [p\delta(\Delta_{ij} - \Delta) + (1-p)\delta(\Delta_{ij})]\delta(K_{ij} - K) \quad (2.2.1)$$

sendo $0 \leq p \leq 1$, $0 \leq \Delta \leq 1$ e $K = J/k_B T > 0$. Em $\Delta = 1$ e $p \neq 0, 1$ temos uma mistura de ligações Ising e Heisenberg isotrópico, e o sistema será puro, do tipo Heisenberg anisotrópico (se $p = 1$ e $\Delta > 0$) ou Heisenberg isotrópico (se $\Delta = 0$ e $0 \leq p \leq 1$).

Para a renormalização na rede quadrada, usamos novamente o grafo da Fig. 1.3.1(b), que possui 2^5 configurações, das quais 14 inequivalentes (em relação a este tipo de desordem). Este fato, faz com que a forma binária da distribuição original (eq. (2.2.1)) não se mantenha. A nova lei de probabilidades possui 14 diferentes produtos de funções δ , e é dada por:

$$P_H(K_{ij}, \Delta_{ij}) = \int \prod_{\ell=1}^5 [dK_{ij}^{(\ell)} d\Delta_{ij}^{(\ell)} P(K_{ij}^{(\ell)}, \Delta_{ij}^{(\ell)})] \delta(K_{ij} - K_H) \delta(\Delta_{ij} - \Delta_H) \quad (2.2.2)$$

Procedemos de modo análogo ao caso da seção anterior, e recuperamos a forma binária da distribuição de probabilidades, usando a aproximação:

$$P'(K_{ij}, \Delta_{ij}) = [p' \delta(\Delta_{ij} - \Delta') + (1-p') \delta(\Delta_{ij})] \delta(K_{ij} - K') \quad (2.2.3)$$

onde (p', K', Δ') são funções de (p, K, Δ) . Para determiná-las impomos a preservação dos seguintes momentos, sob a renormalização:

$$\langle K_{ij} \rangle_{P'} = \langle K_{ij} \rangle_{P_H} \equiv g_1(p, K, \Delta) \quad (2.2.4)$$

$$\langle \Delta_{ij} \rangle_{P'} = \langle \Delta_{ij} \rangle_{P_H} \equiv g_2(p, K, \Delta) \quad (2.2.5)$$

$$\langle \Delta_{ij}^2 \rangle_{P'} = \langle \Delta_{ij}^2 \rangle_{P_H} \equiv g_3(p, K, \Delta) \quad (2.2.6)$$

A escolha do 2º momento de Δ_{ij} (eq. (2.2.6)) torna possível desacoplar as variáveis p' e Δ' que aparecem na combinação $p'\Delta'$ na eq. (2.2.5). As eqs. (2.2.4), (2.2.5) e (2.2.6) permitem obter:

$$K' = g_1 \quad (2.2.7)$$

$$\Delta' = g_3/g_2 \quad (2.2.8)$$

$$p' = g_2^2/g_3 \quad (2.2.9)$$

Estas três últimas equações, constituem as relações de renormalização, cujas iterações numéricas permitem-nos obter a fronteira crítica (Fig. 2.2.1) e as classes de universalidade do sistema.

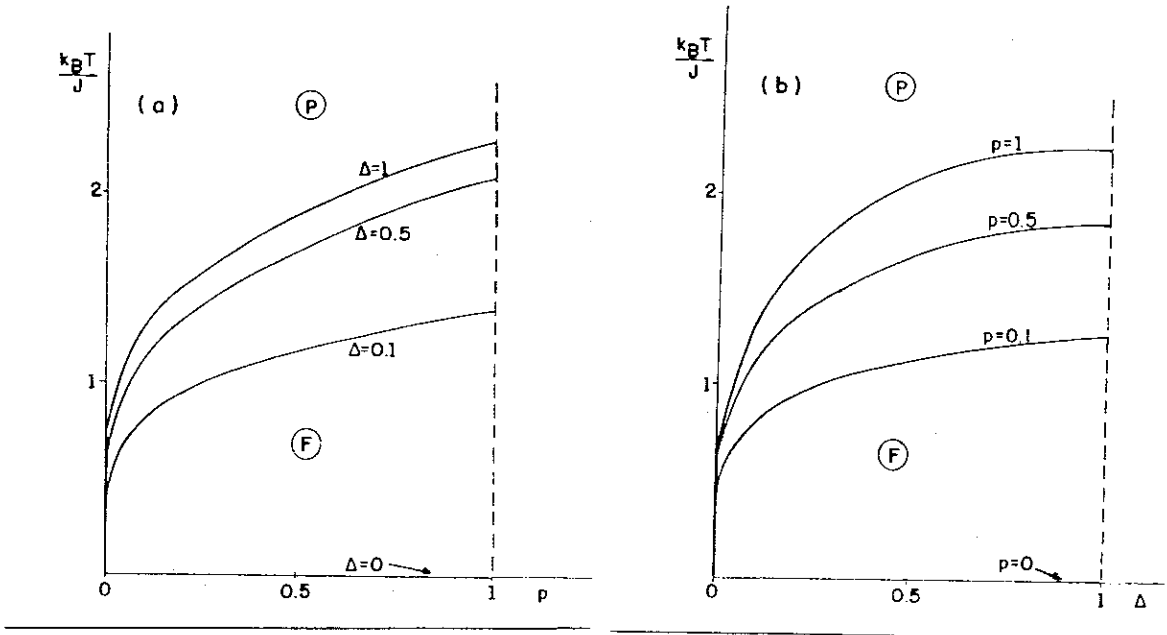


FIGURA 2.2.1 - Cortes da fronteira crítica para valores selecionados de Δ (a) e p (b). F e P designam respectivamente as fases ferromagnética e paramagnética.

Observemos nas curvas acima, que quando p e/ou Δ crescem, a temperatura crítica aumenta, já que a simetria menor (uniaxial) torna-se dominante.

Na vizinhança de $p = 1$ e $\Delta = 1$, observamos os seguintes comportamentos assintóticos:

$$a) \quad \frac{T_c(1, \Delta) - T_c(p, \Delta)}{T_c(1, \Delta)} \sim A(\Delta)(1-p) \quad ; \quad (p \rightarrow 1) \quad (2.2.10)$$

$$b) \quad \frac{T_c(p, 1) - T_c(p, \Delta)}{T_c(p, 1)} \sim B(p)(1-\Delta) + C(p)(1-\Delta)^2 \quad (\Delta \rightarrow 1) \quad (2.2.11)$$

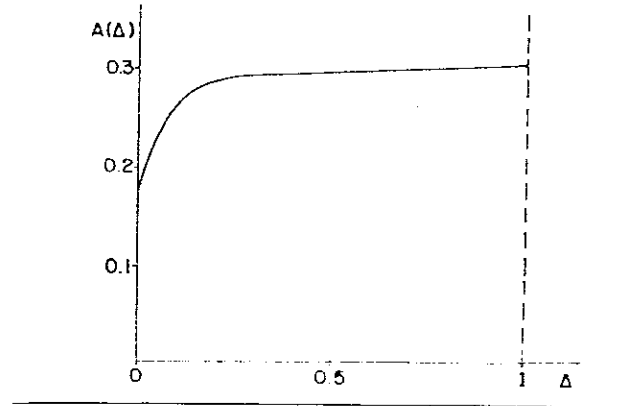
O coeficiente $A(\Delta)$ tem o comportamento mostrado na Fig. 2.2.2, e os coeficientes $B(p)$ e $C(p)$ são representados na Fig. 2.2.3.

FIGURA 2.2.2 - Variação do coeficiente $A(\Delta)$. $A(1) \cong 0.32$ e $A(0) \cong 0.18$.

Problemas numéricos impediram a obtenção de comportamentos assintóticos confiáveis em $k_B T/J \rightarrow 0$.

Somente duas classes de universalidade foram

encontradas: uma associada ao modelo de Heisenberg isotrópico puro (para todos os pontos críticos com $k_B T_c/J = 0$) que é dominada pelo ponto fixo $(p, k_B T/J, \Delta) = (1, 0, 0)$ e outra classe associada ao modelo de Ising puro (para todos os pontos críticos com $k_B T_c > 0$) cujo atrator é o ponto fixo $(p, k_B T/J, \Delta) = (1, 2.269\dots, 1)$. Os expo-



entes ν_i ($i = T, \Delta$) encontrados nestes pontos são os mesmos apresentados na Tabela 2.1.1. Consequentemente o GR aqui utilizado confirma as expectativas sugeridas por argumentos de simetria, e não reproduz a variação contínua de expoentes com a concentração p , obtida por outros métodos.

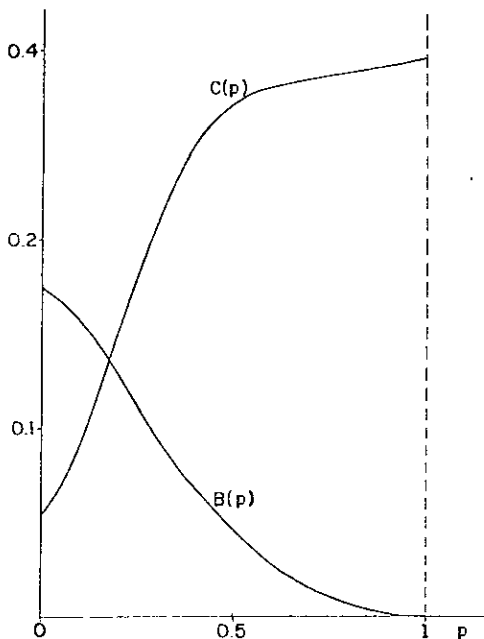


FIGURA 2.2.3 - Gráfico dos coeficientes $B(p)$ e $C(p)$. $B(1) \cong 0$, $C(1) \cong 0.29$ e $B(0) \cong 0.17$, $C(0) \cong 0.05$.

2.3 - O SISTEMA PURO NA REDE CÚBICA SIMPLES

No caso tridimensional, a principal diferença qualitativa que o modelo de Heisenberg anisotrópico apresenta, é a existência de magnetização espontânea a $T \neq 0$ para $-\infty \leq \Delta \leq 1$, em particular para $\Delta = 0$ (Heisenberg isotrópico) e $\Delta = -\infty$ (XY), modelos que em 2 dimensões não possuem ordem de longo alcance para $T \neq 0$.

Nesta seção aplicamos o método de renormalização do Capítulo 1, para estudar a criticalidade deste modelo ferromagnético (puro) na rede cúbica simples⁽¹⁴⁹⁾. Nesta e em outras redes tridimensionais, não existem, até o presente momento, soluções exatas para qualquer valor do parâmetro Δ . Aliado a este fato, a existência de inúmeros magnetos tridimensionais isolantes⁽³⁴⁾ que são descritos por este modelo, justifica plenamente um estudo de suas propriedades críticas em 3 dimensões por técnicas aproximativas como o presente GR.

É conveniente no presente sistema, reescrever o Hamiltoniano da eq. (2.1.1) de forma ligeiramente modificada.

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} K[(1-\Delta)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + (1+\Delta)\sigma_i^z \sigma_j^z] \quad (2.3.1)$$

onde $K \equiv J/k_B T > 0$ e $-1 \leq \Delta \leq 1$ são os mesmos para todas as ligações de primeiros vizinhos na rede. A variação do parâmetro Δ no intervalo $[-1,1]$ nos permite estudar o sistema com simetrias planar ($-1 \leq \Delta < 0$), esférica ($\Delta = 0$) e uniaxial ($0 < \Delta \leq 1$). Os casos particulares $\Delta = -1, 0, 1$, reproduzem os modelos XY, Heisenberg isotrópico e Ising respectivamente.

Para a renormalização na rede cúbica simples, vamos

usar um grafo da Fig. 2.3.1(a) ^(150,151) que é renormalizado na -
quele da Fig. 2.3.1(b). O fator de escala neste caso é $b = 2$.

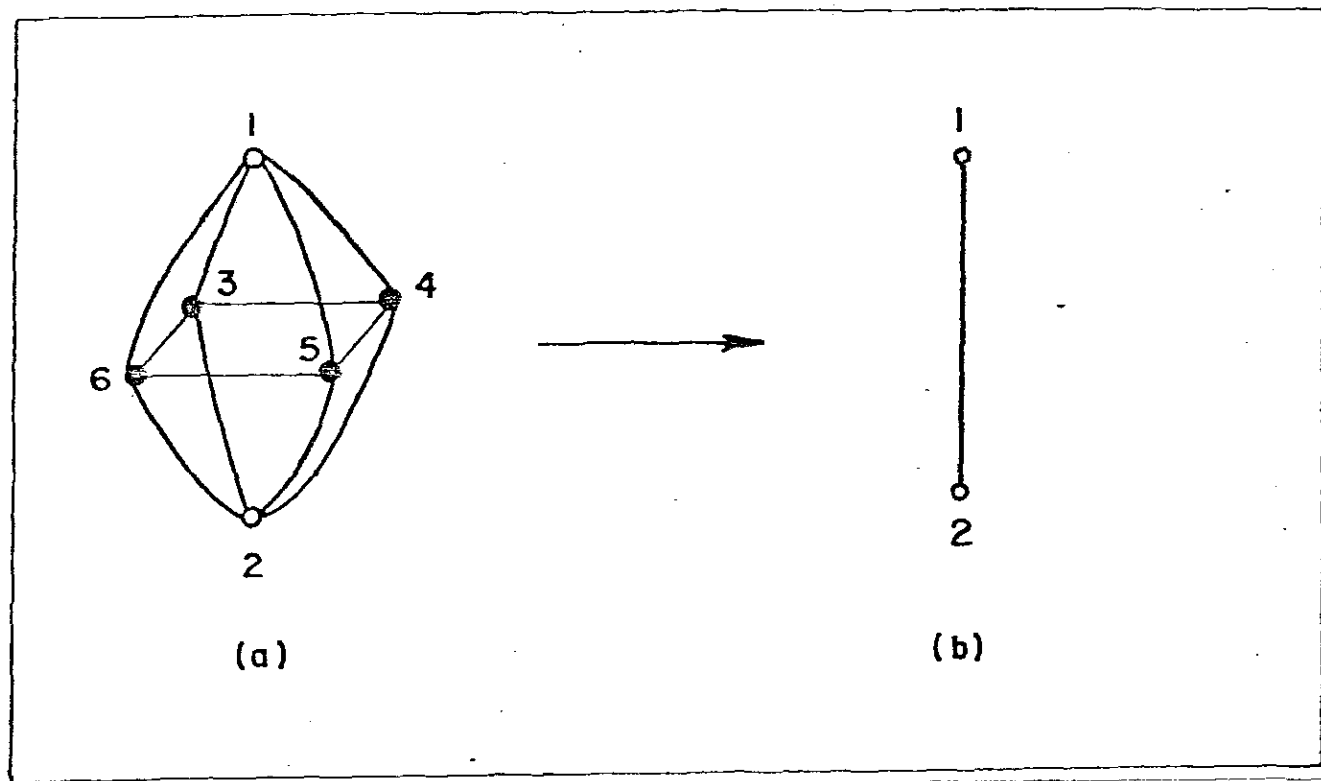


FIGURA 2.3.1 - Grafos de 2 terminais usados para a renormalização na rede cúbica simples.

Esta renormalização (traço parcial sobre os 4 sítios internos) envolve a diagonalização de uma matriz 64×64 , estruturada em blocos diagonais de tamanho 1×1 (2 blocos), 6×6 (2 blocos), 15×15 (2 blocos) e 20×20 (1 bloco). Não nos foi possível efetuar a diagonalização analítica de todos estes blocos, de modo que as relações de renormalização $K' = K'(K, \Delta)$ e $\Delta' = \Delta'(K, \Delta)$ foram obtidas numericamente. A fronteira crítica é apresentada na Fig. 2.3.2, e possui 3 pontos fixos críticos, associados às simetrias planar (XY), esférica (H) e uniaxial (I).

Da Fig. 2.3.2, podemos notar que o sistema possui 3 classes de universalidade, associadas aos pontos fixos XY ($-1 \leq \Delta < 0$),

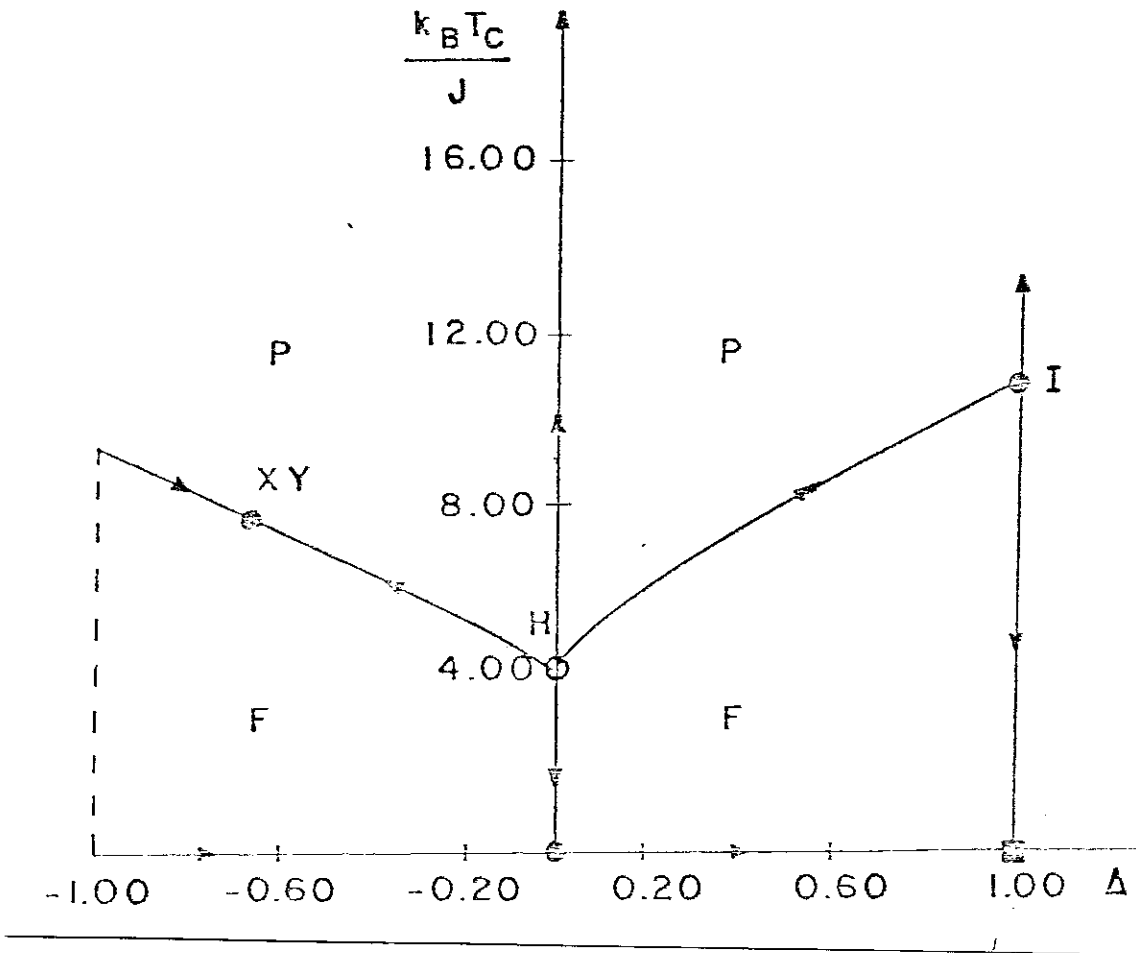


FIGURA 2.3.2 - Fronteira crítica e linhas de fluxo, com os respectivos pontos fixos (○, ●, ■ indicam respectivamente pontos fixos instáveis, semi-estáveis e estáveis).

