

LUCIANO RODRIGUES DA SILVA

MAGNETISMO DE POTTS EM DUAS E TRÊS DIMENSÕES  
NA APROXIMAÇÃO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

TESE DE

DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS/CNPq

RIO DE JANEIRO - 1985

A Pedro e Albanisa.

Aos irmãos Luis, Dinarte, Airton, Diva,  
Wilton, Dione e Ana.

Ao saudoso Pedro Afonso de Barros.

## AGRADECIMENTOS

- Ao prof. e amigo Constantino Tsallis, com quem tanto aprendi. Sua competência, seriedade e liderança científica resultaram em um dinâmico e aprazível grupo de trabalho, onde a física torna-se mais agradável.
- A Ananias M. Mariz, Armando Y. Takeuchi, Conceição Vieira, Paulo Hauser e Uriel M.S. Costa, pelas constantes discussões e pelo coleguismo sempre presente.
- Ao prof. Georges Schwachheim, competentíssimo, meu reconhecimento pela sua inestimável colaboração.
- Aos professores Affonso A.G.Gomes, Aglaé C.N. de Magalhaães, Aníbal O. Caride, Evaldo M.F. Curado, Liacir S. Lucena, Nilson S. de Almeida e Paulo Murilo C. de Oliveira, pelas tantas discussões, sugestões e trabalhos que compartilhamos.
- Ao prof. Carlos A.P.Galvão, profissional competente, incentivador e amigo.
- À Vanda Wood e Myriam Simões, amigas de todas as horas.
- A Helô, João e Kiko, grandes colegas e amigos. Em particular à Heloisa, que tanto me ajudou na correção dos textos com sua competência indiscutível.
- A Luis Reis (Lu), que nunca poupa tempo para ajudar a quem precise, de seus conhecimentos de computação. Ainda em relação à computação, não posso esquecer o apoio que me deu Cristina Sargento Izzo.
- A Baiano, Conceição, Elias, Fátima, Socorro, Valéria, Vera e Zé Gordo, grandes amigos dos estudantes.
- Aos colegas do CBPF e da UFRN, com quem sempre contei.
- Ao CBPF, que me deu infra-estrutura e do qual eu gosto tanto.
- À UFRN e ao CNPq, pelo apoio financeiro.
- À Helena de Souza Ferreira, meu agradecimento pela seriedade com que executou a datilografia do presente texto.

## RESUMO

Através da técnica do Grupo de Renormalização (GR) no espaço real discutimos a criticalidade de vários sistemas físicos, calculamos parâmetros de ordem para problemas geométricos e analisamos aspectos de convergência da teoria de GR.

Inicialmente tratamos do modelo de Potts de  $q$ -estados ferromagnético, completamente anisotrópico ( $J_x, J_y$  e  $J_z$  arbitrários) em rede cúbica simples. Obtemos a dependência em  $q$  do expoente crítico ( $d=3$ )  $\nu_3$  do comprimento de correlação, a dependência em  $q$  do expoente crítico de "crossover"  $\Phi_{23}$  ( $d=2 \leftrightarrow d=3$ ) e através de uma extrapolação numérica conveniente, calculamos valores mais apurados para a temperatura crítica correspondente a valores arbitrários das razões  $J_y/J_x$  e  $J_z/J_x$  e de  $q$ . Ainda para o ferromagneto de Potts em rede cúbica simples, discutimos a situação em que o sistema é constituído de dois volumes semi-infinitos diferentes (respectivamente caracterizados pelas constantes de acoplamento  $J_1$  e  $J_2$ ) separados por uma interface  $(1,0,0)$  (caracterizados por  $J_s$ ). Quatro fases fisicamente distintas (paramagnética, ferromagnética de um volume, ferromagnética de duplo volume e a ferromagnética de superfície) e quatro classes de universalidade são exibidas por este sistema. Para o mesmo problema discutimos o caso em que  $J_2 = 0$  e a superfície é diluída. Estudamos, para  $q = 1$  e  $q = 2$ , a evolução da fronteira crítica que separa as fases de superfície e paramagnética, com a probabilidade  $p$  de presença da ligação  $J_s$ .

Usamos um procedimento de GR no espaço real recentemente desenvolvido para calcular equações de estado para problemas ge

ométricos, para tratar percolação de ligações na rede quadrada anisotrópica. Escolhendo uma célula auto-dual conveniente, calcula - mos, para todos os valores das probabilidades de ocupação  $p_x$  e  $p_y$  (ao longo dos eixos  $x$  e  $y$  respectivamente), os parâmetros de ordem  $P_\infty(p_x, p_y)$  e  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  respectivamente associados com a célula infinita percolante e sua espinha dorsal. Uma diferença interessan - te aparece entre estas duas quantidades sempre que uma das duas probabilidades de ocupação, por exemplo  $p_y$ , é igual à unidade :  $\lim_{p_y \rightarrow 1} P_\infty(p_x, p_y)$  é descontínuo em  $p_x = 0$  (onde  $P_\infty$  salta de zero para 1), enquanto  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  cresce continuamente de 0 a 1 quando  $p_x$  cresce de 0 a 1. Através de um procedimento de extrapolação conve - niente que inclui o uso dos melhores valores disponíveis para os expoentes  $\beta$  e  $\beta^B$  obtemos valores para  $P_\infty$  e  $P_\infty^B$  que acreditamos ser numericamente satisfatórios.

Analizamos a questão da convergência na aproximação de GR, quando renormalizamos células de tamanho  $b$  em células menores de tamanho  $b'$ , no limite  $b \rightarrow \infty$ . Mostramos para duas famílias de cé - lulas hierárquicas, as quais associamos o modelo de Potts de  $q$ -es - tados, que a convergência é mais rápida sempre que  $b' = b-1$ . Para os mesmos sistemas estudamos a transformação de GR com fator de es - cala infinitesimal, onde  $b = 1+\eta$  e  $b' = 1$ , obtida da transformação usual por uma extensão analítica. Vários resultados exatos para a temperatura crítica e expoentes críticos são reproduzidos.

Calculamos o comprimento de penetração característico  $\xi$  exato associado com espalhamento elástico incoerente simples e múl - tiple em meio desordenado uni-dimensional semi-infinito. Ele é es - tabelecido como função de  $p$  (concentração de centros espalhadores) e  $f_0$  (coeficiente de transmissão de um único centro). Em seguida apresentamos como estes fenômenos podem ser vistos como fenômenos

críticos, podendo os  $\xi$ 's correspondentes ser reobtidos em um contexto de GR no espaço real conveniente. Finalmente discutimos um modelo generalizado onde o coeficiente de transmissão  $f$  de um centro espalhador pode assumir aleatoriamente dois valores diferentes  $f_1$  e  $f_2$ .

## ABSTRACT

Through a real space Renormalization Group (RG) technique we discuss the criticality of various physical systems, calculate order parameters for geometrical problems and analyse convergence aspects of the RG theory.

We first treat the fully anisotropic (arbitrary  $J_x$ ,  $J_y$  and  $J_z$ )  $q$ -state Potts ferromagnetic model in simple cubic lattice. We obtain the  $q$ -dependence of the crossover critical exponent  $\Phi_{23}$  ( $d=2 \leftrightarrow d=3$ ), and through a convenient numerical extrapolation we calculate more accurate values for the critical temperatures corresponding to arbitrary values of the ratio  $J_y/J_x$  and  $J_z/J_x$  and  $q$ . Still for the Potts ferromagnet in a simple cubic lattice we discuss the case in which the system is constituted by two different semi-infinite bulks (respectively characterized by the coupling constants  $J_1$  and  $J_2$ ) separated by a  $(1,0,0)$  interface (characterized by  $J_s$ ). Four physically distinct phases – paramagnetic, single-bulk ferromagnetic, double-bulk ferromagnetic and the surface ferromagnetic ones – and four universality classes are exhibited by this system. For the same problem we discuss the case in which  $J_2 = 0$  and the surface is diluted. We study, for  $q = 1$  and  $q = 2$ , the evolution of the critical frontier which separates the surface ferromagnetic and paramagnetic phases, with probability  $p$  that a  $J_s$ -bond is present.

We use a real space RG procedure (recently developed to calculate equations of state for geometrical problems) to treat bond percolation in anisotropic square lattice. By choosing a

convenient self-dual cluster we calculate, for all values of the occupancy probabilities  $p_x$  and  $p_y$  (along the x- and y-axes, respectively), the order parameters  $P_\infty(p_x, p_y)$  and  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  respectively associated with the complete percolating infinite cluster and its backbone. An interesting difference appears between two quantities whenever one of the occupancy probabilities, say  $p_y$ , equals unity:  $\lim_{p_y \rightarrow 1} P_\infty(p_x, p_y)$  is discontinuous at  $p_x = 0$  (where  $P_\infty$  jumps from 0 to 1), whereas  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  continuously increases from 0 to 1. Through a convenient extrapolation procedure which includes the use of the best available values for the critical exponents  $\beta$  and  $\beta^B$  we obtain values for  $P_\infty$  and  $P_\infty^B$  which are believed to be numerically quite reliable.

We analyse the convergence in the RG approximation when we renormalize clusters of size  $b$  into smaller clusters of size  $b'$ , in the limit  $b \rightarrow \infty$ . We show for two hierarchical cluster families (to which we associate the  $q$ -state Potts model) that the convergence is more rapid whenever  $b' = b-1$ . For the same systems we study the RG-transformation with infinitesimal scaling factor, where  $b = 1+\eta$  and  $b' = 1$ , obtained from the usual transformation by an analytical extension. Several exact results for the critical temperature and exponents are reproduced.

We calculate the exact characteristic penetration length  $\xi$  associated with simple and multiple incoherent elastic scattering in semi-infinite one-dimensional disordered media. It is established as a function of  $p$  (concentration of scattering centers) and  $f_0$  (transmission coefficient of a single center). Then we exhibit how these phenomena can be seen as critical ones, and the corresponding  $\xi$  are reobtained within a convenient real space RG framework. Finally we discuss a generalized model where the single

transmission coefficient  $f$  can randomly take two different values  $f_1$  and  $f_2$ .

# SUMÁRIO

	<u>PÁG</u>
AGRADECIMENTOS .....	iii
RESUMO .....	iv
SUMMARY .....	vii
LISTA DE FIGURAS .....	xii
LISTA DE TABELAS .....	xv
<u>CAPÍTULO I</u> - INTRODUÇÃO .....	1
<u>CAPÍTULO II</u> - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO .....	9
2.1 - Introdução .....	9
2.2 - Noções sobre a Teoria do Grupo de Renormalização .....	9
2.3 - Grupo de Renormalização Monte Carlo .....	22
2.4 - Grupo de Renormalização Fenomenológico .....	28
<u>CAPÍTULO III</u> - ESTUDO DO FERROMAGNETO DE POTTS EM REDE CÚBICA ANISOTRÓPICA .....	32
3.1 - Introdução .....	32
3.2 - Modelo e Formalismo .....	33
3.3 - Resultados .....	39
3.4 - Método de Extrapolação para o Ponto Crítico .....	47
3.5 - Conclusões .....	53
<u>CAPÍTULO IV</u> - PROBLEMAS DE INTERFACE EM FERROMAGNETO DE POTTS: DIAGRAMA DE FASES E EXPOENTES CRÍTICOS .....	55
4.1 - Introdução .....	55
4.2 - Modelo e Formalismo (caso puro) .....	56
4.3 - Resultados .....	59
4.4 - Formalismo e Resultados (caso diluído) .....	69
4.5 - Conclusões .....	77
<u>CAPÍTULO V</u> - EQUAÇÕES DE ESTADO DE PERCOLAÇÃO DE LIGAÇÕES EM REDE QUADRA DA ANISOTRÓPICA .....	80

5.1 - Introdução .....	80
5.2 - Formalismo e Resultados .....	81
5.3 - Procedimento de Extrapolação .....	91
5.4 - Conclusões .....	97
<u>CAPÍTULO VI</u> - FERROMAGNETO DE POTTS EM REDES HIERÁRQUICAS SIMPLES .....	99
6.1 - Introdução .....	99
6.2 - Formalismo e Resultados .....	100
6.3 - Grupo de Renormalização Diferencial .....	104
6.4 - Conclusões .....	112
<u>CAPÍTULO VII</u> - ESPALHAMENTO SIMPLES E MÚLTIPLO EM MEIO UNIDIMENSIONAL DES- SORDENADO: ABORDAGEM DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO .....	113
7.1 - Introdução .....	113
7.2 - Modelos de Espalhamento .....	114
7.3 - Abordagem Através do uso do Grupo de Renormalização .....	116
7.4 - Modelos Generalizados .....	121
7.5 - Conclusões .....	123
<u>CAPÍTULO VIII</u> - CONCLUSÕES .....	125
<u>APÊNDICE A</u> - MÉTODO CORTE-COLAPSO: MODELO DE POTTS .....	131
<u>REFERÊNCIAS</u> .....	136

## LISTA DE FIGURAS

<u>FIG.</u>	<u>PÁG.</u>
2.2.1 - Diagrama ilustrando como se elimina graus de liberdade na teoria de Grupo de Renormalização no espaço real .....	12
2.2.2 - Ilustração do fenômeno de "crossover" .....	16
2.2.3 - Esquema indicativo da transformação de Migdal-Kadanoff .....	17
2.3.1 - Ilustração indicativa das etapas do MCRG .....	23
3.2.1 - Células usadas na transformação de Grupo de Renormalização no espaço real e seus equivalentes grafos a dois terminais .....	38
3.3.1 - Diagrama de fluxo e superfície crítica separando as fases para magnética e ferromagnética .....	39
3.3.2 - Pontos críticos correspondentes ao modelo tri-dimensional isotrópico em função de $q$ .....	40
3.3.3 - Diagrama mostrando a dependência do expoente crítico $\nu_2$ ( $d=2$ ) do comprimento de correlação com a variável $q$ .....	45
3.3.4 - Diagrama do expoente crítico de "crossover" $\Phi_{23}$ ( $d=2 \leftrightarrow d=3$ ) em função de $q$ .....	45
3.3.5 - Expoente crítico $\nu_3$ ( $d = 3$ ) do comprimento de correlação em função da variável $q$ .....	47
3.4.1 - Construção geométrica relacionada com o procedimento da extrapolação .....	48
3.4.2 - Diagrama mostrando um corte da Fig. 3.4.1 .....	48
3.4.3 - Comparação entre os resultados obtidos pelo procedimento de extrapolação e resultados de séries .....	52

4.2.1 - Célula usada na transformação de Grupo de Renormalização no espaço real para a interface (1,0,0) que se situa entre duas redes cúbicas semi-infinitas .....	57
4.3.1 - Diagrama de fluxo no espaço $(t_1, t_2, t_s)$ para $q = 2$ .....	60
4.3.2 - Evolução com $q$ do diagrama de fase indicado na Fig. 4.3.1 .....	63
4.3.3 - Resultados idênticos aos da Fig. 4.3.2 porém no espaço $\Delta \times T$ ( $\Delta \equiv J_s/J_1 - 1$ ) .....	64
4.3.4 - Diagrama mostrando a evolução com $q$ de $\Delta_c$ para vários valores da razão $J_2/J_1$ .....	64
4.3.5 - Diagrama mostrando a dependência em $q$ dos expoentes $\nu$ 's e $\gamma$ 's e expoentes de "crossover" $\phi$ 's .....	67
4.4.1 - Célula usada na transformação de Grupo de Renormalização no espaço real para o problema de superfície livre .....	69
4.4.2 - Diagrama de fluxo no espaço $(1-p, t_1, t_s)$ ( $q=2$ ) para o problema de superfície livre com as ligações da superfície diluídas .....	72
4.4.3 - Evolução com $p$ da fronteira crítica que separa as fases paramagnética e de superfície para $q = 1$ .....	73
4.4.4 - Diagrama análogo ao da figura anterior para $q = 2$ .....	74
4.4.5 - Mesma evolução com $p$ que aparece na Fig. 4.4.3 só que desta vez na variável $\Delta \times T$ .....	75
4.4.6 - Diagrama análogo ao da Fig. 4.4.5 para $q = 2$ .....	75
4.4.7 - Diagrama mostrando a dependência de $\Delta_c$ com $p$ para $q=1$ e $q=2$ .....	77
5.2.1 - Diagrama de fluxo exibindo as fases percolante e não percolante.....	83
5.2.2 - Diagrama mostrando duas configurações típicas que aparecem no cálculo da função $g(p_x, p_y)$ correspondente à eq. (5.2.11) .....	86
5.2.3 - Diagrama de fluxo no espaço $(m_0, p)$ .....	87
5.2.4 - Seções típicas do parâmetro de ordem $P_\infty(p_x, p_y)$ .....	88

5.2.5 - Seções típicas do parâmetro de ordem $P_{\infty}^B$ .....	90
5.3.1 - Diagrama mostrando o parâmetro de ordem $P_{\infty}$ como função de $p_x=p_y$ = $p$ .....	95
5.3.2 - Diagrama análogo ao anterior para $P_{\infty}^B$ .....	95
6.2.1 - Diagrama mostrando várias sequências de células hierárquicas ca racterizadas pelos seus respectivos motivos .....	100
6.2.2 - Figura mostrando a evolução da transmissividade crítica com o tamanho $b$ da célula a ser renormalizada para dois casos distin- tos (a) $b'$ (célula renormalizada) = 1; (b) $b'=b-1$ .....	102
6.2.3 - Diagrama mostrando famílias de células duais das corresponden- tes na Fig. 6.2.1 .....	103
6.3.1 - Valores da transmissividade crítica, obtida por uma transforma ção infinitesimal, em função da dimensão $d$ para vários valores de $q$ .....	106
6.3.2 - Valores da transmissividade crítica em função de $q$ para diver - sos valores da dimensão $d$ (obtidos também através de transforma ção infinitesimal) .....	107
6.3.3 - Valores do expoente crítico $\nu$ em função da dimensão $d$ para di- versos valores de $q$ .....	109
6.3.4 - Valores do expoente crítico $\nu$ em função de $q$ para diversos va- lores da dimensão $d$ .....	110
6.3.5 - Diagrama ilustrando três tipos de células usadas em uma trans - formação de Grupo de Renormalização no espaço real .....	111
7.3.1 - Diagrama indicativo do diagrama de fluxo no espaço $f_0$ (coefici- ente de transmissão) x $p$ (concentração de centros espalhadores) ...	119
A.1 - Diagrama mostrando a composição de duas transmissividades em sē rie .....	131
A.2 - Esquema indicando como se obtêm a transmissividade equivalente no caso de ligações em paralelo .....	132
A.3 - Grafos a dois terminais mostrando como se calcula $t_{eq}$ .....	133

## LISTA DE TABELAS

<u>TAB.</u>	<u>PÁG.</u>
2.3.1 - Expoente crítico $\nu$ para o modelo de Ising ( $d=2$ ) em função do número de constantes de acoplamento, do número de iterações e do tamanho da rede usada em uma simulação de Monte Carlo .....	27
3.3.1 - Valores da temperatura crítica $k_B T_c / qJ_x$ para o modelo de Potts de q-estados tri-dimensional anisotrópico para vários valores das razões $J_y/J_x$ e $J_z/J_x$ para $q = 1, 2$ e $3$ .....	41
3.3.2 - Valores do ponto crítico $t_c$ , dos expoentes críticos $\nu$ e $\Phi$ para modelos d-dimensionais isotrópicos .....	46
4.3.1 - Resultados correspondentes aos principais pontos e expoentes críticos para o problema de interface em ferromagneto de Potts....	68
5.2.1 - Tabela apresentando $P_\infty$ e $P_\infty^B$ para valores típicos de $(p_x, p_y)$ .....	89
5.3.1 - Valores para os expoentes críticos $\nu$ , $\beta$ e $\beta^B$ e para as amplitudes $A$ e $A^B$ , associados às grandezas $P_\infty$ e $P_\infty^B$ .....	96
5.3.2 - Valores dos parâmetros de ordem $P_\infty$ e $P_\infty^B$ para o caso isotrópico $p_x = p_y = p$ .....	96
6.3.1 - Valores da transmissividade crítica e dos expoentes críticos correspondentes a renormalização usando duas famílias de células descritas pelas eqs. (6.3.1) e (6.3.14) .....	108

## CAPÍTULO I

### INTRODUÇÃO

A área de transição de fase e fenômenos críticos tem despertado bastante interesse nos últimos anos, contribuindo amplamente para o desenvolvimento da mecânica estatística moderna. Podemos dividi-la em duas fases: a "clássica", que começa desde a descoberta dos fenômenos magnéticos e das primeiras tentativas de descrevê-los, até a solução de Onsager <sup>(1)</sup> para o modelo de Ising bidimensional em rede quadrada, e a era "moderna" a partir de então. Em seu famoso trabalho, Onsager determinou entre outros resultados (exatos) que o calor específico apresenta uma divergência logarítmica no ponto de transição, contrariamente aos resultados (aproximados) existentes na época (era prevista uma descontinuidade para o calor específico em  $T = T_c$ ). Do período clássico, cujos trabalhos mais importantes começaram a partir da segunda metade do século passado, podemos destacar Faraday com seus estudos sobre o ferro, van der Waals em fluidos, Curie, Langevin, Weiss, Lenz, etc., para propriedades magnéticas das substâncias, entre outros.

Os resultados de Onsager estimularam a pesquisa nesta área de conhecimento, várias técnicas de cálculo foram desenvolvidas e uma grande quantidade de novos modelos abordados.

Devido a dificuldades no cálculo da função de partição,

poucos são os problemas que admitem solução exata em mecânica estatística (para algumas soluções exatas, vide livro de Baxter<sup>(2)</sup>, 1982). Por esta razão, uma grande quantidade de métodos aproximativos tem sido implementados. Entre as várias técnicas existentes podemos citar: (a) as aproximações de células, nas quais tratamos exatamente uma parte do sistema, enquanto supomos que as variáveis restantes assumem valores médios. Estes métodos dão geralmente uma boa descrição qualitativa das propriedades de sistemas tri-dimensionais, mas seus resultados quantitativos em geral não são bons, principalmente próximo da região crítica, onde as flutuações, que desempenham papel importante neste domínio dos parâmetros termodinâmicos, não são contempladas. Normalmente são usadas como uma primeira tentativa devido a sua simplicidade. Como exemplo temos a técnica do campo médio<sup>(3)</sup>, o método variacional simples<sup>(4-11)</sup> e estendido<sup>(12)</sup>, método do campo efetivo<sup>(13,14,15)</sup> (operador diferencial), o campo de reação<sup>(16,17)</sup>, etc. (b) Os métodos perturbativos (regimes de altas e baixas temperaturas) que têm a qualidade de podermos melhorar os resultados através de correções superiores, mas com o inconveniente que a tarefa de calcular cada nova correção é geralmente comparável ao cálculo de todas as correções anteriores juntas, além de serem métodos típicos de comportamentos assintóticos. (c) A técnica da função de Green<sup>(18)</sup> (CPA<sup>(19,20)</sup>, RPA<sup>(21)</sup>). É uma técnica bastante usada, mas apresenta um grave defeito: o processo de desacoplamento das funções de Green de ordem superiores é um tanto intuitivo, não existindo controle sobre o erro cometido. (d) Simulações de sistemas (que em geral têm tamanhos e número de graus de liberdade infinitos) por amostras onde alguns (ou todos) dos tamanhos originais sejam feitos finitos, de tal modo que os novos sistemas possam ser tratados. Como exemplo temos os

métodos de Monte Carlo <sup>(22,23,24)</sup>, a técnica da matriz de transferência <sup>(25)</sup>, etc. A convergência é feita estudando amostras cada vez maiores. As propriedades críticas são estabelecidas usando argumentos de "Efeitos de Tamanhos Finitos" <sup>(26)</sup>. Atualmente, são técnicas bastante empregadas, pois apesar de laboriosas, em geral conduzem a resultados muito bons. (e) Grupo de Renormalização <sup>(27-30)</sup>, que pode ser descrito no espaço real ou no espaço recíproco. É um dos formalismos mais usados nos últimos anos na determinação das propriedades críticas dos sistemas (pode também ser aplicado fora da região crítica). Apesar de nem sempre conter um método sistemático de cálculo de erros, uma vez que sua confiabilidade normalmente é testada quando podemos comparar algumas de suas previsões com resultados estabelecidos por outros métodos, sua simplicidade, elegância e capacidade de prever resultados não triviais, têm-na tornado uma das teorias de maior sucesso na área de fenômenos críticos e transições de fase. Além da boa concordância desta teoria com muitos resultados experimentais, o estabelecimento do conceito de universalidade e as leis de escalas consistem num dos frutos mais surpreendentes deste formalismo.

Os bons resultados obtidos através do uso do grupo de Renormalização no espaço real (GR), tem motivado a criação de novas versões desta técnica de cálculo. Assim surgiram formalismos que consistem em combinações do GR com outros métodos de cálculo da mecânica estatística. Dentre estas versões podemos destacar o MCRG <sup>(24)</sup>, que combina o GR com técnicas de Monte Carlo, o MKRG <sup>(31)</sup> ligando o GR com as aproximações de Migdal-Kadanoff <sup>(\*)</sup>, o MFRG <sup>(32)</sup>

---

(\*) Migdal-Kadanoff é uma das transformações em que o fator de escala "b" aparece explicitamente. Assim, é possível fazer uma extensão analítica para se obter um fator de escala infinitesimal. Neste caso a transformação obtida é chamada Grupo de Renormalização Diferencial.

que mistura o GR com a técnica de campo médio e o Grupo de Renormalização Fenomenológico <sup>(33, 34)</sup> aplicado para sistemas que tenham tamanhos finitos.

No Capítulo II fazemos uma breve revisão das idéias do Grupo de Renormalização, uma vez que esta é a técnica que usamos no tratamento de todos os problemas discutidos neste trabalho, os quais tratamos temperadamente ("quenched"). Conexões do Grupo de Renormalização com as técnicas de Monte Carlo (MCRG) e com o problema de escalas em tamanhos finitos (Grupo de Renormalização Fenomenológico) também serão vistos.

Entre os inúmeros modelos tratados com as técnicas citadas anteriormente, um que tem despertado bastante interesse, quer por sua riqueza teórica ou quer por suas aplicações práticas, é o modelo de Potts <sup>(35)</sup> de  $q$ -estados (MP) (como excelente artigo de revisão vide Wu <sup>(36)</sup> - 1982). Ele consiste numa generalização do modelo de Ising. Neste modelo (Ising) admitimos que uma dada variável aleatória  $\sigma_i$  é associada a cada sítio de uma determinada rede, podendo assumir dois valores possíveis ( $\sigma_i = \pm 1$ ). A interação entre dois sítios "i" e "j", é representada por uma constante de acoplamento  $J_{ij}$ , vinculada à ligação entre os mesmos, que para sistemas magnéticos (caso que temos interesse) é a integral de "exchange" entre as funções de onda dos dois referidos sítios, aos quais associamos momentos magnéticos localizados ( $\sigma_i$  representa a componente z do "spin"). Consideremos que  $J_{ij} = J$  entre sítios primeiros vizinhos e  $J_{ij} = 0$  nos demais casos. Este sistema apresenta dois níveis de energia, um deles correspondendo ao caso onde os "spins" estão paralelos e o outro ao caso em que se encontram anti-paralelos. Se  $J_{ij} > 0$  a tendência natural destes momentos magnéticos é se alinharem no mesmo estado, digamos para cima (equivalentemente

poderia ser para baixo) e corresponde ao caso em que o sistema é ferromagnético. Acontece o contrário (alinhamento anti-paralelo), quando  $J_{ij} < 0$  e corresponde ao caso anti-ferromagnético. O MP consiste em admitir que os "spins" possam se configurar em  $q$  estados ( $\sigma_i = 1, 2, 3 \dots q$ ) e que como no caso de Ising tratado anteriormente tenha somente dois níveis de energia, correspondendo respectivamente aos casos onde as variáveis  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$  estejam em estados idênticos ou distintos. O caso onde  $q = 2$  reproduz o modelo de Ising. Potts determinou a temperatura crítica (exata) para a rede quadrada e valores de  $q = 2, 3, 4$  ( $q = 2$  já era determinado por Kramers e Wannier <sup>(37)</sup>) e a expressão por ele obtida é hoje estabelecida para todo valor de  $q$  onde a transição é contínua ( $0 \leq q \leq 4$ ). A temperatura crítica também é conhecida para as redes triangular e "honeycomb". Em três dimensões os resultados existentes para a temperatura crítica não são exatos, o valor de  $q$  a partir do qual a transição é de primeira ordem é aproximadamente igual a 3.

Existem várias realizações experimentais do MP. Como exemplo podemos citar: átomos de  $^4\text{He}$  adsorvidos em grafite com cobertura  $1/3$  ( $q=3$ ) <sup>(38)</sup>, átomos de  $\text{O}_2$  adsorvidos em Ni ( $q=4$ ) <sup>(39)</sup>, a transição do ferromagneto cúbico  $\text{DyAl}_2$  submetido a um campo magnético diagonal em relação aos seus eixos fáceis ( $q=3, d=3$ ) <sup>(40)</sup>, a transição estrutural em  $\text{SrTiO}_3$  ( $q=3, d=3$ ) <sup>(41)</sup> submetido à pressão externa, entre outros.

O MP está relacionado a vários outros modelos da mecânica estatística - ele é um caso particular do modelo  $Z(N)$  (vide Wu <sup>(36)</sup>-1982) - dentre os quais citamos o isomorfismo apresentado por este modelo e o problema de jogar aleatoriamente resistores em uma dada rede <sup>(42)</sup> ( $q \rightarrow 0$ ); para  $q \rightarrow 1/2$  ele é isomorfo ao sistema de vidro de "spin" diluído <sup>(43, 44)</sup>; para  $q \rightarrow 1$ , Kasteleyn e For

tuin<sup>(45)</sup> estabeleceram uma correspondência entre o MP e o problema da percolação; o caso  $q = 2$ , como já vimos, é o modelo de Ising. Tais relações permitem que, a partir do MP, tenhamos informações sobre outros modelos estatísticos.

No Capítulo III tratamos do modelo de Potts de  $q$ -estados, ferromagnético em rede quadrada anisotrópica onde estudamos diagramas de fases, expoentes críticos e expoentes de "crossover".

Tratamentos teóricos de transições de fase, normalmente consideram os cristais como sendo de extensão infinita. Para várias propriedades isto é bastante razoável, no entanto é conhecido que para muitas amostras, próximo da região crítica, onde o comprimento de correlação é de longo alcance, efeitos de tamanhos finitos devem ser considerados. Por exemplo, num sistema tridimensional de tamanho finito em uma de suas direções, a temperatura crítica depende do comprimento  $L$  deste tamanho. Experiências também mostram que em muitos casos efeitos de superfície não devem ser desprezados. Podemos ter um sistema onde as propriedades críticas da superfície sejam distintas das do volume. Estas questões têm sido bastante discutidas nos últimos anos. Como artigos de revisão podemos citar M.N. Barber<sup>(26)</sup>, para o estudo dos efeitos de tamanhos finitos e K. Binder<sup>(23)</sup> para a discussão dos efeitos de superfície. Os trabalhos em sistemas magnéticos estão entre os que mais contribuíram para a discussão desses efeitos. Neste trabalho nos interessamos pela discussão do segundo tópico, ou seja, tratamos de efeitos superficiais em sistemas magnéticos. No Capítulo IV discutimos as propriedades críticas de um sistema contendo interfaces. Tratamos do modelo de Potts ferromagnético em rede cúbica onde associamos uma constante de acoplamento  $J_s$  para as ligações contidas num plano que separa a rede em dois meios semi-infinitos, os quais

caracterizamos respectivamente pelas constantes  $J_1$  (meio 1) e  $J_2$  (meio 2). Ainda neste capítulo, estudamos um problema semelhante ao anterior, só que desta vez  $J_2 = 0$  (superfície livre) e  $J_s$  obedece a uma distribuição binária de probabilidades, isto é,  $J_s$  tem uma probabilidade  $p$  de estar presente e  $1-p$  de estar ausente (diluição das ligações da superfície).

A técnica do Grupo de Renormalização no espaço real é empregada principalmente para a obtenção de pontos e expoentes, críticos. No entanto nada impede que a utilizemos em todo o intervalo de variação dos parâmetros externos (tipicamente temperatura) e na determinação de outras grandezas termodinâmicas. Neste sentido podemos citar o trabalho de Martin e Tsallis <sup>(46)</sup> (1981) no qual eles calcularam o calor específico e a magnetização espontânea para o modelo de Ising em redes hipercúbicas. Num trabalho posterior <sup>(47)</sup> (1983), os mesmos autores calcularam o calor específico do modelo de Potts em rede quadrada, ao longo de todo espectro de temperaturas. Podemos ainda citar o trabalho de Niemeijer e Van Leeuwen <sup>(48)</sup> (1976), onde eles desenvolveram uma teoria de Grupo de Renormalização para calcular a energia livre ao longo de toda variação dos parâmetros termodinâmicos. A partir da energia livre ou outras grandezas termodinâmicas podem ser determinadas. Recentemente Tsallis et al. <sup>(49)</sup> (1985) desenvolveram um formalismo de Grupo de Renormalização que permite estabelecer equações de estado para problemas geométricos estatísticos (não necessariamente relacionados com formalismos Hamiltonianos). Neste trabalho eles determinaram parâmetros de ordem para a completa célula infinita percorrente e sua associada espinha dorsal, na rede quadrada. Através da escolha de uma célula conveniente estendemos este problema para a rede quadrada anisotrópica. Os resultados são apresentados no Capít

tulo V.

Na teoria do Grupo de Renormalização no espaço real, os tipos de células usadas desempenham um papel muito relevante. Por exemplo devemos esperar que, para uma dada escolha, aumentando o tamanho "b" da célula, no processo de renormalização (renormaliza-se uma célula de tamanho b em outra de tamanho  $b' < b$ ) os valores, aproximados, fornecidos pela teoria sejam melhorados. A questão que se coloca é: como devemos renormalizar para acelerar a convergência, escolhendo células tais que  $b' \ll b$  (digamos  $b'=1$ ) ou que  $b' \sim b$  (por exemplo  $b' = b-1$ ) ? Algumas destas questões serão discutidas no Capítulo VI, através da aplicação do Grupo de Renormalização no espaço real, para duas famílias de células hierárquicas auto-duais.

Com a finalidade de salientar a diversidade de tipos de problemas que podem ser resolvidos com o uso da técnica do Grupo de Renormalização no espaço real, apresentamos no Capítulo VII, o emprego desta técnica para tratar um problema que não exhibe transição de fase no sentido usual. Neste problema calculamos o comprimento de penetração característico  $\xi$  associado com o espalhamento elástico incoerente (simples e múltiplo), em um meio semi-infinito desordenado, em função do parâmetro p (concentração de centros espalhadores) e do coeficiente de transmissão  $f_0$  de cada centro espalhador.

Finalmente apresentamos no Capítulo VIII, as principais conclusões e extensões deste trabalho.

## CAPÍTULO II

### GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

#### 2.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo fazemos uma breve introdução da teoria do Grupo de Renormalização. Através da discussão das propriedades críticas de um determinado sistema, elaboramos os principais conceitos desta técnica de cálculo. Ao final discutimos algumas versões deste formalismo mencionando as abordagens do Grupo de Renormalização Monte Carlo e Fenomenológico.

#### 2.2 - NOÇÕES SOBRE A TEORIA DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

Consideremos um sistema com um número muito grande de graus de liberdade ( $g_l$ ). Normalmente, em mecânica estatística, mesmo uma pequena amostra de uma dada substância pode apresentar suas propriedades fisicamente significativas. Podemos nos perguntar até que ponto reduzindo o tamanho desta amostra, para uma dada temperatura, ela mantém suas propriedades termodinâmicas características. O tamanho limite ao qual corresponde alterações em tais propriedades chamamos de comprimento de correlação ( $\xi$ ), que é uma função da temperatura. Mesmo para um sistema dessas dimensões, em geral o número de  $g_l$  continua elevado, particularmente próximo à região de

temperatura crítica, onde o comprimento de correlação  $\xi$  é muito grande. Longe da região crítica,  $\xi$  é pequeno e métodos tradicionais tais como expansões perturbativas, aproximações de Hartree-Fock e teorias de campo médio podem ser adequadas ao estudo do sistema; porém quando  $T \sim T_c$  as previsões destes métodos, na maioria dos casos, não concordam com a experiência nem com resultados teóricos exatos. A explicação para esta discordância está no fato de que estes métodos não consideram adequadamente o efeito cooperativo, acentuado próximo à transição de fase. Por exemplo, a teoria de campo médio ao desprezar as flutuações encontra um valor para a temperatura crítica superestimado, favorecendo deste modo a fase ordenada. Em alguns casos é mais trágico; ela prevê transição onde não existe (por exemplo, em sistemas a uma dimensão com forças de alcance finito). Observa-se que quando o sistema evolui para atingir à transição de fase, as várias partes que o compõem não se comportam como que isoladas, mas pelo contrário, elas se "vêm" mutuamente por meio das flutuações. Os métodos clássicos são úteis, porque em geral, além de serem mais simples dão uma descrição qualitativa (para altas dimensões) da física do sistema.

O Grupo de Renormalização (GR) (cuja versão mais completa deve-se a Wilson <sup>(28,29)</sup>) é uma técnica de cálculo poderosa no tratamento de sistemas que contêm um número elevado de gl. A vantagem fundamental que este método oferece é a redução sucessiva de gl sem comprometer a física básica do problema. Sua idéia fundamental assemelha-se àquela usada em hidrodinâmica, quando se introduz a variável densidade, a qual corresponde uma média sobre os gl microscópicos em um determinado elemento de volume do fluido. Todas as flutuações microscópicas são eliminadas subsistindo

somente as macroscópicas, que por sua vez, estão embutidas nas equações da hidrodinâmica que relacionam dois pontos distantes entre si. Espera-se que as flutuações locais não sejam determinantes para o comportamento macroscópico. A diferença que existe em relação ao GR, é que, neste caso, o processo de diminuição de  $gl$  é feito repetidas vezes, isto é, a transformação que elimina flutuações locais é aplicada iterativamente para cada resultado obtido. Se iniciamos com um Hamiltoniano  $H_0$ , o processo de restrição de  $gl$  leva à sequência  $H_0, H_1, H_2, \dots, H_n$ , de Hamiltonianos transformados. A idéia inicial que poderia ocorrer seria que se a sequência  $\{H_n\}$  levasse a um Hamiltoniano solúvel, através da transformação inversa poderíamos retornar ao sistema original. Isto no entanto não é possível pois ao fazermos médias locais perdemos informações que não podem ser recuperadas, acarretando deste modo que a transformação não admite inversa e que o GR não constitui propriamente um grupo no sentido da matemática (e sim um semigrupo). Espera-se que, partindo de um Hamiltoniano  $H_0$  onde as interações são locais elas também o sejam em todos os Hamiltonianos transformados, pois caso contrário não teríamos simplificação nenhuma.

Consideremos o sistema descrito pelo Hamiltoniano de Ising com interações entre primeiros vizinhos em uma rede quadrada com espaçamento "a" (ver eq. (2.2.1) e Fig. 2.2.1).

$$H = K_0 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (2.2.1)$$

onde  $S_i = \pm 1, \forall i$ ,  $K_0 = J/k_B T$ ,  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $J$  a constante de troca entre spins.  $\langle i,j \rangle$  indica sítios primeiros vizinhos.

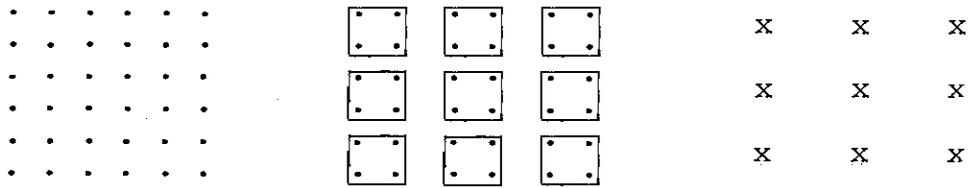


FIGURA 2.2.1 - Eliminação de graus de liberdade segundo a idéia de Kadanoff. Próximo de  $T_c$  os "spins" estão fortemente correlacionados podendo cada bloco de quatro "spins" ser substituído por um "spin" efetivo.

Suponhamos que a temperatura do sistema esteja próxima de  $T_c$  de tal modo que o comprimento de correlação seja grande. Nestas condições é razoável supor que localmente os "spins" estão fortemente correlacionados. Podemos pensar que subdividindo a rede em pequenos blocos (digamos blocos com quatro "spins" como na Figura 2.2.1) estes "spins" pertencentes a cada bloco estejam provavelmente no mesmo estado (imagem de Kadanoff<sup>(27)</sup>) ou seja, todos para cima, ou todos para baixo. Portanto, cada bloco pode, em primeira aproximação, ser substituído por um "spin" efetivo e a rede original por uma outra onde o espaçamento é  $a' = 2a$  e o número de gl é reduzido por um fator quatro (mais geralmente teremos  $a' = ba$  e o fator de redução de gl  $b^d$  onde "b" é o comprimento dos blocos e "d" a dimensão espacial do sistema). Como no processo de redução de gl somente variáveis locais são consideradas, o comprimento de correlação  $\xi$  deve permanecer invariante. Expressando  $\xi$  em unidades do novo parâmetro de rede, temos

$$\xi(a') = \frac{\xi(a)}{2} \quad (2.2.2)$$

(para células de tamanho b teremos  $\xi(a') = \xi(a)/b$ ). Aos "spins" efetivos podemos associar uma nova constante de acoplamento  $K_1$ , bem

como um novo Hamiltoniano  $H_1$ . Repetindo todo o procedimento para  $H_1$  obtemos um Hamiltoniano  $H_2$ , e assim sucessivamente. A simplicidade está em que, para determinar as novas constantes de acoplamento, não é necessário estudar o sistema inteiro, mas uma região da ordem do alcance da interação. Esperamos que o alcance de  $K_1$  seja  $2a$ ,  $K_2$  de  $4a$ ,  $K_3$  de  $8a$ , etc.. Além disso,  $H_i$  deve ser determinado a partir de  $H_{i-1}$  e não de  $H_0$  que tem mais gl. Deste modo calcula-se  $H_n$  para o qual  $2^n a \sim \xi$ . Neste estágio temos poucos gl por comprimento de correlação e o problema pode ser resolvido por outros métodos.

A discussão anterior serviu para dar uma primeira idéia sobre como eliminar gl na teoria do GR. No entanto, devemos lembrar que muita simplificação tem sido feita. Uma análise rigorosa mostra que apesar de fortemente correlacionados os blocos de "spins" podem se configurar em mais do que dois estados. Outra possibilidade é que o processo iterativo gere novos tipos de interações (interações a três corpos, quatro corpos, etc.) de tal modo que para descrever completamente o sistema é preciso trabalhar em um espaço de parâmetros mais amplo.

A eliminação de gl descrita no exemplo anterior foi realizada no espaço real. Existe uma segunda forma de executar este procedimento que é elaborada para o espaço recíproco. Neste caso o processo de diminuição de gl consiste em se eliminar os grandes vetores de onda (correspondem à eliminação das flutuações contidas em uma pequena região do espaço real). O sistema é definido através de uma Hamiltoniana do tipo Landau-Ginzburg, onde as variáveis de "spin" podem assumir qualquer valor ("spin" clássico) e são distribuídas continuamente no espaço. Consequentemente, o GR construído desta forma não se presta para o cálculo de grandezas sensíveis à

estrutura da rede como por exemplo a temperatura crítica, sendo no entanto muito adequado para o cálculo de expoentes críticos.

Em uma rede com espaçamento "a", não existem flutuações tendo vetores de onda maiores do que  $1/a$ . Como o objetivo de estudar a distribuição de variáveis ("spins") para o espaço contínuo é facilitar os cálculos (transformando somatórios em integrais) este vínculo deve ser preservado por imposição com a finalidade de manter a física original do problema. Portanto,  $1/a$  é um parâmetro de corte natural no processo de integração sobre os vetores de onda. Para que a densidade original de estados seja preservada, fazemos uma mudança de escala nos referidos vetores, emergindo daí a relação entre os parâmetros do velho e do novo Hamiltonianos.

A versão do GR no espaço real é mais fácil de ser visualizada. Por esta razão, e pelo fato de ser a versão que usamos neste trabalho nos limitaremos à sua discussão.

O segundo mérito da teoria do GR é a determinação das classes de universalidade. O comportamento cooperativo do sistema é levado em conta através das iterações sucessivas. Existe uma transformação  $\tau$  (a ser determinada) que leva  $H_0$  em  $H_1$ ,  $H_1$  em  $H_2, \dots, H_\ell$  em  $H_{\ell+1}, \dots$  etc., ou seja,  $\tau(H_0) = H_1$ ,  $\tau(H_1) = H_2, \dots$ . A aplicação sucessiva desta transformação pode fazer com que a sequência  $\{H_\ell\}$  tenda para um ponto fixo<sup>†</sup>, isto é, um Hamiltoniano  $H^*$  tal que  $\tau(H^*) = H^*$ . Geralmente existe mais do que um ponto fixo no espaço de parâmetros de  $H$ . O ponto fixo de uma transformação é uma propriedade da mesma, independe do Hamiltoniano que está sendo transformado. O comportamento crítico do sistema é deter-

---

<sup>†</sup> Existem casos em que a sequência  $\{H_\ell\}$  não tende para um ponto fixo mas para um ciclo fixo, comportamento turbulento, etc. Neste trabalho, não tratamos desses casos.

minado através dos pontos fixos de  $\tau$ . Se a transformação  $\tau$  admite  $n$  pontos fixos, podemos ter  $n$  comportamentos cooperativos distintos. Como  $\tau$  não faz referência ao ponto inicial no processo de iteração, vemos pela eq. (2.2.2) que seus pontos fixos têm  $\xi = 0$  ou  $\xi = \infty$ . O caso  $\xi = \infty$  corresponde à região crítica, onde o sistema está fortemente correlacionado. O fato da transformação  $\tau$  independe do ponto de partida no espaço de parâmetros de  $H$ , significa que todos os sistemas cuja iteração converge para um mesmo ponto fixo  $H^*$  tal que  $\xi = \infty$  (pela eq. (2.2.2) vemos que todos tais sistemas necessariamente têm  $\xi = \infty$ ) possuem os mesmos expoentes críticos. Isto constitui o conceito de universalidade em fenômenos críticos. Dizemos que tais sistemas pertencem à mesma classe de universalidade. É uma espécie de lei de estados correspondentes e é comprovada experimentalmente.

O lugar geométrico dos pontos, no espaço de parâmetros, que têm  $\xi = \infty$ , constitui a linha, superfície ou hipersuperfície crítica. Esta hipersuperfície pode conter vários pontos fixos, cada qual determinando uma classe de universalidade distinta. O fluxo determinado pelas repetidas iterações, no espaço de parâmetros de  $H$ , assemelha-se às correntes fluviais em um relevo hidrográfico com suas várias bacias atratoras. As bacias são separadas entre si por regiões de instabilidade (linha "divisória das águas" ( $\xi = \infty$ )). Estas regiões correspondem à separação entre as várias fases do sistema.

A presença de vários pontos fixos na superfície crítica faz com que existam regiões de competição sobre a mesma. Muitas vezes o domínio de um determinado atrator é aparente. Seguindo-se o fluxo observamos que inicialmente ele dirige-se para o referido atrator mas ao atingir uma certa região (quando  $T \rightarrow T_c$ ) "sente" a

presença de um segundo ponto fixo, desviando-se em sua direção (veja Fig. 2.2.2). Este comportamento é frequente em transição de fase e é conhecido como fenômeno de "crossover".

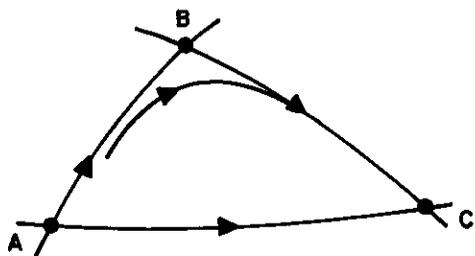


FIGURA 2.2.2 - Esquema ilustrando o fenômeno de "crossover". Inicialmente o fluxo dirige-se na direção do ponto fixo B. Próximo de B e  $T \cong T_c$  ele é atraído por um segundo ponto fixo C.

Consideremos a estabilidade dos pontos fixos  $H^*$  de  $\tau$ . Uma das exigências para a determinação da transformação  $\tau$  (mais adiante veremos exemplos de  $\tau$ ) é que ela seja uma função analítica de seus parâmetros. Isto permite linearizá-la (jacobiano da transformação) nos seus vários pontos fixos. Os auto-vetores das matrizes obtidas são conhecidos como campos de escala. Eles podem ser expressos como combinações dos parâmetros do Hamiltoniano e se renormalizam como uma simples mudança de escala. Um campo de escala é dito relevante se o auto-valor  $\lambda$  que lhe é associado é maior do que um. Qualquer afastamento na direção do auto-vetor leva o sistema a um novo ponto fixo. Quando  $\lambda < 1$ , o campo associado é dito irrelevante. O sistema é estável segundo a direção de tais campos. A presença de campos irrelevantes não altera a criticalidade do sistema. O caso  $\lambda = 1$  é dito marginal. A linearização não é suficiente para descrever as características deste campo.

Vejamos agora algumas considerações sobre a transformação  $\tau$  e exemplos onde ela é determinada. Sua construção deve ser de tal maneira que preserve ao máximo as propriedades físicas relevantes do sistema em estudo (por exemplo, ela pode preservar a fun

ção de partição para  $T > 0$  ou a energia do estado fundamental se  $T = 0$ ). A sua determinação não é única. A rigor não existe um argumento para decidir, sem qualquer ambigüidade, qual a melhor proposta a não ser através da comparação com resultados fornecidos por outros métodos ou pela experiência. A transformação  $\tau$  emerge da forma pela qual eliminamos  $g_1$ . Como um primeiro exemplo, consideremos a aproximação de Migdal-Kadanoff (50,51,52). Seja um sistema descrito por interações entre "spins" (digamos modelo de Ising) em uma rede quadrada. Nesta aproximação a redução de  $g_1$  é feita em duas etapas. Inicialmente deslocamos ligações (adição ao Hamiltoniano  $H$  de um potencial  $V$  tal que  $\langle V \rangle_H = 0$ , onde  $\langle V \rangle_H$  é o valor médio do potencial  $V$  calculado com lei de probabilidade proporcional a  $e^{-\beta H}$ ) paralelamente a um suposto eixo  $x$  e a um suposto eixo  $y$  como indicado pela Fig. 2.2.3. Cada ligação resultante tem o

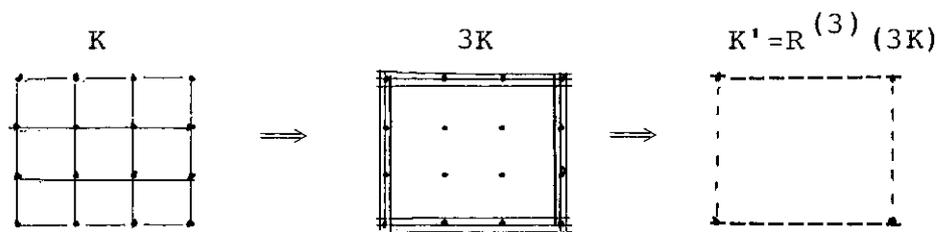


FIGURA 2.2.3 - Obtenção da função  $\tau = K'(K)$  através do deslocamento de ligações (primeira transformação) seguido do processo de decimação de sítios (segunda transformação). O índice "3" em  $R^{(3)}(3K)$  é o fator de mudança de escala.

valor equivalente a três vezes o valor da ligação original. Na segunda etapa, sobre o resultado obtido, fazemos uma decimação nos sítios intra-vértices. As ligações efetivas são facilmente expressas como função das ligações originais.

De uma maneira geral a transformação  $\tau$ , para sistemas descrevendo interações entre "spins" pode ser expressa de uma

forma implícita através da seguinte equação

$$e^{[G+H'(s')]} = \sum_{\langle s \rangle} P(s',s) e^{H(s)} \quad (2.2.3)$$

onde  $H'(s)$ ,  $H(s)$  são os Hamiltonianos associados às células usadas na transformação (mais geralmente renormaliza-se uma célula de tamanho  $b$  em outra de tamanho  $b' < b$ ).  $P(s',s)$  é um fator de peso que depende das configurações dos "spins"  $\{s'\}$  e  $\{s\}$  com as seguintes propriedades

$$P(s',s) \geq 0 \quad \forall s',s \quad (2.2.4)$$

$$\sum_{\{s'\}} P(s',s) = 1 \quad . \quad (2.2.5)$$

A inclusão da função  $G$  é necessário porque em princípio  $H(s)$  e  $H'(s')$  não têm a mesma energia no estado fundamental.

Como segundo exemplo de transformação do GR podemos citar a Regra da Maioria de Niemeijer e Van Leeuwen<sup>(48)</sup>. Nesta transformação admitimos que se a maioria dos "spins" do bloco a ser renormalizado estiverem para cima, ou seja  $\sum_i \sigma_i > 0$  então o "spin" efetivo  $\sigma'_i$  deve se configurar para cima. Procedemos analogamente quando  $\sum_i \sigma_i < 0$ . No caso em que  $\sum_i \sigma_i = 0$ , admitimos que  $\sigma'_i$  possa estar para cima ou para baixo com igual probabilidade. Associando-se pesos  $P(s',s)$  às configurações de "spins" do bloco a ser renormalizado e usando a eq. (2.2.3), obtemos a transformação que relaciona as novas com as velhas constantes de acoplamento.

No GR que usamos neste trabalho, a transformação  $\tau$  é obtida da seguinte maneira: escolhemos os blocos " $b$ " e " $b'$ " de modo

que por justaposição qualquer um deles preencha a rede em que está definido o sistema e que contenha o maior número possível de propriedades de simetria do sistema em estudo. Congelamos em algum dos estados permitidos, ao longo de uma dada direção, os sítios externos equivalentes em "b" e em "b'". A transformação  $\tau$  é obtida fazendo-se um traço parcial em todas as variáveis internas e igualando-se as expressões obtidas a partir de "b" com as correspondentes extraídas de "b'". Como por construção os sítios externos em "b" (ou em "b'") estão no mesmo estado (não é obrigado que os sítios externos de um lado da célula "b" (ou em "b'") estejam no mesmo estado que aqueles do lado oposto) podemos juntá-los (de cada lado da célula) em um único sítio. Nestas condições, o processo de iteração define uma rede hierárquica e a transformação obtida preserva a função de correlação.

Consideremos agora o cálculo de expoentes críticos. Eles são determinados medindo-se a rapidez com que a transformação  $\tau$  afasta ( $\lambda > 1$ ) o Hamiltoniano renormalizado do ponto fixo. Retornemos para o exemplo dado pela Fig. 2.2.1 admitindo agora que os blocos de "spins" a serem renormalizados tenham tamanho "b". Suponhamos que através de algum critério de eliminação de gl, tenhamos obtido a função  $\tau$  caracterizada por  $K'(K)$ . O comprimento de correlação  $\xi$  se escala através da seguinte equação

$$\xi(K'(K)) = \frac{\xi(K)}{b} \quad (2.2.6)$$

O que esta expressão representa para a criticalidade do sistema? Nos pontos fixos devemos ter

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

$K = 0$  e  $K = \infty$ , devem ser soluções da eq. (2.2.7) e são chamados pontos fixos triviais. Nestes casos  $\xi = 0$ , o sistema está totalmente desordenado (tipicamente  $K = 0$ ) ou totalmente ordenado (tipicamente  $K = \infty$ ). O ponto fixo não trivial (se existir) caracteriza a transição de fase ( $\xi = \infty$ ). Expandindo  $K'(K)$  na vizinhança deste ponto, obtemos

$$K'(K) \sim K'(K_c) + \lambda(K-K_c) = K_c + \lambda(K-K_c) \quad (2.2.8)$$

onde  $\lambda \equiv \left. \frac{dK'(K)}{dK} \right|_{K=K_c}$ . Sabemos que no ponto crítico o comprimento de correlação se comporta como

$$\xi(K) \sim |K-K_c|^{-\nu} \quad (*) \quad (2.2.9)$$

O cálculo da eq. (2.2.9) para as constantes de acoplamento  $K'(K)$  e  $K$  permite escrever que

$$\frac{\xi(K'(K))}{\xi(K)} = \left| \frac{K'(K) - K_c}{K - K_c} \right|^{-\nu} \quad (2.2.10)$$

Das eqs. (2.2.6), (2.2.8) e (2.2.10) obtemos a seguinte expressão para o expoente crítico  $\nu$

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda} \quad (2.2.11)$$

O Hamiltoniano que estamos discutindo tem somente uma constante de acoplamento. Temos também admitido que no processo de renorma-

---

(\*) A forma mais geral que  $\xi(K)$  satisfaz é  $\xi(K) = (K-K_c)^{-\nu} F[\ln(K-K_c)]$  onde  $F(x)$  é uma função periódica de período  $\lambda$ .

lização não aparece novas constantes. Em sistemas mais gerais, o Hamiltoniano de partida contém vários K's bem como a proliferação de interações pode ser inevitável.

Consideremos o Hamiltoniano mais geral descrevendo interações entre operadores de "spins". Ele pode ser escrito da seguinte forma

$$H = \sum_{\alpha} K_{\alpha} S_{\alpha} \quad (2.2.12)$$

onde  $S_{\alpha}$  descreve os vários tipos de interações que ocorrem entre os "spins" no Hamiltoniano  $H_0$  ou interações que são geradas pela transformação do GR ( $H(s) = H \sum_i s_i + K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \dots$ ). Neste caso ao invés de um ponto crítico obtemos uma superfície crítica e os vários pontos fixos sobre esta superfície caracterizam as classes de universalidade do sistema. A eq. (2.2.8) é generalizada para a seguinte expressão:

$$K'_{\alpha} = (K_c)_{\alpha} + \sum_{\beta} T_{\alpha\beta} (K_{\beta} - (K_c)_{\beta}) \quad (2.2.13)$$

onde  $T_{\alpha\beta} \equiv \frac{\partial K'_{\alpha}}{\partial K_{\beta}}$  são os elementos de matriz Jacobiana calculados nos pontos fixos. Se não existe campo externo esta matriz apresenta tipicamente um auto-valor maior do que um e é associado ao expoente  $\nu$ . A presença do campo externo faz aparecer um segundo auto-valor maior do que um, o qual é associado aos expoentes  $\mu$  e  $\delta$ . Outros expoentes podem ser calculados usando-se as leis de escalas..

Temos discutido a técnica do GR para a obtenção de propriedades críticas das substâncias. No entanto já temos mencionado que este formalismo pode ser empregado para determinar valo -

res das grandezas físicas, incluindo equações de estado, fora de tal região. Um exemplo é mostrado no Capítulo V deste trabalho.

O sucesso conseguido pelo GR nos últimos anos, motivou a combinação desta técnica de cálculo com outros métodos estatísticos. Assim dedicamos as duas últimas seções deste capítulo para dar uma idéia sobre o GR Monte Carlo e o GR fenomenológico.

### 2.3 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO MONTE CARLO

No capítulo anterior já temos apontado várias qualidades e defeitos da técnica do GR. A principal desvantagem que esta técnica apresenta (com poucas exceções) é a falta de um teste simples que possa avaliar o erro cometido. Este inconveniente não acontece com os métodos de Monte Carlo. Por outro lado, quando se quer calcular as propriedades de um sistema através de simulações de Monte Carlo, efeitos de tamanho finito devem ser considerados.

Recentemente foi desenvolvido um formalismo que combina o GR no espaço real com simulações de Monte Carlo, de modo a evitar as dificuldades que ambos os métodos apresentam. Esta nova técnica é conhecida na literatura como MCRG<sup>(24)</sup> ("Monte Carlo Renormalization Group").

No processo de renormalização usual muitas vezes é frequente a proliferação do número de constantes de acoplamento. Cada nova constante que é gerada aumenta sensivelmente a quantidade de cálculos. Deste modo para que o problema seja factível, é necessário truncar, a partir de certo ponto, o aparecimento de novas constantes. Isto pode ser justificado admitindo que as interações desprezadas tenham pequena intensidade. Para uns sistemas esta aproximação

mação concorda com os resultados fornecidos por outros métodos mas para certos problemas isto não acontece e a inclusão de mais e mais constantes se faz necessária. No MCRG esta inclusão é implementada sistematicamente sem dificuldade de um nível de aproximação para outro.

A idéia do método é ilustrada pela seguinte figura:

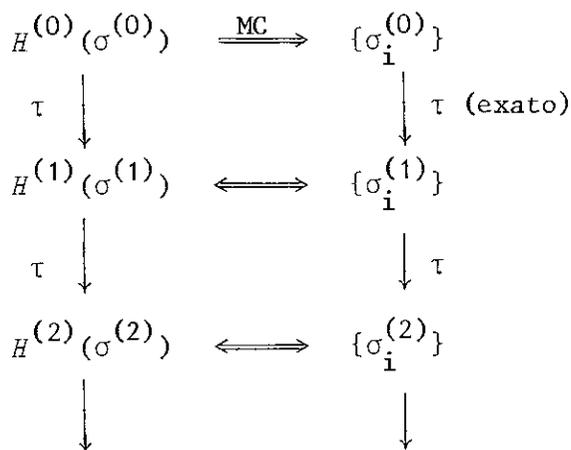


FIGURA 2.3.1 - Ilustração que indica as etapas do MCRG.

$H^{(0)}(\sigma^{(0)})$  é o Hamiltoniano que queremos tratar e é dado pela eq. (2.2.12). No procedimento usual do GR calcula-se as constantes de acoplamento renormalizadas em função das constantes originais através de uma transformação  $\tau$  como indicado pelas setas verticais que vão de  $H^{(0)}$  para  $H^{(1)}$ , de  $H^{(1)}$  para  $H^{(2)}$ , etc. Mas aí aparece a dificuldade de se lidar com um grande número de constantes de acoplamento. Em vez disso usa-se uma simulação de Monte Carlo que gere uma sequência de configurações características do sistema original em uma rede finita. Qualquer função de correlação que se queira pode ser calculada a partir das configurações. Uma vez que tais configurações podem ser armazenadas no computador, dividimos cada uma delas em blocos de "spins" e aplicamos a transformação  $\tau$  diretamente sobre os blocos. O resultado obtido é uma sequência de con

figurações para os "spins" renormalizados que deve ser característica do Hamiltoniano transformado. O efeito de qualquer constante de acoplamento que fosse gerada no processo de renormalização é automaticamente levado em conta. Agora tentamos encontrar um Hamiltoniano efetivo  $H^{(1)}(\sigma^{(1)})$  que seja compatível com as configurações renormalizadas. Devido ao fato do sistema ser finito, o número de interações que podem ser incluídas para ajustar  $H^{(1)}(\sigma^{(1)})$  com  $\{\sigma_i^{(1)}\}$  é muito maior do que em outras aproximações usuais. Este procedimento é continuado para obtermos  $H^{(2)}(\sigma^{(2)})$ ,  $H^{(3)}(\sigma^{(3)})$ , etc. A necessidade de construirmos os Hamiltonianos efetivos é porque, como veremos um pouco adiante, os expoentes críticos são determinados a partir de funções de correlação. Estas, por sua vez, dependem de tais Hamiltonianos no sentido que para calculá-las é preciso saber que tipos de interações devem ser levadas em conta. Estes Hamiltonianos que são obtidos através da rede finita são usados como correspondentes àqueles que teríamos caso a transformação  $\tau$  fosse aplicada em  $H^{(0)}$ , que é definido sobre a rede infinita. Neste ponto, aparece a primeira aproximação do método. Para a aproximação ser válida, o alcance efetivo do Hamiltoniano renormalizado, especialmente na vizinhança do ponto crítico, deve ser pequeno comparado ao tamanho da rede. Isto pode ser testado repetindo os cálculos para várias redes finitas de tamanhos diferentes.

Ao fazer simulações de Monte Carlo para um determinado modelo próximo da temperatura crítica, as interações levam o Hamiltoniano renormalizado até o ponto fixo. Isto fornece uma sequência de aproximações para os expoentes críticos, os quais devem convergir para os valores associados aos do ponto fixo.

Consideremos o cálculo das funções de correlação. Para o Hamiltoniano em estudo (eq. (2.2.12)) a distribuição de probabili

dade de equilíbrio é dada por

$$P(\sigma) = \exp[H(\sigma)]/Z \quad (2.3.1)$$

onde Z é a função de partição que é dada por

$$Z = \text{Tr}_{\sigma} \exp[H(\sigma)] \quad (2.3.2)$$

Em termos da distribuição de probabilidades as funções de correlação são dadas pela seguinte equação

$$\langle S_{\alpha} \rangle = \text{Tr}_{\sigma} S_{\alpha}(\sigma)P(\sigma) \quad (2.3.3)$$

Para os "spins" renormalizados  $\sigma'$  teremos

$$P'(\sigma') = \text{Tr}_{\sigma} \{ \tau(\sigma', \sigma)P(\sigma) \} \quad (2.3.4)$$

que pode ser expressa em termos do Hamiltoniano efetivo  $H'$  através da seguinte equação

$$P'(\sigma') = \exp[H'(\sigma')] / Z' \quad (2.3.5)$$

A matriz  $T_{\alpha\beta}$  é encontrada resolvendo-se o seguinte conjunto de equações:

$$\frac{\partial \langle S_{\gamma}^{(n+1)} \rangle}{\partial K_{\beta}^{(n)}} = \sum_{\alpha} \frac{\partial K_{\alpha}^{(n+1)}}{\partial K_{\beta}^{(n)}} \frac{\partial \langle S_{\gamma}^{(n+1)} \rangle}{\partial K_{\alpha}^{(n+1)}} \quad (2.3.6)$$

onde as derivadas são dadas por

$$\frac{\partial \langle S_Y^{(n+1)} \rangle}{\partial K_\beta^{(n)}} = \langle S_Y^{(n+1)} S_\beta^{(n)} \rangle - \langle S_Y^{(n+1)} \rangle \langle S_\beta^{(n)} \rangle \quad (2.3.7)$$

e

$$\frac{\partial \langle S_Y^{(n)} \rangle}{\partial K_\alpha^{(n)}} = \langle S_Y^{(n)} S_\alpha^{(n)} \rangle - \langle S_Y^{(n)} \rangle \langle S_\alpha^{(n)} \rangle \quad (2.3.8)$$

e são deduzidas usando as eqs. (2.3.1), (2.3.3) e (2.3.4). Estas funções de correlação devem ser calculadas a partir das simulações de Monte Carlo. Os auto-valores da matriz  $T_{\alpha\beta}$  dão estimativas para os expoentes críticos se o Hamiltoniano efetivo estiver próximo do ponto crítico. Em princípio, a matriz  $T_{\alpha\beta}$  pode ter um número infinito de componentes. Portanto, também no MCRG em algum momento é necessário truncar o surgimento de novas interações. Neste ponto, uma segunda aproximação é feita. A grande vantagem que este método oferece, é a possibilidade de investigar sistematicamente a matriz  $T_{\alpha\beta}$  através da inclusão de muitas constantes de acoplamento no Hamiltoniano efetivo.

Como um exemplo mostramos na Tabela 2.3.1 o valor do expoente crítico  $\gamma_T = 1/\nu$  para o modelo de Ising bidimensional em rede quadrada como uma função do número de constantes de acoplamento usadas, do número de iterações processadas e do tamanho da rede empregada na simulação. São usadas interações entre primeiros vizinhos, segundos vizinhos, interações de quatro "spins", formando plaquetas, interações de terceiros vizinhos, quartos vizinhos, interações de quatro "spins" formando plaquetas em sub-rede, e, finalmente, interações entre quintos vizinhos. Podemos verificar pelos dados da Tabela 2.3.1 que aumentando o tamanho da rede, os resultados tendem para a resposta exata. É interessante observar que, mesmo para redes pequenas, efeitos de tamanhos finitos não estragam

TABELA 2.3.1(\*) - Cálculo do expoente crítico  $\gamma_T=1/\nu$  (valor exato é igual a um) para o modelo de Ising ( $d=2$ ) em função do número de constantes de acoplamento, NC, do número de iterações, NI, e do tamanho da rede usada na simulação de Monte Carlo. Os números entre parêntesis dão a incerteza estatística do último dígito.

TAMANHO DA REDE		64	32	16	8	4
NI	NC					
1	1	0.912(2)	0.904(1)	0.897(3)	0.887(3)	0.877(3)
	2	0.967(3)	0.966(2)	0.964(3)	0.965(3)	0.988(2)
	3	0.968(3)	0.968(2)	0.966(3)	0.966(3)	0.992(2)
	4	0.969(4)	0.968(2)	0.966(3)	0.969(3)	
	5	0.969(4)	0.968(3)	0.964(4)	0.964(5)	
	6	0.969(3)	0.968(3)	0.965(4)	0.964(5)	
	7	0.969(5)	0.967(3)	0.966(4)	0.962(5)	
2	1	0.963(4)	0.953(2)	0.937(3)	0.927(3)	
	2	0.999(4)	0.998(2)	0.993(3)	1.018(3)	
	3	1.001(4)	1.000(2)	0.994(3)	1.023(3)	
	4	1.002(5)	0.998(2)	0.984(4)		
	5	1.001(5)	0.997(2)	0.980(5)		
	6	1.001(5)	0.997(2)	0.980(5)		
	7	1.000(5)	0.997(3)	0.980(5)		
3	1	0.957(2)	0.936(3)	0.921(5)		
	2	0.998(2)	0.991(3)	1.013(4)		
	3	0.999(2)	0.993(3)	1.020(3)		
	4	0.999(2)	0.987(4)			
	5	0.997(2)	0.981(7)			
	6	0.997(2)	0.979(7)			
	7	0.997(2)	0.977(9)			
4	1	0.940(7)	0.939(5)			
	2	0.993(6)	1.025(4)			
	3	0.992(6)	1.031(4)			
	4	0.988(5)				
	5	0.990(5)				
	6	0.988(5)				
	7	0.984(4)				

(\*) Estes dados foram extraídos de: Swendsen R.H., "Monte Carlo Renormalization" (Topics in Current Physics) ed. Burkhardt T.W. e Van Leeuwen J.M.J. (Springer, New York)(1982), Cap. 3.

muito as aproximações obtidas. Outra característica positiva do método é que não é preciso lançar mão de muitas constantes de acoplamento para que tenhamos bons resultados.