H ($\Delta = 0$) e I ($0 < \Delta \leq 1$), e que correspondem às diferentes simetrias das interações.

O ponto fixo de simetrias planar (XY) possui uma interação residual uniaxial ($\Delta \neq -1$), refletindo o fato de que o modelo XY ($\Delta = -1$) não se renormaliza nele próprio, já que os termos $(\sigma_i^X \sigma_j^X + \sigma_i^Y \sigma_j^Y)$ geram interações $\sigma_i^Z \sigma_j^Z$ devido à não comutatividade dos operadores. A temperatura crítica do modelo XY, pode,

no entanto, ser obtida pela interseção da fronteira crítica com a reta $\Delta = -1$.

Um comportamento espúrio aparece na fase ordenada (F) do modelo com simetria planar, que tem como atrator o ponto de $T = 0$ do modelo de Heisenberg isotrópico. Este aspecto aparece também em renormalizações do tipo Migdal-Kadanoff, e é atribuído⁽⁹¹⁾ a não preservação da simetria do estado fundamental dos grafos na renormalização.

Neste caso ($\Delta < 0$), razões de simetria indicam que o comportamento esperado seria uma invariância da linha $\Delta = -1$ (simetria planar) com 2 pontos fixos triviais (atratores dos pontos da região $\Delta < 0$) localizados em $T = 0$ (fase ordenada) e $T = \infty$ (fase desordenada) além de um ponto fixo crítico (atrator da linha crítica ($\Delta < 0$)) correspondendo à transição do modelo XY.

Calculamos também os expoentes críticos ν do comprimento de correlação, associados aos pontos fixos XY (ν_T), H(ν_T, ν_Δ) e I(ν_T). A existência de 2 expoentes no ponto fixo H, nos permite de finir o expoente de "crossover":

$$\phi = \nu_\Delta / \nu_T \quad (2.3.2)$$

Este expoente determina a forma assintótica da fronteira crítica próxima a $\Delta = 0$, que é dada por

$$\frac{k_B T_c(\Delta)}{J} = \frac{k_B T_c(0)}{J} + A_\pm |\Delta|^\phi \quad (2.3.3)$$

onde A_\pm são constantes numéricas correspondentes aos limites $\Delta \rightarrow \pm 0$.

Apresentamos na Tabela 2.3.1 os valores obtidos para os pontos fixos e expoentes críticos. Uma comparação com resultados de Migdal-Kadanoff, mostra que para a temperatura crítica os dois métodos têm o mesmo grau de aproximação (comparados com os resultados de séries) enquanto o presente GR, melhora consideravelmen-

te os valores dos expoentes críticos. Resultados mais precisos podem ser obtidos com o uso de grafos maiores ($b > 2$) ⁽¹⁵¹⁾, embora a dificuldade operacional associada à renormalização destes grafos seja enorme.

Para finalizar este capítulo, gostaríamos de mencionar que outros sistemas tridimensionais foram estudados pelo método de renormalização aqui apresentado, entre os quais o problema de diluição de anisotropia ⁽¹⁵³⁾ (onde aplicamos também a aproximação de Migdal-Kadanoff) e sistemas semi-infinitos ⁽¹⁵⁴⁾ nos quais a simetria das interações volumétricas difere da simetria das interações de superfície.

TABELA 2.3.1 - Pontos fixos e expoentes, obtidos pelo presente método, pela aproximação de Migdal-Kadanoff (MK) e resultados de séries. A temperatura crítica do modelo XY ($\Delta = -1$) é indicada entre colchetes.

MODELO	VALORES CRÍTICOS	M. K. ⁽⁸⁷⁾	PRESENTE GR	SERIES
ISING	$(\Delta, k_B T_C / J)$	(1,7.66)	(1,10.91)	(1,9.09) ^(26.b)
	ν_T	1.06	0.87	0.63 ^(26.b)
HEISENBERG ISOTRÓPICO	$(\Delta, k_B T_C / J)$	(0,2.91)	(0,4.18)	(0,3.33) ⁽⁴³⁾
	ν_T	1.39	1.17	0.72 ⁽⁴³⁾
	$\phi^{-1} = \nu_T / \nu_\Delta$	1.56	1.27	1.25 ⁽¹⁵²⁾
XY	$(\Delta, k_B T_C / J)$	(-0.88,6.80) [-1,7.26]	(-0.65,7.68) [-1,9.44]	(-1,8.00) ⁽⁴⁸⁾
	ν_T	1.16	1.09	0.67 ⁽⁴⁸⁾

CAPÍTULO 3

GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO DE CORTE-COLAPSO PARA O MODELO Z(4)

Desenvolvemos um algoritmo para o modelo Z(4), que facilita enormemente a realização de traços parciais em grafos de 2 terminais, comumente usados em procedimentos de renormalização. Como aplicação, estudamos a criticalidade do modelo (ferromagnético) na rede quadrada.

3.1 - O MODELO Z(N)

O modelo Z(N) é um dos mais gerais da Mecânica Estatística, contendo como casos particulares, os modelos de Potts de N estados ^(37,38) (N = 1 é o problema de percolação de ligações e N = 2 é o modelo de Ising), XY Clássico ^(46,47) e o modelo de Villain ⁽¹⁵⁵⁾.

Nos últimos anos, vários trabalhos foram dedicados ao estudo deste modelo ^(40,156-163), e alguns resultados exatos foram obtidos, principalmente em duas dimensões, usando argumentos de dualidade.

A construção matemática deste modelo é feita associando-se a cada sítio da rede uma variável $S_j = \exp\left(\frac{i2\pi n_j}{N}\right)$ ($n_j = 0,$

1,2,...,N-1) que pode ser interpretada como um vetor que assume N orientações no plano, separadas por ângulos iguais.

Considerando somente interações de primeiros vizinhos, o Hamiltoniano do sistema (onde incluímos o fator térmico $-1/k_B T$) é dado por:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} h(n_i - n_j) \quad (3.1.1)$$

com

$$h(n_i - n_j) = \sum_{\beta=1}^{\bar{N}} \{ 2K_\beta \cos[\frac{2\pi\beta}{N} (n_i - n_j)] \} - K_1 \quad (3.1.2)$$

Sendo \bar{N} a parte inteira de $N/2$ se $N \geq 2$ e $\bar{N} = 1$ se $N \leq 2$. O modelo de Potts corresponde ao caso particular em que $K_1 = K_2 = \dots = K_{\bar{N}-1} = \frac{1}{2} (3 + (-1)^N) K_{\bar{N}}$, de modo que somente para $N \geq 4$ é que o modelo $Z(N)$ torna-se mais geral que o de Potts.

Uma variável apropriada para o estudo deste modelo, é o vetor transmissividade ⁽¹⁶²⁾ de N componentes (\vec{t}) (que generaliza o escalar de mesmo nome (t) usado no modelo de Potts ⁽¹⁶⁴⁾) e cujas componentes (t_α , $\alpha = 0, 1, 2, \dots, N-1$) são dadas por:

$$t_\alpha = \frac{\left\{ \sum_{\beta=0}^{N-1} e^{-h(\beta)} e^{i2\pi\alpha\beta/N} \right\}}{\left\{ \sum_{\beta=0}^{N-1} e^{-h(\beta)} \right\}} \quad (3.1.3)$$

Da equação acima, podemos facilmente verificar que $t_0 = 1$ e $t_\alpha = t_{N-\alpha}^*$.

É conveniente definirmos também o dual deste vetor (\vec{t}^D), cujas componentes (t_α^D , $\alpha = 0, 1, 2, \dots, N-1$) satisfazem à seguinte expressão:

$$t_{\alpha}^D = \left\{ \sum_{\beta=0}^{N-1} t_{\beta} e^{-i2\pi\alpha\beta/N} \right\} / \left\{ \sum_{\beta=0}^{N-1} t_{\beta} \right\} \quad (3.1.4)$$

A principal vantagem do uso destas variáveis é que para combinações de ligações em séries e paralelo, elas possuem algoritmos semelhantes ao de combinações de probabilidades.

Assim se 2 ligações (caracterizadas pelos vetores $\vec{t}^{(1)}$ e $\vec{t}^{(2)}$) estão dispostas em série ou paralelo, as respectivas transmissividades equivalentes ($\vec{t}^{(s)}$ ou $\vec{t}^{(p)}$) têm componentes determinados pelos produtos:

$$t_{\alpha}^{(s)} = t_{\alpha}^{(1)} t_{\alpha}^{(2)} \quad (3.1.5)$$

e

$$t_{\alpha}^{(p)D} = t_{\alpha}^{(1)D} t_{\alpha}^{(2)D} \quad (3.1.6)$$

Estas relações permitem calcular trivialmente a transmissividade equivalente de um grafo, redutível a ligações em série e/ou paralelo. Quando o grafo não é completamente redutível a estas combinações, este cálculo torna-se mais complicado. Ele envolve o processo usual de contagem direta de configurações, que é um procedimento tedioso e que se torna impraticável quando o tamanho do grafo e/ou o número de configurações associadas a cada sítio aumentam.

Em alguns modelos (Potts ⁽¹⁶⁴⁾, rede de resistores ⁽¹⁶⁵⁾ e percolação direcionada ⁽¹⁶⁶⁾) esta dificuldade foi contornada com o desenvolvimento do método de corte-colapso. Este algoritmo estabelece procedimentos sistemáticos, que fazendo uso de operações topológicas locais, permitem realizar traços parciais sobre os sítios internos de um grafo, sem necessidade de efetuar a soma dire

ta sobre as configurações destes sítios. Na próxima seção, generalizamos este método para o modelo $Z(4)$ ⁽¹⁶⁷⁾.

3.2 - O MÉTODO DE CORTE-COLAPSO PARA O MODELO $Z(4)$

O Hamiltoniano deste modelo (obtido das eqs. (3.1.1) e (3.1.2) com $N = 4$) pode ser reescrito ⁽¹⁶²⁾ da seguinte forma:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [K_1(\sigma_i \sigma_j + \tau_i \tau_j - 1) + 2K_2(\sigma_i \sigma_j \tau_i \tau_j)] \quad (3.2.1)$$

onde $\sigma_i, \tau_i = \pm 1$ ($\forall i$) são variáveis de Ising.

As componentes do vetor transmissividade e seu dual, valem respectivamente:

$$\begin{aligned} t_0 &= 1 & \text{a)} \\ t_1 &= t_3 = \frac{1 - e^{-4K_1}}{1 + 2e^{-2(K_1 + 2K_2)} + e^{-4K_1}} & \text{b)} \\ t_2 &= \frac{1 - 2e^{-2(K_1 + 2K_2)} + e^{-4K_1}}{1 + 2e^{-2(K_1 + 2K_2)} + e^{-4K_1}} & \text{c)} \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

e

$$\begin{aligned} t_0^D &= 1 & \text{a)} \\ t_1^D &= t_3^D = \frac{1 - t_2}{1 + 2t_1 + t_2} = e^{-2(K_1 + 2K_2)} & \text{b)} \\ t_2^D &= \frac{1 - 2t_1 + t_2}{1 + 2t_1 + t_2} = e^{-4K_1} & \text{c)} \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Como t_0 e t_3 são trivialmente conhecidos, vamos nos referir a partir de agora, somente às componentes t_1 e t_2 .

Consideremos agora um grafo qualquer de 2 terminais (re-

duável ou não a combinações série-paralelo), cuja transmissividade equivalente (\vec{t}') possui componentes $t'_\alpha(\{\vec{t}^{(i)}\}) = N_\alpha(\{\vec{t}^{(i)}\}) / D_\alpha(\{\vec{t}^{(i)}\})$ ($\alpha = 1, 2$), onde $\{\vec{t}^{(i)}\}$ indica o conjunto das transmissividades associadas a *todas* as ligações do grafo. O numerador ($N_\alpha(\{\vec{t}^{(i)}\})$) e denominador ($D_\alpha(\{\vec{t}^{(i)}\})$) são funções multilineares da forma $A + Bt_1^{(j)} + Ct_2^{(j)}$, sendo $t^{(j)}$ a transmissividade de uma j -ésima ligação *arbitrária* e A, B e C funções das transmissividades restantes (denotadas por $\{\vec{t}_r^{(i)}\}$). A forma multilinear $t_1^{(j)}t_2^{(j)}$ não é apropriada pois no caso particular $t_1^{(j)} = t_2^{(j)}$ (Potts) perde sua linearidade.

Efetuamos agora na j -ésima ligação, 3 diferentes operações topológicas: (i) O corte da ligação ($t_1^{(j)} = t_2^{(j)} = 0$); (ii) O colapso da ligação ($t_1^{(j)} = t_2^{(j)} = 1$); (iii) O semi-colapso ($t_1^{(j)} = 0, t_2^{(j)} = 1$). A outra maneira de semi-colapsar a ligação, que consiste em fazer $t_1^{(j)} = 1$ e $t_2^{(j)} = 0$, é descartada por corresponder a exponenciais negativas (valores de K_1 e K_2 sem significado físico).

Com estas 3 operações, os coeficientes A, B e C ficam determinados, e conseqüentemente verificamos que:

$$N_\alpha(\{\vec{t}^{(i)}\}) = (1 - t_2^{(j)}) N_\alpha^{bb}(\{\vec{t}_r^{(i)}\}) + (t_2^{(j)} - t_1^{(j)}) N_\alpha^{bc}(\{\vec{t}_r^{(i)}\}) + (t_1^{(j)}) N_\alpha^{cc}(\{\vec{t}_r^{(i)}\}) \quad , \quad (\alpha = 1, 2) \quad (a)$$

$$D_\alpha(\{\vec{t}^{(i)}\}) = (1 - t_2^{(j)}) D_\alpha^{bb}(\{\vec{t}_r^{(i)}\}) + (t_2^{(j)} - t_1^{(j)}) D_\alpha^{bc}(\{\vec{t}_r^{(i)}\}) + (t_1^{(j)}) D_\alpha^{cc}(\{\vec{t}_r^{(i)}\}) \quad , \quad (\alpha = 1, 2) \quad (b)$$

(3.2.4)

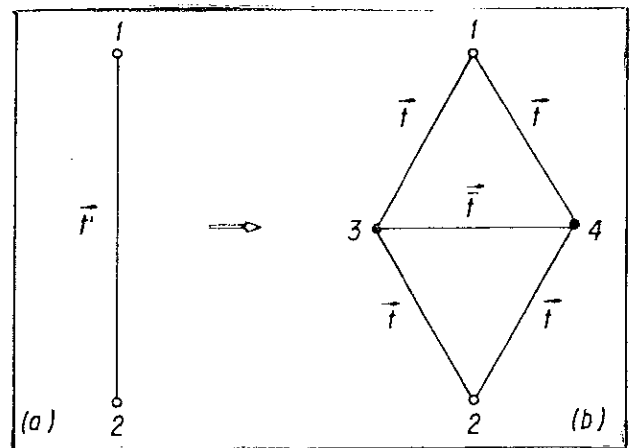
Os índices (bb), (bc) e (cc) referem-se aos numeradores

e denominadores dos grafos resultantes do original, quando a j -ésima ligação foi respectivamente cortada, semi-colapsada e colapsada).

Aplicamos estas operações aos grafos (bb, bc e cc), gerando nove outros grafos, aos quais são repetidos novamente estes procedimentos, e assim sucessivamente. Quando os grafos resultantes forem completamente redutíveis a combinações série-paralelo (e então resolvidos pelas eqs. (3.1.5) e (3.1.6)) ou tiverem todas as ligações semi-colapsadas (e neste caso a transmissividade equivalente será também semi-colapsada), revertemos o procedimento recursivo e obtemos a transmissividade equivalente (\vec{t}') do grafo original.

Vamos ilustrar o método para o grafo da Figura 3.2.1(b), no qual distinguimos a transmissividade da ligação 3-4 (\vec{t}) das demais (\vec{t}').

FIGURA 3.2.1 - Grafos usados para ilustrar o método de corte-colapso e para a renormalização na rede quadrada. \vec{t}' na Fig. (a) é a transmissividade equivalente do grafo da Fig. (b).



Efetuada as operações de corte, semi-colapso e colapso na ligação 3-4 (caracterizada por \vec{t}) obtemos os grafos da Figura 3.2.2.

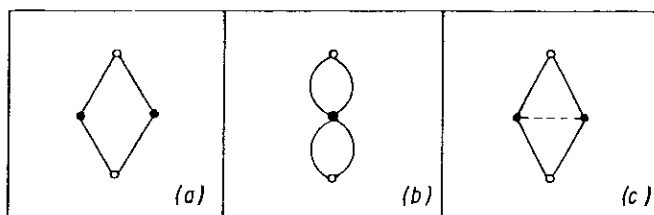


FIGURA 3.2.2 - Grafos gerados a partir da Fig. 3.2.1(b) pelas operações de corte (a), colapso (b) e semi-colapso (c), na ligação 3-4.

As transmissividades equivalentes destes grafos têm os seguintes numeradores e denominadores:

$$N_1^{bb} = 2(1+t_2^2) t_1^2 \quad \text{a)}$$

$$N_2^{bb} = 2(t_2^2+t_1^4) \quad \text{b)} \quad (3.2.5)$$

$$D_1^{bb} = D_2^{bb} = 1 + t_2^4 + 2t_1^4 \quad \text{c)}$$

$$N_1^{cc} = 4(1+t_2)^2 t_1^2 \quad \text{a)}$$

$$N_2^{cc} = 4(t_2^2+2t_2t_1^2+t_1^4) \quad \text{b)} \quad (3.2.6)$$

$$D_1^{cc} = D_2^{cc} = (1+t_2^2)^2 + 4[(1+t_2^2)t_1^2+t_1^4] \quad \text{c)}$$

$$N_1^{bc} = 2(1+t_2)^2 t_1^2 \quad \text{a)}$$

$$N_2^{bc} = 4(t_2^2+t_1^4) \quad \text{b)} \quad (3.2.7)$$

$$D_1^{bc} = D_2^{bc} = (1+t_2^2)^2 + 4t_1^4 \quad \text{c)}$$

As equações (3.2.5) e (3.2.6) fizeram uso dos algoritmos da série-paralelo e as eqs. (3.2.7) foram obtidas pela aplicação sucessiva do método, até a etapa em que os grafos resultantes fossem combinações de série-paralelo, ou possuissem todas as ligações semi-colapsadas.

Com estas equações e com o uso do algoritmo da equação (3.2.4), obtemos finalmente a expressão para a transmissividade equivalente do grafo da Fig. 3.2.1(b):

$$t_1' = \frac{[2(1+t_2^2)t_1^2] + [2(1+t_2)^2 t_1^2]\bar{t}_1 + [4t_2 t_1^2]\bar{t}_2}{[1+t_2^4+2t_1^4] + [4(1+t_2^2)t_1^2]\bar{t}_1 + [2(t_2^2+t_1^4)]\bar{t}_2} \quad (3.2.8)$$

$$t_2' = \frac{[2(t_2^2+t_1^4)] + [8t_2 t_1^2]\bar{t}_1 + [2(t_2^2+t_1^4)]\bar{t}_2}{[1+t_2^4+2t_1^4] + [4(1+t_2^2)t_1^2]\bar{t}_1 + [2(t_2^2+t_1^4)]\bar{t}_2} \quad (3.2.9)$$

Deve-se notar a enorme simplificação que este método proporciona quando comparado com o procedimento usual de contagem direta das configurações (também feito por nós).

No Apêndice B apresentamos a expressão da transmissividade equivalente do grafo da Fig. 3.2.1(b), no caso geral em que todas as ligações possuem transmissividades diferentes (sistema completamente anisotrópico).

Generalizamos o método de corte-colapso também para o modelo Z(6) (que será objeto de publicação posterior) e estamos atualmente trabalhando na generalização do algoritmo para o modelo Z(N) (N qualquer).

3.3 - CRITICALIDADE DO MODELO Z(4) FERROMAGNÉTICO NA REDE QUADRADA

As propriedades críticas do modelo Z(4) ferromagnético ($K_1 \geq 0$ e $K_1+2K_2 \geq 0$) na rede quadrada, foram estudadas por inúmeros autores ⁽¹⁵⁸⁻¹⁶³⁾, sabendo-se que existem 3 diferentes fases: a) a fase paramagnética (P) onde $\langle \sigma_i \rangle = \langle \tau_i \rangle = \langle \sigma_i \tau_i \rangle = 0$; b) a fase intermediária (I) com $\langle \sigma_i \rangle = \langle \tau_i \rangle = 0$ e $\langle \sigma_i \tau_i \rangle \neq 0$; c) a fase ferromagnética (F) caracterizada por $\langle \sigma_i \rangle \neq 0$, $\langle \tau_i \rangle \neq 0$ e $\langle \sigma_i \tau_i \rangle \neq 0$. A linha F-P é auto-dual, possui expoentes críticos que variam conti

tinuamente ⁽¹⁵⁸⁾ (linha de pontos fixos) e se une às linhas I-P e F-I no ponto correspondente ao modelo de Potts de 4 estados. As linhas I-P e F-I são relacionadas por transformações de dualidade, terminam em pontos fixos de Ising e pertencem à classe de universalidade destes pontos, mas sua expressão analítica é ainda desconhecida.

Neste trabalho, vamos usar o grafo da Fig. 3.2.1(b) (com $\vec{t} = \hat{t}$) para construir um G.R. para a rede quadrada. Este grafo que foi utilizado no capítulo anterior para a renormalização de sistemas quânticos, também mostrou ser conveniente para outros sistemas, como percolação de ligações ⁽¹³¹⁾, rede de resistores randômicos ⁽¹⁶⁸⁾, modelo de Potts ⁽¹⁶⁴⁾ e modelo Z(N) ⁽¹⁶⁹⁾. Em particular, nesta última referência, a fronteira crítica do modelo Z(4) foi obtida, mas não foi feito um estudo detalhado dos expoentes críticos e comportamentos assintóticos aqui exibidos.

A interação das eqs. (3.2.8) e (3.2.9) (com $\vec{t} = \hat{t}$) fornece a fronteira crítica da Figura 3.3.1.

O presente G.R. (assim como o método de renormalização de Migdal-Kadanoff ⁽¹⁶¹⁻¹⁶³⁾) reproduz todos os resultados exatos conhecidos para a temperatura crítica: (i) a linha auto-dual ($t_2 = 1 - 2t_1$), parte da qual constitui a fronteira F-P; (ii) os pontos fixos críticos que estão localizados em $t_1 = t_2 = 1/3$ (\hat{P}), $t_1 = \sqrt{t_2} = \sqrt{2} - 1$ (I_1), $t_1 = 0$, $t_2 = \sqrt{2} - 1$ (I_2) e $t_1 = \sqrt{2} - 1$, $t_2 = 1$ (I_3); (iii) as linhas F-I e I-P estão relacionadas pela transformação de dualidade.

Obtemos também os seguintes comportamentos assintóticos nas vizinhanças dos pontos I_2 , I_3 e \hat{P} respectivamente:

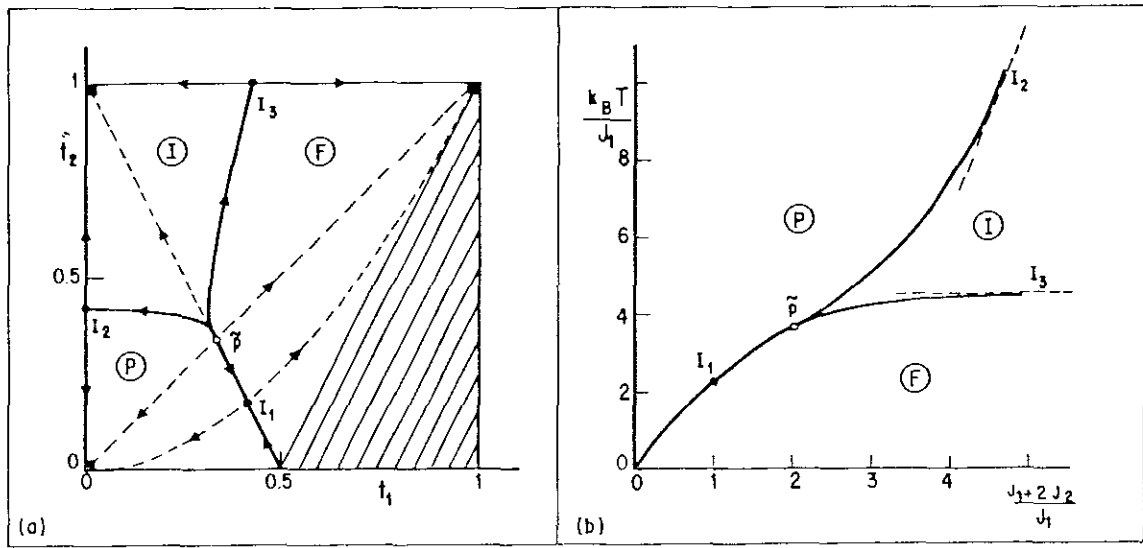


FIGURA 3.3.1 - (a) Diagrama de fases nas variáveis (t_1, t_2) , mostrando as fases ferromagnética (F), intermediária (I) e paramagnética (P). I_1, I_2 e I_3 são pontos fixos de Ising e \tilde{P} é o ponto fixo de Potts. As curvas tracejadas $t_2=t_1$ e $t_2 = t_1^2$ são respectivamente os subespaços invariantes de Potts e Ising. A região tracejada corresponde a valores não físicos de (t_1, t_2) ; (b) Diagrama de fases nas variáveis $(k_B T/J_1, 1+2J_2/J_1)$ com $J_i = (K_i)k_B T$ ($i = 1, 2$). As linhas tracejadas são assíntotas.

$$t_2 \sim (\sqrt{2}-1) - c t_1^3 \quad ; \quad (c = 2(3\sqrt{2}-2)/7 \approx 0.64) \quad (3.3.1)$$

$$t_2 \sim 1 - d[\sqrt{2}-1-t_1] - e[\sqrt{2}-1-t_1]^3 \quad ; \quad (d=2/(\sqrt{2}-1) \approx 4.83; \\ e=c/\sqrt{2}(\sqrt{2}-1)^4 \approx 15.4) \quad (3.3.2)$$

$$t_2 \sim 1 - 2t_1 \pm f(1/3-t_1)^\phi \quad ; \quad (f \approx 982; \phi = \ln(27/13)/\ln(17/13) \approx 2.7245) \quad (3.3.3)$$

Com relação aos expoentes críticos ν_T , os resultados são os seguintes: (i) os pontos I_1, I_2 e I_3 são semi-estáveis e possuem o mesmo valor de ν_T , dado por $\nu_T = \ln 2 / \ln(2\sqrt{2} - 1) \approx$

$\cong 1.15$ ($v_T(\text{exato}) = 1$ ⁽¹³³⁾); (ii) O ponto \hat{P} é totalmente instável com $v_T = \ln 2 / \ln(27/13) \cong 0.95$ ($v_T(\text{exato}) = 2/3$ ⁽¹³⁴⁾), possuindo, também, o expoente de "crossover" $\phi = \ln(27/13) / \ln(17/13) \cong 2.7245$, (iii) As linhas F-I e I-P pertencem à classe de universalidade de Ising (resultado exato); (iv) A linha F-P é da classe de universalidade de Ising (esta previsão do G.R. é incorreta, já que esta é uma linha de pontos fixos ⁽¹⁵⁸⁾).

Para finalizar, gostaríamos de mencionar que o método de corte-colapso aqui apresentado, foi também aplicado para o modelo $Z(4)$ na rede quadrada, anisotrópica ⁽¹⁷⁰⁾ e com diluição de ligações ⁽¹⁷¹⁾.

CAPÍTULO 4

O MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS EM UMA ÁRVORE DE CAYLEY

Empregando técnicas iterativas semelhantes às do GR, obtemos o diagrama de fases do modelo de Ising com interações competitivas J_1 (1^{os} vizinhos) e J_2 e J_3 (2^{os} vizinhos) em uma árvore de Cayley cujo número de ramificação é 2. Todos os sinais de J_1 , J_2 , J_3 são considerados, e a influência do campo magnético é discutida.

4.1 - MODELO E FORMALISMO

Apesar de árvores de Cayley não reproduzirem as estruturas geométricas de substâncias reais, elas têm sido extensivamente estudadas em Mecânica Estatística. Vários fatores contribuem para isso: (a) A correspondência entre estas árvores e a aproximação de Bethe-Peierls⁽¹⁷²⁾ para rede de Bravais; (b) A presença nestas árvores de efeitos semelhantes aos fenômenos observados em sistemas mais realísticos, como o modelo ANNNI⁽¹⁷³⁾, que é usado para descrever algumas substâncias, tais como CeSb e NaNO_2 ; (c) O fato de que a topologia especial das árvores de Cayley, torna mais factível (na maioria das vezes) o cálculo de certas grandezas fí-

sicas.

Vamos considerar a árvore de Cayley da Fig. 4.1.1(a), cujo número de ramificação é 2, e onde enumeramos as camadas em ordem crescente a partir da superfície (que corresponde a $N=1$). Vamos associar a cada sítio, uma variável de Ising ($\sigma_i = \pm 1$) e considerar interações J_1 (de 1^{os} vizinhos); J_2 (de 2^{os} vizinhos no mesmo ramo da árvore) e J_3 (de 2^{os} vizinhos em ramos anexos).

O caso particular $J_3 = 0$ foi estudado por Vannimenus⁽¹⁷⁴⁾ que obteve o diagrama de fases, o qual apresenta as fases paramagnética (P), ferromagnética (F), antiferromagnética (AF), uma fase de período 4 ($\langle 2 \rangle$), além de um conjunto de fases com modulação mais geral (que denotaremos M), apresentando estruturas comensuráveis e incomensuráveis. O estudo deste sistema para o caso $J_3 = J_2$, foi feito por Inawashiro e colaboradores^(175,176), que encontraram um diagrama de fases semelhante ao de Vannimenus, e investigaram a estrutura das fases do conjunto M, detectando a existência de uma escada do diabo⁽¹⁷⁷⁾, que é associada a estruturas moduladas encontradas em fases do tipo vidro de spin⁽¹⁷⁸⁾.

Neste capítulo⁽¹⁷⁹⁾, vamos generalizar os trabalhos anteriores, considerando a situação em que as interações J_1 , J_2 e J_3 podem assumir quaisquer valores (positivos ou negativos).

Para este estudo vamos aplicar um formalismo que emprega relações iterativas^(175,176,179) obtidas por um procedimento de decimação, que a cada passo elimina os sítios da camada mais externa, de modo a preservar a função de partição (Fig. 4.1.1(b)).

O efeito das camadas externas já eliminadas, é incorporado no campo efetivo \underline{X} , e sob a decimação aparecem os novos campos \underline{U} e \underline{V} da Fig. 4.1.1(b).

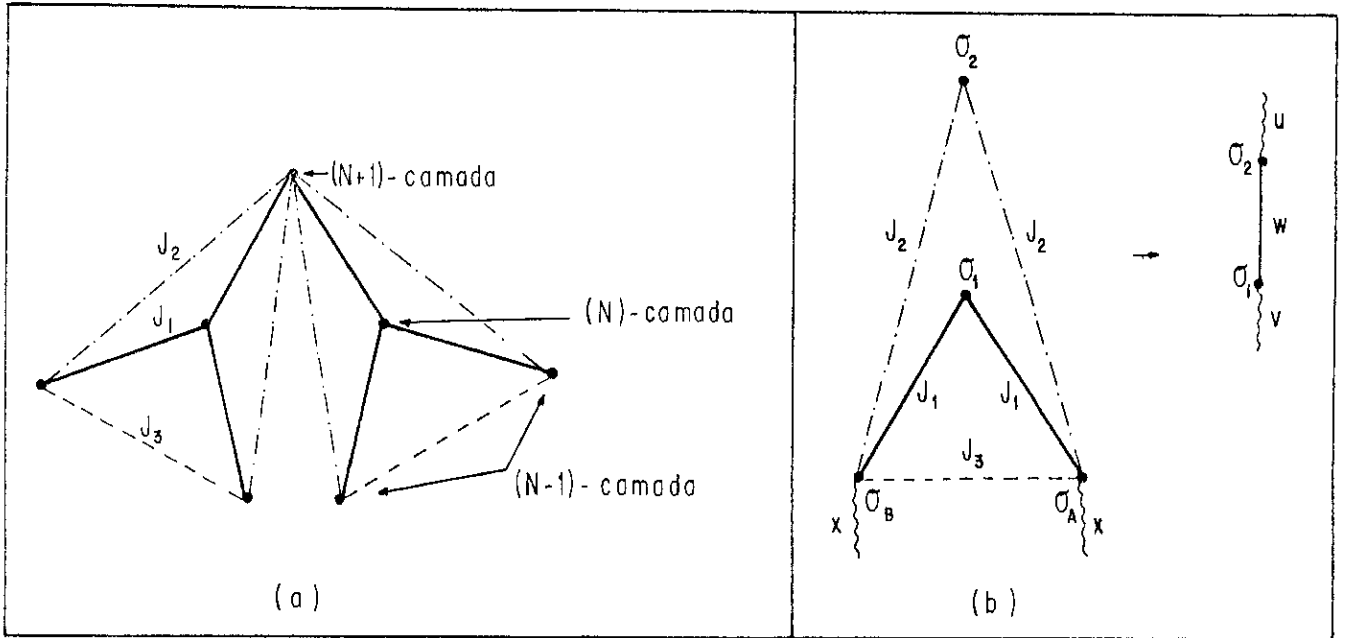


FIGURA 4.1.1: (a) Três sucessivas gerações de uma árvore de Cayley de número de ramificação 2. J_1 (—), J_2 (-.-.-) e J_3 (----) são interações entre variáveis de Ising; (b) Diagrama usado para ilustrar o procedimento de decimação que elimina os sítios externos (σ_A e σ_B). X , U e V são campos efetivos.

A realização da operação indicada nesta figura é feita igualando-se:

$$\sum_{\sigma_A, \sigma_B = \pm 1} \exp \left\{ K_1 (\sigma_1 \sigma_A + \sigma_1 \sigma_B) + K_2 (\sigma_2 \sigma_A + \sigma_2 \sigma_B) + K_3 \sigma_A \sigma_B + X (\sigma_A + \sigma_B) \right\} = C \exp (W \sigma_1 \sigma_2 + U \sigma_2 + V \sigma_1) \quad (4.1.1)$$

onde $K_i = J_i/k_B T$ ($i = 1, 2, 3$). O traço parcial da eq. (4.1.1) permite obter:

$$U = (1/4) \ln [w(1,1)w(1,-1)/w(-1,1)w(-1,-1)] \quad (4.1.2)$$

$$V = (1/4) \ln [w(1,1)w(-1,1)/w(1,-1)w(-1,-1)] \quad (4.1.3)$$

$$W = (1/4) \ln [w(1,1)w(-1,-1)/w(1,-1)w(-1,1)] \quad (4.1.4)$$

$$C = [w(1,1)w(1,-1)w(-1,1)w(-1,-1)]^{1/4} \quad (4.1.5)$$

sendo

$$w(\sigma, \sigma') = 2 \exp(K_3) \cosh(2X + 2K_2\sigma + 2K_1\sigma') + 2 \exp(-K_3) \quad (4.1.6)$$

À medida que eliminamos as camadas, as variáveis $X^{(r)}$ e $K_1^{(r)}$ (r é o índice que enumera a ordem de iteração) se transformam (para $r = 2, 3, 4$) segundo as relações abaixo

$$X^{(r)} = B^{(r)} + 2U(X^{(r-2)}, K_1^{(r-2)}) + V(X^{(r-1)}, K_1^{(r-1)}) \quad (4.1.7)$$

e

$$K_1^{(r)} = K_1 + W(X^{(r-1)}, K_1^{(r-1)}) \quad (4.1.8)$$

onde $B^{(r)} = H^{(r)}/k_B T$; $H^{(r)}$ é o campo magnético aplicado na r -ésima camada.