## 2.4 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO FENOMENOLÓGICO

Consideremos um sistema com tamanho finito  $L$  em pelo menos uma direção. Seja  $T_c$  e  $\xi(T)$  respectivamente sua temperatura crítica e seu comprimento de correlação quando  $L \rightarrow \infty$ . A teoria de efeitos de tamanhos finitos afirma que na vizinhança de  $T_c$ , o comportamento do sistema é determinado pela seguinte variável:

$$Y = L/\xi(T) \quad (2.4.1)$$

Se  $Y \gg 1$  o sistema comporta-se como se tivesse tamanho infinito em qualquer direção (comportamento do corpo do sistema) mas se  $Y \ll 1$  suas propriedades termodinâmicas refletem o tamanho finito que o caracteriza.

Seja  $F_L(T)$  uma grandeza termodinâmica associada ao sistema, tal que próximo à transição de fase tenhamos

$$F_\infty(T) \sim A_\infty t^{-\rho}, \quad t \rightarrow 0 \quad (2.4.2)$$

onde  $t \equiv (T-T_c)/T_c$ . Suponhamos que quando  $Y \ll 1$  o sistema continue apresentando uma transição para uma temperatura crítica  $T_c(L)$ . Nestas condições teremos

$$F_L(T) \sim A_L t'^{-\rho'}, \quad t' \rightarrow 0 \quad (2.4.3)$$

com  $t' \equiv (T-T_c(L))/T_c(L)$ . Em geral, verifica-se que  $\rho \neq \rho'$ . Quando  $L \rightarrow \infty$  devemos ter  $T_c(L) \rightarrow T_c$  e  $\rho' \rightarrow \rho$ .

A hipótese fundamental da teoria de efeitos de tamanhos finitos é que para  $L$  finito e  $T$  próximo de  $T_c$  a função  $F_L(T)$  satisfaz

$$F_L(T) \sim l^\omega Q_F(l^\theta t') \quad , \quad l \rightarrow \infty, t' \rightarrow 0 \quad (2.4.4)$$

onde  $\theta = 1/\nu$ ,  $\nu$  é o expoente crítico associado ao comprimento de correlação  $\xi(T)$  e " $l$ " é igual a  $L/a$ ,  $a$  sendo um comprimento microscópico característico do sistema, por exemplo, parâmetro de rede, distância entre camadas. O expoente  $\omega$  é determinado exigindo que  $F_L(T) \rightarrow F_\infty(T)$  quando  $L \rightarrow \infty$ , e é dado por  $\rho/\nu$ .

A eq. (2.4.4) é satisfeita para toda quantidade que apresenta singularidade algébrica quando  $Y \gg 1$ . Em particular, podemos aplicá-la para o comprimento de correlação para o qual obtemos

$$\xi_l(T) \sim l Q_\xi(l^\theta t) \quad , \quad l \rightarrow \infty \quad (2.4.5)$$

onde temos admitido que a eq. (2.4.4) continua válida se substituirmos  $t'$  por  $t$ . Nightingale <sup>(33,34)</sup> foi quem primeiro interpretou o conteúdo da eq. (2.4.5). Ele mostrou que ela pode ser vista como uma transformação do Grupo de Renormalização para o sistema infinito ( $Y \gg 1$ ). O ponto essencial é admitir que a eq. (2.4.4) é satisfeita exatamente para dois sistemas finitos de larguras  $l$ ,  $l'$ , diferentes no sentido que

$$\frac{\xi_l(T)}{l} = \frac{\xi_{l'}(T')}{l'} \quad (2.4.6)$$

Vemos que se  $l, l' \rightarrow \infty$  com  $l/l'$  fixo, a eq. (2.4.6) exprime justamente como se escala  $\xi$  no Grupo de Renormalização usual. Usando a eq. (2.4.2) para o cálculo de  $\xi$  no limite de  $l, l' \rightarrow \infty$ , a eq. (2.4.6) transforma-se da seguinte forma:

$$T' - T_C = (T - T_C) \left(\frac{\ell}{\ell'}\right)^\theta \quad (2.4.7)$$

Nightingale admitiu que a eq. (2.4.7) continuava válida para sistemas finitos de tal maneira que ela corresponderia a uma renormalização da temperatura sob a forma

$$T \rightarrow T' = R_{\ell, b}(T) \quad (2.4.8)$$

onde  $b = \ell/\ell'$ . Esta transformação constitui a essência do que se chama Grupo de Renormalização Fenomenológico.

O ponto fixo da transformação deve ser tal que

$$\frac{\xi_\ell(T^*)}{\ell} = \frac{\xi_{\ell'}(T^*)}{\ell'} \quad (2.4.9)$$

Espera-se que  $T_{\ell, \ell'}^* \rightarrow T_C$  quando  $\ell, \ell' \rightarrow \infty$ . O expoente  $\nu$  pode ser obtido através da seguinte equação

$$b^{1/y_T} = \left. \frac{dR_{\ell, b}(T)}{dT} \right|_{T=T^*}$$

onde  $y_T = 1/\nu$ . A partir da eq. (2.4.6) obtemos que

$$\frac{dR}{dT} = \frac{dT'}{dT} = \frac{\ell'}{\ell} \frac{d\xi_\ell(T)}{dT} \bigg/ \frac{d\xi_{\ell'}(T')}{dT'} \quad (2.4.10)$$

portanto

$$\left(\frac{\ell'}{\ell}\right)^{1+\nu-1} = \left. \left( \frac{d\xi_\ell(T)}{dT} \bigg/ \frac{d\xi_{\ell'}(T')}{dT'} \right) \right|_{T=T_{\ell, \ell'}^*} \quad (2.4.11)$$

de onde obtemos estimativas para o expoente  $\nu$ . Outros expoentes po

dem ser obtidos permitindo que  $\xi_\ell$  dependa de outros campos e considerando as derivadas de  $\xi_\ell$  com relação a estes campos.

## CAPÍTULO III

### ESTUDO DO FERROMAGNETO DE POTTS EM REDE CÚBICA ANISOTRÓPICA

#### 3.1 - INTRODUÇÃO

Nos últimos anos muitos trabalhos têm sido dedicados ao estudo do modelo de Potts de  $q$ -estados, motivados tanto pela sua riqueza teórica como por sua utilidade experimental (como um excelente artigo de revisão podemos citar Wu <sup>(36)</sup>). A maior parte destes trabalhos tem focalizado o caso bi-dimensional (veja Wu <sup>(36)</sup> e de Oliveira e Tsallis <sup>(53)</sup> e referências contidas nestes dois artigos). Uma certa atenção tem sido dispensada para o ferromagneto tri-dimensional isotrópico (Blöte e Swendsen <sup>(54)</sup>) porém não temos conhecimento de qualquer estudo sistemático para o caso tri-dimensional anisotrópico e seus "crossovers" para dimensões inferiores. Esta é justamente a finalidade do presente trabalho <sup>(55)</sup>, onde nós nos interessamos pela discussão da temperatura crítica  $T_c$ , dos expoentes críticos  $\nu$  (do comprimento de correlação) e  $\phi$  (de "crossover"). O trabalho equivalente em duas dimensões foi feito por de Oliveira e Tsallis <sup>(53)</sup>. Seguimos a linha desenvolvida por estes autores e reobtivemos seus resultados como caso particular. Chamamos  $q_c(d)$  o valor de  $q$  acima do qual a transição é de primeira ordem, para uma dada dimensão  $d$  (relembramos que  $\lim_{d \rightarrow 1+0} q_c(d) = \infty$ ,

$q_c(2) = 4$  e  $q_c(3) \lesssim 3$ ; veja Wu<sup>(36)</sup> e de Magalhães e Tsallis<sup>(56)</sup> e referências contidas nestes dois artigos). Neste trabalho nos limitamos à discussão de sistemas tais que  $q \leq q_c(d)$ .

Apresentamos na Seção II o modelo e o Grupo de Renormalização (GR) usados, na Seção III os resultados, e na Seção IV um procedimento de extrapolação que proporciona valores muito precisos para as temperaturas críticas correspondentes a modelos com anisotropia arbitrária ( $\forall J_x, J_y, J_z$ ).

### 3.2 - MODELO E FORMALISMO

Consideremos o modelo de Potts de  $q$ -estados ferromagnético cujo Hamiltoniano é dado por

$$H = -q \sum_{(i,j,k)} \{ J_x \delta_{\sigma_{i,j,k}, \sigma_{i+1,j,k}} + J_y \delta_{\sigma_{i,j,k}, \sigma_{i,j+1,k}} + J_z \delta_{\sigma_{i,j,k}, \sigma_{i,j,k+1}} \} \quad (J_x > 0; J_y, J_z \geq 0) \quad (3.2.1)$$

onde  $i, j, k$  varrem todos os sítios de uma rede cúbica simples e  $\sigma_{i,j,k} = 1, 2, \dots, q, \forall_{i,j,k}$ . Relembremos a situação atual sobre a criticalidade ( $T_c, \nu$  e  $\phi$ ) deste modelo:

1) para  $d = 1$  (isto é,  $J_y = J_z = 0$ ) a temperatura crítica  $T_c$  é nula e o expoente do comprimento de correlação satisfaz

$$\nu_1 = 1, \quad \forall q \quad (3.2.2)$$

2) para  $d = 2$  (isto é,  $J_z = 0$  e  $J_y > 0$ )  $T_c$  é conhecida exatamente

te e é dada por <sup>(57-59)</sup>

$$[1+(q-1)e^{-qJ_x/k_B T_c}] [1+(q-1)e^{-qJ_y/k_B T_c}] = q \quad (3.2.3)$$

e o correspondente expoente crítico  $\nu$  é dado por (den Nijs <sup>(60)</sup>)

$$\nu_2 = \frac{2}{3} \{2+\pi/[\arccos(\frac{\sqrt{q}}{2}) - \pi]\}^{-1} \quad (3.2.4)$$

3) Os expoentes críticos de "crossover" associados às mudanças de uma para duas dimensões ( $\phi_{12}$ ) e de uma para três dimensões ( $\phi_{13}$ ), são aceitos normalmente como satisfazendo (veja Redner e Stanley <sup>(61)</sup>, de Oliveira e Tsallis <sup>(53)</sup> e referências contidas nestes dois artigos)

$$\phi_{12} = \phi_{13} = 1, \quad \forall q \quad (3.2.5)$$

4) Para o caso tri-dimensional isotrópico ( $J_x = J_y = J_z$ ),  $k_B T_c/qJ_x$  é dada por

$$3,52 \pm 0,05 \quad (q = 1) \\ \text{(veja Gaunt e Ruskin <sup>(62)</sup>)} \quad (3.2.6a)$$

$$2,2556 \pm 0,0002 \quad (q = 2) \\ \text{(veja Zinn-Justin <sup>(63)</sup>)} \quad (3.2.6b)$$

$$1,8169 \quad (q = 3) \\ \text{(veja Jensen e Mouritsen <sup>(64)</sup>)} \quad (3.2.6c)$$

onde o valor para  $q = 1$  foi obtido a partir de  $p_c = 0,247 \pm 0,003$

usando o isomorfismo de Kasteleyn e Fortuin <sup>(65)</sup> ( $p=1-e^{-J_x/k_B T}$ ) para percolação de ligações. Lembramos que para  $q=3$  a transição deve ser ligeiramente de primeira ordem .

Os expoentes críticos do comprimento de correlação são dados por

$$v_3 \cong \begin{cases} 0,88 & (q=1) & (3.2.7a) \\ \text{(Heerman e Stauffer <sup>(66)</sup>)} & & \\ 0,630 \pm 0,0015 & (q=2) & (3.2.7b) \\ \text{(Le Guillou e Zinn-Justin <sup>(67)</sup>)} & & \end{cases}$$

5) Para o expoente crítico de "crossover" associado à passagem de duas para três dimensões existem disponíveis os seguintes resultados:

$$\Phi_{23} \cong \begin{cases} 1,75 & (q=1) & (3.2.8a) \\ \text{(Redner e Stanley <sup>(61)</sup>)} & & \\ 7/4 \text{ (exato)} & (q=2) & (3.2.8b) \\ \text{(Liu e Stanley <sup>(68,69)</sup>;} & & \\ \text{Citteur e Kasteleyn <sup>(70,71)</sup>)} & & \end{cases}$$

Antes de apresentar o GR que usamos, definamos algumas variáveis convenientes (Tsallis e Levy <sup>(72)</sup>; Tsallis <sup>(73)</sup>)

$$t_\alpha \equiv \frac{1 - e^{-qJ_\alpha/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ_\alpha/k_B T}} \in [0, 1] \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.2.9a)$$

(que são conhecidas como transmissividades) e

$$s_{\alpha}^{(d)} \equiv s^{(d)}(t_{\alpha}) \equiv \frac{\ln[1+(q-1)h(d)t_{\alpha}]}{\ln[1+(q-1)h(d)]} \in [0,1] \quad (\alpha=x,y,z) \quad (3.2.9b)$$

onde (Tsallis e de Magalhães <sup>(74)</sup> e de Magalhães e Tsallis <sup>(56)</sup>) o número puro  $h(d)$  depende sensivelmente da dimensionalidade  $d$  e muito fracamente da rede particular  $d$ -dimensional usada ( $h(2)=1$  para a rede quadrada e  $h(3) = 0,377 \pm 0,044$  para a rede cúbica simples).

Consideremos a composição de transmissividades. Se nós temos um arranjo em série (ou em paralelo) de duas ligações com transmissividades  $t_1$  e  $t_2$  então as transmissividades equivalentes (respectivamente  $t_s$  e  $t_p$ ) são dadas por

$$t_s = t_1 t_2 \quad (\text{série}) \quad (3.2.10)$$

e

$$t_p^D = t_1^D t_2^D \quad (\text{paralelo}) \quad (3.2.11)$$

onde

$$t_i^D \equiv \frac{1 - t_i}{1 + (q-1)t_i} \quad (i=1,2,p) \quad (3.2.12)$$

(D entende-se por dual). Podemos também verificar que  $h = 1$  (rede quadrada) implica em

$$s^{(2)}(t^D) = 1 - s^{(2)}(t) \quad (3.2.13)$$

Podemos agora introduzir a transformação do GR. Estabelecemos a relação de recorrência renormalizando a célula indicada na Fig. 3.2.1g (que é equivalente a 3.2.1h) na célula dada pela Fig.

3.2.1d, onde  $b$ , como já tem sido mencionado, denota o tamanho da célula e coincide com o fator de escala linear.

A relação de recorrência pode ser obtida usando-se o Método de Corte-Colapso <sup>(72)</sup> (veja Apêndice A). Obtemos então

$$t_x^r = R_b(t_x, t_y, t_z; q) \quad (3.2.14)$$

onde  $R_b(t_x, t_y, t_z)$  é uma função dada pela razão entre dois polinômios (nas variáveis  $t_x, t_y, t_z$  para um dado  $q$ ) extensos (cada um tendo da ordem de 1600 termos). Abaixo apresentamos  $R_3(t_x, t_x, t_x; 2)$ , cuja isotropia reduz enormemente o tamanho de sua expressão.

$$\begin{aligned} R_3(t_x, t_x, t_x, 2) = & (27t_x^3 + 218t_x^5 + 1410t_x^7 + 7153t_x^9 + 28640t_x^{11} + 84805t_x^{13} \\ & + 183265t_x^{15} + 273834t_x^{17} + 263475t_x^{19} + 151028t_x^{21} + 46924t_x^{23} + 7221t_x^{25} \\ & + 546t_x^{27} + 29t_x^{29} + t_x^{31}) / (1 + 8t_x^2 + 64t_x^4 + 599t_x^6 + 3342t_x^8 + 14907t_x^{10} + 50759t_x^{12} \\ & + 130256t_x^{14} + 236165t_x^{16} + 284318t_x^{18} + 214054t_x^{20} + 91983t_x^{22} + 19772t_x^{24} \\ & + 2255t_x^{26} + 131t_x^{28} + 2t_x^{30}) . \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

Uma característica da função  $R_b(t_x, t_y, t_z; q)$  é que a soma dos coeficientes da função no numerador coincide com a correspondente soma no denominador e é dada por  $q^K$  (Tsallis e Levy <sup>(72)</sup>; Essam e Tsallis <sup>(75)</sup>) onde  $K$  é o número ciclomático dado por: número de ligações - número de sítios + 1 (para o grafo com dois terminais na Fig. 3.2.1h  $K$  é igual a 20). É importante notar que  $R_b(t_x, t_y, 0; q)$  reobtem a correspondente expressão bi-dimensional determinada por Oliveira e Tsallis <sup>(53)</sup>.

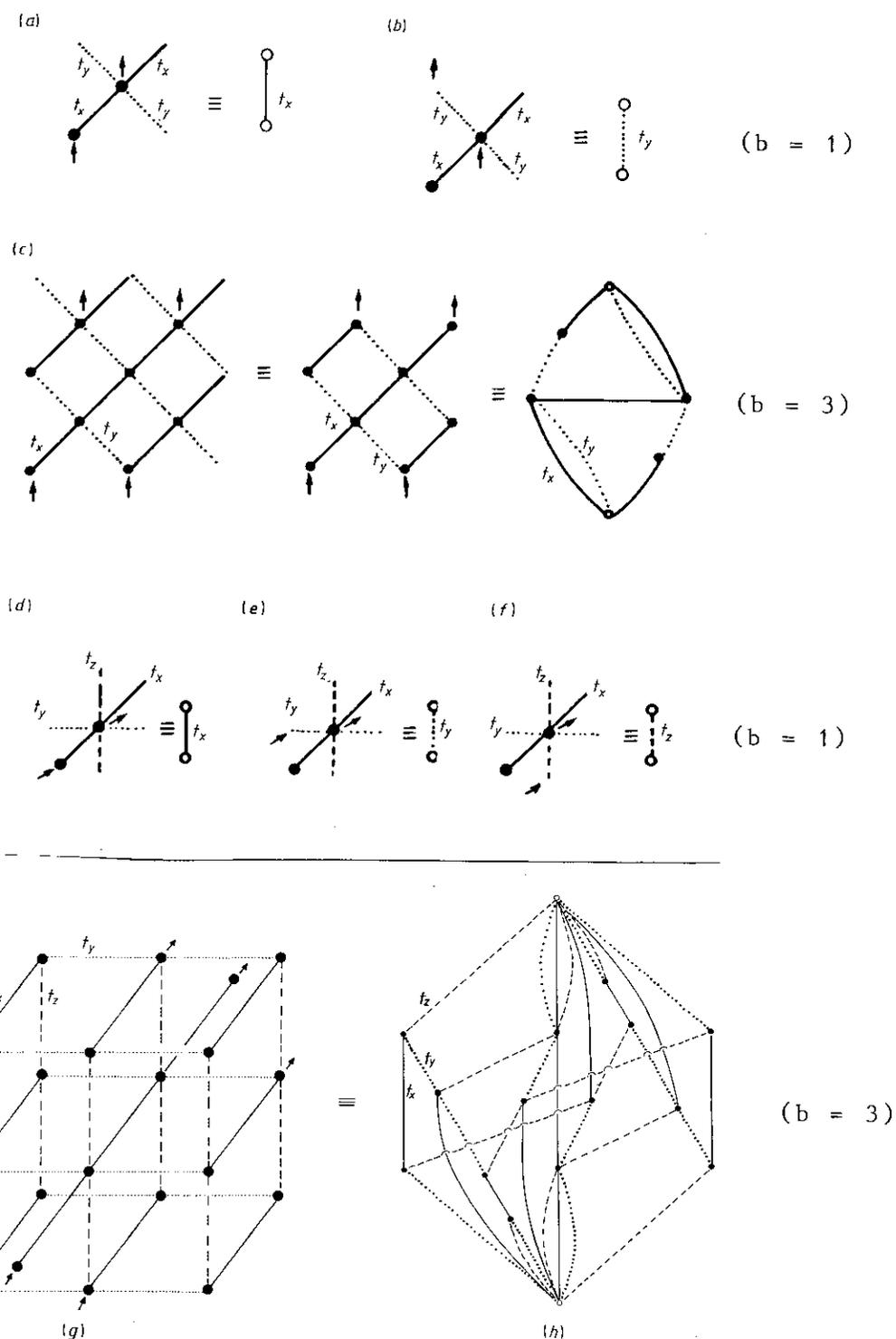


FIGURA 3.2.1 - Células usadas no GR e seus equivalentes grafos a dois terminais; as setas indicam as entradas e as saídas da célula; o e  $\bullet$  denotam respectivamente sítios terminais e internos da célula;  $t_x, t_y$  e  $t_z$  são as transmissividades associadas aos três eixos perpendiculares da célula. (a), (b) e (c) foram usadas por de Oliveira e Tsallis<sup>(53)</sup> para o caso bi-dimensional (a célula (c) é renormalizada na célula (a)). (d)-(h) corresponde ao caso tri-dimensional (a célula (g) ou equivalentemente a célula (h), é renormalizada na célula (d)). (g) é a extensão tri-dimensional da célula central em (c); (h) é a extensão tri-dimensional do grafo mais a direita em (c); devido a sua complexidade nós temos omitido a indicação da extensão tri-dimensional da célula mais a esquerda em (c).

As outras relações de recorrências são dadas pelas seguintes equações:

$$t'_y = R_b(t_y, t_z, t_x; q) \quad (3.2.16)$$

$$t'_z = R_b(t_z, t_x, t_y; q) \quad (3.2.17)$$

onde a equivalência entre os eixos  $x, y, z$  é levada em conta. Estudando o fluxo no espaço de parâmetros  $(t_x, t_y, t_z)$  determinado pelas eqs. (3.2.14), (3.2.16) e (3.2.17), para  $q$  fixo, obtemos os pontos fixos, a fronteira crítica que separa a fase paramagnética da ferromagnética, bem como os Jacobianos relevantes  $\partial(t'_x, t'_y, t'_z) / \partial(t_x, t_y, t_z)$  que por sua vez determinam os expoentes críticos  $\nu$  e  $\Phi$ .

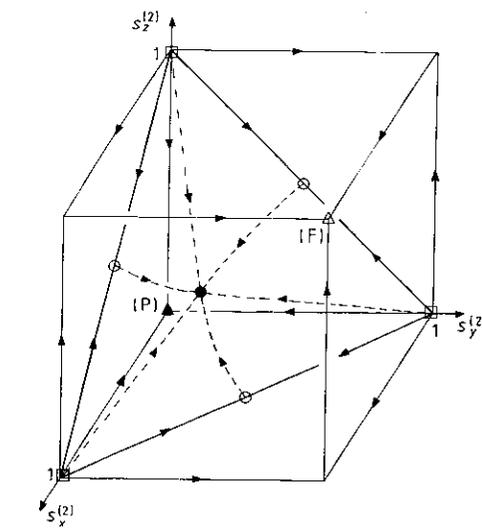
### 3.3 - RESULTADOS

Nossos resultados estão ilustrados na Fig. 3.3.1 abaixo.

FIGURA 3.3.1 - Superfície crítica separando as fases paramagnética e ferromagnética no espaço  $(s_x^{(2)}, s_y^{(2)}, s_z^{(2)})$ . As setas indicam o fluxo - GR. Os principais pontos fixos são indicados da seguinte maneira:  $\Delta$  (fase ferromagnética) e  $\blacktriangle$  (fase paramagnética) atraem respectivamente todos os pontos acima e abaixo da superfície crítica;  $\square$ ,  $\circ$  e  $\bullet$  são respectivamente os pontos fixos uni-dimensionais, bi-dimensionais e tri-dimensionais.

As eqs. (3.2.14), (3.2.16) e (3.2.17) fornecem os seguintes pontos fixos:

i)  $(s_x^{(2)}, s_y^{(2)}, s_z^{(2)}) = (0, 0, 0)$  e  $(1, 1, 1)$



que são completamente estáveis e correspondem respectivamente às fases paramagnética e ferromagnética; ii)  $(1,1,0)$ ,  $(1,0,1)$  e  $(0,1,1)$  são pontos fixos semi-estáveis e pertencem à região ferromagnética; iii)  $(1,0,0)$ ,  $(0,1,0)$  e  $(0,0,1)$  são completamente instáveis e correspondem ao caso uni-dimensional; iv)  $(1/2,1/2,0)$ ,  $(1/2,0,1/2)$  e  $(0,1/2,1/2)$  são pontos semi-estáveis e estão associados ao caso bi-dimensional isotrópico. v)  $(s_c^{(3)}, s_c^{(3)}, s_c^{(3)})$  é também semi-estável e corresponde ao caso tri-dimensional isotrópico ( $s_c^{(3)}$  depende ligeiramente de  $q$ ; veja Fig. 3.3.2).

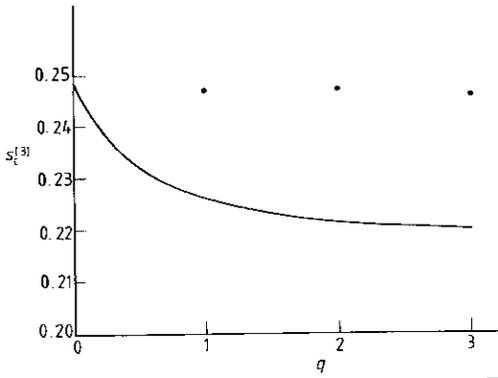


FIGURA 3.3.2 - Pontos críticos (GR) correspondentes ao modelo tri-dimensional isotrópico em função de  $q$ . Os pontos acima da curva contínua são resultados de séries:  $q = 1$  (Gaunt e Ruskin <sup>(62)</sup>)  $q = 2$  (Zinn-Justin <sup>(63)</sup>) e  $q = 3$  (Jensen e Mouritsen <sup>(64)</sup>).

A superfície crítica contém a linha  $s_x^{(2)} + s_y^{(2)} = 1$  para  $s_z^{(2)} = 0$  e as outras duas equivalentes, assim reproduzindo o resultado bi-dimensional exato expresso pela eq. (3.2.3). O desempenho do ponto fixo tri-dimensional obtido através do GR não é comparável ao correspondente ponto bi-dimensional. Enquanto neste caso a resposta exata é reproduzida pelo grupo, temos para  $d=3$ ,  $t_c = 0,2260$  ( $q=1$ ), em vez de  $0,247$  que corresponde à eq. (3.2.6a),  $t_c = 0,1949$  ( $q=2$ ), em vez de  $0,21811$  correspondente à eq. (3.2.6b) e  $t_c = 0,1750$  ( $q=3$ ) em vez de  $0,1966$  correspondente à eq. (3.2.6b). Os resultados obtidos para  $T_c$  encontram-se na Tabela 3.3.1 para  $q = 1,2,3$  e valores arbitrários da anisotropia  $J_y/J_x$  e  $J_z/J_x$ .

		$q = 1$										
$J_z/J_x$	$J_y/J_x$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
	0	0	0	0.5548	0.7112	0.8349	0.9421	1.0390	1.1287	1.2129	1.2928	1.3692
	0	0	0.5548	0.7112	0.8349	0.9421	1.0390	1.1287	1.2129	1.2928	1.3692	1.4427†
0.1	—	—	1.0592	1.2643	1.4255	1.5646	1.6896	1.8047	1.9125	2.0145	2.1117	2.2049
	—	—	1.0229	1.2104	1.3612	1.4934	1.6139	1.7260	1.8317	1.9322	2.0284	2.1210
0.2	—	—	—	1.4912	1.6689	1.8216	1.9584	2.0840	2.2013	2.3121	2.4174	2.5183
	—	—	—	1.4061	1.5636	1.7024	1.8293	1.9479	2.0601	2.1670	2.2696	2.3686
0.3	—	—	—	—	1.8592	2.0223	2.1682	2.3019	2.4266	2.5440	2.6557	2.7625
	—	—	—	—	1.7259	1.8690	2.0002	2.1231	2.2394	2.3506	2.4575	2.5607
0.4	—	—	—	—	—	2.1942	2.3476	2.4882	2.6190	2.7421	2.8591	2.9708
	—	—	—	—	—	2.0158	2.1504	2.2766	2.3963	2.5107	2.6209	2.7273
0.5	—	—	—	—	—	—	2.5078	2.6543	2.7905	2.9186	3.0402	3.1563
	—	—	—	—	—	—	2.2882	2.4172	2.5397	2.6569	2.7698	2.8789
0.6	—	—	—	—	—	—	—	2.8061	2.9472	3.0798	3.2055	3.3256
	—	—	—	—	—	—	—	2.5489	2.6739	2.7935	2.9088	3.0203
0.7	—	—	—	—	—	—	—	—	3.0927	3.2294	3.3590	3.4826
	—	—	—	—	—	—	—	—	2.8012	2.9232	3.0406	3.1543
0.8	—	—	—	—	—	—	—	—	—	3.3699	3.5031	3.6300
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	3.0472	3.1667	3.2824
0.9	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	3.6395	3.7696
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	3.2882	3.4057
1.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	3.9026
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	3.5250‡

		$q = 2$										
$J_z/J_x$	$J_y/J_x$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
	0	0	0	0.4529	0.5708	0.6644	0.7462	0.8205	0.8897	0.9550	1.0172	1.0769
	0	0	0.4529	0.5708	0.6644	0.7462	0.8205	0.8897	0.9550	1.0172	1.0769	1.1346†
0.1	—	—	0.7276	0.8578	0.9631	1.0555	1.1398	1.2183	1.2925	1.3631	1.4309	1.4964
	—	—	0.6993	0.8165	0.9141	1.0018	1.0828	1.1591	1.2316	1.3012	1.3682	1.4332
0.2	—	—	—	0.9967	1.1090	1.2075	1.2972	1.3806	1.4593	1.5341	1.6059	1.6751
	—	—	—	0.9323	1.0299	1.1184	1.2009	1.2792	1.3540	1.4261	1.4958	1.5634
0.3	—	—	—	—	1.2270	1.3304	1.4243	1.5116	1.5939	1.6721	1.7470	1.8192
	—	—	—	—	1.1275	1.2164	1.2998	1.3791	1.4553	1.5289	1.6002	1.6696
0.4	—	—	—	—	—	1.4379	1.5355	1.6262	1.7115	1.7926	1.8702	1.9449
	—	—	—	—	—	1.3058	1.3898	1.4700	1.5472	1.6219	1.6944	1.7652
0.5	—	—	—	—	—	—	1.6365	1.7301	1.8181	1.9018	1.9818	2.0588
	—	—	—	—	—	—	1.4746	1.5556	1.6336	1.7092	1.7828	1.8546

TABELA 3.3.1

(continua)

(b)		$q = 2$										
$J_z/J_x$	$J_y/J_x$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
0.6	—	—	—	—	—	—	—	1.8264	1.9169	2.0029	2.0851	2.1642
	—	—	—	—	—	—	—	1.6373	1.7162	1.7927	1.8671	1.9399
0.7	—	—	—	—	—	—	—	—	2.0098	2.0979	2.1821	2.2630
	—	—	—	—	—	—	—	—	1.7958	1.8732	1.9485	2.0221
0.8	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2.1880	2.2741	2.3568
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1.9513	2.0274	2.1019
0.9	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2.3619	2.4463
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2.1044	2.1796
1.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2.5323
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2.2556§

(c)		$q = 3$										
$J_z/J_x$	$J_y/J_x$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
0	0	0.4060	0.5066	0.5869	0.6572	0.7213	0.7813	0.8380	0.8923	0.9445	0.9950	
	0	0.4060	0.5066	0.5869	0.6572	0.7213	0.7813	0.8380	0.8923	0.9445	0.9950†	
0.1	—	0.6044	0.7072	0.7918	0.8670	0.9360	1.0008	1.0622	1.1211	1.1778	1.2327	
	—	0.5820	0.6749	0.7537	0.8251	0.8917	0.9548	1.0150	1.0730	1.1291	1.1836	
0.2	—	—	0.8144	0.9028	0.9814	1.0537	1.1214	1.1857	1.2472	1.3065	1.3638	
	—	—	0.7642	0.8413	0.9123	0.9791	1.0429	1.1043	1.1636	1.2213	1.2774	
0.3	—	—	—	0.9945	1.0761	1.1510	1.2212	1.2878	1.3515	1.4128	1.4721	
	—	—	—	0.9174	0.9878	1.0547	1.1187	1.1807	1.2408	1.2993	1.3565	
0.4	—	—	—	—	1.1602	1.2374	1.3098	1.3783	1.4439	1.5070	1.5681	
	—	—	—	—	1.0580	1.1249	1.1892	1.2515	1.3122	1.3714	1.4293	
0.5	—	—	—	—	—	1.3168	1.3911	1.4614	1.5287	1.5934	1.6560	
	—	—	—	—	—	1.1918	1.2564	1.3191	1.3802	1.4399	1.4985	
0.6	—	—	—	—	—	—	1.4671	1.5391	1.6080	1.6742	1.7382	
	—	—	—	—	—	—	1.3213	1.3843	1.4459	1.5061	1.5652	
0.7	—	—	—	—	—	—	—	1.6127	1.6830	1.7506	1.8159	
	—	—	—	—	—	—	—	1.4478	1.5098	1.5705	1.6301	
0.8	—	—	—	—	—	—	—	—	1.7546	1.8235	1.8900	
	—	—	—	—	—	—	—	—	1.5723	1.6335	1.6936	
0.9	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1.8936	1.9613	
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1.6952	1.7557	
1.0	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2.0300
	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	1.8169

TABELA 3.3.1 - Valores da temperatura crítica  $k_{BC} T/qJ_x$  para o modelo de Potts de q-estados tri-dimensional anisotrópico. Os números superiores são fornecidos diretamente pelo GR usado. Os inferiores são obtidos a partir de um procedimento de extrapolação. † indica resultados exatos (veja por exemplo Wu<sup>(36)</sup>) para o caso bi-dimensional isotrópico; ‡, § e || são resultados de séries (veja texto e Fig. 3.3.2) para o caso tri-dimensional isotrópico.