As condições iniciais das relações iterativas (4.1.7) e (4.1.8) são:

$$X^{(0)} = K_1^{(0)} = 0 \quad (4.1.9)$$

$$X^{(1)} = B_S \quad ; \quad K_1^{(1)} = K_1 \quad (4.1.10)$$

sendo B_S associado ao campo aplicado na superfície da árvore (H_S), cuja presença é necessária para quebrar a simetria da superfície. Recordemos que em uma árvore de Cayley os efeitos de superfície são extremamente importantes, já que o número de sítios na camada externa é sempre da mesma ordem de grandeza do número de sítios

do volume. Neste trabalho escolhemos para B_S , o valor $B_S = 0.01$, embora para quase todo o diagrama de fases possa ser feita uma escolha arbitrária para B_S ($B_S \neq 0$). Entretanto, para valores de B_S suficientemente grandes, modificações no diagrama de fases (induzidas por campos muito altos) podem, em princípio, ocorrer (as referências (180) e (181) contêm uma discussão deste efeito para o caso particular $J_2 = J_3 = 0$).

4.2 - O DIAGRAMA DE FASES

As relações de recorrência (eqs. (4.1.7) e (4.1.8)) permitem obter o diagrama de fases do sistema, que apresentamos no espaço das variáveis $(k_B T/J_1, p, q, H/J_1)$, sendo $p \equiv -J_2/J_1$, $q \equiv J_3/J_2$ ($q = 0$ e 1 , correspondem respectivamente aos casos estudados por Vannimenus (174) e por Inawashiro e colaboradores (175, 176)).

Cada fase é caracterizada por um atrator específico no plano $(X^{(r)}, K_1^{(r)})$, onde o campo efetivo $X^{(r)}$ determina a magnetização da r -ésima camada. O diagrama de fases é obtido, pela observação das mudanças qualitativas destes atratores, mudanças estas que podem ser contínuas ou abruptas, caracterizando respectivamente transições de 2ª ou 1ª ordem. Alguns atratores típicos são apresentados na Figura 4.2.1.

Nas Figuras 4.2.2, 4.2.3 e 4.2.4 apresentamos alguns diagramas de fases para $H = 0$ e diversos valores de p e q . É importante notar que existe um isomorfismo entre as regiões (J_1, J_2, J_3) e $(-J_1, J_2, J_3)$. Neste isomorfismo, a fase ferromagnética corresponde à fase antiferromagnética e a fase modulada $\langle 2 \rangle$ tem a ordem al

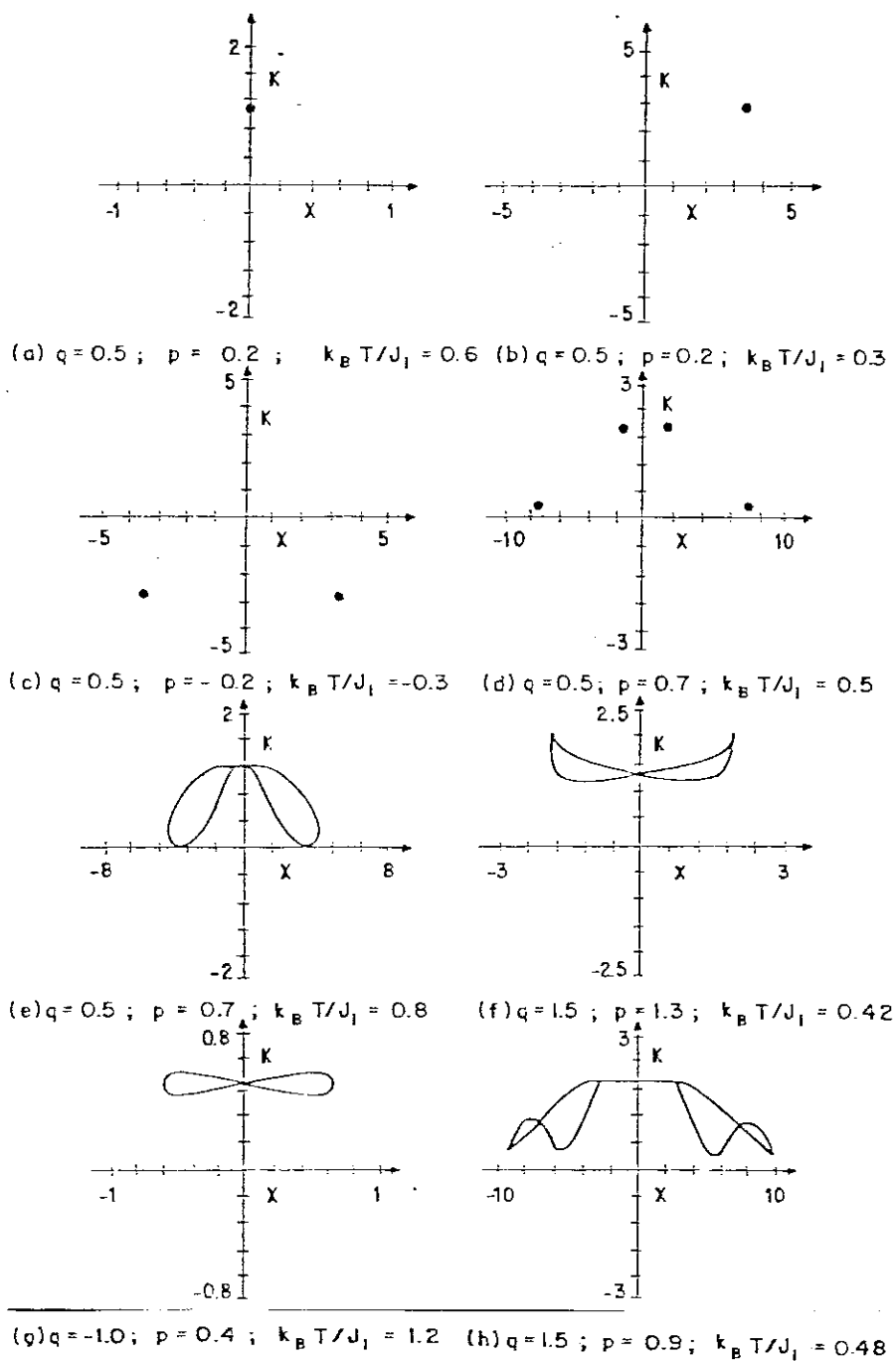
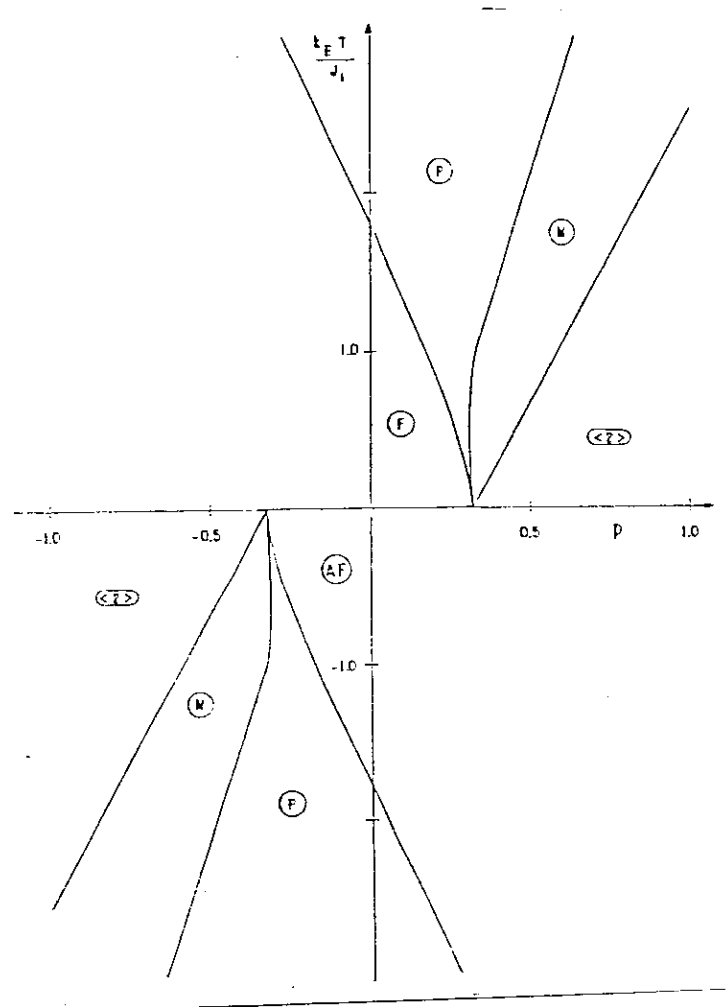


FIGURA 4.2.1 - Exemplos de atratores no plano (X, K_1) (determinados pelas equações (4.1.7) e (4.1.8)) para $H = 0$ e valores típicos de p e q , caracterizando as seguintes fases: (a) paramagnética; (b) ferromagnética; (c) antiferromagnética; (d) modulação $\langle 2 \rangle$; (e)-(h) fases moduladas (M).

FIGURA 4.2.2 - Diagrama de fases para $H = 0$ e $q \equiv J_3/J_2 = -1$, apresentando as fases ferromagnética (F), paramagnética (P), antiferromagnética (AF), modulação $\langle 2 \rangle$ e modulações mais gerais (M).



terada de $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$ para $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$, onde as setas indicam a magnetização de 4 camadas sucessivas. As fases moduladas (M) apresentam uma inversão de ordem semelhante à fase $\langle 2 \rangle$. Devido a este isomorfismo, vamos

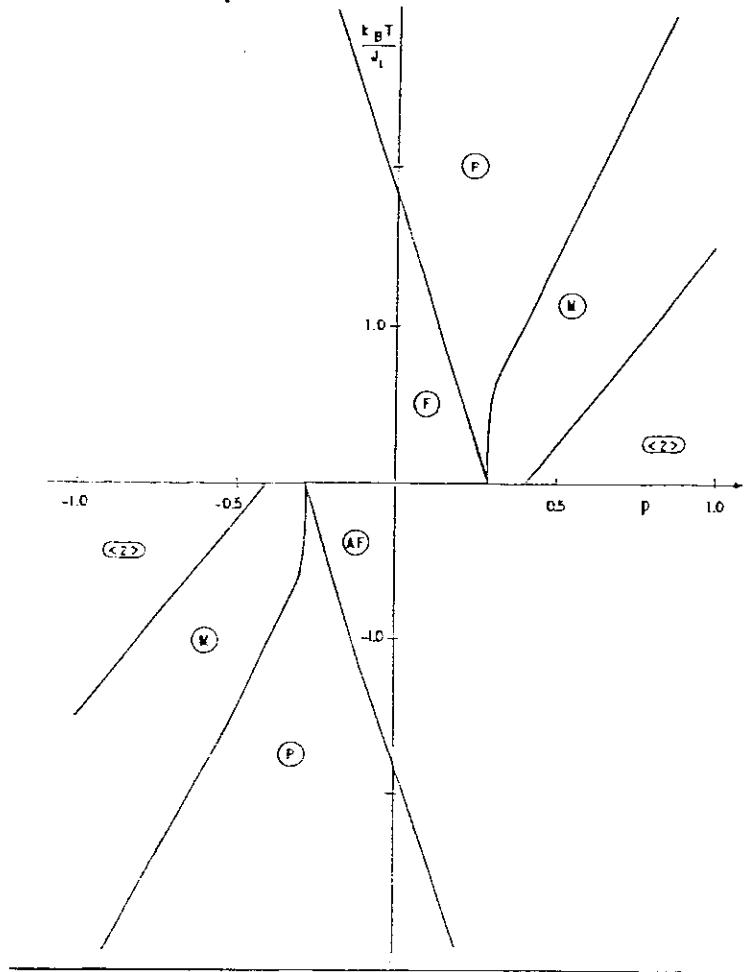
nos limitar a analisar a região $k_B T / J_1 \geq 0$, já que o semiplano $k_B T / J_1 \leq 0$ é obtido trivialmente a partir daquele.

Um aspecto interessante do diagrama de fases, é que para $q > 1$, as temperaturas críticas das linhas P-M e M- $\langle 2 \rangle$ atingem um máximo e depois diminuem (quando p cresce), ao contrário do que ocorre se $q \leq 1$ onde estas temperaturas críticas crescem monotonicamente com p .

Para $q = 3/2$ a região \underline{M} divide-se em duas partes distintas \underline{M}_1 e \underline{M}_2 (Figura 4.2.4) que são caracterizadas pelos atratores das Figs. 4.2.1(h) e 4.2.1(f), respectivamente. A fronteira de \underline{M}_1 - $\langle 2 \rangle$ é de 2ª ordem, o que possivelmente não é o caso da linha \underline{M}_2 - $\langle 2 \rangle$, onde o atrator muda abruptamente daquele representa-

FIGURA 4.2.3 - Diagrama de fases para $H = 0$ e $q = 0.5$.

do na Fig. 4.2.1(d) (<2>) para o da Fig. 4.2.1 (f) (M_2), caracterizando uma transição de 1ª ordem. Se $q \geq 3/2$ ou $q \leq 3/2$ o ponto multicrítico P- M_1 - M_2 -<2> desaparece, e as partes M_1 e M_2 tornam-se conectadas por meio de uma região bastante estreita (Fig. 4.2.5).



Nesta região divisória ocorre um interessante fenômeno de *metaestabilidade*, já que durante um longo transiente (muitas interações) o atrator é do tipo daquele da Fig. 4.2.1(f) (fases M_2), até que flutuações numéricas levam o sistema para um atrator do tipo da Fig. 4.2.1(h) (fases M_1). Este fenômeno indica que um número enorme de camadas externas possui uma fase modulada (M_2) diferente da modulação das camadas internas (M_1).

A baixas temperaturas (e com $H = 0$), se $q < 1$, a região M apresenta uma pequena reentrância na fase paramagnética (Fig. 4.2.6) que é mais pronunciada em $q = 0$ e diminui quando q se afasta deste valor (por valores positivos ou negativos).

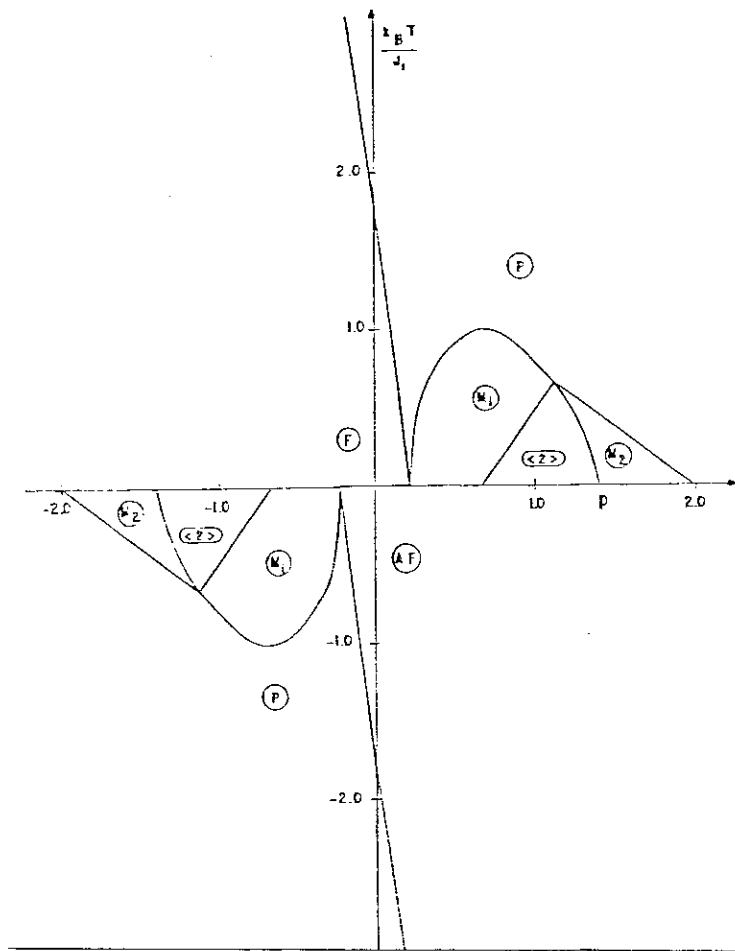


FIGURA 4.2.4 - Diagrama de fases para $H = 0$ e $q = 3/2$. A região \underline{M} se bifurca em duas partes \underline{M}_1 e \underline{M}_2 .

FIGURA 4.2.5 - Parte do diagrama de fases, para $H = 0$ e $q = 1.6$. A região tracejada divide as fases M_1 e M_2 .

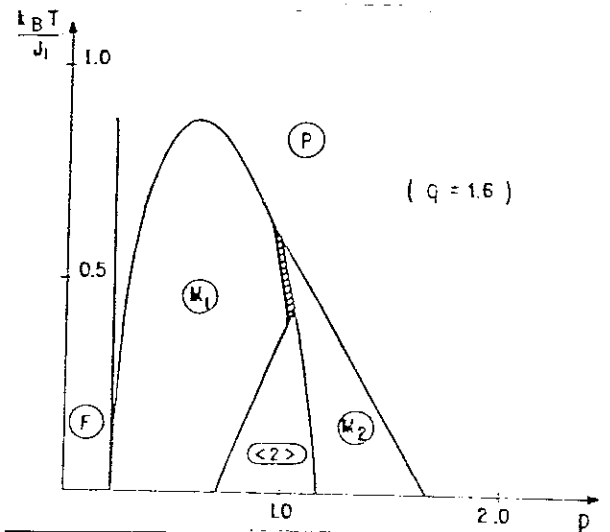


FIGURA 4.2.6 - Reentrâncias da região M na fase P.

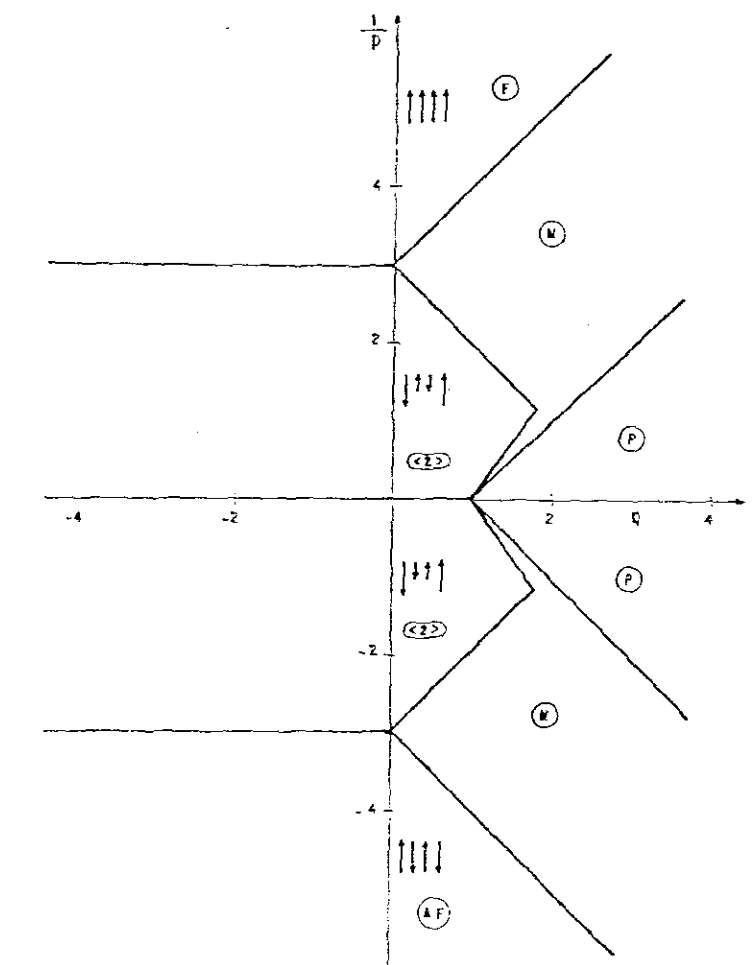
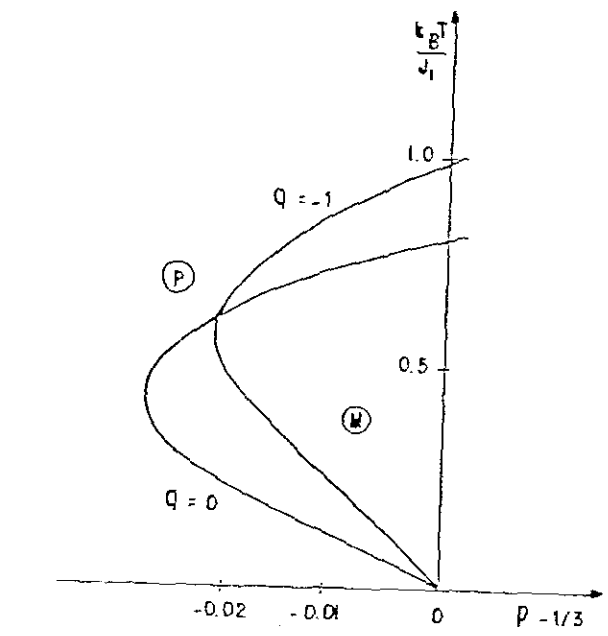


FIGURA 4.2.7 - Diagrama de fases, para $H = 0$ e $k_B T / J_1 = 0$ (o diagrama para $p < 0$ é obtido usando o isomorfismo sob a transformação $(J_1, J_2, J_3) \rightarrow (-J_1, J_2, J_3)$).

Ainda para campos nulos, obtivemos o diagrama de fases em $k_B T/J_1 = 0$, o que são segmentos de reta (Fig. 4.2.7), dados por:

$$\text{a) Linha F-}\langle 2 \rangle \quad : \quad \frac{1}{p} = 3 \quad ; \quad q \leq 0 \quad (4.2.1)$$

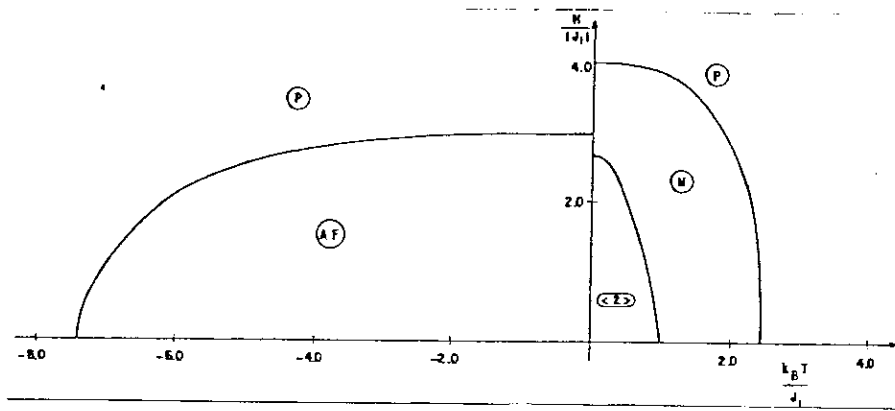
$$\text{b) Linha F-M} \quad : \quad \frac{1}{p} = 3+q \quad ; \quad q \geq 0 \quad (4.2.2)$$

$$\text{c) Linha M-}\langle 2 \rangle \quad : \quad \frac{1}{p} = \begin{cases} 3-q & ; \quad p \leq (2+\sqrt{2})/4 \\ \sqrt{2}(q-1) & ; \quad p \geq (2+\sqrt{2})/4 \end{cases} \quad (4.2.3)$$

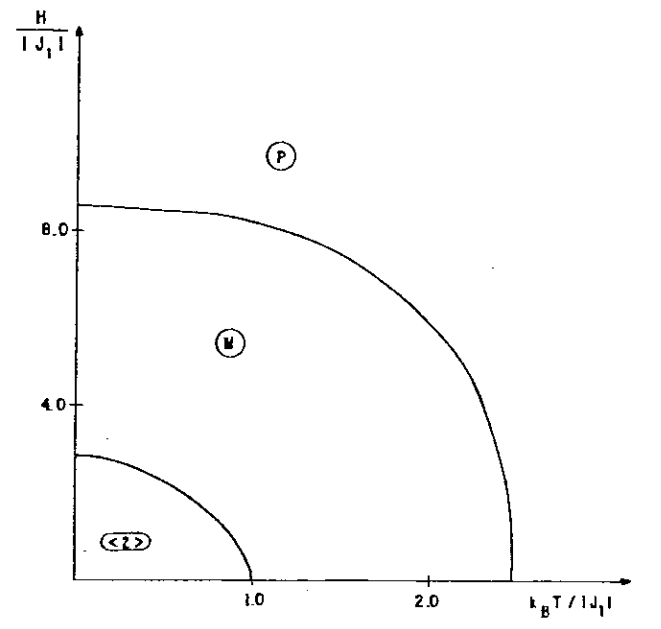
$$\text{d) Linha P-M} \quad : \quad \frac{1}{p} = q-1 \quad ; \quad q \geq 1 \quad (4.2.4)$$

A presença de um campo magnético externo ($H \neq 0$) mudará o diagrama de fases. Em particular a linha F-P desaparecerá, já que o parâmetro de ordem da fase F que é a magnetização, é termodinamicamente conjugado a H. Ilustramos na Fig. 4.2.8 a mudança do diagrama de fases provocada pelo campo, e uma análise mais detalhada dos efeitos provocados por H (no caso particular $J_2=J_3=0$) pode ser encontrada nas referências (182), (183) e (184).

Finalmente, gostaríamos de mencionar como possíveis extensões deste trabalho, um exame mais acurado da estrutura interna das fases moduladas M, o estudo de árvores de número de ramificações diferentes (185) (e eventualmente infinitos) e o diagrama de fases de outros modelos estatísticos em árvores de Cayley, como o modelo de Potts (186) e o modelo "Chiral" (187), já estudados em situações especiais.



(a)



(b)

FIGURA 4.2.8 - Diagrama de fases na presença de um campo externo $H \neq 0$:
(a) $p = q = 1$;
(b) $p = -q = -1$.

CAPÍTULO 5

NÍVEIS DE ENERGIA E CALOR ESPECÍFICO DE OSCILADORES ANARMÔNICOS DESACOPLADOS

Neste capítulo nos afastamos do tema central desta tese (magnetismo de sistemas de spins localizados), para estudar os níveis de energia e calor específico de osciladores anarmônicos desacoplados, utilizando diferentes aproximações analíticas e comparando seus resultados com cálculos numéricos de alta precisão.

5.1 - O ESPECTRO DE ENERGIA

Vamos considerar um sistema cujo Hamiltoniano é:

$$H = \frac{1}{2m} (P^2 + a^{(v+2)/2} |x|^v) \quad ; \quad a, v > 0 \quad (5.1.1)$$

Este sistema engloba como casos particulares (diferentes valores de v) vários casos de interesse físico. Assim o limite $v \rightarrow 0$ representa um poço de potencial de altura $a/2m$ e largura infinitesimal ($\Delta x \rightarrow 0$); para $v = 2$ temos o oscilador harmônico simples de constante $K = a^2/m$; no limite $v \rightarrow \infty$ o sistema reproduz um poço quadrado infinito de largura $\Delta x = 2/\sqrt{a}$, e finalmente, para os demais valores de v , temos um oscilador anarmônico.

A solução exata dos níveis de energia do Hamiltoniano acima (para ν qualquer) ainda não é conhecida, com exceção dos casos particulares $\nu = 0, 2, \infty$ (188). Além destes resultados, somente por meio de cálculos numéricos de alta precisão (189-193) e aproximações analíticas (W.K.B. (188) e Turschner (194)) tem sido possível fazer estimativas (195) sobre os valores dos níveis de energia $E_n(\nu)$ ($n = 0, 1, 2, \dots$ é o número quântico que caracteriza o estado).

Turschner interpretou sua fórmula como exata, até que trabalhos posteriores (196, 197) mostraram que o resultado por ele obtido constituía, na realidade, uma aproximação. Sua fórmula estabelece a seguinte expressão para os níveis de energia:

$$E_n(\nu) = B(\nu) \frac{(-1)^n}{n!} \left\{ \frac{d^n}{ds^n} \left[\frac{(2+s)^n}{s^{(3\nu+2)/(\nu+2)}} \right] \right\}_{s=2} ; \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (5.1.2)$$

onde

$$B(\nu) \equiv \hbar \omega(\nu) \Gamma\left(\frac{3\nu+2}{\nu+2}\right) \left[\frac{\nu \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{\nu} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma(1/\nu)} \right]^{2\nu/(\nu+2)} \quad (5.1.3)$$

com

$$\omega(\nu) \equiv (a/m) \hbar^{(\nu-2)/(\nu+2)} \quad (5.1.4)$$

$\hbar = h/2\pi$ é a constante de Planck e $\Gamma(x)$ é a função Gamma (198), que generaliza o fatorial e cuja propriedade fundamental é $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$.

A expressão original para $E_n(\nu)$ (eq. (5.1.2)) não é apropriada para fins operacionais, já que a obtenção do enésimo

nível de energia exige o cálculo de uma derivada de ordem \underline{n} , o que pode ser um processo tedioso se o estado correspondente é um dos estados de alta energia.

A expressão para $E_n(\nu)$ pode ser colocada em forma mais conveniente, desenvolvendo em binômio de Newton o termo $(2+s)^n$ e efetuando posteriormente a derivada na variável \underline{s} , o que resulta em:

$$E_n(\lambda) = \frac{B(\lambda)}{2^{1+\lambda}} \sum_{\ell=0}^n \frac{\Gamma(\lambda+\ell+1)}{\Gamma(\ell+1)\Gamma(n+1-\ell)\Gamma(\lambda+\ell+1-n)} \quad (5.1.5)$$

onde $\lambda = 2\nu/(\nu+2) \in (0,2)$ é uma variável apropriada que faz um mapeamento biunívoco do intervalo $0 < \nu < \infty$ em $0 < \lambda < 2$.

Da equação (5.1.5) temos:

$$E_0(\lambda) = B(\lambda)/2^{(1+\lambda)} \quad (5.1.6)$$

$$E_1(\lambda) = E_0(\lambda)(2\lambda+1) \quad (5.1.7)$$

$$E_2(\lambda) = E_0(\lambda)(2\lambda^2+2\lambda+1) \quad (5.1.8)$$

Pode-se mostrar que, em geral, $E_n(\lambda)/E_0(\lambda)$ é um polinômio de grau \underline{n} na variável $\underline{\lambda}$.

É possível também derivar relações recursivas a partir da eq. (5.1.2). Usando a igualdade $2E_0(\lambda+1)/E_0(\lambda) = B(\lambda+1)/B(\lambda)$, mostra-se que:

$$\frac{E_n(\lambda+1)}{E_0(\lambda+1)} = \binom{n+1}{\lambda+1} \left[\frac{E_{n+1}(\lambda)}{E_0(\lambda)} + \binom{n-\lambda}{n+1} \frac{E_n(\lambda)}{E_0(\lambda)} \right] \quad (5.1.9)$$

$$\frac{E_{n+1}(\lambda)}{E_0(\lambda)} = \binom{n-\lambda}{\lambda+1} \left[\binom{n+1}{n-\lambda} \frac{E_n(\lambda+1)}{E_0(\lambda+1)} - \frac{E_{n+1}(\lambda+1)}{E_0(\lambda+1)} \right] \quad (5.1.10)$$

Destas relações, vemos que para os níveis de energia na aproximação de Turschner, os intervalos $0 < \lambda \leq 1$ e $1 \leq \lambda < 2$ são relacionados, de modo que apenas uma destas regiões precisa ser estudada, já que a outra é trivialmente obtida a partir da primeira.

Combinando as eqs. (5.1.9) e (5.1.10), obtemos:

$$E_{n+1}(\lambda) = \left(\frac{1}{n+1}\right) \left[(2\lambda+1)E_n(\lambda) + n E_{n-1}(\lambda) \right] \quad (5.1.11)$$

Esta relação de recorrência, permite obter iterativamente a energia de um estado qualquer, a partir das energias do estado fundamental $E_0(\lambda)$ (eq. (5.1.6)) e do 1º estado excitado $E_1(\lambda)$ (eq. (5.1.7)), o que facilita enormemente a realização de médias térmicas, as quais envolvem a totalidade do espectro.

Derivamos também expressões assintóticas ($n \rightarrow \infty$) para os níveis dos estados de mais alta energia, que são dados por:

$$E_n(\lambda) = E_0(\lambda) \frac{2^\lambda n^\lambda}{\Gamma(\lambda+1)} \left[1 + \frac{\lambda}{2n} + \frac{\lambda(\lambda^2-1)}{12n^2} + O(1/n^3) \right] \quad (5.1.12)$$

ou

$$E_n(\lambda) = E_0(\lambda) \frac{2^\lambda (n+1/2)^\lambda}{\Gamma(\lambda+1)} \left[1 + \frac{\lambda(\lambda-1)(2\lambda-1)}{24(n+1/2)^2} + O(1/n^3) \right] \quad (5.1.13)$$

Em particular, o termo dominante da equação (5.1.13) constitui a fórmula obtida pela aproximação W.K.B. (193) para os níveis $E_n(\lambda)$.

No limite $\nu \rightarrow 0$ ($\lambda \rightarrow 0$) as aproximações de Turschner e W.K.B., coincidem e todos os níveis convergem para o valor $E_n(\lambda \rightarrow 0) = a/2m$ que é a altura do poço de potencial. Este é um resultado exato⁽¹⁸⁸⁾, já que neste caso não existem estados ligados e o espectro de energia do sistema é contínuo, com limite inferior $E_0 = a/2m$.

Para $\nu = 2$ ($\lambda = 1$) novamente as duas aproximações coincidem e reproduzem o valor exato do espectro de um oscilador harmônico simples $E_n(\lambda=1) = \hbar\omega(\lambda=1) (n + 1/2)$.

No limite $\nu \rightarrow \infty$ ($\lambda \rightarrow 2$) as aproximações mencionadas fornecem as seguintes expressões para os níveis de energia:

$$E_n(\lambda) = \frac{\pi^2 \hbar^2 a}{8m} (n^2 + n + 1/2) \quad (\text{Turschner}) \quad (5.1.14)$$

$$E_n(\lambda) = \frac{\pi^2 \hbar^2 a}{8m} (n^2 + n + 1/4) \quad (\text{W.K.B.}) \quad (5.1.15)$$

Estas aproximações falham na reprodução do valor exato dado por⁽¹⁸⁸⁾

$$E_n(\lambda) = \frac{\pi^2 \hbar^2 a}{8m} (n^2 + 2n + 1) \quad (\text{exato}) \quad (5.1.16)$$

Os resultados obtidos para outros valores de ν (Tabela 5.1.1) mostram ser a aproximação de Turschner superior à aproximação W.K.B. para quaisquer ν e n . Em ambas as aproximações os erros cometidos diminuem para grandes valores de n , tornando-se desprezíveis no limite $n \rightarrow \infty$, quando ambas reproduzem o resultado exato.

Na Fig. 5.1.1 apresentamos um gráfico dos primeiros níveis de energia previstos pela aproximação de Turschner.

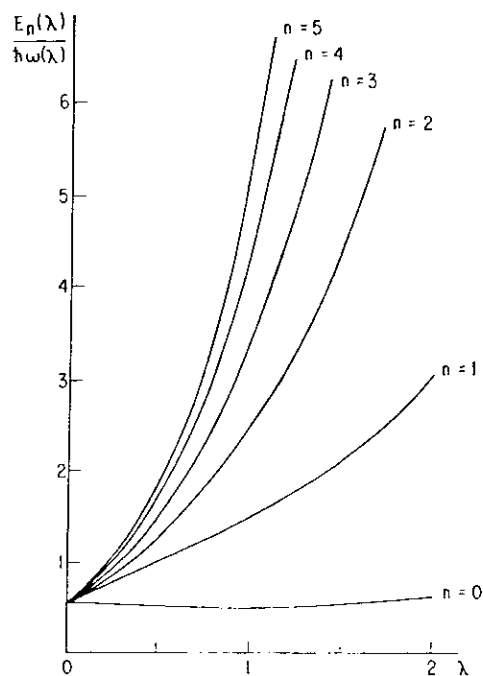
(a)			
n	$E_n(\nu=4)/\hbar\omega(\nu=4)$		
	Banerjee (1978)	WKB	Turschner
0	0.530 181	0.433 573	0.516 229
1	1.899 837	1.875 961	1.892 838
10	25.128 127	25.120 092	25.127 242
50	203.937 182	203.934 483	203.936 825
100	510.494 996	510.493 531	510.494 769
1 000	10 932.631 059	10 932.637 589	10 932.631 010
10 000	235 395.147 214	235 395.296 055	235 395.147 202

(b)			
n	$E_n(\nu=6)/\hbar\omega(\nu=6)$		
	Hioe (1976)	WKB	Turschner
0	0.572 404	0.400 415	0.532 288
1	2.169 303	2.080 618	2.129 151
2	4.536 544	4.476 777	4.524 447
3	7.467 589	7.415 792	7.452 030
4	10.857 066	10.811 208	10.845 365
5	14.649 761	14.608 294	14.637 916

(c)			
n	$E_n(\nu=8)/\hbar\omega(\nu=8)$		
	Hioe (1976)	WKB	Turschner
0	0.612 911	0.380 968	0.544 641
1	2.377 909	2.209 441	2.287 492
2	5.122 494	5.003 113	5.076 054
3	8.671 641	8.571 270	8.631 471
4	12.905 042	12.813 753	12.870 085
5	17.749 655	17.665 151	17.716 048

TABELA 5.1.1 - Resultados numéricos dos níveis de energia para valores típicos de ν ((a) $\nu=4$; (b) $\nu=6$; (c) $\nu=8$), obtidos ^(195a) pelas aproximações de Turschner e W.K.B., comparados com cálculos numéricos ⁽¹⁹⁰⁻¹⁹²⁾.