O Jacobiano calculado no ponto fixo uni-dimensional é completamente degenerado com auto-valor  $\lambda^{(1)} = 3$ . Pode ser mostrado que  $\lambda^{(1)} = 2b-1$  para um valor arbitrário de  $b$ , portanto  $v_1 = \lim_{b \rightarrow \infty} \ln b / \ln(2b-1) = 1$  reobtendo assim o valor exato dado pela eq. (3.2.2). A degenerescência deste Jacobiano implica que ambos expoentes de "crossover"  $\Phi_{12}$  e  $\Phi_{13}$ , associados respectivamente às passagens  $d = 1 \leftrightarrow d=2$  e  $d=1 \leftrightarrow d=3$ , são iguais entre si e iguais a um, confirmando a equação (3.2.5).

Consideremos o cálculo dos Jacobianos para os pontos fixos bi-dimensionais. Analisemos, por exemplo, o ponto fixo  $(s_x^{(2)}, s_y^{(2)}, s_z^{(2)}) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$  (os outros são análogos); para este ponto temos

$$\begin{pmatrix} a(q) & b(q) & c(q) \\ b(q) & a(q) & c(q) \\ 0 & 0 & d(q) \end{pmatrix} \quad (3.3.1)$$

cujos auto-valores são dados por:

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(2)} = a(q) + b(q) = & (2025 + 11160\sqrt{q} + 26580q + 35792q^{3/2} + 29852q^2 \\ & + 15816q^{5/2} + 5207q^3 + 976q^{7/2} + 80q^4) / (2025 + 8820\sqrt{q} + 16804q \\ & + 18290q^{3/2} + 12444q^2 + 5424q^{5/2} + 1481q^3 + 232q^{7/2} + 16q^4) \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

$$\sim \begin{cases} 1 + \frac{52}{45} \sqrt{q} & , \quad q \rightarrow 0 \\ 5(1 - \frac{23}{10} \frac{1}{\sqrt{q}}) & , \quad q \rightarrow \infty \end{cases} \quad (3.3.2a) \quad (3.3.2b)$$



(veja Figs. 3.3.3 e 3.3.4 e Tab. 3.3.2).

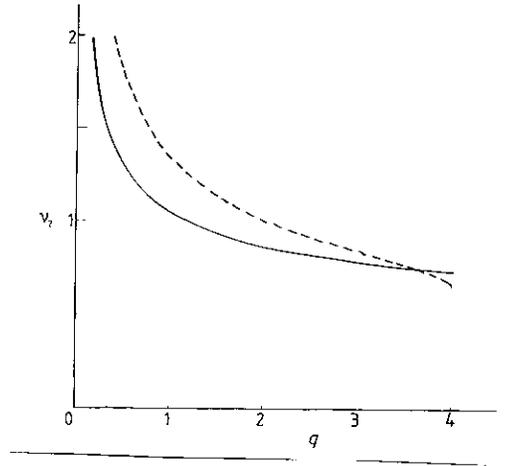


FIGURA 3.3.3 - Diagrama mostrando a dependência do expoente crítico  $\nu_2$  do comprimento de correlação ( $d=2$ ) com a variável  $q$ : a linha contínua representa os dados obtidos através do GR. Cada ponto desta curva deve ser multiplicado pelo fator  $\ln 3/\ln 2$ ; a linha tracejada é a resposta exata de den Nijs <sup>(60)</sup>.

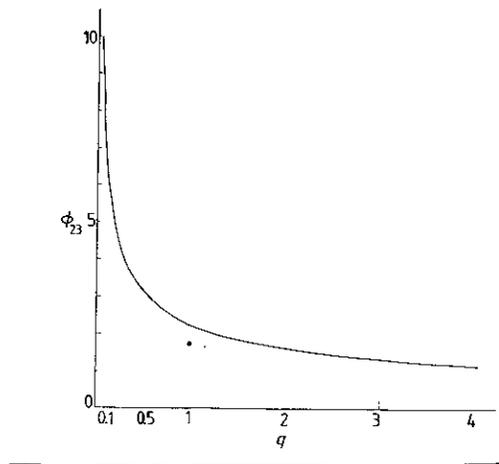


FIGURA 3.3.4 - Diagrama do expoente crítico de "crossover"  $\phi_{23}$  ( $d=2 \Leftrightarrow d=3$ ) em função de  $q$ . O ponto  $\bullet$  é resultado de séries (Redner e Stanley <sup>(61)</sup>) e  $\circ$  é resultado exato (Liu e Stanley <sup>(68,69)</sup>; Citteur e Kasteleyn <sup>(70,71)</sup>).

		$q \rightarrow 0$	$q=1$	$q=2$	$q=3$	$q=4$	
$d=1$	$t_c^{(1)}$	RG ( $\nabla b$ )	1	1	1	1	
		exact	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	
	$\nu_1$	RG ( $\nabla b$ )	$\frac{\ln b}{\ln(2b-1)}$	$\frac{\ln b}{\ln(2b-1)}$	$\frac{\ln b}{\ln(2b-1)}$	$\frac{\ln b}{\ln(2b-1)}$	
		exact	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	
	$\phi_{1d}$	RG ( $\nabla b$ )	1	1	1	1	
		exact	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	1 <sup>a</sup>	
$d=2$	$t_c^{(2)}$	RG ( $\nabla b$ )	$\sim 1-\sqrt{q}$	1/2	$\sqrt{2}-1$	$1/(\sqrt{3}+1)$	1/3
		exact	$\sim 1-\sqrt{q^a}$	1/2 <sup>a</sup>	$\sqrt{2}-1^a$	$1/(\sqrt{3}+1)^a$	1/3 <sup>a</sup>
	$\nu_2$	RG ( $b=2$ )	$\frac{45 \ln 2}{52\sqrt{q}} \approx \frac{0.600}{\sqrt{q}}$	1.042	0.864	0.785	0.738
		exact	$\frac{\pi}{3\sqrt{q}} \approx \frac{1.047^b}{\sqrt{q}}$	$\frac{4}{3} \approx 1.333^b$	1 <sup>b</sup>	$\frac{5}{6} \approx 0.833^b$	$\frac{2}{3} \approx 0.667^b$
	$\phi_{23}$	RG ( $b=2$ )	$\approx \frac{2}{\sqrt{q}}$	2.258	1.637	1.346	1.163
		exact or series	—	1.75 <sup>c</sup>	1.75 <sup>d</sup>	—	—
$d=3$	$t_c^{(3)}$	RG ( $b=2$ )	$\approx 0.294-0.11q$	0.2260	0.1949	0.1750	—
		series	—	0.247 <sup>e</sup>	0.21811 <sup>f</sup>	0.1966 <sup>g</sup>	—
	$\nu_3$	RG ( $b=2$ )	$\approx 1.105-0.66q$	0.756	0.657	0.606	—
		series	—	0.88 <sup>h</sup>	0.630 <sup>i</sup>	—	—

TABELA 3.3.2 - Nesta tabela apresentamos, para vários valores de  $q$ , o ponto crítico  $t_c$  e os expoentes críticos  $\nu$  e  $\Phi$  para modelos  $d$ -dimensionais isotrópicos. (a) Wu <sup>(36)</sup> e referências contidas neste artigo; den Nijs M.P.M. <sup>(60)</sup>; (c) Redner e Stanley <sup>(61)</sup>; (d) Liu e Stanley <sup>(68,69)</sup>, Citteur e Kasteleyn <sup>(70,71)</sup>; (e) Gaunt e Ruskin <sup>(62)</sup>; (f) Zinn-Justin <sup>(63)</sup>; (i) Le Guillou e Zinn-Justin <sup>(67)</sup>.

O Jacobiano calculado para o ponto fixo tri-dimensional

$(t_x = t_y = t_z = t_c^{(3)}(q))$  é dado pela seguinte expressão:

$$\begin{pmatrix} e(q) & f(q) & f(q) \\ f(q) & e(q) & f(q) \\ f(q) & f(q) & e(q) \end{pmatrix} \quad (3.3.4)$$

cujos auto-valores são dados por

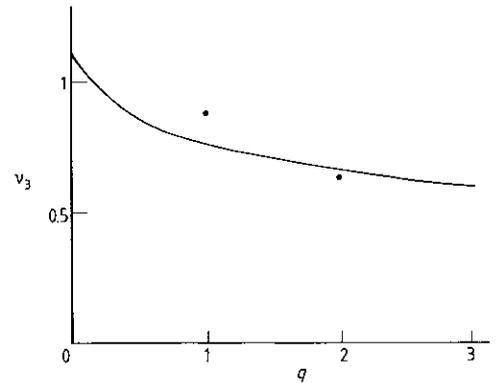
$$\lambda_1^{(3)} = e(q) + 2f(q) \quad (3.3.5)$$

e

$$\lambda_2^{(3)} = \lambda_3^{(3)} = e(q) - f(q) \quad (3.3.6)$$

com os respectivos auto-vetores  $(1,1,1)$  e qualquer vetor perpendicular a  $(1,1,1)$ . Verificamos que  $\lambda_1^{(3)}(q) \geq 1 \geq \lambda_2^{(3)}(q) > 0, \forall q \geq 0$ . O correspondente expoente crítico (aproximado) é dado por  $\nu_3 = \ln 3 / \ln \lambda_1^{(3)}$  (veja Fig. 3.3.5 e Tabela 3.3.2).  $\lambda_2^{(3)}(q)$  aumenta monotonicamente de aproximadamente zero até um quando  $q$  varia de zero a infinito.

FIGURA 3.3.5 - Diagrama mostrando a dependência do expoente crítico  $\nu_3$  do comprimento de correlação ( $d=3$ ) com a variável  $q$ : a linha contínua representa os dados obtidos através do GR. Cada ponto desta curva deve ser multiplicado pelo fator  $\ln 3 / \ln 2$ ; os pontos  $\bullet$  são resultados de séries: Heerman e Stauffer <sup>(66)</sup> para  $q=1$  e Le Guillou e Zinn-Justin <sup>(67)</sup> para  $q = 2$ .



### 3.4 - MÉTODO DE EXTRAPOLAÇÃO PARA O PONTO CRÍTICO

Nesta seção descrevemos um procedimento "ad hoc" para extrapolar a temperatura crítica, para um valor arbitrário de  $q$ . Esta extrapolação beneficia-se do fato de que os resultados fornecidos pelo GR para o caso bi-dimensional anisotrópico coincidem com a fronteira crítica exata para todo valor de  $q$  e que para o modelo tri-dimensional isotrópico, os resultados não são ruins (pelo menos para  $q = 1, 2, 3$ , onde a comparação com outros resultados é possível). Ela consiste essencialmente em "puxar" o centro  $(s_x^{(2)} = s_y^{(2)} = s_z^{(2)} = s_c^{(2)})$  da superfície crítica no espaço  $(s_x^{(2)}, s_y^{(2)}, s_z^{(2)})$  (veja Fig. 3.3.1) até ele coincidir (por imposi -



Este ponto e a trissetriz determinam um único plano cuja equação é dada por

$$\frac{s_y - s_z}{s_x - s_z} = \frac{s_y^p - s_z^p}{s_x^p - s_z^p} \equiv g \in [0, 1] \quad (3.4.1)$$

Este plano e o plano dado pela seguinte equação

$$s_x + s_y + s_z = 1 \quad (3.4.2)$$

(o qual contém as três linhas críticas bi-dimensionais exatas, como por exemplo,  $s_x + s_y = 1$  para  $s_z = 0$ ) determinam uma única linha reta. Esta linha corta o plano  $s_z = 0$  no ponto  $(s_x^{(z)}, s_y^{(z)}, 0)$  e o plano  $s_x = 0$  no ponto  $(0, s_y^{(x)}, s_z^{(x)})$  onde

$$s_x^{(z)} = 1/(1+g) \quad (3.4.3a)$$

$$s_y^{(z)} = g/(1+g) \quad (3.4.3b)$$

$$s_y^{(x)} = (1-g)/(2-g) \quad (3.4.3c)$$

$$s_z^{(x)} = 1/(2-g) \quad (3.4.3d)$$

Esta linha também corta a trissetriz no ponto T com coordenadas  $(1/3, 1/3, 1/3)$ . Se consideramos agora o triângulo determinado pelos pontos  $(0, 0, 0)$ ,  $(s_x^{(z)}, s_y^{(z)}, 0)$  e  $(0, s_y^{(x)}, s_z^{(x)})$  (veja Figura 3.4.2), imediatamente obtemos que

$$r_1 = +[(1/3)^2 + (1/3 - s_y^{(x)})^2 + (1/3 - s_z^{(x)})^2]^{1/2} \quad (3.4.4a)$$

$$r_2 = +[(1/3 - s_x^{(z)})^2 + (1/3 - s_y^{(z)})^2 + (1/3)^2]^{1/2} \quad (3.4.4b)$$

onde  $r_1$  e  $r_2$  são definidos na Fig. 3.4.2 ( $r_1$  e  $r_2$ , respectivamente correspondem a  $(s_x^{(z)}, s_y^{(z)}, 0)$  e  $(0, s_y^{(x)}, s_z^{(x)})$ ). O ângulo  $\theta$  definido na Fig. 3.4.2 é calculado através da seguinte equação

$$\cos \theta = \frac{s_x^p + s_y^p + s_z^p}{\sqrt{3} s^p} \quad (3.4.5)$$

onde

$$s^p \equiv + \sqrt{(s_x^p)^2 + (s_y^p)^2 + (s_z^p)^2} \quad (3.4.6)$$

A grandeza  $r^p$  definida na Fig. 3.4.2 é dada pela seguinte expressão:

$$r^p = - \frac{\text{tg} \theta}{\sqrt{3}} \in [-r_2, r_1] \quad (3.4.7)$$

Obviamente podemos ter que  $s^p \leq ((1/3) + (r^p)^2)^{1/2}$ . Chamemos  $s^{\text{ex}}$  o valor extrapolado obtido a partir de  $s^p$  através da seguinte equação

$$s^{\text{ex}} = s^p [1 + F(r^p)] \quad (3.4.8)$$

onde a função extrapolante  $F(r^p)$  deve satisfazer às seguintes condições:

$$F(r_1) = F(-r_2) = 0 \quad (3.4.9a)$$

$$F(0) = \frac{\sqrt{3} s_0}{s^p} - 1 \quad (3.4.9b)$$

$$F(r) \text{ é máxima para } r = 0 \quad (3.4.9c)$$

O polinômio mais simples satisfazendo estas condições é dado pela seguinte expressão:

$$F(r) = F(0) [1 - Ar^2 - Br^3] \quad (3.4.10)$$

onde

$$A \equiv \frac{r_1^3 + r_2^3}{r_1^2 r_2^3 + r_1^3 r_2^2} \quad (3.4.11a)$$

e

$$B \equiv \frac{1 - Ar_1^2}{r_1^3} \quad (3.4.11b)$$

Finalmente obtemos as coordenadas do ponto extrapolado através de

$$s_{\alpha}^{\text{ex}} = \frac{s_{\alpha}^{\text{ex}}}{s_{\alpha}^{\text{P}}} s_{\alpha}^{\text{P}} \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.4.12)$$

A despeito da aparente complexidade do método de extrapolação devemos dizer que sua implementação computacional é muito simples. Os passos operacionais são desenvolvidos da seguinte maneira: (i) dado  $(s_x^{\text{P}}, s_y^{\text{P}}, s_z^{\text{P}})$  (o ponto que queremos extrapolar),  $g$  é calculado através da eq. (3.4.1) e  $s_x^{(z)}, s_y^{(z)}, s_y^{(x)}, s_z^{(x)}$  através das eqs. (3.4.3), a partir dos quais obtemos  $r_1$  e  $r_2$  através das eqs. (3.4.4). O conhecimento de  $r_1$  e  $r_2$  determinam  $A$  e  $B$  pelas eqs. (3.4.11); (ii)  $(s_x^{\text{P}}, s_y^{\text{P}}, s_z^{\text{P}})$  determinam  $\theta$  e  $s^{\text{P}}$  através das eqs. (3.4.5) e (3.4.6) com as quais obtemos  $r^{\text{P}}$  com a eq. (3.4.7); (iii)  $s_0$  (extraído da literatura) e  $s^{\text{P}}$  determinam  $F(0)$  através da eq. (3.4.9b); (iv) com o conhecimento de  $A, B, r^{\text{P}}$  e  $F(0)$  calculamos  $F(r^{\text{P}})$  através da eq. (3.4.10) de onde obtemos  $s^{\text{ex}}$  pela equa

ção (3.4.8). Finalmente  $(s_x^{ex}, s_y^{ex}, s_z^{ex})$  é determinado através da eq. (3.4.12).

Os resultados obtidos através do uso do algoritmo de extrapolação, são indicados na Tabela 3.3.1. Com a finalidade de testar a eficiência desta aproximação temos comparado nossos resultados com cálculos disponíveis na literatura (de séries) para  $q = 1$  (veja Fig. 3.4.3a) e  $q = 2$  (veja Fig. 3.4.3b) para os casos particulares onde  $0 \leq J_z/J_x \leq J_y/J_x = 1$ . Podemos observar que a concordância é muito satisfatória (a discrepância na variável  $t$  é sempre menor que 0,01).

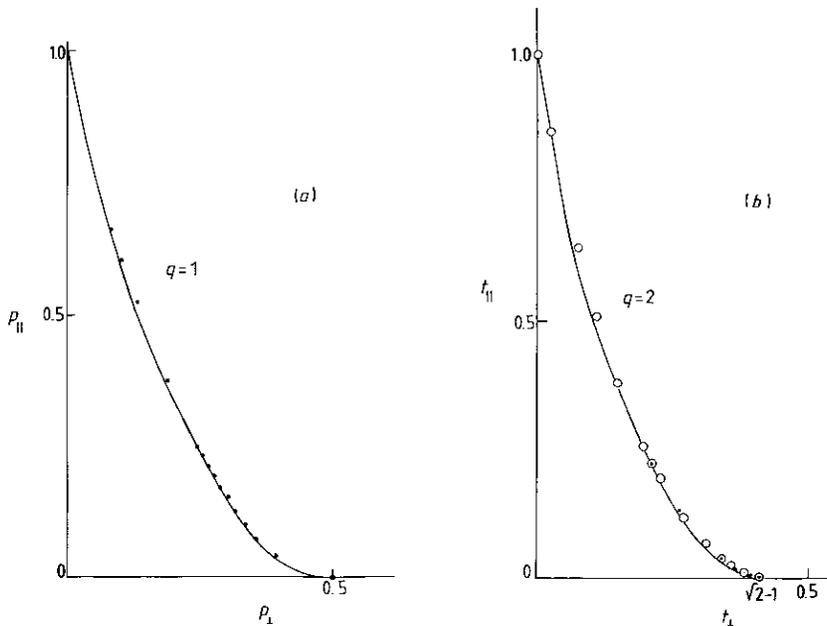


FIGURA 3.4.3 - A curva contínua representa os resultados extrapolados para os pontos críticos correspondentes ao modelo tridimensional anisotrópico onde duas das constantes de acoplamento (digamos  $t_x$  e  $t_y$ ) são iguais entre si (definida por  $J_{\perp}$ ) e a terceira (definida por  $J_{\parallel}$ ) sendo eventualmente diferente. Temos os casos isotrópicos,  $d=1$ ,  $d=2$  e  $d=3$ , respectivamente na ordenada, abcissa e na bissetriz. (a) ( $q=1$ ) os pontos são resultados de séries (Redner e Stanley <sup>(61)</sup>); (b) ( $q=2$ ) ambos, pontos (Oitmaa e Enting <sup>(79)</sup>) e círculos (Paul e Stanley <sup>(80)</sup>) são resultados de séries.

### 3.5 - CONCLUSÕES

Discutimos, dentro do contexto do Grupo de Renormalização no espaço real, o ferromagneto de Potts de  $q$ -estados na rede cúbica simples, completamente anisotrópica (arbitrários  $J_x, J_y$  e  $J_z$ ). Analisamos, para a região onde a transição é de segunda ordem ( $\forall q$  para  $d=1$ ,  $q \leq 4$  para  $d=2$  e  $q \leq q_c^{(3)} \approx 3$  para  $d=3$ ), a dependência em  $q$  da temperatura crítica  $T_c$ , os expoentes críticos  $\nu_1, \nu_2$  e  $\nu_3$  do comprimento de correlação associados respectivamente a  $d=1, 2$  e  $3$  e os expoentes críticos de "crossover"  $\Phi_{1d}$  ( $d=1 \longleftrightarrow d>1$ ) e  $\Phi_{23}$  ( $d=2 \longleftrightarrow d=3$ ).

O nosso Grupo de Renormalização reproduz uma quantidade considerável de resultados exatos conhecidos tais como  $t_c^{(1)} = \nu_1 = \Phi_{1d} = 1$ ,  $\forall q$  se  $d=1$ ,  $t_c = 1/(\sqrt{q}+1)$  para  $d=2$ ; etc; também obtemos no limite  $q \rightarrow 0$ , o comportamento assintótico correto, ou seja,  $\nu_2 \propto 1/\sqrt{q}$ . Sempre que nossos resultados numéricos não coincidem com valores disponíveis exatos ou de séries, as discrepâncias existentes são aceitáveis. Além disso, as classes de universalidade que encontramos são as comumente esperadas, isto é, a de três dimensões para todos os valores de  $J_x > 0$ ,  $J_y > 0$  e  $J_z > 0$ ; a classe de universalidade bi-dimensional quando um (e somente um) dos três  $J$ 's é zero, a classe uni-dimensional quando um e somente um dos três  $J$ 's é diferente de zero. O quadro geral inspira razoável confiança, o que nos leva a acreditar que no limite  $q \rightarrow 0$  os resultados para  $d=3$ ,  $\Phi_{23} \propto 1/\sqrt{q}$ ,  $t_c^{(3)}(q) \sim t_c^{(3)}(0) + t_c^{(3)'}(0)q$  e  $\nu_3(q) \sim \nu_3(0) + \nu_3'(0)q$  (com valores finitos para  $t_c^{(3)}(0), t_c^{(3)'}(0), \nu_3(0)$  e  $\nu_3'(0)$ ) são corretos.

Desenvolvemos também um procedimento de extrapolação para a temperatura crítica  $T_c$  que provou ser muito satisfatório, sempre que a comparação com outros resultados disponíveis (tipicamen

te de séries) era possível, a saber, para os casos onde  $0 \leq J_z/J_x \leq J_y/J_x = 1$  e  $0 \leq J_y/J_x = J_z/J_x \leq 1$  para  $q = 1$  e  $2$ . Através deste procedimento calculamos  $T_c$  para várias razões arbitrárias de  $J_y/J_x$  e  $J_z/J_x$  e  $q = 1, 2, 3$  (os resultados para  $q=3$ , provavelmente não são afetados pelo fato de que a transição deve ser provavelmente de primeira ordem). Uma teoria que ao aumentar o espaço de parâmetros tivesse sucesso quantitativo na previsão da existência de uma transição de fase de primeira ordem seria bem vinda. Se alternativamente o presente Grupo de Renormalização é entendido como se referindo à rede hierárquica definida pela Fig. 3.2.1h, então todos os resultados que ele fornece são exatos para  $q \geq 0$ .

## CAPÍTULO IV

### PROBLEMAS DE INTERFACE EM FERROMAGNETO DE POTTS: DIAGRAMA DE FASES E EXPOENTES CRÍTICOS

#### 4.1 - INTRODUÇÃO

Fenômenos críticos associados com magnetismo de superfície ou de interfaces, têm recentemente levantado um interesse crescente, devido tanto a seu interesse teórico (veja Binder <sup>(23)</sup> para uma revisão recente) quanto experimental (Pierce e Meier <sup>(81)</sup>, Alvarado et al. <sup>(82,83)</sup>, Klebanoff et al. <sup>(84)</sup>). Um dos modelos mais simples que pode ser assumido é o ferromagneto de Potts de  $q$ -estados em rede cúbica simples semi-infinita, em que as constantes de acoplamento da superfície livre e do volume não são necessariamente iguais. Este modelo já tem recebido alguma atenção no contexto da teoria de Grupo de Renormalização (GR) no espaço real (Lipowsky <sup>(85,86)</sup>, Lam e Zang <sup>(87)</sup>, Tsallis e Sarmiento <sup>(88)</sup>). Entretanto os trabalhos destes autores evidenciam mais os aspectos qualitativos do problema. Recentemente Costa et al. <sup>(89)</sup> (daqui para frente referido como artigo I) usou para o mesmo problema, a célula mais sofisticada, indicada na Fig. 3.2.1-g, obtendo resultados quantitativos satisfatórios.

No presente trabalho <sup>(90)</sup> assumimos inicialmente que o sistema é constituído por dois volumes cúbicos simples semi-infinitos (não necessariamente iguais) separados por uma interface

$(1,0,0)$  com uma constante de acoplamento que pode ser diferente das dos volumes. Este modelo contém o problema da superfície livre (tratado no artigo I) bem como o problema do defeito planar (uma anomalia planar em um sistema homogêneo) como casos particulares. Todos os cálculos deste trabalho recuperam os resultados do artigo I, se um dos volumes semi-infinitos é assumido como sendo o vácuo.

Em uma segunda etapa discutimos o que acontece quando diluimos as ligações da superfície. Isto enriquece o problema como mostrado por Kaneyoshi et al. <sup>(91)</sup> no estudo do modelo de Ising ferromagnético em meio semi-infinito, onde eles usaram uma teoria de campo médio. O problema de estudar a diluição das ligações da interface, do sistema que estamos descrevendo foi muito recentemente discutido por Cavalcanti e Tsallis <sup>(92)</sup>. Aqui nós re-discutimos o problema (para  $q = 1$ , e  $2$ ) para o caso da superfície livre (artigo I) com o uso de células mais eficientes.

Este capítulo está organizado da seguinte maneira: na Seção II introduzimos o modelo e o formalismo para o caso puro; na Seção III apresentamos os resultados (evolução com  $q$  do diagrama de fases e expoentes críticos) para o caso puro; na Seção IV apresentamos o caso diluído com seus resultados e finalmente concluimos na Seção V.

## 4.2 - MODELO E FORMALISMO (CASO PURO)

Consideremos um modelo de Potts de  $q$ -estados cuja Hamiltoniana é dada pela seguinte equação

$$H = -q \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \quad (\sigma_i = 1, 2, \dots, q, \forall i) \quad (4.2.1)$$

onde  $\langle i,j \rangle$  varre todos os pares de sítios primeiros vizinhos de dois volumes cúbicos simples semi-infinitos separados por uma interface  $(1,0,0)$  (rede quadrada).  $J_{ij}$  é igual a  $J_1$  em um volume semi-infinito,  $J_2$  no outro e  $J_s$  na interface ( $J_1, J_2, J_s \geq 0$ ). Devido a sua simplicidade de manipulação mais uma vez trabalharemos com as transmissividades  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_s$  (veja eq. (3.2.9a)) associadas respectivamente a  $J_1$ ,  $J_2$  e  $J_s$ . A seguinte definição também nos será útil

$$\Delta \equiv \frac{J_s}{J_1} - 1 = \frac{\ln \left[ \frac{1+(q-1)t_s}{1-t_s} \right]}{\ln \left[ \frac{1+(q-1)t_1}{1-t_1} \right]} - 1 \quad (4.2.2)$$

onde temos usado a eq. (3.2.9a).

Para estabelecer as relações recursivas, renormalizamos a célula de dois terminais indicada na Fig. 4.2.1 em uma única ligação (com transmissividade renormalizada) de tal maneira que a função de correlação é preservada.

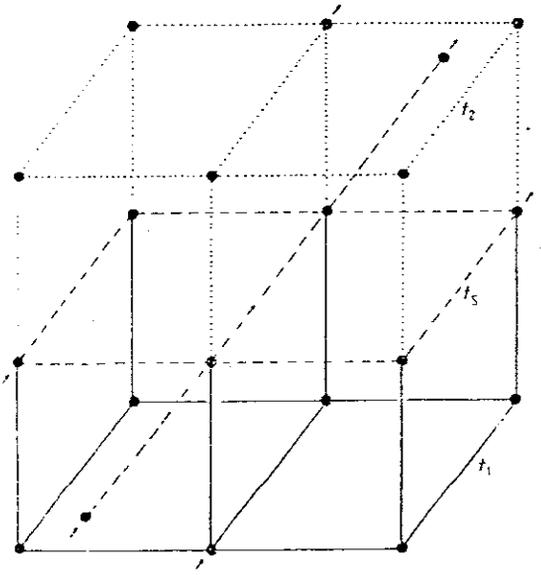


FIGURA 4.2.1 - Célula usada na transformação do GR para a interface  $(1,0,0)$  que se situa entre duas redes cúbicas simples semi-infinitas. As ligações cheias (pontilhadas) representam as constantes de acoplamento  $t_1$  ( $t_2$ ) do volume 1 (volume 2). As ligações tracejadas representam as constantes de acoplamento da interface. As setas indicam os sítios terminais da célula.

A recorrência para o primeiro volume é obtida associando-se  $t_1$  a cada ligação da célula dada pela Fig. 4.2.1 e é dada pela seguinte equação

$$t_1' = f(t_1) \quad (4.2.3)$$

onde a função  $f(t_1)$  (muito extensa para ser reproduzida aqui) foi calculada através do uso do Método Corte-colapso (BCM; Ref. (72)). Analogamente obtemos para o segundo volume a seguinte equação

$$t_2' = f(t_2) \quad (4.2.4)$$

Para encontrar a relação de recorrência para a transmissividade da interface, associamos  $t_1$ ,  $t_2$  e  $t_s$  à célula precisamente como indicado na Fig. 4.2.1, e obtemos (mais uma vez através do BCM) a seguinte equação para  $t_s'$

$$t_s' = g(t_1, t_2, t_s) \quad (4.2.5)$$

onde a função  $g$  é uma razão entre dois polinômios em  $(t_1, t_2, t_s)$ , cada um deles contendo da ordem de dois mil termos para um dado  $q$  arbitrário. Verificamos também que  $g(t, t, t) = f(t)$ ,  $\forall t$ .

O conjunto das eqs. (4.2.3)-(4.2.5) fecha formalmente o procedimento de GR e determina o diagrama de fases e os vários expoentes críticos, do comprimento de correlação e de "crossover" (respectivamente denotados por  $\nu$  e  $\Phi$ ). O caso particular  $t_2 = 0$  (ou equivalentemente  $t_1 = 0$ ) recupera precisamente o GR construído no artigo I.

### 4.3 - RESULTADOS

Antes de entrarmos na discussão dos resultados obtidos pelo presente GR, vamos fazer algumas considerações gerais. A expectativa intuitiva para o presente sistema é de que várias transições de fase podem ocorrer. Duas delas correspondem às transições de fase usuais para-ferromagnética de um volume, que ocorre respectivamente em  $T_c^{3D(1)} = n^{3D}(q)J_1/k_B$  (volume 1) e  $T_c^{3D(2)} = n^{3D}(q)J_2/k_B$ , onde  $n^{3D}(q)$  é um número puro (exemplo,  $n^{3D(2)} = 4,511$  <sup>(63)</sup> correspondente ao modelo de Ising). Para  $\Delta$  acima de um valor crítico  $\Delta_c$  (que depende de  $q$  e  $J_2/J_1$ ), espera-se que a interface retenha a ordem ferromagnética mesmo quando os dois volumes tenham perdido as suas, mais precisamente para temperaturas até um valor crítico  $T_c^S$  que depende de  $q$ ,  $J_s/J_1$  e  $J_2/J_1$ , e que satisfaz  $T_c^S \geq T_c^{2D} \equiv n^{2D}(q)J_s/k_B$ , onde  $n^{2D}(q)$  é um número puro (exemplo,  $n^{2D(2)} = 2,269$  <sup>(36)</sup>).  $T_c^S$  aproxima-se de  $T_c^{2D}$  se e somente se  $J_s$  é muito maior do que tanto  $J_1$  como  $J_2$ . Um argumento de campo médio para o modelo de Ising ( $4J_s + J_1 + J_2 = 6J_1$ , convencionalmente assumindo  $J_2 \leq J_1$ ) fornece  $\Delta_c = (1 - J_2/J_1)/4$ . Isto implica em que  $\Delta_c = 1/4$  ( $\Delta_c = 0$ ) para o problema da superfície livre (defeito planar) que corresponde a  $J_2 = 0$  ( $J_2 = J_1$ ). Os resultados de GR que apresentamos agora são diferentes e a priori mais confiáveis.

O diagrama de fluxo para  $q = 2$  é apresentado na Fig. 4.3.1. Ele ilustra qualitativamente o diagrama de fase geral obtido para um valor de  $q$  arbitrário. Ele contém os seguintes resultados:

- i) cinco fases diferentes, respectivamente caracterizadas pelos pontos fixos completamente estáveis, a saber,  $(t_1, t_2, t_s) = (0, 0, 0)$

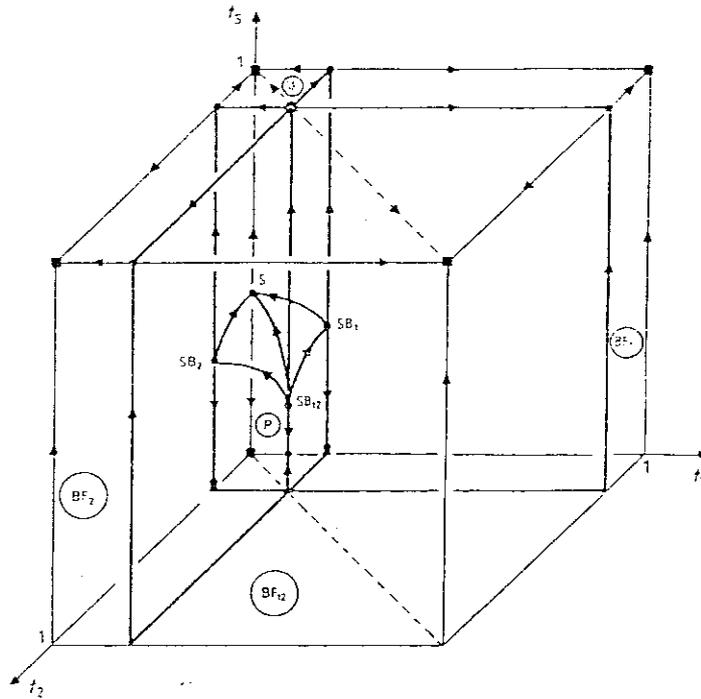


FIGURA 4.3.1 - Diagrama de fluxo no espaço  $(t_1, t_2, t_s)$  para  $q = 2$ . ■ representa pontos fixos triviais (completamente estáveis); ● representa pontos fixos multicríticos e críticos (semi-estáveis) ( $SB_1, SB_2, S$ , etc); ○ representa o ponto multicrítico de maior ordem ( $SB_{12}$ ) (completamente instável). As cinco fases possíveis estão indicadas da seguinte maneira: as duas fases ferromagnéticas de volumes simples ( $BF_1$  e  $BF_2$ ), a fase ferromagnética de duplo volume ( $BF_{12}$ ), a fase ferromagnética de superfície (SF) e a paramagnética (P).

correspondendo à fase paramagnética representada pela letra P;  $(1,0,1)$  correspondendo à fase ferromagnética do volume 1 representada por  $BF_1$  (o volume 1 e a interface estão ordenados enquanto o volume 2 está desordenado;  $(0,1,1)$  associado à fase ferromagnética do segundo volume representada por  $BF_2$  (o volume 2 e a interface estão ordenados enquanto o volume 1 está desordenado;  $(1,1,1)$  associado à fase ferromagnética onde todo o sistema está ordenado, sendo representada por  $BF_{12}$  e  $(0,0,1)$  associado à fase ferromagnética de superfície onde só a superfície está ordenada. Representamos esta fase por SF.

ii) Onze pontos fixos semi-estáveis (veja também Tabela 4.3.1) a saber, em  $(t_1, t_2, t_s) = (t^B(q), 0, 1)$  e  $(0, t^B(q), 1)$  (caracterizan-

do a transição de fase para-ferromagnética de um volume, com expoente crítico do comprimento de correlação tri-dimensional  $v^{3D}$ ),  $(t^B(q), t^B(q), 1)$  (caracterizando a transição de fase do duplo volume, cujo expoente crítico também é  $v^{3D}$ ),  $(0, 0, t^S(q))$  (caracterizando a transição de fase para-ferromagnética da interface com expoente crítico  $v^{2D}$ ),  $(t^B(q), 0, t^{SB}(q))$  e  $(0, t_B(q), t^{SB}(q))$  (caracterizando as linhas multicríticas superfície-volume simples com expoentes críticos  $v^{3D}$  para os volumes e  $1/y_{t_1}^{SB}$  (93) para a superfície),  $(t^B(q), 0, t^{S1}(q))$  e  $(0, t^B(q), t^{S1}(q))$  (caracterizando a transição de fase simultânea para-ferromagnética de um volume e da interface com expoente crítico  $v^{3D}$  para o volume e  $1/y_{t_1}^{SB}$  para a interface) e finalmente  $(t^B(q), t^B(q), t^{SEB}(q))$  (caracterizando a transição de fase simultânea volume 1 = volume 2 e interface com expoente crítico  $v^{3D}$  para os volumes e  $1/y_{t_1}^{SEB}$  para a interface).