FIGURA 5.1.1 - Variação dos seis primeiros níveis de energia (usando a fórmula de Turschner) em relação ao parâmetro $\lambda = 2\nu/(\nu+2)$.



5.2 - O CALOR ESPECÍFICO

Efeitos anarmônicos têm particular importância no estudo de propriedades vibracionais de um sólido⁽¹⁹⁹⁾, como por exemplo, na explicação da dilatação térmica e no cálculo da condutividade térmica de isolantes. Em geral, considera-se os átomos como um conjunto de osciladores acoplados, e se estudam os modos normais de vibração, e os efeitos provenientes de perturbações anarmônicas. Este fato justifica o interesse em calcular propriedades termodinâmicas de osciladores anarmônicos.

Assim, nesta seção, vamos investigar o comportamento térmico de um conjunto de osciladores anarmônicos (eq.(5.1.1)) de sacoplados, calculando o seu calor específico, cuja expressão exata é conhecida somente no caso $\nu = 2$ ⁽³⁾, e cujo limite clássico de altas temperaturas para $\nu = 2N$ ($N = 1, 2, 3, \dots$) vale $C \approx (\frac{1}{2} + \frac{1}{2N})k_B$ ⁽²⁰⁰⁾. Usaremos a aproximação de Turschner para o espectro de energia, que é superior a W.K.B., conforme vimos na seção anterior.

O calor específico é dado pela expressão geral⁽³⁾:

$$C = k_B \frac{\partial}{\partial T} \left[T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right] \quad (5.2.1)$$

sendo $Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n(\lambda)/k_B T)$ a função de partição do sistema.

Não nos foi possível obter as expressões analíticas de Z e C para valores arbitrários de λ e T . Devido a isso, efetuamos um cálculo numérico cujos resultados são exibidos na Fig. 5.2.1 e na Tabela 5.2.1, e métodos analíticos foram empregados somente nos limites $T \rightarrow 0$ e $T \rightarrow \infty$.

No limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$) somente transições entre os primeiros níveis de energia ocorrem (a menos de even

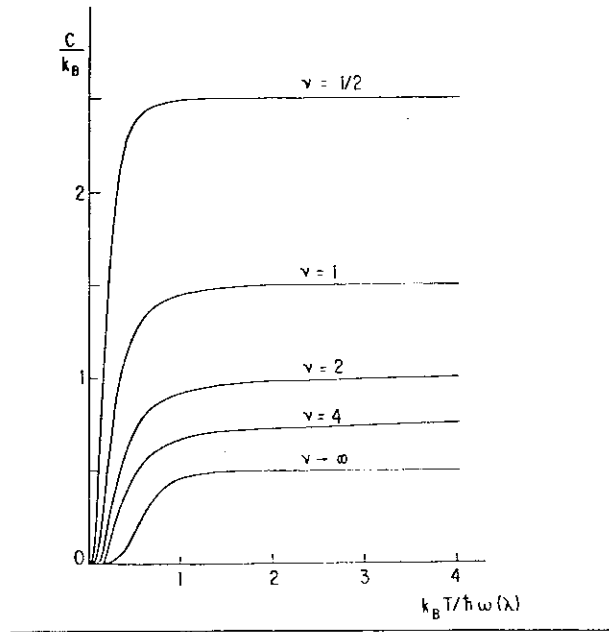


FIGURA 5.2.1 - Variação térmica do calor específico para valores selecionados de ν .

$k_B T / \hbar\omega(\nu)$	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{\nu}{2}^*$	4	$\nu \rightarrow \infty$
0.2	1.150 874	0.505 332	0.170 742	0.048 489	0.000 668
0.4	2.309 754	1.133 296	0.608 890	0.376 005	0.079 362
0.6	2.451 448	1.345 011	0.797 441	0.558 937	0.268 633
0.8	2.483 854	1.423 335	0.879 366	0.633 495	0.405 654
1.0	2.493 504	1.457 285	0.920 674	0.669 246	0.467 745
1.2	2.497 000	1.474 010	0.944 085	0.689 473	0.490 114
1.4	2.498 465	1.483 099	0.958 546	0.702 307	0.497 182
1.6	2.499 150	1.488 428	0.968 074	0.711 103	0.499 237
1.8	2.499 499	1.491 746	0.974 672	0.717 465	0.499 801
2.0	2.499 689	1.493 914	0.979 425	0.722 251	0.499 950

* A expressão analítica para $\nu=2$ é dada por (3):

$$\frac{C}{k_B} = \frac{\theta^2 \exp(\theta)}{[\exp(\theta) - 1]^2} \left[\theta = \frac{\hbar\omega(\nu=2)}{k_B T} \right]$$

TABELA 5.2.1 - Calor específico (em unidades de k_B) para valores típicos de ν e T.

tuais flutuações). Considerando apenas transições entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, obtemos:

$$\frac{C}{k_B} \cong \left(\frac{2\lambda E_0(\lambda)}{k_B T} \right)^2 \exp \left(- \frac{2\lambda E_0(\lambda)}{k_B T} \right) ; \quad (T \rightarrow 0) \quad (5.2.2)$$

A função de Cauchy $\exp(-2\lambda E_0(\lambda)/k_B T)$ garante que $C \rightarrow 0$ em $T \rightarrow 0$ (3ª lei da termodinâmica), sendo uma função típica do comportamento de baixas temperaturas de sistemas cujos espectros de energia são descontínuos no estado fundamental.

No limite de altas temperaturas, obtemos:

$$\frac{C}{k_B} \cong \frac{1}{\lambda} \left\{ 1 - R(\lambda) \left[\frac{\hbar\omega(\lambda)}{k_B T} \right]^\alpha \right\} \quad (T \rightarrow \infty) \quad (5.2.3)$$

Esta expressão (com diferentes $R(\lambda)$ e α) foi obtida também pela aproximação W.K.B. e pela expansão semi-clássica de Wigner-Kirkwood (3,201,202), que consiste em expandir a função de partição em potências de \hbar .

O valor clássico ($T \rightarrow \infty$) predito pelas 3 aproximações acima mencionadas $C \cong \frac{1}{\lambda} k_B = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu}\right)k_B$ generaliza o teorema da equipartição ($\nu = 2$) e o caso $\nu = 2N$ ($N = 1,2,3$) obtido anteriormente (200).

No tocante ao expoente (α) da correção quântica ao valor clássico, a aproximação de Turschner e a expansão de Wigner-Kirkwood prevêem um valor $\alpha = 2/\lambda = 1+2/\nu$, enquanto a aproximação W.K.B. fornece $\alpha = 1+1/\lambda = (3\nu+2)/2\nu$. No caso particular $\nu = 4$, efetuamos um cálculo computacional, usando o espectro numérico disponível (190) e observamos que o expoente da aproximação de Turschner é o correto. Na Tabela 5.2.2 apresentamos estes resulta

dos e efetuamos uma comparação entre as aproximações de Turschner e W.K.B.

$k_B T / \hbar \omega (\nu=4)$	exato (numérico)	C/k_B	
		Turschner	WKB
0.2	0.049 697 . . .	0.048 489 (-2.43)	0.038 335 (-22.88)
0.4	0.378 727 . . .	0.376 005 (-0.72)	0.352 683 (-6.88)
0.6	0.560 176 . . .	0.558 937 (-0.22)	0.554 271 (-1.05)
0.8	0.633 516 . . .	0.633 495 (-0.003)	0.641 220 (1.22)
1.0	0.668 456 . . .	0.669 246 (0.12)	0.682 084 (2.04)
1.2	0.688 183 . . .	0.689 473 (0.19)	0.703 790 (2.27)
1.4	0.700 741 . . .	0.702 307 (0.22)	0.716 535 (2.25)
1.6	0.709 408 . . .	0.711 103 (0.24)	0.724 616 (2.14)
1.8	0.715 732 . . .	0.717 465 (0.24)	0.730 054 (2.00)
2.0	0.720 536 . . .	0.722 251 (0.24)	0.733 886 (1.85)
3.0	0.733 549 . . .	0.734 921 (0.19)	0.742 773 (1.26)
4.0	0.739 164 . . .	0.740 211 (0.14)	0.745 840 (0.90)
5.0	0.742 181 . . .	0.742 997 (0.11)	0.747 268 (0.69)

TABELA 5.2.2 - Calores específicos para $\nu = 4$ obtidos ^(195a) pelas fórmulas de Turschner e W.K.B., comparados com o resultado numérico. Os erros percentuais são indicados entre parênteses.

Uma expansão da função de partição (usando o espectro de Turschner) em altas temperaturas ⁽¹⁹⁵⁾ permite estimar um valor para $R(\lambda)$ e compará-lo com o valor obtido pela expansão de Wigner-Kirkwood. Para $\nu = 2$ ($\lambda = 1$) ambas as aproximações reproduzem o resultado exato $R(1) = 1/12 \cong 0.0833$ enquanto para $\nu = 4$ ($\lambda = 4/3$) as aproximações mencionadas fornecem os valores 0.104 (Turschner) e 0.119 (Wigner-Kirkwood). O cálculo numérico feito para este valor de ν , confirma o valor obtido pela expansão semi-clássica de Wigner-Kirkwood, cuja expressão para $(\lambda \geq 1)$ é dada por:

$$R(\lambda) = 2\lambda \Gamma\left(\frac{5}{2} - \frac{1}{\lambda}\right) / 3\lambda 2^{2/\lambda} (2-\lambda) \Gamma\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{2}\right) \quad (5.2.4)$$

Para $\lambda < 1$ não nos foi possível obter uma expressão analítica para $R(\lambda)$. Entretanto, um cálculo numérico usando a fórmula de Turschner ^(195a) mostra que $R(\lambda)$ cresce monotonicamente de $R(\lambda=0) = 0$ para $R(\lambda=1) = 1/12 = 0.0833$.

CONCLUSÕES

O principal objetivo deste trabalho, foi o estudo de propriedades críticas estáticas de sistemas magnéticos de spins localizados.

Inicialmente desenvolvemos um método para a renormalização (no espaço real) do modelo quântico de Heisenberg anisotrópico de spin $S = 1/2$, que permite o cálculo *exato* de médias térmicas em grafos de 2 terminais comumente usados em renormalização. Examinamos alguns efeitos de origem quântica, que evidenciam o fato de que procedimentos *locais* (que tratam separadamente regiões finitas do sistema), quando aplicados a sistemas quânticos são necessariamente de natureza aproximativa.

Estudamos o modelo (ferromagnético) acima mencionado na rede quadrada (com anisotropia uniaxial, $0 \leq \Delta_{ij}$) e na rede cúbica (com anisotropia uniaxial e planar $-1 \leq \Delta_{ij} \leq 1$), e obtivemos fronteiras críticas e expoentes críticos do comprimento de correlação (ν) e de "crossover" (ϕ), além de determinar as classes de universalidade existentes.

No caso bidimensional, foram analisadas as desordens temperadas de diluição de ligações e de anisotropias. As fronteiras críticas encontradas reproduzem todos os resultados exatos conhecidos (temperaturas críticas dos modelos puros de Ising e de Heisenberg isotrópico, e ponto de percolação do modelo de Ising), o que nos permitem acreditar que as mesmas constituem excelentes propostas numéricas das superfícies reais, para quaisquer temperatu-

ras. Os expoentes críticos obtidos, possuem um erro máximo de 15% em relação aos valores exatos, e a classe de universalidade predominante em ambos os casos, é a do modelo de Ising puro, que engloba todos os pontos críticos do sistema com temperatura não-nula.

No caso tridimensional, onde não existem soluções exatas conhecidas, obtemos uma fronteira crítica, que comparada aos resultados de séries, possuem um erro da ordem de 20%. Os expoentes críticos, quando comparados aos resultados de séries, são superiores aos valores obtidos pela aproximação de Migdal-Kadanoff.

Na região de simetria planar ($\Delta_{ij} < 0$) não é tão boa a performance do presente método (bem como do método de Migdal-Kadanoff). Assim em duas dimensões não reproduzimos a transição de Kosterlitz-Thouless, e em 3 dimensões não obtemos uma descrição adequada da fase ordenada, pois o ponto fixo atrator desta região que possui simetria planar, não é obtido neste trabalho. Em princípio estas dificuldades podem ser contornadas com o uso de grafos adequados.

Outro sistema estudado foi o modelo $Z(4)$, para o qual desenvolvemos um método de realização de traços parciais em grafos de 2 terminais, que dispensa a operação de contagens de configurações. Fizemos uma aplicação, para o modelo ferromagnético na rede quadrada, e a fronteira crítica que encontramos, reproduz todos os resultados exatos conhecidos: a existência das fases paramagnética (P), ferromagnética (F) e intermediária (I); a linha auto-dual F-P; os pontos fixos de Potts (\tilde{P}) e de Ising (I_1, I_2 e I_3). No tocante às classes de universalidade, obtemos *corretamente* que as linhas F-I e I-P possuem a classe de universalidade do modelo de Ising, e *incorretamente* que a linha F-P também possui uma classe de universalidade de Ising (sabe-se que esta é uma linha

de pontos fixos). Todos estes resultados indicam que o diagrama de fases que exibimos (com os comportamentos assintóticos das curvas F-I e I-P) é uma excelente aproximação numérica das linhas críticas reais.

O modelo de Ising em uma árvore de Cayley, com interações competitivas J_1 (de primeiros vizinhos) e J_2, J_3 (de segundos vizinhos) foi estudado por meio de relações iterativas que permitem obter o diagrama de fases (numericamente exato). Este trabalho generalizou resultados obtidos anteriormente para $J_3 = J_2$ e $J_3 = 0$. O diagrama apresenta as seguintes fases: (i) paramagnética (P); (ii) ferromagnética (F); (iii) antiferromagnética (AF); (iv) duas fases de período 4 (denotada por $\langle 2 \rangle$); (v) um conjunto de fases moduladas (comensuráveis e incomensuráveis) que indicamos por M. Alguns fenômenos interessantes foram encontrados, a saber: (a) o desaparecimento das fases $\langle 2 \rangle$ e M para $q = J_3/J_2 > 1$ e valores de $|p| = |-J_2/J_1|$ suficientemente grandes, provocando o aparecimento da fase P a temperaturas arbitrariamente baixas; (b) em $q = 3/2$ as fases M, bifurcam-se em duas regiões M_1 e M_2 , que se conectam por meio de um ponto multicrítico, e para valores de q próximos de $3/2$, a conexão entre estas regiões se dá por meio de uma estreita faixa onde ocorrem fenômenos de metaestabilidade. A transição $\langle 2 \rangle - M_2$ é, ao que tudo indica, de 1ª ordem, ao contrário das demais que são transições contínuas.

Finalmente estudamos os níveis de energia e o calor específico, de um sistema de osciladores anarmônicos desacoplados, onde cada oscilador é caracterizado por um potencial proporcional a $|x|^\nu$ ($\nu > 0$). Realizamos um estudo comparativo entre as aproximações analíticas de Turschner e W.K.B., que evidenciou os seguintes fatos: (a) ambas as aproximações são exatas para os casos par

ticulares $\nu \rightarrow 0$ e $\nu = 2$; (b) para os demais valores de ν , a aproximação de Turschner é superior à WKB, tanto para os níveis de energia como para o cálculo do calor específico. Em particular, o valor clássico do calor específico $C \sim k_B (\frac{1}{2} + \frac{1}{\nu})$ previsto pelas duas aproximações é exato, mas somente a fórmula de Turschner prevê a forma apropriada da 1ª correção quântica a este limite clássico.

Como possíveis extensões do presente trabalho (algumas das quais já estão sendo feitas) gostaríamos de mencionar: (a) o estudo de sistemas antiferromagnéticos e de anisotropias no espaço cristalino; (b) a generalização do método de renormalização de sistemas quânticos, para incluir campo magnético, spins $S > 1/2$ e sistemas de férmions; (c) o estudo de desordens associadas a sítios que são as mais encontradas experimentalmente; (d) a generalização do método de corte-colapso para o modelo $Z(N)$ (N um inteiro qualquer); (e) um exame detalhado das fases moduladas (Capítulo 4) para a detecção de escadas do diabo, atratores estranhos e outros aspectos interessantes.

... pois cada qual considera claras as idéias que estão no mesmo grau de confusão que as suas.

M. Proust

APÊNDICE A

RENORMALIZAÇÃO DE LIGAÇÕES EM SÉRIE E PARALELO

A.1 - LIGAÇÕES EM PARALELO

Consideremos inicialmente um grafo de 2 ligações em paralelo (Fig. A.1(a)). Cada ligação é do tipo Heisenberg anisotrópica (eq. (1.3.1)), e caracterizada pelos parâmetros K_i, Δ_i ($i = 1, 2$). A renormalização deste grafo é obtida trivialmente, e os parâmetros resultantes (K_p, Δ_p) são dados por:

$$K_p = K_1 + K_2 \quad (\text{A.1.1})$$

e

$$\Delta_p = \frac{K_1 \Delta_1 + K_2 \Delta_2}{K_1 + K_2} \quad (\text{A.1.2})$$

A generalização para N ligações em paralelo, de parâmetros K_i, Δ_i ($i = 1, 2, \dots, N$) também é facilmente realizada e resul-

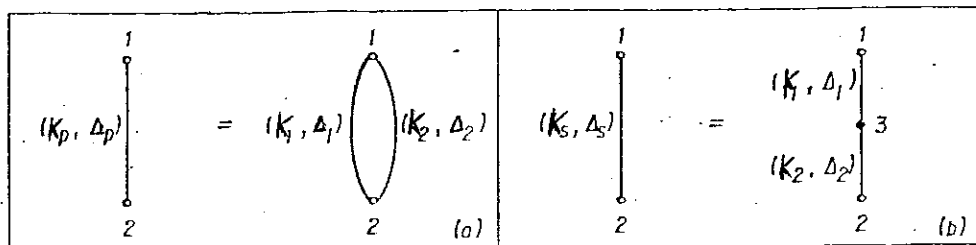


FIGURA A.1 - Grafos de 2 terminais representando a renormalização de 2 ligações em paralelo (a) e em série (b).

ta em:

$$K_p = \sum_{i=1}^N K_i \quad (\text{A.1.3})$$

$$\Delta_p = \frac{\sum_{i=1}^N K_i \Delta_i}{\sum_{i=1}^N K_i} \quad (\text{A.1.4})$$

Duas observações merecem ser feitas, acerca da renormalização do parâmetro de anisotropia (Δ): (i) Se todas as ligações possuem o mesmo valor de Δ ($\Delta_i = \Delta$, $i = 1, 2, \dots, N$) a ligação renormalizada possuirá a mesma simetria, ou seja, $\Delta_p = \Delta$; (ii) Se combinamos algumas ligações isotrópicas ($\Delta_i = 0$; $i = 1, 2, \dots, p$) com outras anisotrópicas ($\Delta_i = \Delta \neq 0$; $i = p+1, \dots, N$; $1 \leq p < N$), a simetria resultante será anisotrópica (planar ($\Delta < 0$) ou uniaxial ($\Delta > 0$)).

A.2 - LIGAÇÕES EM SÉRIE

Vamos agora renormalizar 2 ligações em série (Fig.A.1(b)) de parâmetros K_1, Δ_1 e K_2, Δ_2 , utilizando o método da seção 1.3 . Os parâmetros renormalizados K' e Δ' daquela seção, são denotados aqui por K_s e Δ_s , respectivamente.

Os Hamiltonianos dos grafos de 2 ligações e do grafo renormalizado são dados respectivamente por:

$$H = K_1 [(1-\Delta_1)(\sigma_1^x \sigma_3^x + \sigma_1^y \sigma_3^y) + \sigma_1^z \sigma_3^z] + K_2 [(1-\Delta_2)(\sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_2^y \sigma_3^y) + \sigma_2^z \sigma_3^z] \quad (\text{A.2.1})$$

$$H' = K_0' + K_S [(1-\Delta_S) (\sigma_1^X \sigma_2^X + \sigma_1^Y \sigma_2^Y) + \sigma_1^Z \sigma_2^Z] \quad (\text{A.2.2})$$

A expansão de $e^{H'}$ foi realizada na Seção 1.3 (eq. (1.3.4)) enquanto a expansão de e^H é a seguinte:

$$e^H = a + b_{13} (\sigma_1^X \sigma_3^X + \sigma_1^Y \sigma_3^Y) + b_{23} (\sigma_2^X \sigma_3^X + \sigma_2^Y \sigma_3^Y) + b_{12} (\sigma_1^X \sigma_2^X + \sigma_1^Y \sigma_2^Y) + c_{13} \sigma_1^Z \sigma_3^Z + c_{23} \sigma_2^Z \sigma_3^Z + c_{12} \sigma_1^Z \sigma_2^Z \quad (\text{A.2.3})$$

Como existe invariância pela permutação dos sítios 1 e 2, as seguintes igualdades são satisfeitas: $b_{13} = b_{23}$ e $c_{13} = c_{23}$.

Os parâmetros renormalizados K_0' , K_S e Δ_S são funções dos coeficientes a , b_{12} e c_{12} , determinadas pelas eqs. (1.3.14), (1.3.15) e (1.3.16), fazendo-se $N = 3$.

Para determinar a dependência funcional de a , b_{12} e c_{12} com K_1 , Δ_1 ; K_2 , Δ_2 , necessitamos diagonalizar o Hamiltoniano. Vamos inicialmente representá-lo na base:

$$|\sigma_1^Z \sigma_2^Z \sigma_3^Z\rangle = \{ |+++ \rangle, |++-\rangle, |+-+\rangle, | -++ \rangle, |--+\rangle, | -+- \rangle, | +-- \rangle, | --- \rangle \} .$$

Temos então

$$H = \begin{pmatrix} A_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.4})$$

Definindo $W_i = K_i (1-\Delta_i)$, ($i = 1, 2$) as matrizes A_1 e A_3

tem a seguinte forma:

$$A_1 = K_1 + K_2 \quad (\text{A.2.5})$$

e

$$A_3 = \begin{pmatrix} -(K_1+K_2) & 2W_2 & 2W_1 \\ 2W_2 & (K_1-K_2) & 0 \\ 2W_1 & 0 & (K_2-K_1) \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.6})$$

O Hamiltoniano H , possui um autovalor trivial associado com A_1 ($\epsilon_0 = K_1+K_2$) enquanto os autovalores associados à matriz A_3 ($\epsilon_j, j = 1,2,3$) são as raízes da equação cúbica:

$$\epsilon^3 + \alpha\epsilon^2 - [\beta^2 + 4(W_2^2 + W_1^2)]\epsilon - \beta[\alpha\beta + 4(W_2^2 - W_1^2)] = 0 \quad (\text{A.2.7})$$

$$(\alpha = K_1 + K_2 ; \beta = K_1 - K_2).$$

A matriz U que diagonaliza H , possui a mesma estrutura de blocos que H , com $U_1 = 1$ e U_3 sendo uma matriz 3×3 , cujos elementos são dados por:

$$(U_3)_{i,j} = \lambda_j^i, \quad (i,j = 1,2,3) \quad (\text{A.2.8})$$

onde:

$$\begin{aligned} \lambda_j^1 = & \left(\frac{\epsilon_j + \beta}{2W_1}\right) \lambda_j^3 (1 - \delta_{\Delta_1}^1) (1 - \delta_{\Delta_2}^1) + \sqrt{\frac{4W_2^2}{4W_2^2 + (\epsilon_j + \alpha)^2}} (1 - \delta_{\Delta_2}^1) \delta_{\Delta_1}^1 (1 - \delta_j^3) \\ & + \sqrt{\frac{4W_1^2}{4W_1^2 + (\epsilon_j + \alpha)^2}} (1 - \delta_{\Delta_1}^1) \delta_{\Delta_2}^1 (1 - \delta_j^2) + \delta_{\Delta_1}^1 \delta_{\Delta_2}^1 \delta_j^1 \end{aligned} \quad (\text{A.2.9})$$

$$\lambda_j^2 = \left[\frac{\epsilon_j^2 + \epsilon_j \beta - 4W_1^2}{\alpha(\beta - \epsilon_j) + 4W_2^2} \right] \cdot \left(\frac{W_2}{W_1} \right) \lambda_j^3 (1 - \delta_{\Delta_1}^1) (1 - \delta_{\Delta_2}^1) + \sqrt{\frac{4W_2^2}{4W_2^2 + (\epsilon_j - \beta)^2}} (1 - \delta_{\Delta_2}^1) \delta_{\Delta_1}^1 (1 - \delta_j^3) + (1 - \delta_{\Delta_1}^1) \delta_{\Delta_2}^1 \delta_j^2 + \delta_{\Delta_1}^1 \delta_{\Delta_2}^1 \delta_j^2 \quad (\text{A.2.10})$$

$$(\lambda_j^3)^2 = 1 - (\lambda_j^1)^2 - (\lambda_j^2)^2 \quad (\text{A.2.11})$$

Conhecendo os elementos da matriz U e os autovalores de H , determinamos explicitamente a matriz $F(K_1, \Delta_1; K_2, \Delta_2)$ da equação (1.3.19).

A representação matricial (na mesma base usada para representar H) do lado direito da eq. (A.2.3), é:

$$e^H = \begin{pmatrix} B_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.12})$$

onde

$$B_1 = a + c_{12} + 2c_{13} \quad (\text{A.2.13})$$

e

$$B_3 = \begin{pmatrix} (a + c_{12} - 2c_{13}) & 2b_{13} & 2b_{13} \\ 2b_{13} & (a - c_{12}) & 2b_{12} \\ 2b_{13} & 2b_{12} & (a - c_{12}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.2.14})$$

Assim fica também determinada analiticamente a matriz $G(a, b_{12}, c_{12},$

b_{13}, c_{13}) da equação (1.3.20).

Igualando as matrizes F e G, obtemos:

$$a = \frac{1}{4} \left[e^{(K_1+K_2)} + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 e^{\epsilon_j (\lambda_j^i)^2} \right] \quad (\text{A.2.15})$$

$$b_{12} = \frac{1}{2} \left[\sum_{j=1}^3 e^{\epsilon_j (\lambda_j^2 \lambda_j^3)} \right] \quad (\text{A.2.16})$$

$$c_{12} = \frac{1}{2} \left[e^{(K_1+K_2)} + \sum_{j=1}^3 e^{\epsilon_j (\lambda_j^1)^2} \right] - a \quad (\text{A.2.17})$$

Finalmente, substituindo as 3 equações anteriores nas eqs. (1.3.14), (1.3.15) e (1.3.16) podemos obter explicitamente as relações de renormalização $K'_0(K_1, \Delta_1; K_2, \Delta_2)$, $K_S(K_1, \Delta_1; K_2, \Delta_2)$ e $\Delta_S(K_1, \Delta_1; K_2, \Delta_2)$.

No caso homogêneo ⁽⁸⁷⁾ $K_1 = K_2 = K$ e $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$, temos

$$e^{4K_S(1-\Delta_S)} = \frac{[(\theta+K)e^\theta + (\theta-K)e^{-\theta}]e^{-K}}{2\theta} \quad (\text{A.2.18})$$

$$e^{4K_S} = \frac{\{2\theta e^{2K} + [(\theta-K)e^\theta + (\theta+K)e^{-\theta}]e^{-K}\}^2}{8\theta [(\theta+K)e^\theta + (\theta-K)e^{-\theta}]e^{-K}} \quad (\text{A.2.19})$$

$$e^{K'_0} = 2e^{K_1(3-2\Delta)} \quad ; \quad \theta = K \sqrt{9-16\Delta+8\Delta^2} \quad (\text{A.2.20})$$

Estas relações reproduzem expressões já obtidas anteriormente para os casos particulares $\Delta = 1$ ^(164-a) e $\Delta = 0$ ⁽⁹⁴⁾.

Para finalizar, gostaríamos de mencionar que também para ligações em série, a combinação de interações isotrópicas ($\Delta = 0$)

com anisotrópicas ($\Delta \neq 0$). resulta em uma ligação com simetria anisotrópica ($\Delta_S \neq 0$).

APÊNDICE B

O MODELO Z(4) TOTALMENTE ANISOTRÓPICO NA PONTE DE WHEATSTONE

Consideremos o modelo Z(4) no grafo da ponte de Wheatstone (Fig. 3.2.1), no caso geral em que as ligações entre os sítios $\langle i, j \rangle$ primeiros vizinhos são caracterizados por transmissividades $\vec{t}^{(i,j)}$ distintas. Este caso permite estudar o modelo Z(4) com ligações anisotrópicas e mistas, situações mais gerais que o caso puro apresentado no Capítulo 3.

A renormalização deste grafo, realizada pelo método de corte-colapso ou através da contagem direta de configurações, resulta em uma transmissividade \vec{t}' cujas componentes são:

$$t'_0 = 1 \quad (\text{B.1})$$

$$t'_1 = t'_3 = N'_1/D'_1 \quad (\text{B.2})$$

e

$$t'_2 = N'_2/D'_2 \quad (\text{B.3})$$

onde N'_1 , N'_2 e $D'_1 = D'_2$ são dados pelas expressões:

$$\begin{aligned} N'_1 = & [t_1^{13} t_1^{23} + t_1^{14} t_1^{24}] + [t_1^{13} t_1^{34} t_1^{24} + t_1^{14} t_1^{34} t_1^{23}] + [t_1^{14} t_1^{34} t_1^{23} t_2^{13} \\ & + t_1^{13} t_1^{34} t_1^{24} t_2^{23} + t_1^{13} t_1^{34} t_1^{24} t_2^{14} + t_1^{14} t_1^{34} t_1^{23} t_2^{24}] + [t_1^{13} t_1^{23} t_2^{14} t_2^{24} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +t_1^{14}t_1^{24}t_2^{13}t_2^{23} + t_1^{13}t_1^{23}t_2^{24}t_2^{34} + t_1^{13}t_1^{23}t_2^{14}t_2^{34} + t_1^{14}t_1^{24}t_2^{23}t_2^{34} + \\
 & +t_1^{14}t_1^{24}t_2^{13}t_2^{34}] + [t_1^{13}t_1^{34}t_2^{24}t_2^{14}t_2^{23} + t_1^{14}t_1^{34}t_2^{23}t_2^{13}t_2^{24}] \quad (B.4)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 N'_2 = & [t_2^{13}t_2^{23} + t_2^{14}t_2^{24}] + [t_2^{13}t_2^{34}t_2^{24} + t_2^{14}t_2^{34}t_2^{23}] + [2t_1^{13}t_1^{23}t_1^{14}t_1^{24}] + \\
 & 2[t_1^{13}t_1^{14}t_1^{34}t_2^{23} + t_1^{14}t_1^{13}t_1^{34}t_2^{24} + t_1^{23}t_1^{24}t_1^{34}t_2^{13} + t_1^{24}t_1^{23}t_1^{34}t_2^{14}] + \\
 & [2t_1^{13}t_1^{23}t_1^{14}t_1^{24}t_2^{34}] \quad (B.5)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D'_1 = D'_2 = & 1 + [2(t_1^{13}t_1^{34}t_1^{14} + t_1^{23}t_1^{34}t_1^{24}) + (t_2^{13}t_2^{34}t_2^{14} + t_2^{23}t_2^{34}t_2^{24})] + \\
 & + [2t_1^{13}t_1^{23}t_1^{24}t_1^{14} + t_2^{13}t_2^{23}t_2^{24}t_2^{14}] + [2t_1^{13}t_1^{14}t_2^{34}t_1^{23}t_1^{24} + \\
 & 2(t_1^{13}t_1^{14}t_1^{34}t_2^{23}t_2^{24} + t_1^{23}t_1^{24}t_1^{34}t_2^{13}t_2^{14})] \quad (B.6)
 \end{aligned}$$

Estas expressões apresentam uma interessante propriedade topológica (presente também no modelo de Potts anisotrópico ^(164-c)): se considerarmos as ligações como caminhos ligando os sítios, então nos numeradores (N'_1 e N'_2) sempre aparecem combinações (de $t_\alpha^{(ij)}$) associadas a ligações que formam pelo menos um caminho contínuo ligando os terminais (por exemplo, as combinações (1,3)(3,4)(2,4)), enquanto no denominador estas combinações formam pelo menos um caminho fechado ((1,3)(3,4)(1,4)) que pode ou não conectar os terminais do grafo.

BIBLIOGRAFIA

- (1) - Mattis D.C., "The Theory of Magnetism", Springer Series in Solid-State Sciences, Springer-Verlag, New York, Vol.17 (1981).
- (2) - Hurd C.M., Contemp. Phys. 23(1982)469.
- (3) - Landau L.D. e Lifshitz E.M., "Statistical Physics", Pergamon Press, London (1980).
- (4) - Mitsui T., Tatsuzaki I. e Nakamura E., "An Introduction to the Physics of Ferroelectrics", Gordon and Breach Sci.Publ., London(1976).
- (5) - London F., "Superfluids I: Macroscopic Theory of Superconductivity", Dover Publ., New York (1961).
- (6) - London F., "Superfluids II: Macroscopic Theory of Superfluid Helium", Dover Publ., New York (1964).
- (7) - de Gennes P.G., "The Physics of Liquid Crystals", Clarendon Press, Oxford (1974).
- (8) - Norvel J.C. e Als-Nielsen J., Phys.Rev. B2(1970)277.
- (9) - Stanley H.E., "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Clarendon Press, Oxford (1971).
- (10) - Van der Waals J.D., Tese de Doutorado, Universidade de Leiden (1873).
- (11) - Weiss P., J. Physique Theor. Appl. 6 (1907)661.
- (12) - Ornstein L.S. e Zernicke F., Proc. Acad. Sci., Amsterdam 17 (1914)793.
- (13) - Landau L.D., Zh. ěksp. Theor. Fiz. 7(1937)19.
- (14) - Landau L.D., Zh. ěksp. Theor. Fiz. 7(1937)627.

- (15) - Widom B., J. Chem. Phys. 43(1965)3898.
- (16) - Domb C. e Hunter D.L., Proc. Phys. Soc. 86(1965)1147.
- (17) - Griffiths R.B., Phys. Rev. 158(1967)176.
- (18) - Kadanoff L.P., Physics 2(1966)263.
- (19) - Wilson K.G., Phys. Rev. B4(1971)3174.
- (20) - Vários autores, "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S. Green (vols. 1 a 6), C. Domb e J.L. Lebowitz (vols. 7 e 8), Academic Press, London (1972-1984).
- (21) - Langevin P., J. Physique Theor. Appl. 4(1905)678.
- (22) - Lenz W., Physik Z. 21(1920)613.
- (23) - Para uma descrição da experiência de Stern-Gerlach (1922), ver por exemplo "Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles", R. Eisberg e R. Resnick, J. Wiley & Sons, New York, Cap. 8(1974).
- (24) - Uhlenbeck G.E. e Goudsmit S., Naturwissenschaften 13(1925) 953.
- (25) - Ising E., Z. Physik 31(1925)253.
- (26) - (a) Brusch S.G., Rev. of Mod. Phys. 39(1967)883; (b) Domb C., Vol. 3, Cap. 6, referência 20.
- (27) - Peierls R., Proc. Cambridge Phil. Soc. 32(1936)477.
- (28) - Kramers H.A. e Wannier G.H., Phys. Rev. 60(1941)252.
- (29) - Onsager L., Phys. Rev. 65(1944)117.
- (30) - Yang C.N., Phys. Rev. 85(1952)808.
- (31) - Fisher M.E., Physica 25(1959)521.
- (32) - McCoy B.M. e Wu T.T., "The Two-Dimensional Ising Model", Harvard Univ. Press, Cambridge (1973).