- iii) Um ponto fixo completamente instável em  $(t_1, t_2, t_s) = (t^B(q), t^B(q), t^B(q))$  (caracterizando um ponto multicrítico de ordem superior com expoente crítico  $v^{3D}$  para os volumes e  $1/y_{t_1}^{SEB}$  para interface). Sua existência é óbvia devido ao fato que  $g(t, t, t) = f(t)$ . Sua instabilidade (estabilidade), entretanto, merece alguns comentários. Recentemente dos Santos et al. (94), trataram com um formalismo de GR tipo Migdal-Kadanoff (cuja diferença essencial com o presente tratamento vem da escolha da célula), a criticalidade de uma interface de Heisenberg anisotrópica quântica entre dois volumes caracterizados pelo modelo de Ising. Para  $q = 2$  ambos os problemas compartilham regiões comuns, sendo portanto possível fazer comparações. Por exemplo, ambos apresentam no eixo  $t_1 = t_2$ , dois pontos fixos

não triviais, um completamente instável e, em um valor mais baixo de  $t_s$ , um semi-estável. Entretanto no tratamento de dos Santos et al., o ponto fixo mais baixo (isto é, o ponto fixo semi-estável) fica no eixo  $t_1 = t_2 = t_s$ , enquanto no presente tratamento ele é o mais alto (isto é, o completamente instável) que fica neste eixo como já dissemos. Além disso, o GR de dos Santos et al. fornece  $t^B(2) \approx 0,34$  (que é muito mais alto com respeito ao resultado muito preciso de séries, que é  $0,21811^{(63)}$ , enquanto o presente GR fornece  $t^B(2) \approx 0,19$  (que é muito baixo com relação ao resultado de séries antes citado). Todas estas características postas juntas, possibilitam a construção do seguinte quadro. O fato de  $g(t, t, t) = f(t)$  (verdadeiro para ambos os GR em análise) implica, como dito anteriormente, na existência de um ponto fixo não trivial no eixo  $t_1 = t_2 = t_s$ . A natureza das aproximações (GR) leva à existência de um outro ponto fixo não trivial no eixo  $t_1 = t_2$ , cuja coordenada  $t_s$  pode ser mais alta ou mais baixa do que aquelas dos pontos fixos justo mencionados. Células do GR que superestimam  $t^B(2)$  podem pertencer a uma classe, e aquelas que subestimam  $t^B(2)$  podem pertencer a outra. Se assim for, um GR exato deve corresponder à colisão destes dois pontos fixos, e um conjunto de aproximações correndo de um tipo ao outro deve corresponder ao cruzamento destes dois pontos fixos e simultaneamente a uma troca de estabilidade (como ocorre frequentemente; veja Toulouse e Pfeuty<sup>(95)</sup>). Toda esta análise poderia ser esclarecida pelo estudo da influência de células progressivamente maiores; infelizmente computacionalmente falando, isto não é nada trivial.

Apresentamos nas Figs. 4.3.2 e 4.3.3 a evolução com  $q$  do diagrama de fase. A localização do ponto multicrítico (caracterizado pelo valor  $\Delta_c$ ) como função de  $q$  e  $J_2/J_1$ , é apresentada na Fig. 4.3.4.

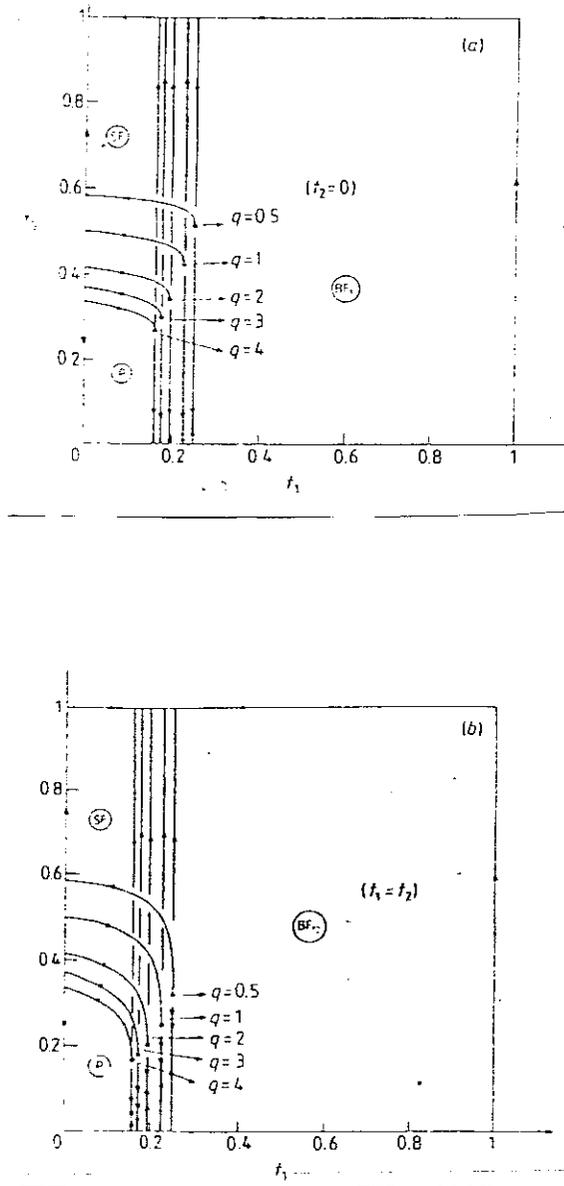


FIGURA 4.3.2 - Evolução com  $q$  do diagrama de fase indicado na Fig. 4.3.1.  
(a) para  $t_2 = 0$  ; (b) para  $t_1 = t_2$ .

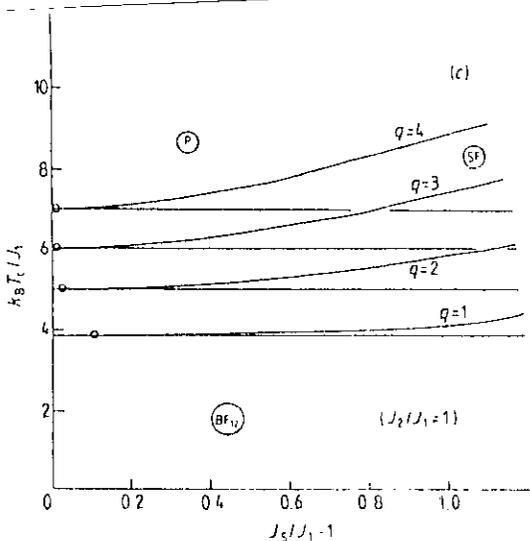
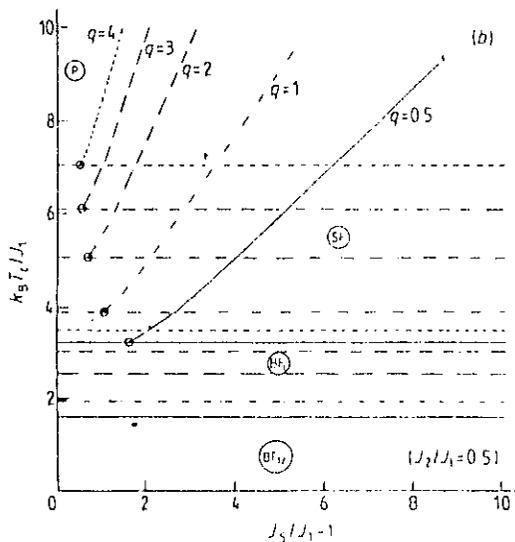
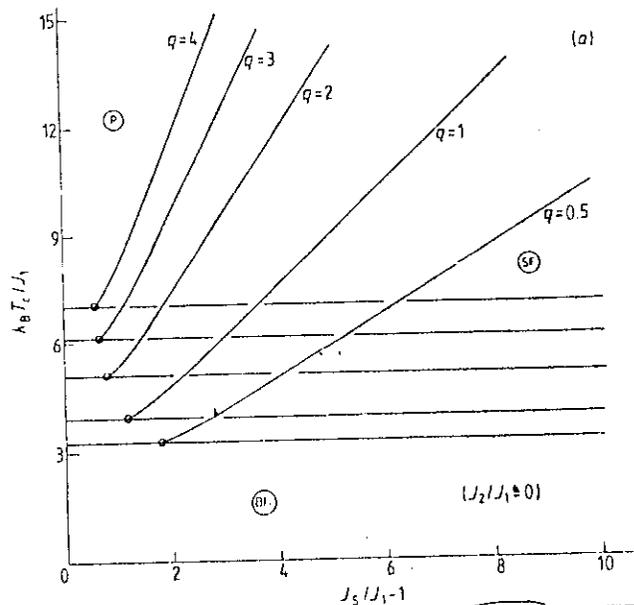


FIGURA 4.3.3 - Mesmos resultados da Fig. 4.3.2, porém agora no espaço  $\Delta \times T$  ( $\Delta \equiv J_2 / J_1 - 1$ ). (a) para  $J_2 / J_1 = 0$ ; (b) para  $J_2 / J_1 = 0,5$ ; (c) para  $J_2 / J_1 = 1$ .

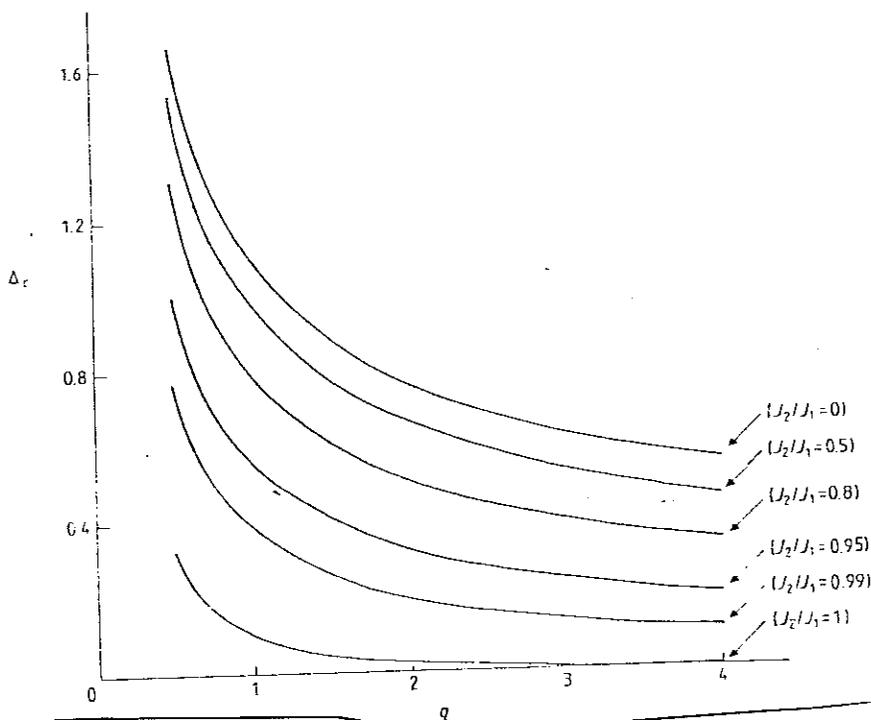


FIGURA 4.3.4 - Diagrama mostrando a evolução com  $q$  de  $\Delta_c$  para vários valores da razão  $J_2 / J_1$ ; o caso  $J_2 / J_1 = 0$  reproduz os resultados obtidos no artigo I.

Focalizemos agora os valores dos vários expoentes críticos do comprimento de correlação. As eqs. (4.2.3)-(4.2.5) possibilitam o cálculo da matriz Jacobiana  $M \equiv \partial(t_1', t_2', t_3') / \partial(t_1, t_2, t_3)$ , que deve ser calculada para os vários pontos fixos relevantes. Sua forma geral é dada pela seguinte expressão:

$$M = \begin{pmatrix} a(q) & 0 & 0 \\ 0 & b(q) & 0 \\ d(q) & e(q) & c(q) \end{pmatrix} \quad (4.3.1)$$

onde  $a(q), \dots, e(q)$  dependem do ponto fixo em particular. Seus auto-valores são dados pelas seguintes equações:

$$\lambda_1 = a(q) \quad (4.3.2a)$$

$$\lambda_2 = b(q) \quad (4.3.2b)$$

$$\lambda_3 = c(q) \quad (4.3.2c)$$

cujos respectivos auto-vetores são dados por

$$\vec{u}_1 \propto \begin{pmatrix} a-c \\ 0 \\ d \end{pmatrix} \quad (4.3.3a)$$

$$\vec{u}_2 \propto \begin{pmatrix} 0 \\ b-c \\ e \end{pmatrix} \quad (4.3.3b)$$

$$\vec{u}_3 \propto \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.3.3c)$$

Revisemos rapidamente os vários tipos de pontos fixos que aparecem em nosso problema. Para o ponto fixo tal que  $(t_1, t_2,$

$t_s) = (t^B(q), 0, 1)$  temos  $b = c = d = e = 0$ ,  $a > 1$  e o expoente crítico tri-dimensional é dado por

$$\nu^{3D}(q) = \ln 3 / \ln a(q) \quad (4.3.4)$$

onde 3 é o fator de escala linear do GR. Para o ponto fixo  $(1, t^B(q), 1)$  temos  $a = c = d = e$  e  $b > 1$ ;  $b$  é igual ao valor de  $a$  que aparece na eq. (4.3.4). Para o ponto fixo  $(t^B(q), t^B(q), 1)$  temos  $c = d = e = 0$  e  $a = b > 1$ ;  $a, b$  são iguais ao valor de  $a$  que aparece na eq. (4.3.4). Para o ponto fixo  $(0, 0, t^S(q))$  temos  $a = b = 0$ ,  $d = e$  e  $c > 1$ ; o expoente crítico bi-dimensional é dado pela seguinte equação

$$\nu^{2D}(q) = \ln 3 / \ln c(q) \quad (4.3.5)$$

Para o ponto fixo  $(t^B(q), 0, t^{SB}(q))$  temos  $b = 0$ ,  $d, e < 1$  e  $a, c > 1$ ;  $a$  é igual ao valor que aparece na eq. (4.3.4) e os correspondentes expoentes crítico e de "crossover" são respectivamente dados por

$$1/\gamma_{t_1}^{SB}(q) = \ln 3 / \ln c(q) \quad (4.3.6)$$

e

$$\phi^{SB}(q) = \ln c(q) / \ln a(q) \quad (4.3.7)$$

Para o ponto fixo  $(t^B(q), t^B(q), t^B(q))$  temos  $d=e$ ,  $c+d+e = a = b > 1$  e  $c > 1$ ;  $a$  e  $b$  sendo iguais ao valor de  $a$  da eq. (4.3.4) e os correspondentes expoentes crítico e de "crossover" são respectivamente dados pelas seguintes equações:

$$1/y_{t_1}^{SEB}(q) = \ln 3 / \ln c(q) \quad (4.3.8)$$

e

$$\phi^{SEB}(q) = \ln c(q) / \ln a(q) \quad (4.3.9)$$

Para o ponto fixo  $(t^B(q), 0, t^{S1}(q))$  temos  $b=0, c, d, e < 1$  e  $a > 1$ ;  $a$  igual ao valor que aparece na eq. (4.3.4). Finalmente para o ponto fixo  $(t^B(q), t^B(q), t^{SEB}(q))$  temos  $c, d, e < 1, a = b > 1$ ;  $a, b$  sendo iguais ao valor de  $a$  na eq. (4.3.4). Os vários expoentes que foram determinados são apresentados na Tabela 4.3.1 e na Fig.4.3.5.

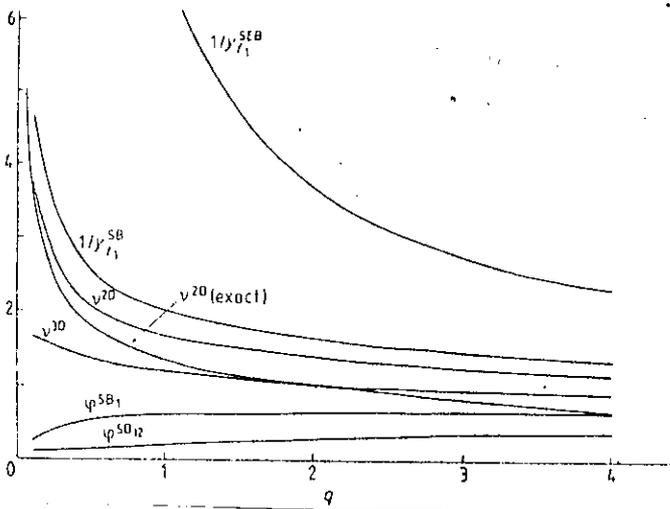


FIGURA 4.3.5 - Diagrama mostrando a dependência em  $q$  dos expoentes tipo-térmicos ( $v$ 's e  $y$ 's) e expoentes de "crossover"  $\phi$ 's.

Todos os resultados que estamos discutindo valem estritamente para transições de

fase padrões de segunda ordem (ou ao menos contínuas), isto é, para  $0 \leq q \leq 4$  para duas dimensões e  $0 \leq q \leq q_c$  (com  $q_c \cong 3$ ) para três dimensões. Contudo, todas as vezes que a transição for de primeira ordem o calor latente é bastante pequeno no intervalo  $q \in [0, 4]$ ; por isso apresentamos nossos resultados (ver Tab. 4.3.1 e Fig. 4.3.5) até  $q = 4$ .

q	1/2	1	2	3	4
$t^B$	.2510 .2668 <sup>a</sup>	.2260 .247 <sup>b</sup>	.1949 .2181 <sup>c</sup>	.1750 .1966 <sup>d</sup>	.1607 -
$t^{SB}$	.5058 -	.4166 -	.3345 .3405 <sup>e</sup> .3208 <sup>f</sup>	.2911 -	.2626 -
$t^S$	.5858 .5858 <sup>g</sup>	.5 .5 <sup>g</sup>	.4142 .4142 <sup>g</sup>	.3660 .3660 <sup>g</sup>	.3333 .3333 <sup>g</sup>
$v^{2D}$	2.0481 1.7823 <sup>h</sup>	1.6510 4/3 <sup>h</sup>	1.3692 1 <sup>h</sup>	1.2440 5/6 <sup>h</sup>	1.1692 2/3 <sup>h</sup>
$v^{3D}$	1.3622 -	1.1988 .88 <sup>i</sup>	1.0410 .630 <sup>j</sup>	.9599 -	.9092 -
$1/Y_{t_1}^{SB}$	2.5320 -	2.0071 -	1.6236 -	1.4518 -	1.3497 -
$1/Y_{t_1}^{SEB}$	9.8787 -	6.5141 -	3.6628 -	2.7227 -	2.2880 -
$\phi^{SB}$	.5380 -	.5973 -	.6412 .68 <sup>k</sup> .56.04 <sup>m</sup>	.6612 -	.6736 -
$\phi^{SEB}$	.1379 -	.1840 -	.2842 -	.3526 -	.3974 -
$\Delta_c (J_2/J_1=0)$	1.6678 1.473 <sup>n</sup>	1.1032 .899 <sup>n</sup>	.7620 .569 <sup>n</sup> .6±.1 <sup>o</sup> .5±.03 <sup>m</sup>	.6298 .458 <sup>n</sup>	.5574 -
$\Delta_c (J_2/J_1=.5)$	1.5323 -	.9832 -	.6568 -	.5323 -	.4649 -
$\Delta_c (J_2/J_1=1)$	.3321 -	.1011 -	.0204 -	.0077 -	.0030 -

TABELA 4.3.1 - Resultados correspondentes aos principais pontos e expoentes críticos. Os valores superiores são os nossos resultados (GR) e os inferiores são resultados exatos, de séries, Monte Carlo ou similares, extraídos da literatura. (a) de Magalhães et al. <sup>(96)</sup>; (b) Gaunt e Ruskin <sup>(62)</sup>; (c) Zinn-Justin <sup>(63)</sup>; (d) Jensen e Mouritsen <sup>(64)</sup>; (e) calculado a partir do valor que aparece em Zinn-Justin <sup>(63)</sup> e Binder e Hohemberg <sup>(97)</sup>; (f) calculado a partir do valor que aparece em Zinn-Justin <sup>(63)</sup> e Binder e Landau <sup>(98)</sup>; (g) Wu <sup>(36)</sup> e referências contidas neste artigo; (h) den Nijs <sup>(60)</sup>; (i) Heerman e Stauffer <sup>(66)</sup>; (j) Le Guillou e Zinn-Justin <sup>(67)</sup>; (l) Diehl e Dietrich <sup>(99)</sup>; (m) Binder e Landau <sup>(98)</sup>; (n) Costa et al <sup>(89)</sup>; (o) Binder e Hohemberg <sup>(97)</sup>.

#### 4.4 - FORMALISMO E RESULTADOS (CASO DILUIDO)

Consideremos agora a situação onde  $J_2 = 0$ ,  $J_1 > 0$  e  $J_s$  (veja Fig. 4.4.1) é uma variável randômica cuja lei de probabilidade é dada pela seguinte equação:

$$P(J_s) = (1-p)\delta(J_s) + p\delta(J_s - J_0) \quad (4.4.1)$$

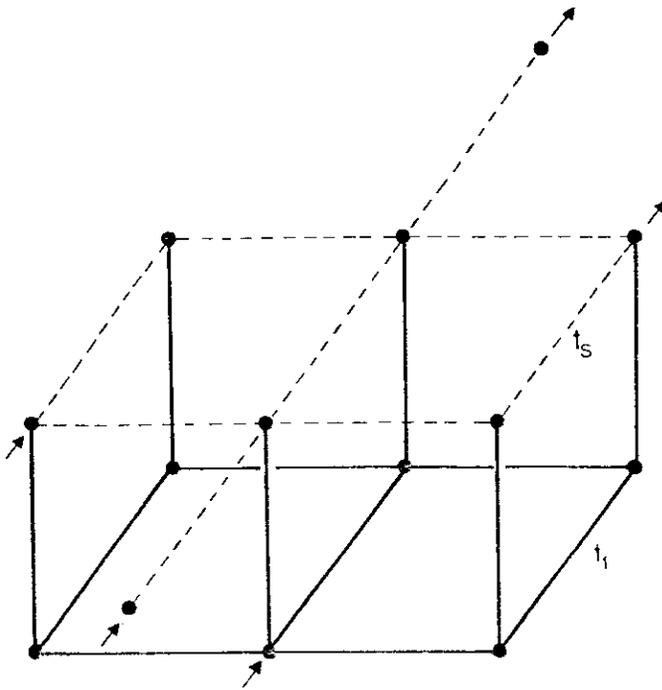


FIGURA 4.4.1 - Célula usada no problema da superfície livre ; as ligações cheias ( $t_1$ ) são associadas ao volume, enquanto as tracejadas ( $t_s$ ) são correspondentes à superfície; as setas indicam sítios terminais.

O GR que devemos construir agora é no espaço  $(p, t_1, t_0)$ .

A relação de recorrência para o volume é dada pela eq. (4.2.3). A eq. (4.4.1) pode ser expressa em termos da transmissividade através da seguinte forma

$$P(t_s) = (1-p)\delta(t_s) + p\delta(t_s - t_0) \quad (4.4.2)$$

Se admitimos que cada ligação  $t_s$  da Fig. 4.4.1 obedece à equação acima, então obtemos a seguinte distribuição de probabilidade para a célula como um todo

$$P_C(t_s) = \sum_{n=1}^9 \sum_{\{\text{conf.}\}} p^n (1-p)^{9-n} \delta(t_s - f(t_1, t_0)) \quad (4.4.2)$$

onde {conf.} indica todas as configurações possíveis, para um dado  $1 \leq n \leq 9$ , que podemos obter a partir da célula dada pela Fig. 4.4.1 e onde  $f(t_1, t_0)$  é a transmissividade equivalente de cada configuração (podendo ser determinada pelo BCM). Para  $p=1$  devemos reproduzir o caso puro descrito pelo artigo I, ou seja  $f(t_0, t_1)$  é igual a  $g(t_1, 0, t_0)$  onde  $g(t_1, t_2, t_s)$  é dado pela eq. (4.2.5). As equações de recorrências para as variáveis  $p$  e  $t_0$  são obtidas aproximando-se a distribuição dada pela eq. (4.4.2) pela seguinte distribuição binária

$$P'(t_s) = (1-p')\delta(t_s) + p'\delta(t_s - t_0') \quad (4.4.3)$$

onde  $p'$  e  $t_0'$  devem ser determinados. Obtemos  $p'$  e  $t_0'$  impondo que os dois primeiros momentos das duas distribuições sejam iguais, quer dizer,

$$\langle t_s \rangle_{p'} = \langle t_s \rangle_{P_C} \quad (4.4.4)$$

$$\langle t_s^2 \rangle_{p'} = \langle t_s^2 \rangle_{P_C} \quad (4.4.5)$$

de onde obtemos

$$p't_0' = \sum_{n=1}^9 \sum_{\{\text{conf.}\}} p^n (1-p)^{9-n} f(t_1, t_0) \equiv F \quad (4.4.6)$$

e

$$p't_0'^2 = \sum_{n=1}^9 \sum_{\{\text{conf.}\}} p^n (1-p)^{9-n} [f(t_1, t_0)]^2 \equiv G \quad (4.4.7)$$

onde as funções  $F$  e  $G$  são bastante extensas para serem reproduzidas aqui. Desta maneira, obtemos para  $t'_0$  e  $p'$  as seguintes equações de recorrência:

$$t'_0 = G/F \quad (4.4.8)$$

e

$$p' = F^2/G \quad (4.4.9)$$

As eqs. (4.2.3), (4.4.8) e (4.4.9) fecham o procedimento de GR. Na Fig. 4.4.2 apresentamos o diagrama de fluxo, para  $q=2$ , bem como as várias fases inerentes ao problema. Existem três pontos fixos completamente estáveis a saber,  $(p, t_1, t_s) = (1, 0, 0)$ , caracterizando a fase paramagnética (P),  $(1, 0, 1)$  caracterizando a fase de superfície (SF) e  $(1, 1, 1)$  caracterizando a fase onde o volume e a superfície estão ordenados.

Observamos na Fig. 4.4.2 que a diluição da superfície faz aparecer um novo ponto fixo semi-estável denotado por SP, cujas coordenadas são  $(p; t_1, t_s) = (0, 5; 0, 1)$  o qual corresponde ao ponto de percolação (exato) do caso bi-dimensional diluído. Notemos que a direção do fluxo é no sentido de SP para S.

De acordo com Cavalcanti e Tsallis<sup>(92)</sup>, e coerente com o critério de Harris<sup>(100)</sup>, existe um valor de  $q = q^*$  tal que para  $q > q^*$ , nasce na linha crítica que vai de SP para S, um novo ponto fixo semi-estável. Como aqui abordamos somente os casos  $q=1$  e  $q=2$  (a implementação computacional tornou-se extremamente complexa para  $q > 2$  e por este motivo não nos foi possível realizá-la até o presente momento) estaremos discutindo a região onde  $q < q^*$ . Consequentemente a diluição nestas condições ( $q < q^*$ ) não altera o comportamento crítico do sistema. Vemos que quando  $t_1$  varia de 0

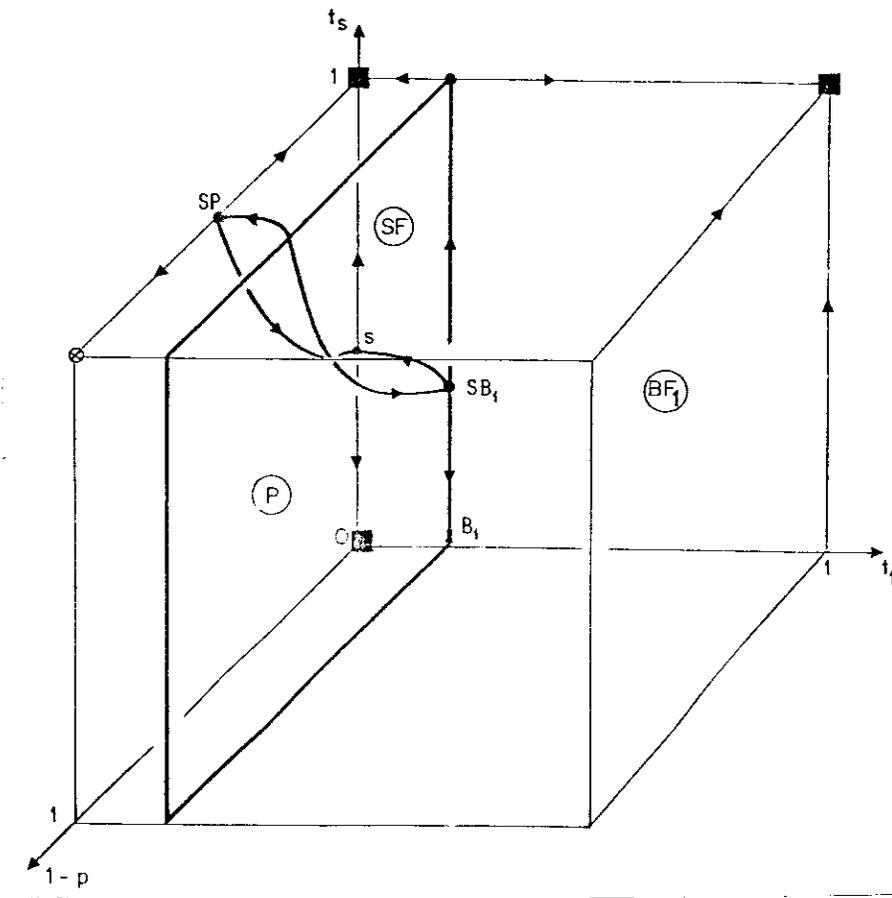


FIGURA 4.4.2 - Diagrama de fluxo no espaço  $(1-p, t_1, t_s)$  para  $q=2$ .  $\odot$  denota um ponto fixo espúrio. Podemos ver na curva crítica  $t_0^C(p)$  que flui do ponto de percolação  $SP = (0, 0,5; 0,1)$  até o ponto  $S = (0, 0, 0,4142)$  correspondente ao sistema puro, uma indicação de que a criticalidade do sistema é estável com relação à diluição.

até  $t_1^C = 0,19492$  ( $q = 2$ ) a concentração crítica decresce de seu valor máximo  $p_c = 0,5$  até um valor mínimo  $p \cong 0,41$ . O ponto fixo  $(p, t_1, t_s) = (0, 0, 1)$  é um ponto espúrio e sua existência é atribuída ao fato de termos aproximado as distribuições da célula completa por uma distribuição binária.

Nas Figs. 4.4.3 (para  $q=1$ ) e 4.4.4 (para  $q=2$ ), apresentamos a evolução do diagrama de fase com a probabilidade  $p$ . Vemos que o efeito de diluir a superfície (digamos com a presença de impurezas) é deslocar a linha crítica que separa as fases paramagnética

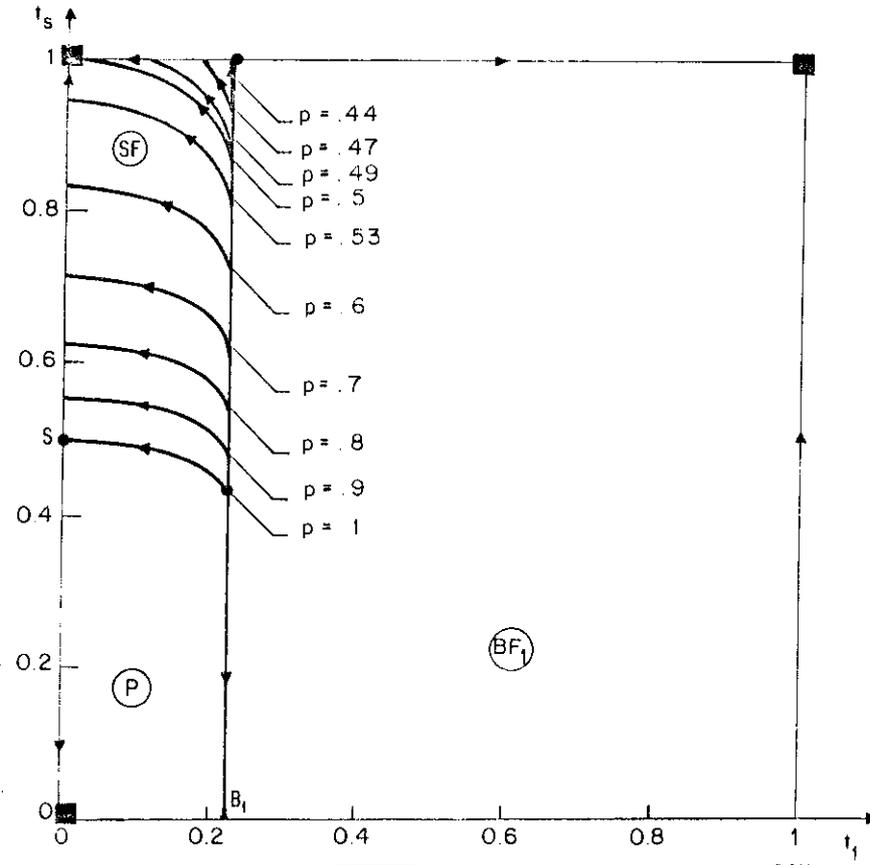


FIGURA 4.4.3 - Evolução com  $p$  da fronteira crítica que separa as fases paramagnética (P) e de superfície (SF) para  $q = 1$ .

(P) e de superfície (SF), desfavorecendo à fase SF, isto é, para  $t_1$  fixo o efeito de diminuir  $p$  é de diminuir a temperatura crítica associada à transição ferromagnética, para-superfície. Vemos também que a presença do volume favorece o ordenamento da superfície. Enquanto no caso bi-dimensional ( $t_1 = 0$ ) o sistema pode se ordenar quando  $p > p_c = 0,5$ , este valor decresce até  $p \approx 0,41$  quando  $t_1$  aumenta até  $t_1^C = 0,22604$  para  $q = 1$  ou  $t_1^C = 0,19492$  para  $q = 2$ , devido à influência do volume. Este resultado é justificado pelo fato de que a correlação na superfície é aumentada indiretamente via o volume.

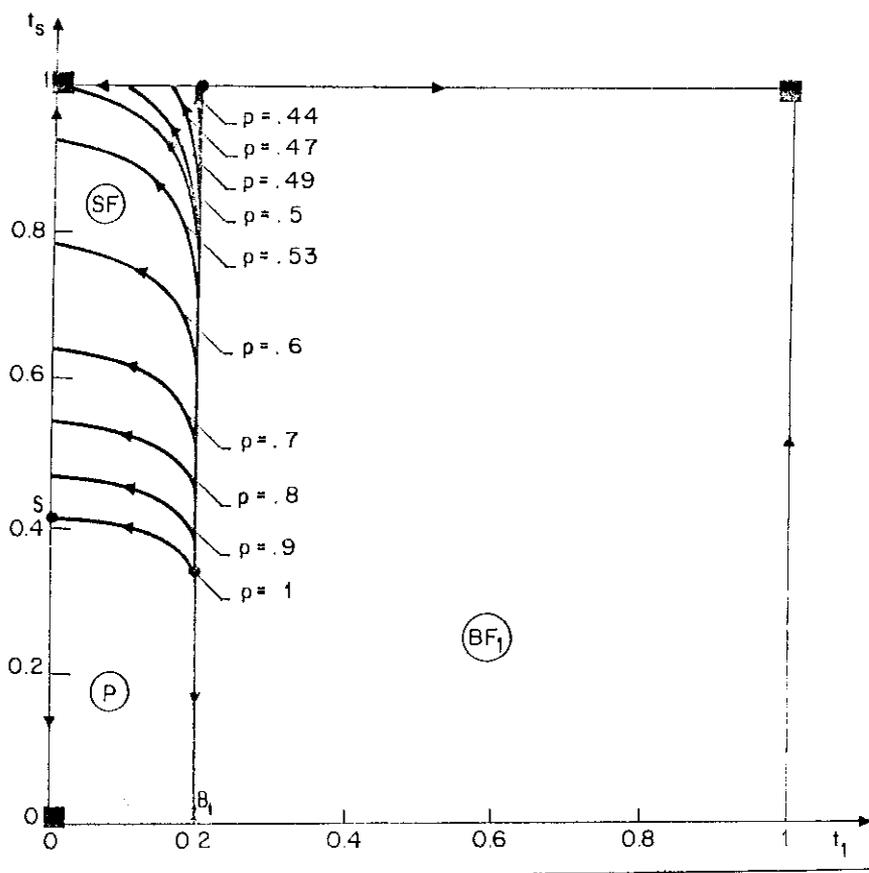


FIGURA 4.4.4 - Diagrama semelhante ao da Fig. 4.4.3. Neste caso para  $q = 2$ .

Nas Figs. 4.4.5 ( $q=1$ ) e 4.4.6 ( $q=2$ ) apresentamos resultados análogos aos dados pelas Figs. 4.4.3 e 4.4.4, a diferença sendo que no caso em questão, estes resultados são expressos em termos das variáveis  $T$  e  $\Delta$  em vez das transmissividades. Podemos ver também nestes diagramas que à medida que  $p$  diminui, a fase de superfície vai se reduzindo até desaparecer quando  $p \cong 0,41$ . Já  $\Delta_c$  ( $\Delta$  crítico) aumenta enquanto  $p$  diminui, indicando que é necessário que as ligações sejam cada vez mais fortes para compensar a diluição. Analisando a evolução com  $p$  (a partir de  $p=1$ ) das várias curvas destes diagramas, observamos que elas tendem para uma assíntota quando  $\Delta \rightarrow \infty$  ( $J_s \rightarrow \infty$ ). Inicialmente estas assíntotas têm inclinação não nula, que correspondem ao valor da temperatura crítica

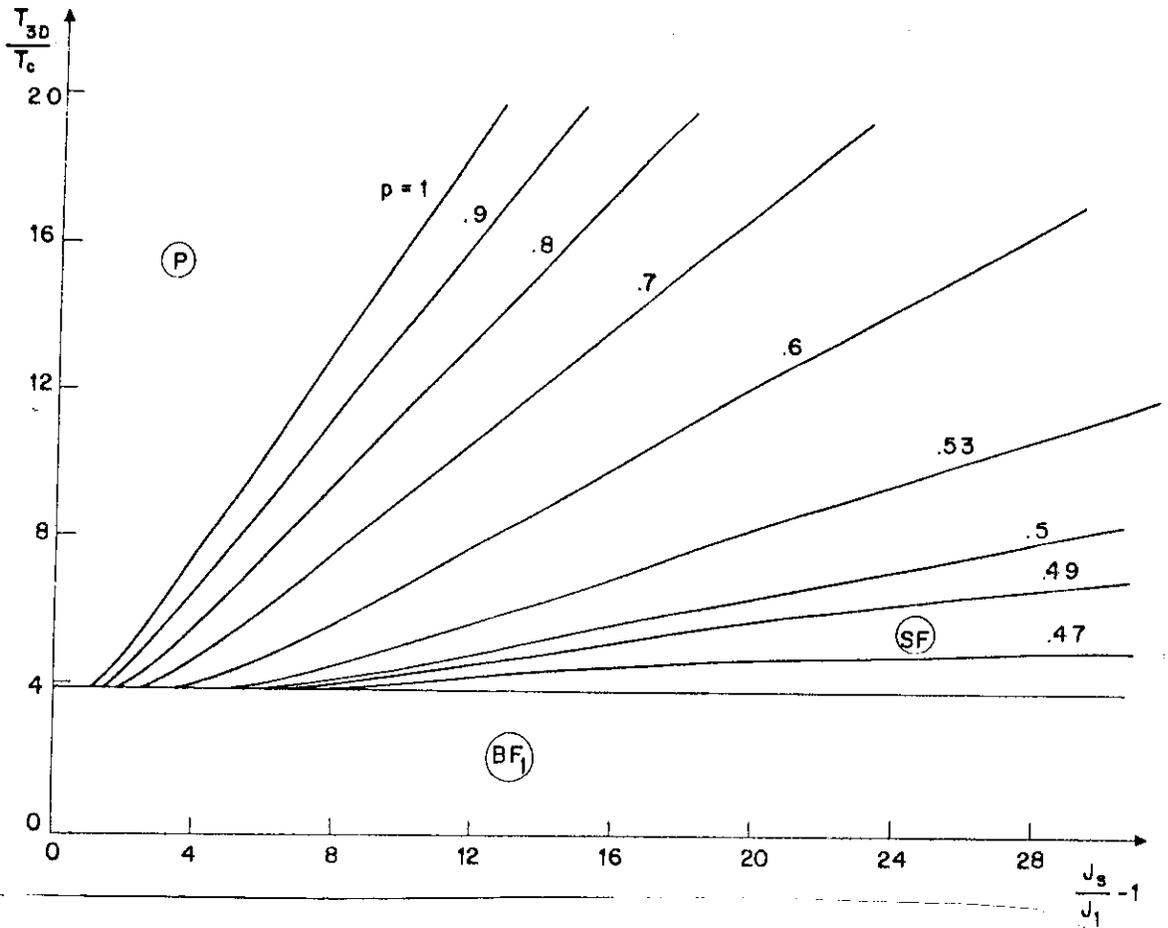


FIGURA 4.4.5 - Mesma evolução com  $p$  que aparece na Fig. 4.4.3 ( $q=1$ ), só que aqui no espaço  $\Delta \equiv \frac{J_s}{J_1} - 1 \times \frac{T_{3D}}{T_c}$ .

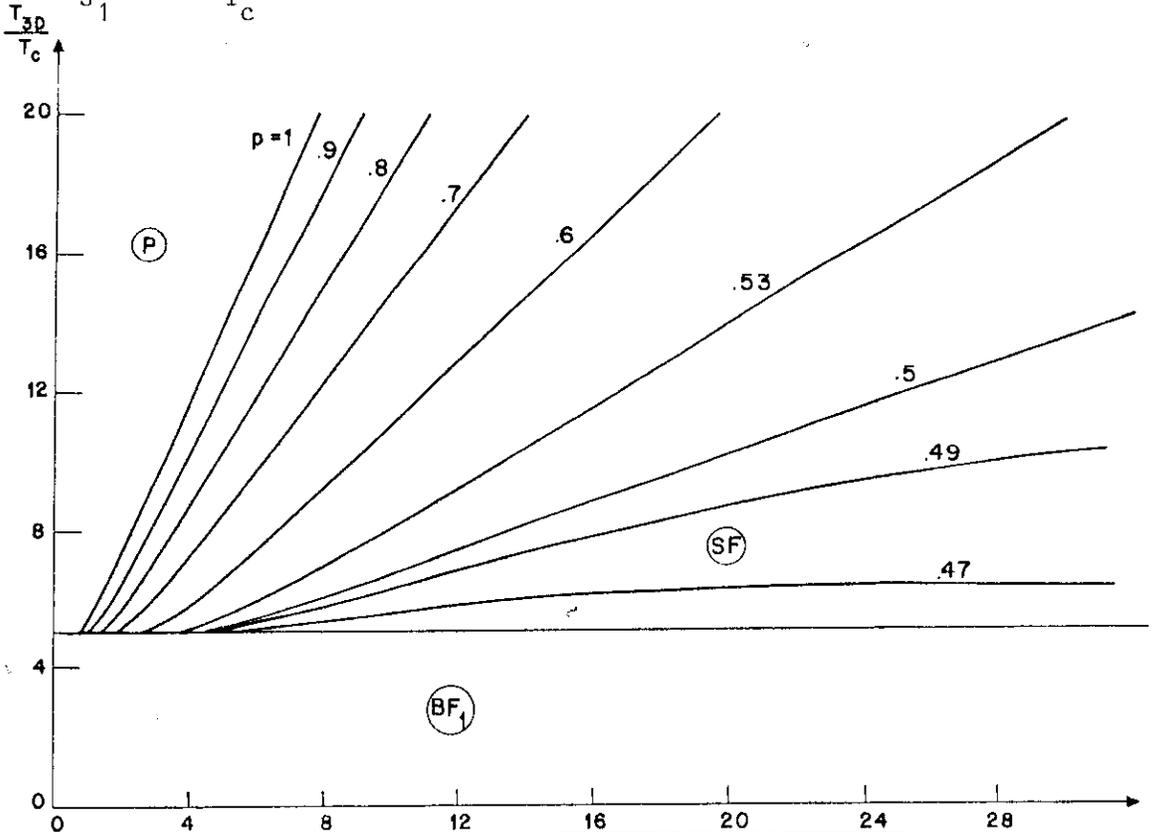


FIGURA 4.4.6 - Diagrama análogo ao da Fig. 4.4.5 para  $q = 2$ .

$\frac{J_s}{J_1} - 1$

do sistema bi-dimensional. No entanto, enquanto  $J_s$  crescendo favorece à fase de superfície,  $p$  diminuindo atua no sentido contrário. Portanto, o sistema experimenta uma competição entre estes dois parâmetros. Para  $p$  grande, o parâmetro dominante é a intensidade da ligação  $J_s$ , mas quando  $p$  diminui até um valor crítico da ordem de  $p^* = 0,55$  os dois parâmetros se tornam comparáveis. A curvatura dos diagramas apresenta o seguinte comportamento: para  $p > p^*$ , inicialmente, para  $J_s$  pequeno, ela é positiva, diminui à medida que  $J_s$  cresce, até se anular para  $J_s \rightarrow \infty$ . Para  $p < p^*$  ela começa positiva, se anula para um determinado  $J_s$ , e torna-se negativa, indo novamente se anular quando  $J_s \rightarrow \infty$ . Diminuindo ainda mais  $p$ , atingiremos uma segunda probabilidade crítica em  $p = 0,5$ . Neste ponto a inclinação da assíntota se anula, tendo uma altura não nula em relação ao eixo  $\Delta$  e indica que a partir daí ( $p < 0,5$ ) toda a ordem da superfície é conseguida via o volume. À medida que abaixamos ainda mais a probabilidade  $p$  a partir de  $0,5$ , a altura da assíntota decresce até que para  $p \approx 0,41$ , ela se anula. Neste ponto obtemos uma terceira probabilidade crítica. Para  $p < 0,41$  não se consegue mais ordenar a superfície nem mesmo com o auxílio do volume, e portanto, esta fase desaparece.

Finalmente, apresentamos na Fig. 4.4.7 o comportamento de  $\Delta_c$  como função de  $p$  para  $q = 1$ , e para  $q = 2$  onde notamos que  $\Delta_c$  diverge quando  $p \rightarrow p_c \approx 0,41$ .

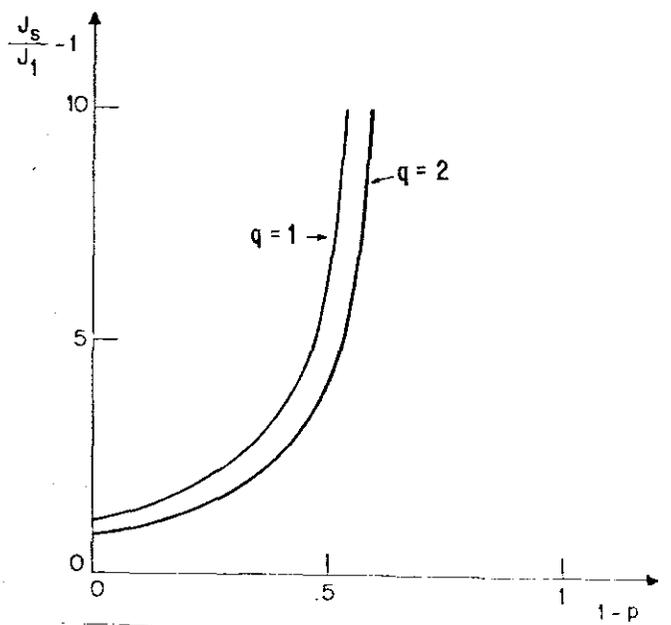


FIGURA 4.4.7 - Diagrama mostrando a dependência de  $\Delta_c$  com  $p$  para  $q = 1$  e para  $q = 2$ .

#### 4.5 - CONCLUSÕES

No contexto de GR no espaço real tratamos primeiramente a criticalidade do modelo ferromagnético de Potts de  $q$ -estados em uma rede inhomogênea constituída por dois volumes cúbicos simples semi-infinitos (caracterizados pelas constantes de acoplamento  $J_1$  e  $J_2$ , respectivamente) separados por uma interface  $(1,0,0)$  correspondente à rede quadrada (caracterizada pela constante de acoplamento  $J_s$ ). A abordagem estende aquela realizada por Costa e colaboradores <sup>(89)</sup>. O diagrama de fase apresenta, para todos os valores de  $q$ , quatro fases fisicamente diferentes, a saber, a paramagnética, a ferromagnética de um volume simples, a ferromagnética de dois volumes e a ferromagnética de superfície. As fases paramagnética, de

volume simples ferromagnética e de superfície ferromagnética, unem-se em uma linha multicrítica cuja classe de universalidade para  $J_1 \neq J_2$  é aquela correspondente ao caso da superfície livre ( $J_2/J_1 = 0$ ). As quatro fases unem-se em um ponto especial (correspondendo a  $J_1=J_2$ ) cuja natureza não é suficientemente esclarecida pela presente abordagem (célula relativamente pequena). A temperatura crítica exata é reproduzida para o limite bi-dimensional ( $J_1, J_2 \ll J_s$ ).

A localização da linha multicrítica pode ser caracterizada pelo valor de  $\Delta \equiv J_s/J_1 - 1$ . Existe um valor de  $\Delta$  acima do qual a ordem magnética da superfície pode existir mesmo tendo desaparecido nos dois volumes (veja Fig. 4.3.3). Apresentamos pela primeira vez, pelo que é do nosso conhecimento, a evolução de  $\Delta$  com  $q$  e  $J_2/J_1$ . Para o modelo de Ising ( $q = 2$ ) obtemos para o caso da superfície livre ( $J_2/J_1 = 0$ ),  $\Delta \approx 0,76$  (que deve ser comparado com o resultado de séries  $0,6 \pm 0,1$  de Binder e Hohenberg<sup>(97)</sup>, com o resultado de Monte Carlo  $0,5 \pm 0,03$  de Binder e Landau<sup>(98)</sup> e com o valor de campo médio  $0,25$ ); para o caso de volumes iguais ( $J_2=J_1$ ) obtemos  $\Delta \approx 0,10$ , que deve ser comparado com o valor zero obtido de campo médio.

Com respeito aos expoentes críticos, obtivemos que todos os  $\nu$ 's decrescem monotonicamente com o aumento de  $q$ , enquanto os expoentes de "crossover"  $\phi$ 's apresentam tendência oposta.

Em um segundo caso, discutimos o problema da superfície livre ( $J_2 = 0$ ) na situação em que as ligações  $J_s$  (da superfície) obedecem à uma distribuição de probabilidades. Calculamos os diagramas de fase para  $q = 1$  e  $q = 2$  em função da probabilidade de ocupação  $p$  das ligações  $J_s$ . Vimos que um dos efeitos da diluição é deslocar a fronteira crítica que separa as fases paramagnética e de superfície, desfavorecendo esta. Observamos que, nos casos estu

dados, a diluição da superfície não altera a criticalidade do sistema. Mostramos também através da evolução de fronteira crítica, com  $p$  (a partir de  $p=1$ ), que três probabilidades características interessantes aparecem nestes diagramas. A primeira  $p^* \sim 0,55$  quando a concavidade de curvas (veja Figs. 4.4.5 e 4.4.6), antes de atingir a assíntota, troca de sinal, preparando-a para ter inclinação nula em uma segunda probabilidade característica que é  $p_c = 0,5$ . Até este ponto quando  $J_s \rightarrow \infty$  o sistema tem comportamento bi-dimensional. Abaixo de  $p_c = 0,5$  e  $J_s$  muito grande, a superfície ainda pode reter ordem, mas esta é conseguida exclusivamente devido à presença do volume. Abaixando ainda mais  $p$ , encontramos a terceira probabilidade característica  $p^* \approx 0,41$  tal que para  $p < p^*$  nem com a presença do volume a superfície pode se ordenar, desaparecendo totalmente esta fase.

Finalmente, mostramos na Fig. 4.4.7 que  $\Delta_c$  diverge quando  $p \rightarrow p_c \approx 0,41$ .

O próximo passo para completar este trabalho seria apresentar resultados para valores de  $q > 2$  e exibir a mudança de classe de universalidade que ocorre para um determinado  $q = q^*$ , de acordo com Harris <sup>(100)</sup>. A introdução de um segundo volume transformando o problema em interface diluída também viria neste sentido. Este avanço já foi feito por Cavalcanti e Tsallis <sup>(92)</sup>, mas como as células que eles usaram são muito simples, seus resultados são melhores do ponto de vista qualitativo do que quantitativo.

## CAPÍTULO V

### EQUAÇÕES DE ESTADO DE PERCOLAÇÃO DE LIGAÇÕES EM REDE QUADRADA ANISOTRÓPICA

#### 5.1 - INTRODUÇÃO

As técnicas de Grupo de Renormalização (GR) no espaço real são empregadas principalmente para calcular expoentes e pontos críticos (ou de maneira mais geral, fronteiras críticas). Entretanto, em princípio, nada impede sua aplicação para calcular várias quantidades termodinâmicas (energia livre, calor específico, parâmetro de ordem, susceptibilidade, etc.) para todo o espectro de variação dos parâmetros externos (tipicamente temperatura). Como um exemplo, podemos citar o trabalho de Niemeijer e Van Leeuwen <sup>(48)</sup> onde eles desenvolveram um formalismo de GR para calcular a energia livre. Da energia livre podemos calcular outras quantidades termodinâmicas de interesse tais como magnetização, calor específico, etc. Esta teoria e outras similares são aplicadas para sistemas que são descritos por formalismos Hamiltonianos.

Recentemente Tsallis et al. <sup>(49)</sup> formularam um procedimento de GR que fornece equações de estado para problemas geométricos estatísticos (não necessariamente relacionados a formalismos Hamiltonianos). A abordagem é tão simples quanto uma aproximação de campo médio, preservando ainda assim a criticalidade do problema. Ele tem sido usado para calcular os parâmetros de ordem (densida-

de de massa de sítios) para a célula infinita percolante e para sua associada espinha dorsal ("backbone"), respectivamente denotados por  $P_\infty(p)$  e  $P_\infty^B(p)$ , para todos os valores da probabilidade  $p$  de ocupação de ligações em uma rede quadrada isotrópica ( $p$  tem o mesmo valor em qualquer direção).

Nosso objetivo <sup>(101)</sup> é estender o tipo de tratamento acima para uma rede quadrada anisotrópica com probabilidades de ocupação  $p_x$  e  $p_y$  (ao longo dos eixos  $x$  e  $y$ , respectivamente) arbitrárias. Usando uma célula auto-dual conveniente (veja ref. <sup>(53)</sup> e referências contidas neste trabalho) calculamos  $P_\infty(p_x, p_y)$  e  $P_\infty^B(p_x, p_y)$ . Na Seção II apresentamos o formalismo de GR e os resultados; na Seção III aplicamos um procedimento de extrapolação bastante eficiente (primeiramente introduzido por Curado e colaboradores <sup>(102)</sup>, para melhorar resultados, no quadro do GR, da tensão superficial em sistemas de Ising) para obter resultados numericamente confiáveis para  $P_\infty$  e  $P_\infty^B$ ; finalmente concluímos na Seção IV.

## 5.2 - FORMALISMO E RESULTADOS

Consideremos uma rede quadrada cujas ligações são ocupadas (ou "ativas") randômica e independentemente com probabilidade  $p_x$  para o eixo  $x$  e  $p_y$  para o eixo  $y$ . Para construir as relações de recorrência (no contexto do GR) no espaço  $(p_x, p_y)$  adotamos o tratamento baseado nas células auto-duais usadas por de Oliveira <sup>(103)</sup> e de Oliveira e Tsallis <sup>(53)</sup>, indicadas na Fig. 3.2.1a-b-c), que provaram ser extremamente eficientes para uma rede quadrada anisotrópica. Note na célula dada pela Fig. 3.2.1c, a existência de dois pontos de entrada e dois pontos de saída; se a configuração é per-

colante, ela pode simular a célula infinita (percolante) e os quatro pontos de entrada/saída podem ser considerados como pertencendo à esta célula. A célula da Fig. 3.2.1a (Fig. 3.2.1c) contém uma (nove) ligação (ligações) relevante(s) e apresenta consequentemente  $2 (2^9)$  configurações (de ocupação) diferentes. A análise destas configurações mostra que somente metade delas percolam e são responsáveis pelas seguintes relações de recorrência <sup>(53, 103)</sup>

$$\begin{aligned}
 p'_x &= p_x^5 p_y^4 + 4 p_x^5 p_y^3 (1-p_y) + 6 p_x^5 p_y^2 (1-p_y)^2 + 4 p_x^5 p_y (1-p_y)^3 + p_x^5 (1-p_y)^4 \\
 &+ 5 p_x^4 (1-p_x) p_y^4 + 20 p_x^4 (1-p_x) p_y^3 (1-p_y) + 27 p_x^4 (1-p_x) p_y^2 (1-p_y)^2 \\
 &+ 14 p_x^4 (1-p_x) p_y (1-p_y)^3 + 2 p_x^4 (1-p_x) (1-p_y)^4 + 10 p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^4 \\
 &+ 36 p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^3 (1-p_y) + 40 p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^2 (1-p_y)^2 + 14 p_x^3 (1-p_x)^2 p_y (1-p_y)^3 \\
 &+ p_x^3 (1-p_x)^2 (1-p_y)^4 + 9 p_x^2 (1-p_x)^3 p_y^4 + 26 p_x^2 (1-p_x)^3 p_y^3 (1-p_y) \\
 &+ 20 p_x^2 (1-p_x)^3 p_y^2 (1-p_y)^2 + 4 p_x^2 (1-p_x)^3 p_y (1-p_y)^3 \\
 &+ 3 p_x (1-p_x)^4 p_y^2 (1-p_y)^2 + 6 p_x (1-p_x)^4 p_y^3 (1-p_y) + 3 p_x (1-p_x)^4 p_y^2 (1-p_y)^2 \\
 &\equiv f(p_x, p_y) \tag{5.2.1}
 \end{aligned}$$

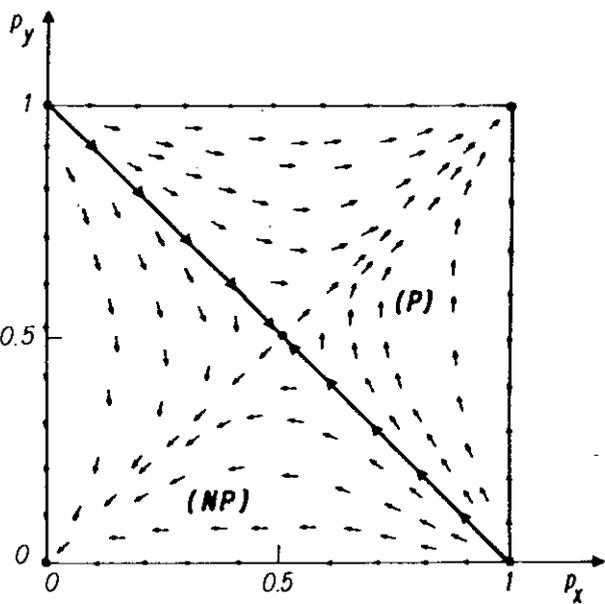
e

$$p'_y = f(p_y, p_x) \tag{5.2.2}$$

Na eq. (5.2.2) levamos em conta a simetria  $p_x \leftrightarrow p_y$  do problema (veja Fig. 3.2.1b). O diagrama de fluxo determinado pelas eqs. (5.2.1) e (5.2.2) é apresentado na Fig. 5.2.1.

FIGURA 5.2.1 - Diagrama de fluxo. P(NP) a fase percolante (não percolante).

A linha crítica exata <sup>(104)</sup>  $p_x + p_y = 1$  é reobtida bem como as classes de universalidade corretas (percolação uni-dimensional para  $p_x = 0$  ou  $p_y = 0$  e percolação bi-dimensional para  $p_x, p_y \neq 0$ ). O expoente crítico  $\nu$  do comprimento de correlação correspondente à rede quadrada anisotrópica é dado por



$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda} = \frac{\ln 3}{\ln(249/2^7)} \approx 1,6510 \quad (5.2.3)$$

onde  $b = 3$  é o fator de escala linear e  $\lambda \equiv [df(p,p)/dp]_{p=1/2}$ .

O parâmetro de ordem da percolação é definido como:

$$P_\infty(p_x, p_y) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{N_L(p_x, p_y)}{L^2} \quad (5.2.4)$$

onde  $L$  é o tamanho linear (adimensional) de uma rede quadrada finita e  $N_L$  é o número médio de sítios que pertencem à maior célula (esta maior célula pode ter número de ligações diferentes ao aumentarmos os parâmetros externos  $p_x$  e  $p_y$  para várias realizações do problema) que no limite  $L \rightarrow \infty$ , gera a única célula infinita percolante. Consequentemente  $P_\infty$  é a probabilidade de escolher aleatoriamente um sítio que pertença à célula infinita.

Consideremos por ora o caso isotrópico <sup>(49)</sup> ( $p_x = p_y = p$ ). Nesta condição a eq. (5.2.4) transforma-se em  $P_\infty(p) = \lim_{L \rightarrow \infty} N_L(p)/L^2$ . Associe-mos com cada sítio da rede uma "massa" adimensional  $m_0$  que per-

mitimos se renormalizar e procuremos expressar  $P_\infty$  como função de  $p$  e de  $m_0$ . Seguindo a idéia introduzida originalmente por Kadanoff, dividimos o sistema de  $L^2$  sítios em um novo sistema de  $L'^2$  células de tamanho linear  $b = L/L' > 1$ . No processo de renormalização devemos ter novas variáveis  $p' = f_1(p, m_0)$  e  $m_0' = f_2(p, m_0)$  (como veremos em breve, elas apresentam de fato a estrutura  $p' = f_1(p)$  e  $m_0' = f_2(p)m_0$ ). As variáveis renormalizadas dependem do GR particular que é usado, porém elas devem satisfazer à condição que a massa total da célula infinita seja invariante pela transformação do GR, ou seja,

$$N_{L'}(p')m_0' = N_L(p)m_0 \quad (5.2.5)$$

Dividindo ambos os lados da eq. (5.2.5) por  $L'^2$  obtemos

$$P_\infty(p')m_0' = b^2 P_\infty(p)m_0 \quad (5.2.6)$$

onde  $P_\infty(p') = N_{L'}(p')/L'^2$ . Após  $n$  iterações da eq. (5.2.6), teremos

$$P_\infty(p^{(n)})m_0^{(n)} = b^{2n} P_\infty(p)m_0 \quad (5.2.7)$$

portanto

$$P_\infty(p) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_\infty(p^{(n)}) \frac{m_0^{(n)}}{b^{2n} m_0} \quad (5.2.8)$$

Para  $p$  menor que a probabilidade crítica de percolação  $p_c$ ,  $\lim_{n \rightarrow \infty} p^{(n)} = 0$ . Como  $P_\infty(0) = 0$  e  $\lim_{n \rightarrow \infty} m_0^{(n)}/b^{2n} < \infty$  (isto se deve ao fato de que qualquer que seja a célula que escolhemos para ser re-

normalizada, teremos pelo menos um caminho percolante entre os terminais) obtemos o resultado esperado  $P_\infty(p) = 0$  para  $p < p_c$ . Para  $p > p_c$ ,  $\lim_{n \rightarrow \infty} p^{(n)} = 1$  e como  $P_\infty(1) = 1$ , teremos que

$$P_\infty(p) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{m_0^{(n)}(p)}{b^{2n} m_0} \quad (p > p_c) \quad (5.2.9)$$

Assim obtemos a expressão de  $P_\infty$  para todos os valores de  $p$ .

A extensão da eq. (5.2.9) para o caso anisotrópico é imediata e é dada pela seguinte equação:

$$P_\infty(p_x, p_y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{m_0^{(n)}(p_x, p_y)}{b^{2n} m_0} \quad (5.2.10)$$

onde agora temos  $m_0' = m_0(p_x, p_y, m_0)$  a qual, como veremos, pode ser escrita na seguinte forma

$$m_0' = g(p_x, p_y) m_0 \quad (5.2.11)$$

onde  $g(p_x, p_y)$  satisfaz  $g(1,1) = b^d$  ( $d$  sendo igual à dimensão, que no nosso caso é igual a  $\ln 9 / \ln 3 = 2$ ) e deve ser estabelecida.  $m_0^{(n)}(p_x, p_y)$  é o valor da massa obtida após  $n$  iterações das eqs. (5.2.1), (5.2.2) e (5.2.11), partindo de valores arbitrários para  $m_0$ ,  $p_x$  e  $p_y$ . Em resumo, o processo consiste em escolher, para dados  $p_x$ ,  $p_y$  tal que  $p_x + p_y \geq 1$ , um valor inicial arbitrário para  $m_0$  (exemplo,  $m_0 = 1$ ), e então realizar a recorrência determinada pelas eqs. (5.2.1), (5.2.2) e (5.2.11), até chegar a um ponto fixo  $(p_x, p_y, m_0) = (1, 1, m_0^{(\infty)})$  (que é sempre garantido pelo fato de que  $g(1,1) = b^d$ ):  $P_\infty(p_x, p_y)$  é proporcional a  $m_0^{(\infty)}$ . Para  $p_x$  e  $p_y$ , tal

que  $p_x + p_y \leq 1$ , o procedimento automaticamente dá  $P_\infty = 0$ .

Vamos agora determinar  $g(p_x, p_y)$ . Esta função é determinada impondo-se <sup>(49)</sup> que a massa média da célula percolante seja preservada pela renormalização. O conjunto de configurações da célula dada pela Fig. 3.2.1a fornece, para a massa média,  $2m_0' p_x'$ . Com respeito à célula dada pela Fig. 3.2.1c, indicamos abaixo duas configurações típicas com suas respectivas contribuições para a massa média sendo dadas por  $7m_0 p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^3 (1-p_y)$  e  $6m_0 p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^2 (1-p_y)^2$ .

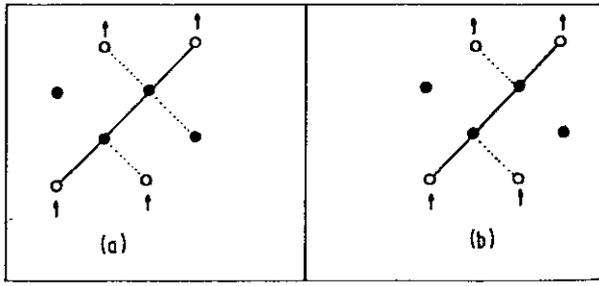


FIGURA 5.2.2 - Duas configurações típicas, que aparecem no cálculo da função  $g(p_x, p_y)$  na eq. (5.2.11).