- (33) - Baxter R.J., "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics", Academic Press, London (1982).
- (34) - de Jongh L.J. e Miedema A.R., "Experiments on Simple Magnetic Model Systems", Advances in Physics 23(1974)1.
- (35) - Als-Nielsen J., Vol. 5a, Cap. 3, referência 20.
- (36) - Guggenheim E.A., J. Chem. Phys. 13(1945)253.
- (37) - Potts R.B., Proc. Cambridge Phil.Soc. 48(1952)106.
- (38) - Wu F.Y., Rev. Mod. Phys. 54(1982)235.
- (39) - Ashkin J. e Teller E., Phys. Rev. 64(1943)178.
- (40) - Savit R., Rev. Mod. Phys. 52(1980)453.
- (41) - (a) Heisenberg W., Z. Physik 49(1928)619; (b) Dirac P.A.M. Proc. Roy. Soc. A123(1929)714.
- (42) - Mermin N.D. e Wagner H., Phys.Rev.Lett. 17(1966)1133.
- (43) - Rushbrooke G.S., Baker G.A. e Wood P.J., Vol. 3, Cap. 5, referência 20.
- (44) - Matsubara T. e Matsuda H., Progr. Theor. Phys. 16(1956)416.
- (45) - (a) Lieb E.H., Schultz T. e Mattis D.C., Annals of Phys. 16(1961)407; (b) Katsura S., Phys.Rev. 127(1962)1508.
- (46) - Stanley H.E. e Kaplan T., Phys.Rev. Lett. 17(1966)913.
- (47) - Kosterlitz J.M. e Thouless D.J., J.Phys.C 6(1973)1181.
- (48) - Betts D.D., Vol. 3, Cap. 8, referência 20.
- (49) - Dalton N.W. e Wood D.W., Proc.Phys.Soc. 90(1967)459.
- (50) - Tsallis C., Anais do VI Brazilian Symposium on Theor. Physics, ed. E. Ferreira e B. Koiller (CNPq), Vol.I(1981)199.
- (51) - Droz M., "Static Critical Phenomena in Inhomogeneous Systems, ed. A. Pekalski e J. Sznajd, Lectures Notes in Phys.,

Vol. 206, Springer-Verlag, New York (1984)3.

- (52) - Rushbrooke G.S., J. Chem. Phys. 39(1963)842.
- (53) - Griffiths R.B., Phys. Rev. Lett. 14(1965)623.
- (54) - Fisher M.E., Phys. Rev. 180(1969)594.
- (55) - Josephson B.D., Proc. Phys. Soc. 92(1967)269.
- (56) - Balescu R., "Equilibrium and Non-equilibrium Statistical Mechanics", John Wiley & Sons, New York (1975).
- (57) - Wilson K.G. e Kogut J., Phys. Rep. 12(1974)75.
- (58) - Fisher M.E., Rev. Mod. Phys. 46(1974)597.
- (59) - Pfeuty P. e Toulouse G., "Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena", John Wiley & Sons, New York (1977).
- (60) - Wallace D.J. e Zia R.K.P., Rep. Prog.Phys.41(1978)1.
- (61) - Vários autores, Vol. 6, referência 20.
- (62) - Hu B., Phys. Rep. 91(1982)233.
- (63) - Wilson K.G., Rev. Mod. Phys. 55(1983)583.
- (64) - Niemeijer Th. e Van Leeuwen J.M.J., Vol. 6, Cap. 7, referência 20.
- (65) - Vários autores, "Real-Space Renormalization", ed. T.W.Burkhardt e J.M.J. Van Leeuwen, Topics in Current Phys. nº 30, Springer-Verlag, New York (1982).
- (66) - Feynmann R.P. e Hibbs A.R., "Quantum Mechanics and Path Integrals", McGraw-Hill, New York (1965).
- (67) - Pfeuty P., Ann. Phys. 57(1970)79.
- (68) - Suzuki M., Phys. Lett. 34A(1971)338.
- (69) - Fradkin E. e Susskind L., Phys.Rev. D 17(1978)2637.

- (70) - Kogut J., Rev. Mod. Phys. 51(1979)659.
- (71) - Mariz A.M., Albuquerque E.L., Gonçalves L.L. e Sarmiento E. F., Rev. Bras. de Fís. 13(1983)24.
- (72) - Betsuyaku H., Progress of Theor. Phys. 73(1985)319.
- (73) - Takano H., Progress of Theor. Phys. 73(1985)332.
- (74) - Pfeuty P., Julien R. e Penson K.A., Cap. 5, ref. 65.
- (75) - Julien R., Pfeuty P., Fields J.N. e Doniach S., Phys. Rev. B 18(1978)3568.
- (76) - Hirsch J. e Mazenko G., Phys. Rev. B 19(1979)2656.
- (77) - Stinchcombe R.B., J. Phys. C 14(1981)L263.
- (78) - Stinchcombe R.B., J. Phys. C 14(1981)2193.
- (79) - dos Santos R.R., Sneddon L. e Stinchcombe R.B., J. Phys. A14(1981)3329.
- (80) - dos Santos R.R., J. Phys. A 14(1981)L179.
- (81) - dos Santos R.R., J. Phys. C 15(1982)3141.
- (82) - Betts D.D. e Plischke M., Can. J. Phys. 54(1976)1553.
- (83) - Stella A.L. e Toigo F., Phys. Rev. B 17(1978)2343.
- (84) - Dekeyser R., Reynaert M., Stella A.L. e Toigo F., Phys. Rev. B 18(1978)3486.
- (85) - Stinchcombe R.J., J. Phys. C 12(1979)4533.
- (86) - Suzuki M. e Takano H., Phys. Lett. 69A(1979)426.
- (87) - Takano H. e Suzuki M., J. Stat. Phys. 26(1981)635.
- (88) - Barma M., Kumar D. e Pandey R.B., J. Phys. C12(1979)L283.
- (89) - Stinchcombe R.B., J. Phys. C 14(1981)397.
- (90) - Caspers W.J., Phys. Rep. 63(1980)223.

- (91) - Castellani G., Di Castro C. e Ranninger J., Nucl. Phys. B200(1982)45.
- (92) - Plascak J.A., J. Phys. A 17(1984)L597.
- (93) - Plascak J.A., Phys. Stat. Sol. B 124(1984)K35.
- (94) - Tsallis C., Stinchcombe R.B. e Buck B., J.Phys.C17(1984)301.
- (95) - Caride A.O., Tsallis C. e Zanette S.I., Phys.Rev. Lett 51
(1983)145,616.
- (96) - Hirsch J.E., Phys. Rev. B 22(1980)5259.
- (97) - Dasgupta C. e Pfeuty P., J. Phys. C 14(1981)717.
- (98) - Spronken G., Jullien R. e Avignon M., Phys.Rev. B24(1981)
5356.
- (99) - Fourcade B. e Spronken G., Phys. Rev. B29(1984)5089.
- (100) - Mariz A.M., Tsallis C. e Caride A.O., J.Phys. C18(1985)4189.
- (101) - Frazer R.A., Duncan W.J. e Collar A.R., "Elementary Matrices", University Press, Cambridge (1955).
- (102) - (a) Berker A.N. e Ostlund S., J.Phys.C 12(1975)4961;
(b) Kaufman M. e Griffiths R.B., Phys. Rev. B24(1981)496.
- (103) - Kaufman M. e Kardar M., Phys. Rev. Lett. 52(1984)483.
- (104) - Migdal A.A., Sov. Phys. JETP 42(1976)413.
- (105) - Kadanoff L.P., Ann. Phys. 100(1976)359.
- (106) - Breed D.J., Gilijamse K., Sterkenburg J.W.E. e Miedema A. R., Physica 68(1973)303.
- (107) - Birgeneau R.J., Cowley R.A., Shirane G. e Guggenheim H.J., Phys. Rev. Lett. 37(1976)940.
- (108) - Suzuki M. e Ikeda H., J. Phys. C 11(1978)3679.
- (109) - Ikeda H. e Hutchings M.T., J.Phys. C 11(1978)L529.

- (110) - Langendijk E. e Huiskamp W.J., Physica 62(1972)444.
- (111) - Adachi K., Sato H., Matsnura M. e Ohashi M., J. Phys. Soc. Japan 29(1970)323.
- (112) - Breed D.J., Gilijamse K., Sterkenburg J.W. e Miedema A.R., J. Appl. Phys. 41(1970)1267.
- (113) - Algra H.A., de Jongh L.J., Huiskamp W.J. e Redijk J., Physica 86-88B(1977)737.
- (114) - Stinchcombe R.B., Vol. 7, Cap. 3, referênciã 20.
- (115) - Plischke M. e Zobin D., J. Phys. C10(1977)4571.
- (116) - Jayapracash C., Riedel E.K. e Wortis M., Phys. Rev. B 18(1978)2244.
- (117) - de Magalhães A.C.N., Schwachheim G. e Tsallis C., J. Phys. C 13(1980)321.
- (118) - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., J.Phys. C13(1980)85.
- (119) - Levy S.V.F., Tsallis C. e Curado E.M.F., Phys. Rev. B21(1980)2991.
- (120) - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., J.Phys.C 13(1980)L239.
- (121) - Kinzel W. e Domany E., Phys. Rev. B 23(1981)3421.
- (122) - Costa U.M.S. e Tsallis C., Physica 128A(1984)207.
- (123) - de Oliveira P.M.C. e Tsallis C., J.Phys. A 15(1982)2865.
- (124) - da Silva L.R. e Tsallis C., J.Phys. A 17(1984)3209.
- (125) - Shukla P., J. Phys. C 11(1978)L621.
- (126) - Berker A.N. e Nelson D.R., J. Appl.Phys. 50(1979)1799.
- (127) - Saxena V.K., Preprint (1985).
- (128) - (a) Sykes M.F. e Essam J.W., Phys. Rev. Lett 10(1963)3 ;
(b) Essam J.W., Vol. 2, Cap. 6, referênciã 20.

- (129) - de Magalhães A.C.N., Tese de Doutorado, CBPF, Rio de Janeiro (1982).
- (130) - Yeomans J.M. e Stinchcombe R.B., J.Phys. C 12(1979)347.
- (131) - Reynolds P.J., Klein W. e Stanley H.E., J.Phys.C 10(1977) L167.
- (132) - Tsallis C. e dos Santos R.J.V., J. Phys. A 16(1983)360.
- (133) - Wu T.T., Phys. Rev. 149(1966)380.
- (134) - den Nijs M.P.M., Physica 95A(1979)449.
- (135) - Wallace D.J. e Young A.P., Phys. Rev. B 17(1978)2384.
- (136) - Polyakov A.M., Phys. Lett. 59B(1975)79.
- (137) - Harris A.B., J. Phys. C 7(1974)1671.
- (138) - Domany E., J. Phys. C 11(1978)337.
- (139) - Aharony A., J. Magn. Magn. Mater. 31-34(1983)1432.
- (140) - Katsumata K., J. Magn. Magn. Mater. 31-34(1983)1435.
- (141) - Pekalski A., "Static Critical Phenomena in Inhomogeneous Systems", ed. A. Pekalski e J. Sznajd, Lecture Notes in Phys., Vol. 26, Springer-Verlag, New York (1984)158.
- (142) - Katsumata K., Tucheindler J. e Legrand S., Solid State Commun. 49(1984)83.
- (143) - Ikeda H., Riste T. e Shirane G., J.Phys. Soc. Japan 49 (1980)504.
- (144) - Ajiro Y., Adachi K. e Maketa M., Solid State Commun. 37 (1981)449.
- (145) - Komoda A. e Pekalski A., J.Phys. C 14(1981)L1067.
- (146) - Pekalski A., J. Phys. C 10(1977)4785.
- (147) - Droz M. e Pekalski A., Phys. Lett. 107A(1985)89.

- (148) - Mariz A.M. e Tsallis C., Phys. Rev. B 31(1985)7491.
- (149) - Mariz A.M., Zorzenon dos Santos R. M., Tsallis C. e dos Santos R.R., Phys. Lett. 108A(1985)95.
- (150) - Martin H.O. e Tsallis C., J. Phys. C 14(1981)5645.
- (151) - Curado E.M.F., Tese de Doutorado, CBPF, Rio de Janeiro (1983).
- (152) - Pfeuty P., Jasnow D. e Fisher M.E., Phys. Rev. B 10 (1974) 2088.
- (153) - Zorzenon dos Santos R.M., Mariz A.M., dos Santos R.R. e Tsallis C., J. Phys. C 18(1985)5475.
- (154) - Costa U.M.S., Mariz A.M. e Tsallis C., J. Physique Lett. 46 (1985)L851.
- (155) - Villain J., J. Phys. 36(1975)581.
- (156) - Wu F.Y. e Wang Y.K., J. Math. Phys. 17(1976)439.
- (157) - Elitzur S., Pearson R.B. e Shigemitsu J., Phys. Rev. D19 (1979)3698.
- (158) - (a) Kadanoff L.P., Phys.Rev. B22(1980)1405 ; (b) Kohmoto M., den Nijs M.P.M. e Kadanoff L.P., Phys. Rev. B 24(1981)5229.
- (159) - Cardy J.L., J. Phys. A 13(1980)1507.
- (160) - Alcaraz F.C. e Küblerle R., (a) J. Phys. A 13(1980)L153 ; (b) J. Phys. A 14(1981)1169.
- (161) - Rujan P., Williams G.O., Frisch H.L. e Forgács G., Phys. Rev. B 23(1981)1362.
- (162) - Alcaraz F.C. e Tsallis C., J. Phys. A 15(1982)587.
- (163) - Baltar V.L., Carneiro G.M., Pol M.E. e Zagury N., J.Phys. A 17(1984)2119.
- (164) - (a) Tsallis C. e Levy S.V.F., Phys.Rev.Lett. 47(1981)950;

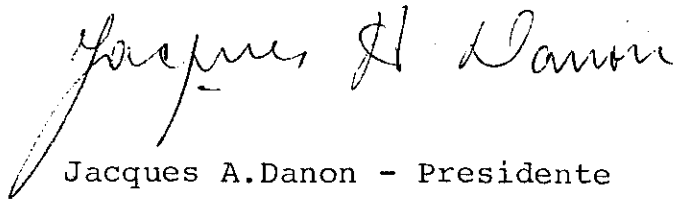
- (b) Essam J.W. e Tsallis C., J.Phys. A (submetido) ;
(c) Tsallis C., Phys. Rep. (em preparação).

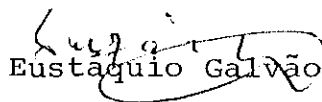
- (165) - Tsallis C., Coniglio A. e Redner S., J.Phys. C16(1983)4339.
(166) - Tsallis C. e Redner S., Phys.Rev. B 28(1983)6603.
(167) - Mariz A.M., Tsallis C. e Fulco P., Phys.Rev. B32(1985).
(168) - Bernasconi J., Phys. Rev. B 18(1978)2185.
(169) - Moraal H., "Classical, Discrete Spin Models: Symmetry, Duality and Renormalization", Lectures Notes in Physics 214, Springer-Verlag, New York (1984).
(170) - Tsallis C. e Souletie J., J. Phys. A (submetido).
(171) - Mariz A.M., a ser publicado.
(172) - (a) Bethe H.A., Proc. Roy. Soc. A 150(1935)122; (b) Peierls R., Proc. Camb. Phil. Soc. A 32(1936)471.
(173) - Fisher M.E., Physica 106A(1981)28.
(174) - Vannimenus J., Z. Phys. B 43(1981)141.
(175) - Inawashiro S. e Thompson C.J., Phys. Lett. 97A(1983)245.
(176) - Inawashiro S., Thompson C.J. e Honda G., J. Stat. Phys. 33(1983)419.
(177) - Bak P. e Von Boehm J., Phys.Rev. B 21(1980)5297.
(178) - Chowdhury D. e Mookerjee A., Phys. Rep. 114(1984)1.
(179) - Mariz A.M., Tsallis C. e Albuquerque E.L., J. Stat Phys. 40(1985)577.
(180) - Moraal H., Physica 92A(1978)305.
(181) - Moraal H., Physica 105A(1981)472.
(182) - Müller-Hartmann E. e Zittartz J., Phys. Rev. Lett. 33(1974)893.


- (183) - Müller-Hartmann E. e Zittartz J., Z. Phys. B 22(1975)59.
- (184) - Gonçalves da Silva C.E.T., J. Phys. C 12(1979)L219.
- (185) - Yokoi C.S.O., Oliveira M.J. e Salinas S.R., Phys. Rev. Lett. 54(1985)163.
- (186) - Christiano P.L. e Goulart Rosa Jr. S., J. Phys. C 18(1985) L407.
- (187) - (a) Fesser K. e Herrmann H.J., J. Phys. A 17(1984)1493 ;
(b) Yokoi C.S.O. e de Oliveira M.J., J. Phys. A 18(1985)L153.
- (188) - Merzbacher E., "Quantum Mechanics", John Wiley & Sons, New York (1970).
- (189) - Barnes F., Brascamp H.J. e Lieb E.H., "Studies in Mathematical Physics", ed. E.H. Lieb, B. Simon e A.S. Wightman, Princeton University Press, Princeton N.J. (1976)88.
- (190) - (a) Hioe F.T. e Montroll E.W., J. Math. Phys. 16(1975)1945;
(b) Schwarz M., J. Stat. Phys. 15(1976)255.
- (191) - Hioe F.T., MacMillen D. e Montroll E.W., J. Math. Phys. 17(1976)1320.
- (192) - Banerjee K., Bhatnagar S.P., Chondry V. e Kanwal S.S., Proc. Roy. Soc. A 360(1978)575.
- (193) - Banerjee K., Proc. Roy. Soc. A 364(1978)265.
- (194) - Turschner H., J. Phys. A 12(1979)451.
- (195) - (a) Mariz A.M. e Tsallis C., Phys. Rev. A 29(1984)2871 .
(b) Mariz A.M. e de Oliveira P.M.C., Rev. Ens. Fís. (a ser publicado).
- (196) - Crowley B.J.B. e Hill T.F., J. Phys. A 12(1979)L223.
- (197) - Ashbaugh M.S. e Morgan III J.D., J. Phys. A 14(1981)809.
- (198) - Korn G.A. e Korn T.M., "Mathematical Handbook for Scientists and Engineers", McGraw-Hill, New York (1968).

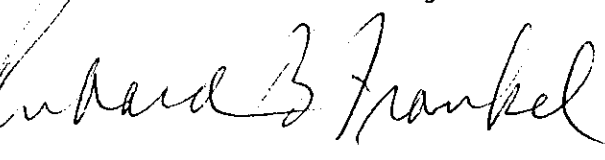
- (199) - Ashcroft N.W. e Mermin N.D., "Solid State Physics", Holt, Rinehart and Winston, New York (1976), Cap. 33.
- (200) - Tsallis C. e da Silva L.R., Phys. Rev. A 25(1982)1095.
- (201) - Witschel W., Chem. Phys. Lett. 71(1980)131.
- (202) - Witschel W., Z. Naturforsch 36A(1981)481.

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


Jacques A. Danon - Presidente


Eustáquio Galvão


Flávio Torres de Araujo


Richard Frenkel


Rosa Bernstein Scorzelli

Rio de Janeiro, 02 de dezembro de 1985