Quando levamos em conta todas as configurações, a preservação da massa média fornece finalmente

$$\begin{aligned}
 2m_0' p_x' &= [8p_x^5 p_y^4 + 32p_x^5 p_y^3 (1-p_y) + 48p_x^5 p_y^2 (1-p_y)^2 + 32p_x^5 p_y (1-p_y)^3 \\
 &+ 8p_x^5 (1-p_y)^4 + 40p_x^4 (1-p_x) p_y^4 \\
 &+ 158p_x^4 (1-p_x) p_y^3 (1-p_y) + 210p_x^4 (1-p_x) p_y^2 (1-p_y)^2 \\
 &+ 106p_x^4 (1-p_x) p_y (1-p_y)^3 + 14p_x^4 (1-p_x) (1-p_y)^4 \\
 &+ 80p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^4 + 280p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^3 (1-p_y) + 298p_x^3 (1-p_x)^2 p_y^2 (1-p_y)^2 \\
 &+ 96p_x^3 (1-p_x)^2 p_y (1-p_y)^3 + 6p_x^3 (1-p_x)^2 (1-p_y)^4 + 72p_x^2 (1-p_x)^3 p_y^4 \\
 &+ 194p_x^2 (1-p_x)^3 p_y^3 (1-p_y) + 134p_x^2 (1-p_x)^3 p_y^2 (1-p_y)^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 24p_x^2(1-p_x)^3p_y(1-p_y)^3 + 24p_x(1-p_x)^4p_y^4 \\
 & + 40p_x(1-p_x)^4p_y^3(1-p_y) + 18p_x(1-p_x)^4p_y^2(1-p_y)^2]m_0 \\
 \equiv & h(p_x, p_y) \tag{5.2.12}
 \end{aligned}$$

A comparação com a eq. (5.2.11) e o uso da eq. (5.2.1) resulta em

$$g(p_x, p_y) = h(p_x, p_y) / 2f(p_x, p_y) \tag{5.2.13}$$

desta maneira fechando o formalismo. O fato de que para estabelecer a eq. (5.2.12) usamos as células dadas pelas Figs. 3.2.1a e 3.2.1c destroi, rigorosamente falando, a simetria  $p_x \neq p_y$  da rede quadrada (o mesmo problema apareceria se privilegiássemos o eixo y em vez do eixo x). As discrepâncias numéricas são, contudo, praticamente desprezíveis ao longo de todo o domínio de variação de  $p_x$  e  $p_y$ . O fluxo-GR determinado pelas eqs. (5.2.1), (5.2.2) e (5.2.11) (com a eq. (5.2.12)) está ilustrado, para  $p_x = p_y$ , na Fig. 5.2.3.

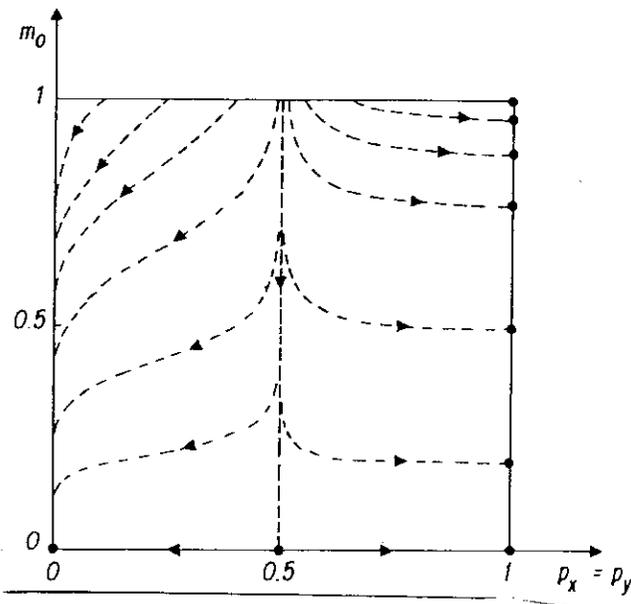


FIGURA 5.2.3 - Diagrama de fluxo no espaço  $(m_0, p)$  ( $p_x = p_y = p$ ). Os pontos  $\bullet$  indicam os valores do parâmetro de ordem  $P_\infty(p)$ , onde  $p$  corresponde ao ponto inicial da linha de fluxo.

Os resultados obtidos estão indicados na Fig. 5.2.4 e na Tab.5.2.1 (linha superior). Os expoentes críticos (que ocorrem ao longo de toda a linha crítica bi-dimensional  $p_x + p_y = 1$ ) e amplitudes críticas (que ocorrem em  $p_x = p_y = 1/2$ ) são indicados na Tabela 5.3.1.

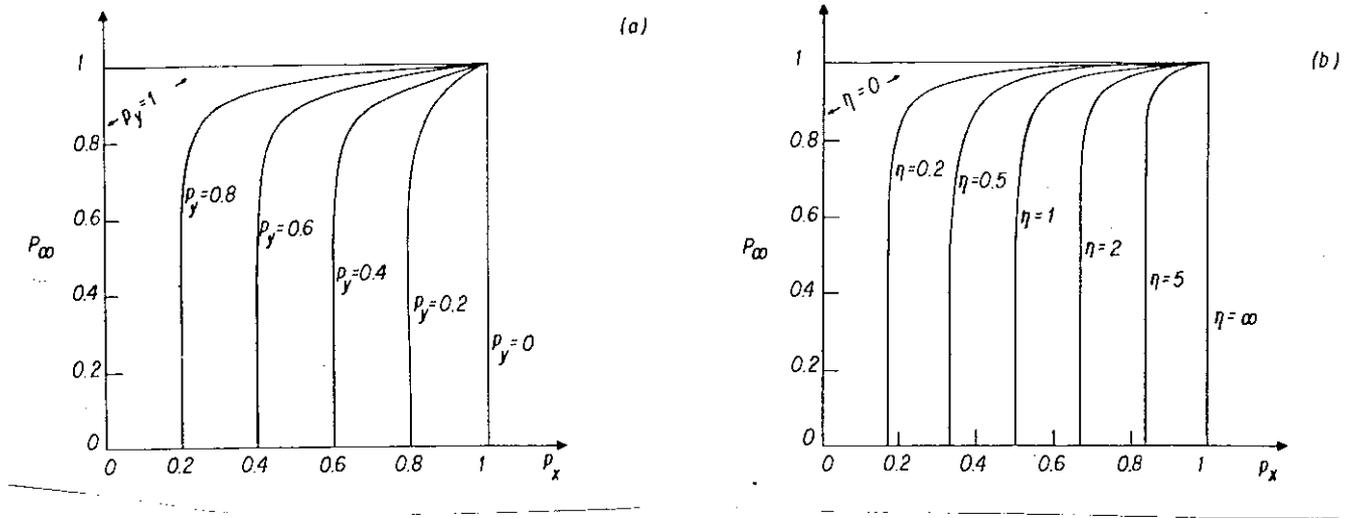


FIGURA 5.2.4 - Seções típicas do parâmetro de ordem-GR  $P_\infty(p_x, p_y)$ : (a) para  $p_y$  fixo; (b) para  $\eta$  fixo onde  $\eta = (1-p_y)/(1-p_x)$ .

Focalizemos agora a espinha dorsal associada à célula in finita percolante. (é a célula obtida quando eliminamos todas as li gações, ou conjunto de ligações, penduradas). O parâmetro de ordem correspondente  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  é calculado neste procedimento-GR, exatame nte da mesma maneira que temos feito para o cálculo de  $P_\infty(p_x, p_y)$ . A eq. (5.2.12) deve ser substituída pela seguinte equação

$$2m_0^B p_x^1 = [8p_x^5 p_y^4 + 30p_x^5 p_y^3 (1-p_y) + 42p_x^5 p_y^2 (1-p_y)^2 + 26p_x^5 p_y (1-p_y)^3 + 6p_x^5 (1-p_y)^4 + 38p_x^4 (1-p_x) p_y^4 + 142p_x^4 (1-p_x) p_y^3 (1-p_y) + 178p_x^4 (1-p_x) p_y^2 (1-p_y)^2 + 86p_x^4 (1-p_x) p_y (1-p_y)^3 + 12p_x^4 (1-p_x) (1-p_y)^4]$$

$$\begin{aligned}
 &+ 70p_x^3(1-p_x)^2p_y^4 + 234p_x^3(1-p_x)^2p_y^3(1-p_y) + 246p_x^3(1-p_x)^2p_y^2(1-p_y)^2 \\
 &+ 84p_x^3(1-p_x)^2p_y(1-p_y)^3 + 6p_x^3(1-p_x)^2(1-p_y)^4 + 58p_x^2(1-p_x)^3p_y^4 \\
 &+ 158p_x^2(1-p_x)^3p_y^3(1-p_y) + 120p_x^2(1-p_x)^3p_y^2(1-p_y)^2 \\
 &+ 24p_x^2(1-p_x)^3p_y(1-p_y)^3 + 18p_x(1-p_x)^4p_y^4 + 36p_x(1-p_x)^4p_y^3(1-p_y) \\
 &+ 18p_x(1-p_x)^4p_y^2(1-p_y)^2 \Big|_{m_0^B} \tag{5.2.14}
 \end{aligned}$$

$p_x \backslash p_y$	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	?
0.1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.936	1
0.3	0	0	0	0	0	0	0	0	0.907	0.964	1
0.4	0	0	0	0	0	0	0	0.891	0.945	0.977	1
0.5	0	0	0	0	0	0	0.884	0.935	0.964	0.984	1
0.6	0	0	0	0	0	0.882	0.930	0.957	0.975	0.989	1
0.7	0	0	0	0	0.886	0.932	0.956	0.972	0.983	0.992	1
0.8	0	0	0	0.899	0.940	0.961	0.974	0.983	0.990	0.995	1
0.9	0	0	0.928	0.960	0.974	0.982	0.988	0.992	0.995	0.997	1
1	?	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	0	0.538	0.647	0.720	0.779	0.827	0.870	0.907	0.942	0.973	1

TABELA 5.2.1 - Valores do parâmetro de ordem  $P_\infty$  (valor superior) e  $P_\infty^B$  (valor inferior) para valores típicos de  $(p_x, p_y)$ . ? refere-se ao fato que este valor não é unicamente determinado.

Os resultados que obtivemos estão indicados na Tab. 5.2.1 (linha inferior) e na Fig. 5.2.5 ; os expoentes críticos bi-dimensionais e amplitudes críticas (no limite  $p_x = p_y \rightarrow 1/2$ ) estão indicados na Tab. 5.3.1.

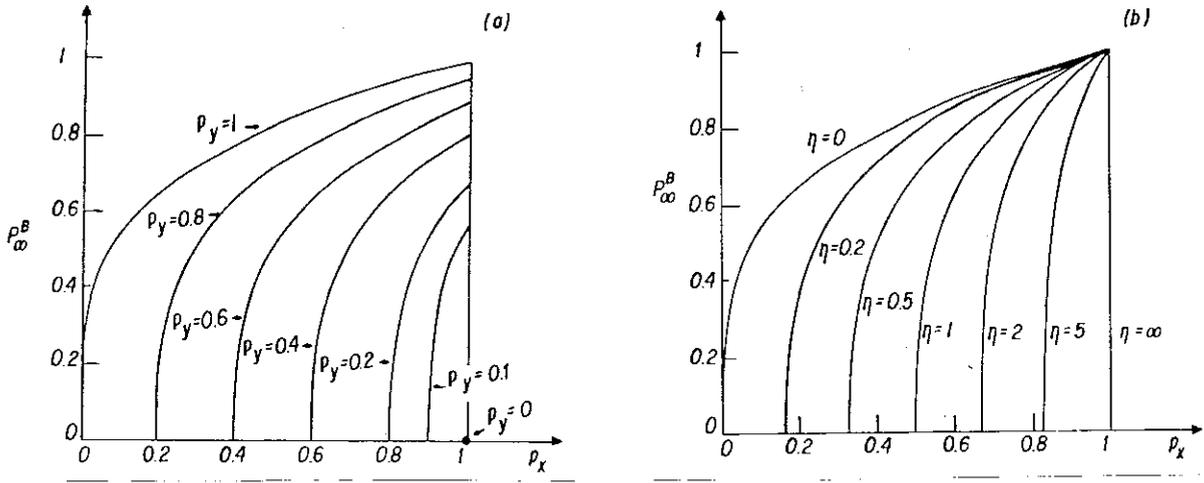


FIGURA 5.2.5 - Seções típicas do parâmetro de ordem-GR  $P_\infty^B(p_x, p_y)$ : (a)  $p_y$  fixo ; (b)  $\eta$  fixo onde  $\eta \equiv (1-p_y)/(1-p_x)$ .

### 5.3 - PROCEDIMENTO DE EXTRAPOLAÇÃO

A fim de melhorar numericamente os resultados fornecidos pelo GR, para a tensão superficial do modelo de Ising, Curado e colaboradores <sup>(102)</sup> desenvolveram uma técnica de extrapolação ("single extrapolation procedure (SEP)") que provou ser bastante eficiente. Intencionamos aplicar aqui a mesma técnica para melhorar nossos resultados para  $P_\infty(p)$  e  $P_\infty^B(p)$ . O procedimento usa como entrada, os valores exatos (ou quase exatos) para o ponto crítico ( $p_c$ ), os expoentes críticos  $\nu$  e  $\beta$  (ou  $\beta^B$ ) e os da derivada de  $P_\infty(p)$  (ou  $P_\infty^B(p)$ ) em  $p = 1$ . Sua base central é que a extrapolação seja "suave" (correção polinomial) se variáveis naturais re-escaladas são introduzidas no problema. Mais especificamente, a equação assintótica  $P_\infty \propto (p-p_c)^\beta$  pode ser reescrita como  $y \propto x$  com  $x \propto (p-p_c)^\nu$  e  $y \propto P_\infty^{\nu/\beta}$ , que define as variáveis naturais justo mencionadas (note que  $x$  e  $y$  são variáveis que comumente aparecem no processo de escala de tamanhos finitos). A extrapolação polinomial será executada no espaço  $(x,y)$ . Vamos descrevê-la em detalhes. Consideremos as seguintes definições

$$x_b(p) \equiv \left( \frac{p-p_b}{1-p_b} \right)^{\nu_b} \quad (5.3.1)$$

$$x(p) \equiv \left( \frac{p-p_c}{1-p_c} \right)^\nu \quad (5.3.2)$$

$$y_b \equiv (P_{\infty b})^{\nu_b/\beta_b} \quad (5.3.3)$$

$$y \equiv (\tilde{P}_{\infty b})^{\nu/\beta} \quad (5.3.4)$$

onde  $p_b$ ,  $\nu_b$ ,  $\beta_b$  e  $P_{\infty b}$  são respectivamente o ponto crítico, o ex

poente crítico do comprimento de correlação, o expoente crítico do parâmetro de ordem e o parâmetro de ordem obtidos por um formalismo de GR que usa células correspondentes a um fator de escala linear  $b$ ;  $p_c$ ,  $\nu$  e  $\beta$  são os valores exatos (ou os melhores disponíveis na literatura) para os correspondentes parâmetros (esperamos, em princípio,  $\lim_{b \rightarrow \infty} p_b = p_c$ ,  $\lim_{b \rightarrow \infty} \nu_b = \nu$  e  $\lim_{b \rightarrow \infty} \beta_b = \beta$ ) ;  $\tilde{P}_{\infty b}$  é o parâmetro de ordem extrapolado que estamos procurando (esperamos, em princípio,  $\lim_{b \rightarrow \infty} P_{\infty b} = \lim_{b \rightarrow \infty} \tilde{P}_{\infty b} = P_{\infty}^{\text{exato}}$ ).  $x_b$  e  $x$  variam de 0 a 1 quando  $p$  varia de probabilidade crítica  $p_c$  a 1. Introduzimos a seguinte relação:

$$y = f_b(x)y_b \quad (5.3.5)$$

onde a função de correção  $f_b(x)$  deve ser encontrada. Para  $p = 1$  (portanto  $x = 1$ ),  $y$  e  $y_b$  são exatos e igual a unidade, por conseguinte  $f_b(x)$  satisfaz

$$f_b(1) = 1 \quad (5.3.6)$$

Ademais, a relação dada pela eq. (5.3.5) implica na seguinte expressão

$$\frac{\nu}{\beta} \left. \frac{d\tilde{P}_{\infty b}}{dp} \right|_{p=1} = \left. \frac{df_b(x)}{dx} \right|_{x=1} \frac{\nu}{1-p_c} + \frac{\nu_b}{\beta_b} \left. \frac{dP_{\infty b}}{dp} \right|_{p=1} \quad (5.3.7)$$

portanto

$$\left. \frac{df_b(x)}{dx} \right|_{x=1} = \frac{1-p_c}{\nu} \left( \frac{\nu}{\beta} C - \frac{\nu_b}{\beta_b} C_b \right) \quad (5.3.8)$$

com

$$C_b \equiv (dP_{\infty b}/dp)_{p=1} \quad (5.3.9)$$

e

$$C \equiv (d\tilde{P}_{\infty b}/dp)_{p=1} = (dP_{\infty}^{\text{exato}}/dp)_{p=1} \quad (5.3.10)$$

onde impusemos que a derivada de  $\tilde{P}_{\infty b}$  em  $p=1$  é igual à exata (normalmente conhecida, através de argumentos simples, para a rede particular que estamos analisando). Além disso, a função de correção  $f_b(x)$  foi introduzida principalmente para compensar a inclinação possivelmente errada de  $P_{\infty b}$  em  $p = 1$  ( $f_b(x) = 1 \forall x$ , se a inclinação exata é reproduzida pelo GR), e queremos que seus efeitos relaxem gradualmente à medida que nos aproximamos de  $p_c$  (portanto  $x = 0$ ); parece assim sensato requerer que

$$\left. \frac{df_b(x)}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (5.3.11)$$

A função mais simples que simultaneamente satisfaz às condições dadas pelas eqs. (5.3.6), (5.3.8) e (5.3.11) é a parábola dada pela seguinte equação

$$f_b(x) = 1 + \frac{1-p_c}{2v} \left( \frac{v_b}{\beta_b} C_b - \frac{v}{\beta} C \right) (1-x^2) \quad (5.3.12)$$

A expressão para a função de correção é agora determinada de forma única. Contudo o procedimento de extrapolação ainda não está fechado; temos que indicar os argumentos de  $y$  e  $y_b$  na eq. (5.3.5). Postulamos a seguinte transformação

$$x_b(\bar{p}) = x(p) \quad (5.3.13)$$

Resumindo, as eqs. (5.3.1) - (5.3.5) e (5.3.13) levam ao seguinte algoritmo de extrapolação

$$\tilde{P}_{\infty b}(p) = \{f_b \left[ \left( \frac{p-p_c}{1-p_c} \right)^v \right] \{P_{\infty b} [p_b + (1-p_b) \left( \frac{p-p_c}{1-p_c} \right)^{v/v_b}] \}^{v_b/\beta_b} \}^{\beta/v} \quad (5.3.14)$$

que junto com a eq. (5.3.12) fecham completamente o procedimento.

A eq. (5.3.13) constitui a hipótese central do presente procedimento e estabelece que um tipo de lei de estados correspondentes vale para as funções aproximadas (GR)  $\{P_{\infty b}(p)\}$  associadas com diferentes tamanhos da célula usada. Notamos que a eq. (5.3.14) torna-se identicamente satisfeita se, no limite  $b \rightarrow \infty$ ,  $p_b \rightarrow p_c$ ,  $v_b \rightarrow v$ ,  $\beta_b \rightarrow \beta$  e  $C_b \rightarrow C$  (em resumo, se  $P_{\infty b}(p)$  aproximar-se regularmente de  $P_{\infty}^{\text{exato}}(p)$  para células progressivamente maiores). Este formalismo reproduz essencialmente aquele usado por Curado e Colaboradores <sup>(102)</sup> (para tensão superficial) para o caso particular  $\beta = (d-1)v$  e  $\beta_b = (d-1)v_b$  (lembramos que as singularidades da tensão superficial e do comprimento de correlação são, em geral, intimamente relacionados). Para o modelo de Ising bi-dimensional o presente procedimento de extrapolação conduziu a erros inferiores a 3% (1%) para a abordagem do GR com  $b = 2$  ( $b=5$ ), sobre todo o domínio de variação da temperatura. O principal interesse do método vem do fato de que o conhecimento de informação comumente disponível ( $p_c$ ,  $v$ ,  $\beta$  e  $C$ ) e um único resultado aproximado (GR) fornece uma curva que é, em princípio, satisfatória sobre o domínio inteiro das concentrações de ligações.

Na nossa presente abordagem (GR,  $b=3$ ) obtemos os resultados para  $P_{\infty}$  que estão indicados na Fig. 5.3.1 e nas Tabs. 5.3.1 e 5.3.2, onde usamos que  $p_b = p_c = 1/2$ ,  $v = 4/3$ ,  $v_b \approx 1,042$ ,  $\beta = 5/36$ ,

$\beta_b \cong 0,095$ ,  $C = 0$  <sup>(108)</sup> e  $C_b = 0$ . Os resultados correspondentes para  $P_\infty^B$  estão indicados na Fig. 5.3.2 e nas Tabelas 5.3.1 e 5.3.2, onde usamos que  $\beta^B \cong 0,53$  <sup>(107)</sup>,  $\beta_b^B \cong 0,334$ ,  $C^B = 0$  e  $C_b^B = 3/4$ .

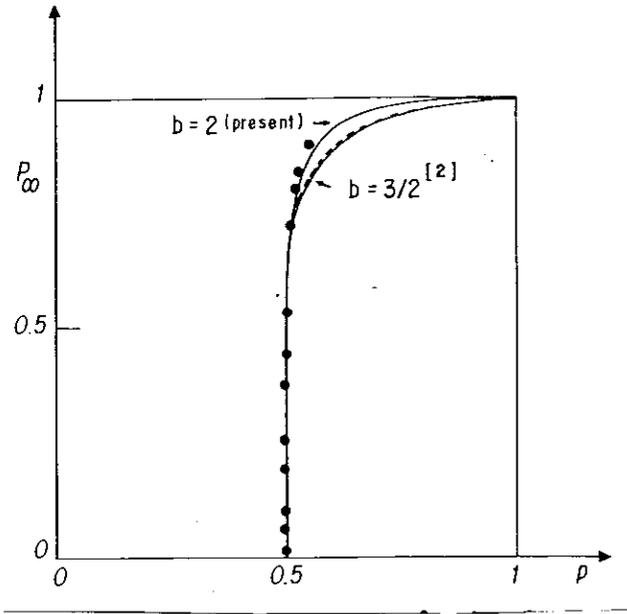
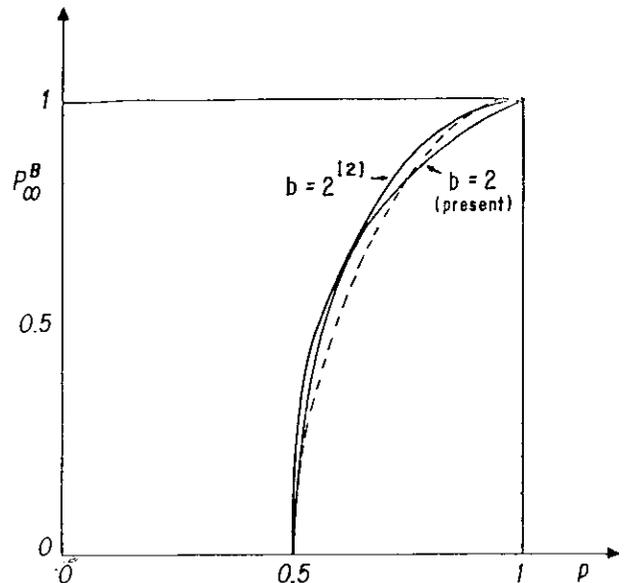


FIGURA 5.3.1 - Parâmetro de ordem (GR)  $P_\infty$  como função de  $p_x = p_y \equiv p$ . A linha cheia superior corresponde ao nosso resultado (GR) para  $b = 2^\dagger$ ; a linha tracejada é a correspondente curva extrapolada <sup>†</sup>; a linha cheia inferior é o resultado de Tsallis et al. <sup>(49)</sup> ( $b = 3/2$ ); os pontos representam dados de Monte Carlo <sup>(105)</sup>

FIGURA 5.3.2 - Parâmetro de ordem  $P_\infty^B$  como uma função de  $p_x = p_y \equiv p$ . As linhas cheias correspondem à nossa proposta ( $b = 2^\dagger$ ) e a de Tsallis et al. <sup>(105)</sup>; a linha tracejada é a curva extrapolada <sup>†</sup>.



<sup>†</sup>Nossos resultados nas Figuras 5.3.1 e 5.3.2 foram calculados admitindo-se que o fator de escala

$b$  correspondente à Fig. 3.2.1c é igual a 2. Atualmente, à luz das discussões de Melrose <sup>(77,78)</sup> e Tsallis <sup>(76)</sup>, devemos reconhecer que este fator de escala vale 3.

	$\nu$	$\beta$	$A$	$\beta^B$	$A^B$
† GR presente	$\frac{\ln 2}{\ln(249/2^7)} \approx 1.042^a$	$\frac{\ln(2^{10}/961)}{\ln(249/2^7)} \approx 0.095$	1.19	$\frac{\ln(2^8/205)}{\ln(249/2^7)} \approx 0.334$	1.41
Outro GR <sup>(49)</sup>	1.428 (b=2)	0.428 (b=2)	2.09 (b=2) <sup>b</sup>	0.550 (b=2)	2.45 (b=2) <sup>b</sup>
	1.380 (b=3)	0.338 (b=3)	1.84 (b=3)		
	1.305 (b=3/2)	0.198 (b=3/2)	4.0 (b=3/2)		
Presente extrapolação	$\frac{4}{3}^c$	$\frac{5}{36}^c$	1.25	0.53 <sup>c</sup>	1.92
Exato ou Monte Carlo	$\frac{4}{3} \approx 1.333^d$	$\frac{5}{36} \approx 0.139^e$		0.53 <sup>f</sup>	

TABELA 5.3.1 - Valores para os expoentes críticos  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\beta^B$  e para as amplitudes  $A$  e  $A^B$  associadas às grandezas  $P_\infty$  e  $P_\infty^B$ . Apresentamos os resultados fornecidos pelo nosso GR; pelo procedimento de extrapolação; resultados de Tsallis e colaboradores <sup>(49)</sup>; resultados exatos ou de séries extraídos da literatura. (a) indica referência (53); (b) indica que os resultados foram extraídos da referência (49); (c) exprime que estes valores (exatos ou quase exatos) são "input" (e não "output") dentro do presente procedimento de extrapolação; (d) indica que os resultados foram obtidos da ref. (60); (e) resultado exato obtido da referência (106); (f) resultado de Monte Carlo obtido da ref. (107). † representa o mesmo como nas figs. 5.3.1 e 5.3.2.

P	$P_\infty$		$P_\infty^B$	
	GR(b=2) <sup>†</sup>	extrapolação	GR(b=2) <sup>†</sup>	extrapolação
0.5	0	0	0	0
0.51	0.764	0.655	0.303	0.167
0.52	0.814	0.721	0.380	0.241
0.53	0.844	0.786	0.434	0.335
0.54	0.865	0.791	0.476	0.346
0.55	0.882	0.814	0.512	0.389
0.56	0.895	0.833	0.543	0.427
0.57	0.906	0.849	0.570	0.462
0.58	0.915	0.863	0.594	0.495
0.59	0.923	0.875	0.616	0.525
0.60	0.930	0.886	0.637	0.553
0.65	0.956	0.926	0.720	0.674
0.70	0.972	0.952	0.783	0.769
0.75	0.982	0.969	0.834	0.845
0.80	0.989	0.982	0.877	0.905
0.85	0.994	0.990	0.913	0.951
0.90	0.997	0.996	0.946	0.982
0.95	0.999	0.993	0.974	0.999
1	1	1	1	1

TABELA 5.3.2 - Valores dos parâmetros de ordem  $P_\infty$  e  $P_\infty^B$  para o caso isotrópico ( $p_x = p_y = p_z$ ). Apresentamos os valores fornecidos pelo GR e pelo procedimento de extrapolação. † representa o mesmo como nas figs. 5.3.1 e 5.3.2.

## 5.4 - CONCLUSÕES

Desenvolvemos um formalismo de GR no espaço real (baseado em uma célula apropriada que estende o trabalho de Tsallis e colaboradores<sup>(49)</sup>) para calcular, para todas as concentrações de ligações em uma rede quadrada anisotrópica, os parâmetros de ordem da célula infinita percolante e sua associada espinha dorsal ( $P_\infty(p_x, p_y)$  e  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  respectivamente. Eles exibem uma diferença interessante: enquanto  $P_\infty(p_x, p_y)$  apresenta descontinuidades em  $(p_x, p_y) = (1, 0)$  e  $(0, 1)$ ,  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  anula-se continuamente à medida que aproxima-se da linha crítica  $p_x + p_y = 1$  (exatamente recuperada dentro da presente abordagem). O tratamento destrói ligeiramente a simetria  $p_x \leftrightarrow p_y$  da rede quadrada. No entanto não deve ser difícil restaurá-la pela realização de médias "ad hoc" (frequentemente adotados na literatura) entre as equações  $-p_x$  e  $-p_y$ ; isto parece-nos entretanto não valer a pena, uma vez que os erros numéricos são praticamente desprezíveis.

A fim de obter valores numéricos mais confiáveis ao longo dos eixos  $p_x = p_y \equiv p$  (rede quadrada isotrópica), implementamos um procedimento para extrapolação que provou ser muito eficiente em outros problemas similares. Nossas melhores propostas aparecem na Tabela 5.3.1 (não existem na literatura valores exatos para  $P_\infty$  e  $P_\infty^B$ ). Na vizinhança do ponto crítico  $p_c = 1/2$  obtemos  $P_\infty \sim A(p-1/2)^\beta$  com  $\beta = 5/36$ <sup>(106)</sup> e  $A \approx 1,25$ , e  $P_\infty^B \sim A^B(p-1/2)^{\beta^B}$ , com  $\beta^B \approx 0,53$ <sup>(107)</sup> e  $A^B \approx 1,92$ .

Concluindo, dentro do quadro consideravelmente simples do GR no espaço real (não mais difícil do que por exemplo, abordagem de Campo Médio) foi possível obter resultados numéricos confiáveis para parâmetros de ordem "geométricos", para todo o domínio

de variação dos parâmetros externos. A extensão deste tipo de técnica para outras quantidades (geométricas e térmicas) e outras redes significará um progresso desejável.

## CAPÍTULO VI

### FERROMAGNETO DE POTTS EM REDES HIERÁRQUICAS SIMPLES

#### 6.1 - INTRODUÇÃO

Um dos aspectos relevantes em qualquer teoria de aproximações sucessivas é a convergência. Em particular no Grupo de Renormalização (GR) no espaço real, uma vez escolhidos os tipos de células e a transformação, usadas, a convergência das grandezas estudadas é obtida analisando-se células cada vez maiores. Como re-normaliza-se uma célula de tamanho  $b$  em uma outra de tamanho  $b' < b$ , e como a convergência das referidas grandezas é obtida no limite  $b \rightarrow \infty$ , vemos que existe uma infinidade de combinações  $b, b'$  com as quais podemos atingir este limite (por exemplo,  $b' = b/2$ ). Assim uma questão natural que nos vem imediatamente é quão rápida é a convergência nestas tantas formas de se chegar ao limite. Como um exemplo citemos a teoria de "Escalas em Tamanhos Finitos" que prevê, nas duas situações limites ( $b'=1; b \rightarrow \infty$ ) e ( $b'=b-1, b \rightarrow \infty$ ) para a transmissividade térmica (ou equivalentemente para a temperatura) crítica os seguintes comportamentos

$$t_b^* - t_\infty^* \propto \frac{1}{\ln b} \quad (b'=1) \quad (6.1.1)$$

e

$$t_b^* - t_\infty^* \propto \frac{1}{b^x} \quad (b'=b-1) \quad (6.1.2)$$

onde  $x > 0$  é um número não trivial, indicando que a convergência é mais rápida em (6.1.2), pois neste caso o termo corretivo tende a zero com uma lei de potência, enquanto temos uma lei logarítmica no outro caso.

Discutimos esta questão através do uso de duas famílias de células hierárquicas, as quais associamos o modelo de Potts de  $q$ -estados, que são gerados por uma transformação do tipo Migdal - Kadanoff. Concluímos a discussão fazendo, para as mesmas famílias de células, transformações com fator de escala infinitesimal (Grupo de Renormalização Diferencial) onde calculamos temperaturas e expoentes críticos.

## 6.2 - FORMALISMO E RESULTADOS

Consideremos as sequências de células bi-dimensionais indicadas na Fig. 6.2.1. Admitamos inicialmente que as ligações de cada célula obedecem a uma distribuição randômica de probabilidades, onde cada ligação tem probabilidade  $p$  de estar presente e  $1-p$  de estar ausente.

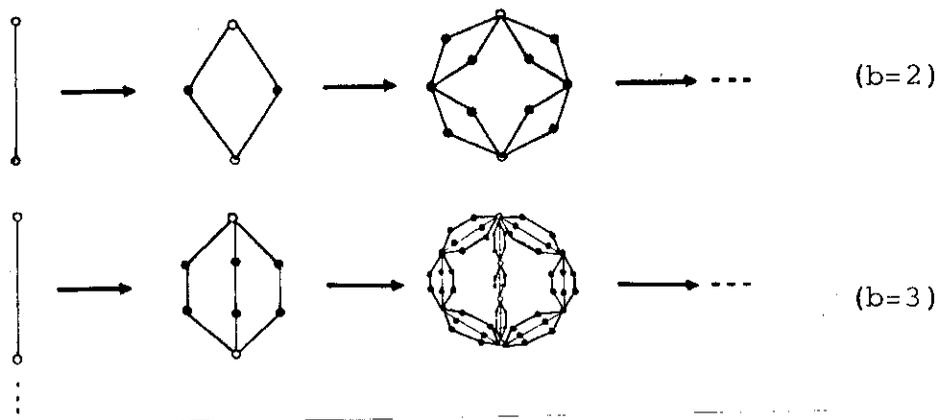


FIGURA 6.2.1 - Diagrama mostrando várias sequências de células hierárquicas caracterizadas pelos seus respectivos motivos (gerador da sequência).

Se cada sequência representa uma transformação do Grupo de Renormalização (GR) então a relação entre as probabilidades  $p$  e  $p'$  que definem a iteração no grupo é facilmente obtida e é dada pela seguinte equação:

$$p' = 1 - (1-p)^b \quad (6.2.1)$$

A generalização da eq. (6.2.1) para o modelo de Potts de  $q$ -estados leva à seguinte expressão:

$$t'_b = \frac{1 - \left[\frac{1-t}{b}\right]^b}{1+Qt} \quad (6.2.2)$$

$$1 + Q \left[\frac{1-t}{b}\right]^b$$

onde  $Q = q-1$ ,  $q$  o número de estados da variável de Potts e  $t$  a transmissividade. Para  $q = 1$  reobtemos a eq. (6.2.1).

Os pontos fixos  $t^*$  correspondentes à renormalização de uma célula de tamanho  $b$  em outra de tamanho  $b' < b$ , são determinados a partir da eq. (6.2.2) resolvendo-se a seguinte equação

$$t'_b(t^*) - t'_{b'}(t^*) = 0 \quad (6.2.3)$$

Apresentamos na Fig. 6.2.2 a evolução de  $t^*(b,b')$ , para  $q=2$ , como função de  $b$ , para duas situações distintas, a saber: (a)  $b' = 1$ ; (b)  $b' = b-1$ . As outras soluções são intermediárias entre estas duas.

Analisando a eq. (6.2.2) podemos mostrar que no limite  $b \rightarrow \infty$ ,  $t^*(b,b') \rightarrow 1$  e que as duas situações correspondentes à Fig. 6.2.2 atingem este limite com os seguintes comportamentos assintóticos

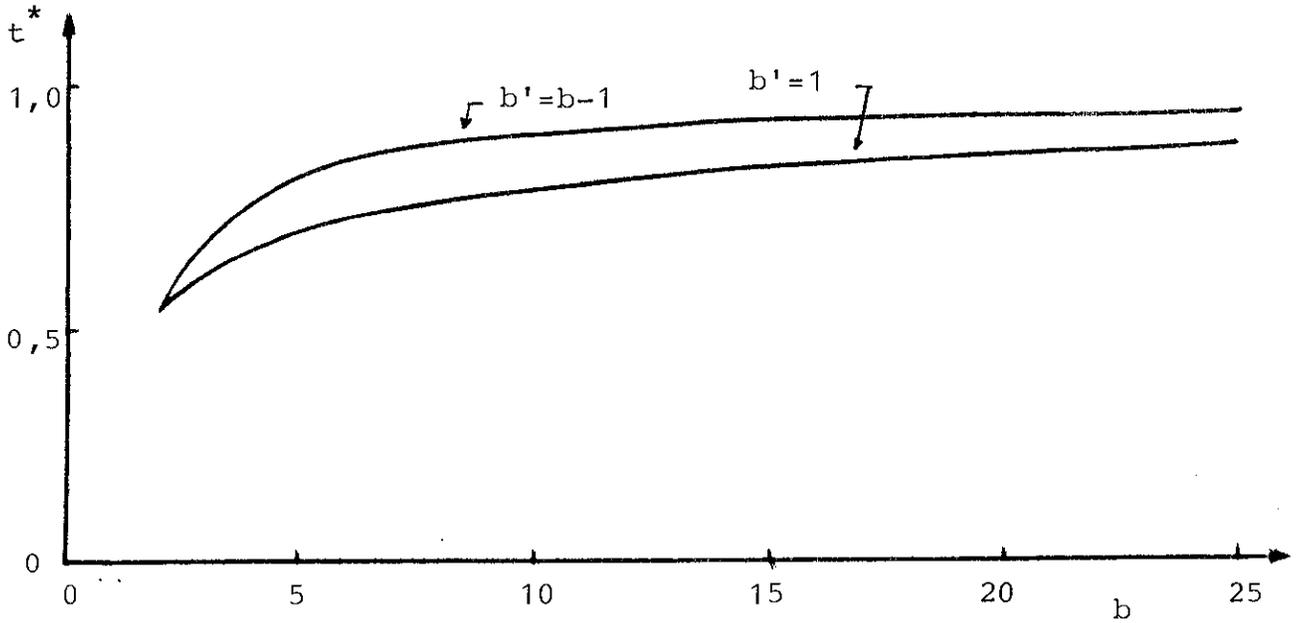


FIGURA 6.2.2 - Diagrama mostrando a evolução de  $t^*(b,b')$  versus  $b$  para dois casos distintos: (a)  $b' = 1$ ; (b)  $b' = b-1$ .

$$t^* \sim 1 - \frac{2}{b} \quad (b'=1) \quad (6.2.4)$$

e

$$t^* \sim 1 - \frac{2}{e} \frac{1}{b} \quad (b'=b-1) \quad (6.2.5)$$

Vemos que as transformações de GR fornecem no limite  $b \rightarrow \infty$ , somente pontos fixos triviais. As correções assintóticas (6.2.4) e (6.2.5) apresentam a mesma lei de potências. Apesar disto, vemos que a amplitude no segundo caso é menor, indicando, como mostra a Fig. 6.2.2, que a convergência é mais rápida quando  $b' = b-1$ . As situações intermediárias (por exemplo,  $b'=2, b=4,5,\dots$ ;  $b'=3, b=5,6,\dots$ ) obedecem à mesma estrutura, ou seja, para um dado  $b$  a convergência é tão mais acelerada quanto mais próximo de  $b$  for  $b'$ . Portanto, dentre todas as combinações  $b,b'$  que podemos ter, para o exemplo em questão, para construir a transformação de GR, a situação onde  $b' = b-1$  é a de convergência mais rápida.

Consideremos agora as famílias de células ilustradas pela seguinte figura:

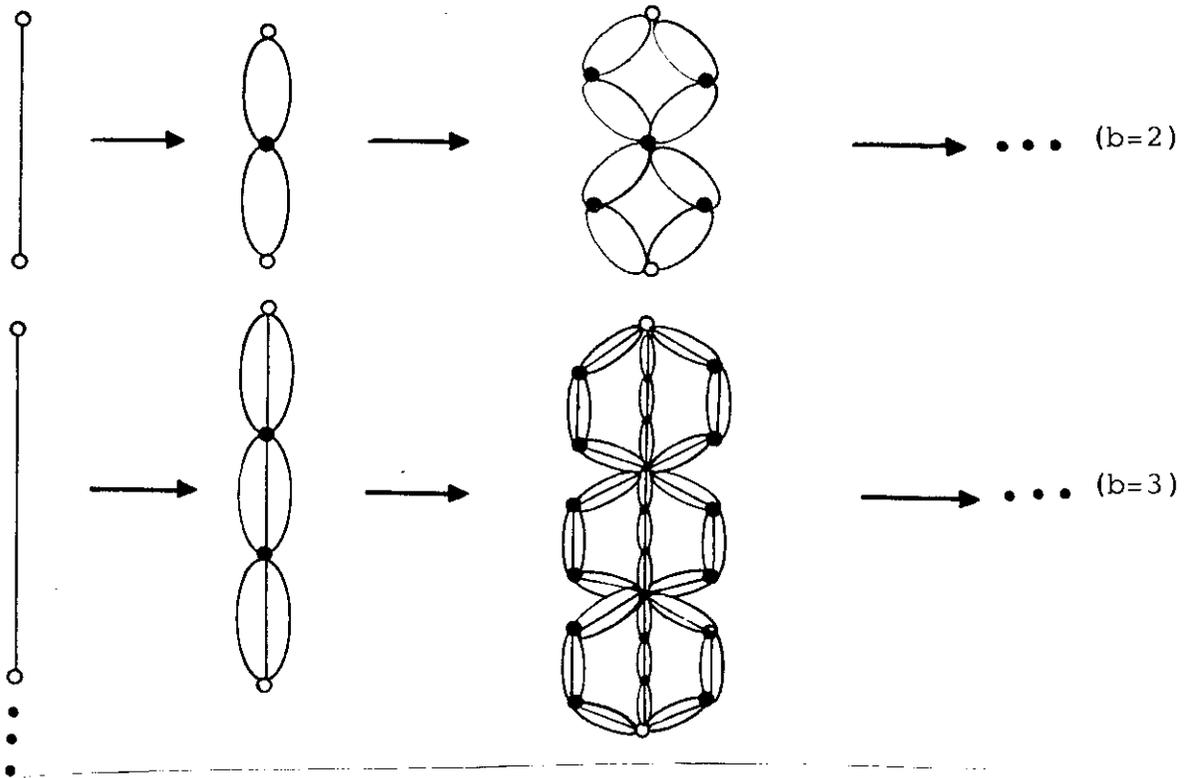


FIGURA 6.2.3 - Diagrama mostrando várias sequências de células hierárquicas caracterizadas pelos seus respectivos motivos. Cada célula desta figura é dual da equivalente célula na Fig. 6.2.1.

A expressão análoga à eq. (6.2.2) para este caso é

$$t'_b = \left[ \frac{1 - \left(\frac{1-t}{1+Qt}\right)^b}{1 + Q \left(\frac{1-t}{1+Qt}\right)^b} \right]^b \quad (6.2.6)$$

Podemos observar que as sequências de células na Fig. 6.2.3 são duais daquelas dadas pela Fig. 6.2.1. As transmissividades de uma dada célula e de sua dual relacionam-se pela seguinte expressão

$$t_i^D \equiv \frac{1-t}{1+Qt} \quad (6.2.7)$$

onde D em  $t_i^D$  significa dual. Por conseguinte, toda informação que

queremos sobre  $t^*$  pode ser extraída da discussão precedente com respeito à primeira família de células, através do uso da equação (6.2.7). Desta maneira é fácil ver que no presente caso, quando  $b \rightarrow \infty$ ,  $t \rightarrow 0$  com os seguintes comportamentos assintóticos

$$t^* \sim \frac{1}{b} \quad (b'=1) \quad (6.2.8)$$

e

$$t^* \sim \frac{1}{e} \frac{1}{b} \quad (b'=b-1) \quad (6.2.9)$$

onde mais uma vez constatamos que  $b' = b-1$  corresponde à situação de convergência mais rápida.

### 6.3 - GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DIFERENCIAL

A análise feita na seção anterior para as duas famílias de células bi-dimensionais pode ser estendida para uma dimensão  $d$  qualquer. As correspondentes famílias de células obtidas apresentam as mesmas características do caso  $d = 2$ , no que se refere a critério de rapidez de convergência e ao valor limite  $t$  da transmissividade quando  $b \rightarrow \infty$  (devemos lembrar que a propriedade de dualidade existe somente para  $d = 2$ ). A expressão  $d$ -dimensional correspondente à eq. (6.2.2) e Fig. 6.2.1 é dada por

$$t' = \frac{1 - \left[ \frac{1-t^b}{1+Qt^b} \right] b^D}{1 + Q \left[ \frac{1-t^b}{1+Qt^b} \right] b^D} \quad (6.3.1)$$

onde  $D = d-1$  e  $d$  é a dimensão espacial.

Consideremos a transformação de GR onde  $b' = 1$  e  $b = 1+\mu$ , obtida através de uma extensão analítica da eq. (6.3.1). Fazendo  $b = 1+\mu$  obtemos que

$$b^D \cong 1+D\mu \quad (6.3.2)$$

$$t^b \cong t(1+\mu \ln t) \quad (6.3.3)$$

Usando estas expressões na eq. (6.3.1) e fazendo uma expansão em  $\mu$  em que mantemos somente termos de primeira ordem, obtemos que

$$t' = t+\mu [t \ln t - D \frac{(1-t)(1+Qt)}{1+Q} \ln(\frac{1-t}{1+Qt})] \quad (6.3.4)$$

O ponto fixo da eq. (6.3.4) é

$$t^* \ln t^* = D \frac{(1-t^*)(1+Qt^*)}{1+Q} \ln(\frac{1-t^*}{1+Qt^*}) \quad (6.3.5)$$

que fornece os seguintes comportamentos assintóticos

$$t^* \sim 1 - q e^{-\frac{1}{d-1}} \quad (d \rightarrow 1) \quad (6.3.6)$$

que reproduz o resultado exato <sup>(109)</sup> para redes hipercúbicas de Bravais quase unidimensionais.

$$t^* = \frac{1}{\sqrt{q}+1} \quad (d = 2) \quad (6.3.7)$$

que também é exato para a rede quadrada. Este fato não nos surpreende uma vez que a família de células que estamos tratando preserva uma das propriedades geométricas mais relevantes da rede quadra

da, no que diz respeito a determinação de quantidades críticas, que é a auto-dualidade. Obtemos também que

$$t^* \sim e^{-(\bar{d}-1)} \quad (\bar{d} \rightarrow \infty) \quad (6.3.8)$$

que não corresponde à resposta exata na rede hipercúbica.

Na Tabela 6.3.1 e nas Figs. 6.3.1 e 6.3.2, apresentamos resultados para a transmissividade crítica  $t^*$  para diversos valores de  $q$  e da dimensão  $d$ .

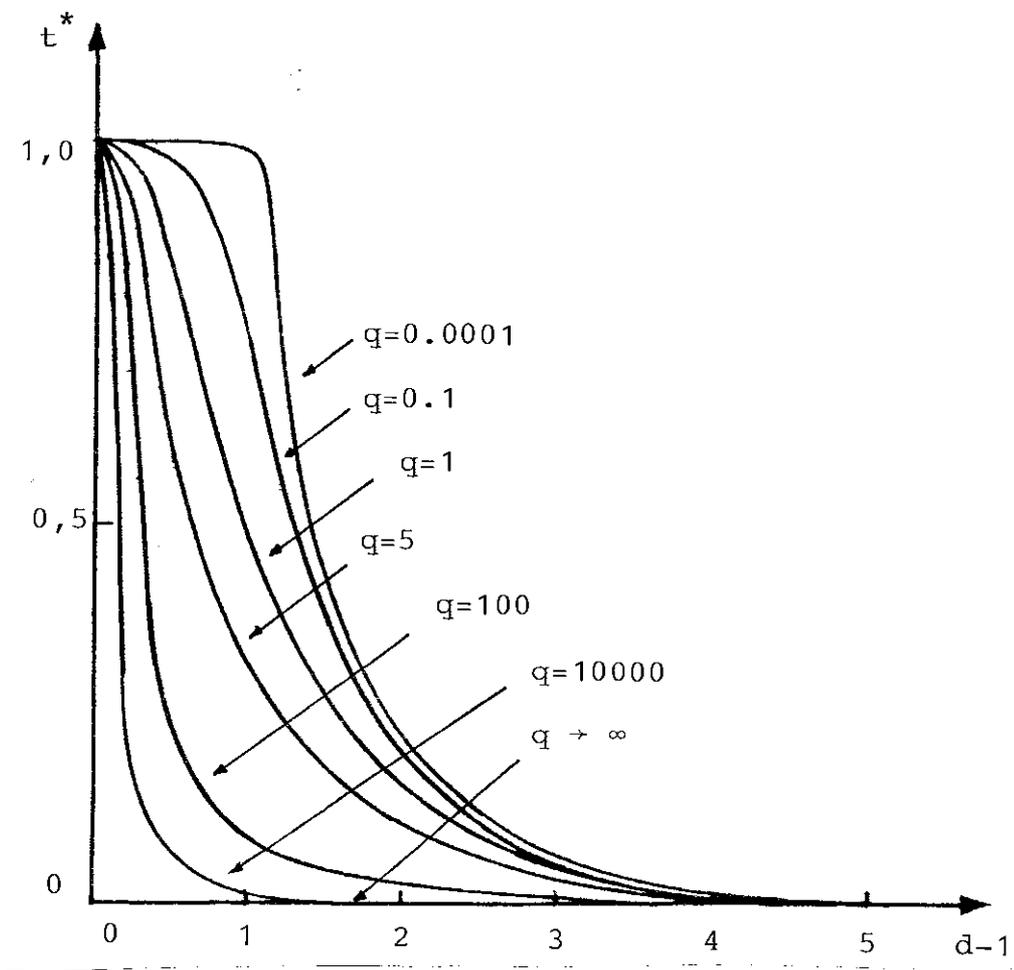


FIGURA 6.3.1 - Valores da transmissividade crítica  $t^*$  em função da dimensão  $d$  para vários valores de  $q$ .

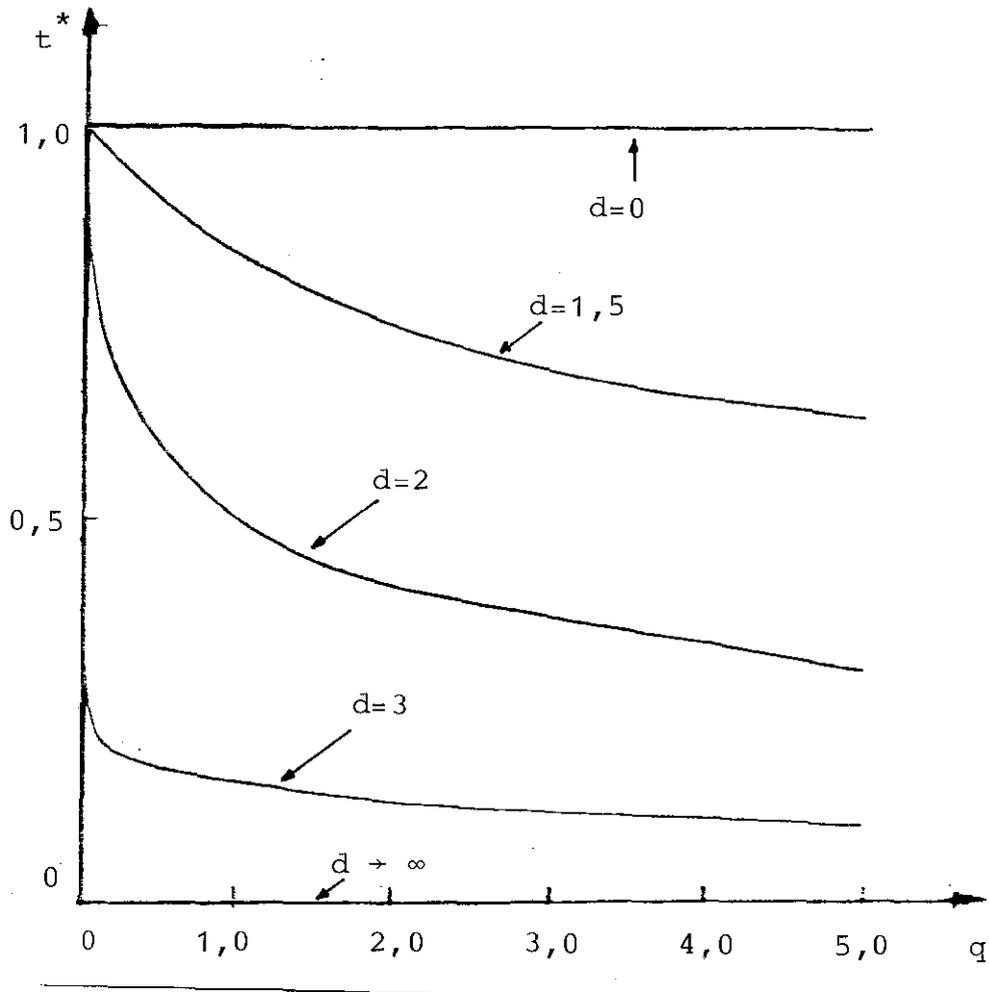


FIGURA 6.3.2 - Valores da transmissividade crítica  $t^*$  em função de  $q$  para diversos valores da dimensão  $d$ .

$\frac{d-1}{q}$	0	.2	.5	1	2	5	$\infty$
.2	1	0,9986	0,9549	0,6910	0,1910	0,0007	0
	$\infty$	5,1615	3,0536	2,8825	1,5268	1,0323	1
.5	1	0,9965	0,9029	0,5858	0,1770	0,0007	0
	$\infty$	5,1332	2,7474	2,0519	1,3737	1,0266	1
1	1	0,9931	0,8396	1/2	0,1604	0,0007	0
	$\infty$	5,0876	2,4387	1,6294	1,2193	1,0175	1
2	1	0,9866	0,7561	0,4142	0,1389	0,0007	0
	$\infty$	5,0015	2,1093	1,3270	1,0547	1,0003	1
5	1	0,9687	0,6260	0,3090	0,1067	0,0006	0
	$\infty$	4,7778	1,7173	1,0530	0,8586	0,9556	1
$\infty$	1	0	0	0	0	0	0
	$\infty$	-	-	-	-	-	1

TABELA 6.3.1 - Valores da transmissividade crítica  $t^*$  (números superiores) e dos expoentes críticos (números inferiores) correspondentes à renormalização usando as duas famílias de células descritas pelas eqs. (6.3.1) e (6.3.14).

Consideremos agora o cálculo do expoente crítico  $\nu$  associado ao comprimento de correlação. Ele é dado pela seguinte expressão

$$\nu = \ln b / \ln \lambda \tag{6.3.9}$$

onde  $b = 1 + \mu$  e  $\lambda = \left. \frac{dt'}{dt} \right|_{t=t^*}$ .

A partir da eq. (6.3.4) obtemos que

$$v^{-1} = 1 + \ln t^* - \frac{D}{q} \left\{ [(Q-1-2Qt^*) \ln(\frac{1-t^*}{1+Qt^*}) - q] \right\} \quad (6.3.10)$$

que tem os seguintes comportamentos

$$v \sim \frac{1}{d-1} \quad (d \rightarrow 1) \quad (6.3.11)$$

que reproduz o resultado exato <sup>(109)</sup>

$$v^{-1} = 2 \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{q}} \ln(\sqrt{q} + 1) \right) \quad (d=2) \quad (6.3.12)$$

que não corresponde à resposta exata <sup>(60)</sup>, e

$$v \rightarrow 1 \quad (d \rightarrow \infty) \quad (6.3.13)$$

Na Tabela 6.3.1 e nas Figs. 6.3.3 e 6.3.4 apresentamos resultados para o expoente crítico  $v$  para diversos valores de  $q$  e da dimensão  $d$ .

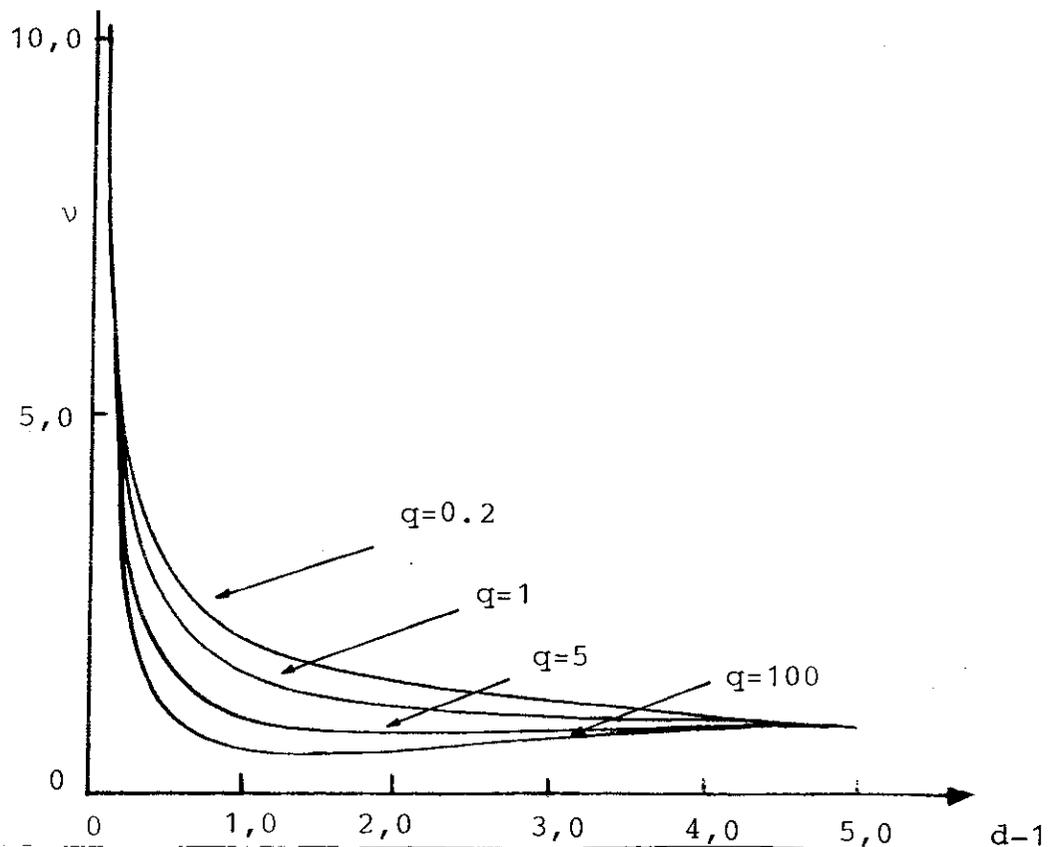


FIGURA 6.3.3 - Valores do expoente crítico  $v$  em função da dimensão para diversos valores de  $q$ .

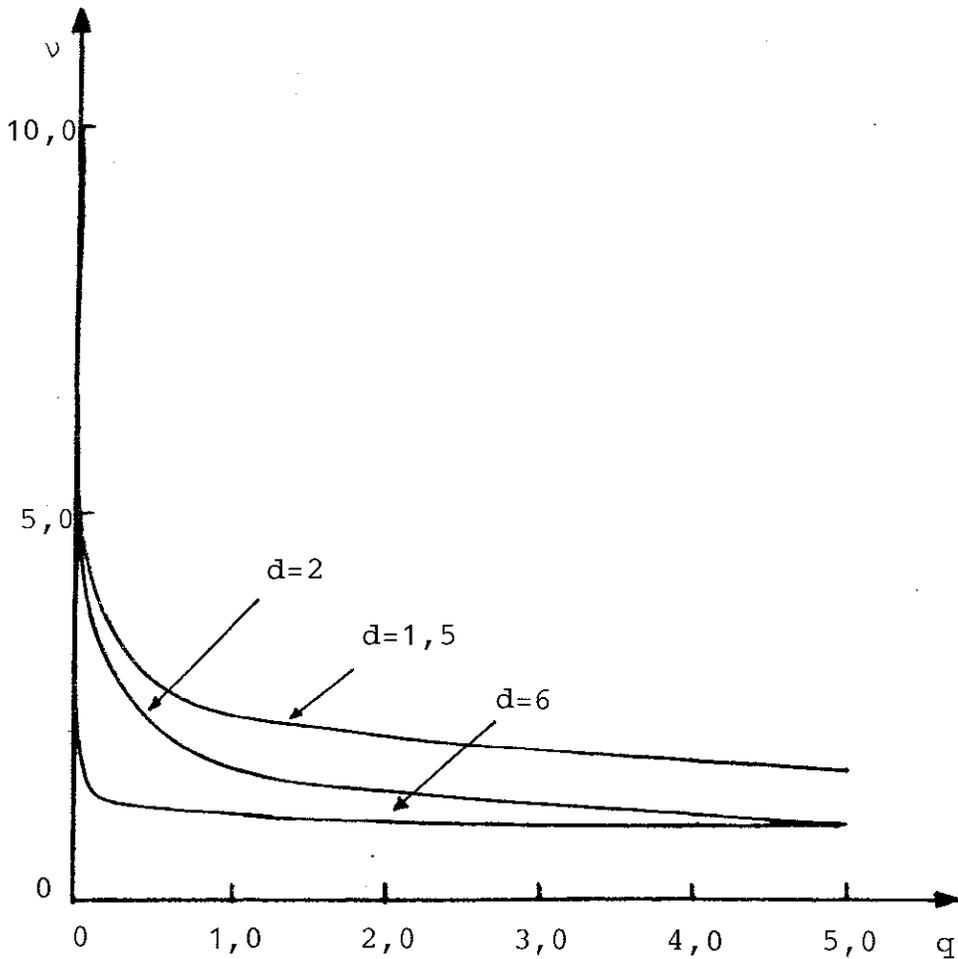


FIGURA 6.3.4 - Valores do expoente crítico  $\nu$  em função de  $q$  para diversos valores da dimensão  $d$ .

Observamos que os resultados obtidos através do uso da transformação infinitesimal, não coincidem com aqueles dados pela transformação onde  $b' = b-1$  no limite  $b \rightarrow \infty$ , como esta transformação poderia sugerir, pelo fato de  $b/b'$  tender a 1.

A equação  $d$ -dimensional correspondente à expressão (6.2.6) e à Fig. 6.2.3 é imediatamente formulada:

$$t' = \left[ \frac{1 - \left(\frac{1-t}{1+Qt}\right)^{b^D}}{1 + Q \left(\frac{1-t}{1+Qt}\right)^{b^D}} \right]^b \quad (6.3.14)$$

Procedendo da mesma forma que discutimos a eq. (6.3.1) obtemos que a transformação dada pela eq. (6.3.14) fornece a mesma aproxima -

ção linear em  $\mu$  que a dada por aquela equação, ou seja, a expressão dada pela eq. (6.3.4). Assim vemos que, na aproximação linear em  $\mu$  em questão, a família de células representada pela eq. (6.3.14) fornece, para uma renormalização com fator de escala infinitesimal, as mesmas temperaturas e os mesmos expoentes críticos.

Consideremos os motivos, geradores de transformação de GR, dados pela seguinte figura

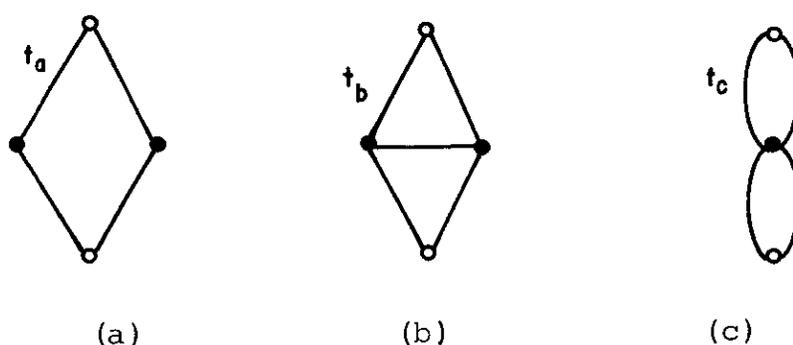


FIGURA 6.3.5 - Diagrama ilustrando três tipos de células usadas em uma transformação de GR.  $t_a$ ,  $t_b$  e  $t_c$  são transmissividades térmicas.

Sabemos que os pontos críticos das transformações associadas com os três motivos, satisfazem à seguinte relação

$$t_a^* \leq t_b^* \leq t_c^* \quad (6.3.15)$$

Como temos visto que a célula "a" e a célula "c" fornecem a mesma temperatura crítica, então a eq. (6.3.15) implica  $t_a^* = t_b^* = t_c^*$ . Desse modo vemos que a renormalização usando a célula (b), que é auto dual, também leva a resposta exata.

## 6.4 - CONCLUSÕES

Mostramos para duas famílias de células hierárquicas, que no Grupo de Renormalização no espaço real, ao escolhermos as células que geram a transformação iterativa do Grupo, a convergência é tão mais rápida quanto mais próximo de  $b$  (tamanho da célula a ser renormalizada) for  $b'$  (célula renormalizada), tendo seu valor ótimo quando  $b' = b-1$ .

Em uma segunda etapa analisamos a transformação infinitesimal onde  $b = 1+\mu$  e  $b' = 1$ , obtida através de uma extensão analítica das eqs. (6.3.1) e (6.3.14). Vimos que as duas famílias de células estudadas levam aos mesmos resultados para a temperatura crítica e para o expoente crítico do comprimento de correlação. Com relação à temperatura crítica, obtivemos a resposta exata no limite  $d \rightarrow 1$  <sup>(109)</sup> para redes hipercúbicas de Bravais quase unidimensionais e para  $d = 2$  correspondente à rede quadrada, onde neste caso, justificamos este resultado (exato) pelo fato das células serem auto-duais. Quanto aos expoentes críticos, conseguimos reproduzir o resultado exato somente no limite  $d \rightarrow 1$  <sup>(109)</sup>.

Discutimos a convergência da temperatura crítica através do uso de células que fornecem pontos fixos triviais quando  $b \rightarrow \infty$  ( $t = 1$  para a primeira família e  $t = 0$  para a segunda). Talvez por isto encontramos nos casos limites  $b' = 1$  e  $b' = b-1$ , correções assintóticas que diferem apenas na amplitude. Seria interessante fazer o mesmo tipo de estudo para outras famílias de células que apresentem pontos fixos não triviais no limite  $b \rightarrow \infty$ . Acreditamos que nestes casos, não só as amplitudes mas também as formas funcionais dos termos corretivos podem ser diferentes.

## CAPÍTULO VII

### ESPALHAMENTO SIMPLES E MÚLTIPLO EM MEIO UNIDIMENSIONAL DESORDENADO: ABORDAGEM DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

#### 7.1 - INTRODUÇÃO

A teoria básica de espalhamento pode ser considerada atualmente como bastante desenvolvida (veja por exemplo as refs. (110) e (111)). Isto é particularmente verdadeiro para um meio ordenado, mas para meio desordenado o problema apresenta um grau mais elevado de dificuldade. O objetivo deste capítulo (112), é mostrar como este tipo de estudo pode ser empreendido a partir do ponto de vista da teoria de fenômenos críticos (veja por exemplo a ref. (113)); nenhuma tentativa deste tipo foi feita antes, embora o correspondente tratamento de difusão já esteja disponível (114,115). Ilustramos a abordagem em modelos uni-dimensionais simples para espalhamento elástico incoerente, simples e múltiplo.

Na Seção II estabelecemos os resultados exatos no que concerne à dependência da intensidade  $I$  com a distância  $l$  e com o comprimento de penetração  $\xi$  associado (função de parâmetros microscópicos do modelo). Na Seção III reobtemos  $\xi$  em um contexto de Grupo de Renormalização (GR) no espaço real conveniente; na Seção IV estendemos a discussão para modelos generalizados e finalmente concluímos na Seção V.

## 7.2 - MODELOS DE ESPALHAMENTO

Consideremos uma cadeia linear regular semi-infinita (com parâmetro cristalino igual a unidade) de centros espalhadores elásticos que espalham ao longo da cadeia; denotemos por  $f_i$  o coeficiente de transmissão de intensidade do  $i$ -ésimo centro ( $0 \leq f_i \leq 1, \forall i$ ;  $1-f_i$  é a fração refletida para trás).

Assumindo que o regime de espalhamento é simples ao longo do semi-espaco inteiro, a razão de intensidade  $I(\ell)/I_0$  após atravessar os  $\ell$  primeiros centros ( $I_0$  sendo a intensidade incidente inicial de o que quer que seja espalhado) é dada por

$$\frac{I(\ell)}{I_0} = \prod_{i=1}^{\ell} f_i \quad (\text{simples}) \quad (7.2.1)$$

Se o coeficiente de transmissão é  $f_0$ , o mesmo para todos os centros, então a eq. (7.2.1) pode ser reescrita como segue:

$$I(\ell)/I_0 = e^{-\ell/\xi} \quad (\text{simples}) \quad (7.2.2)$$

onde

$$\xi = \frac{1}{\ln \frac{1}{f_0}} \quad (7.2.3)$$

Se assumimos em vez disso que o regime de espalhamento é múltiplo ao longo do semi-espaco inteiro, o estabelecimento da razão  $I(\ell)/I_0$  requer um pequeno desenvolvimento. Consideremos os dois primeiros centros espalhadores, com coeficientes  $f_1$  e  $f_2$ ; eles constituem um centro espalhador composto com coeficiente equivalente  $f_\ell \equiv I(2)/I_0$  dado por

$$f_\ell = f_1 f_2 \{ 1 + (1-f_1)(1-f_2) + [(1-f_1)(1-f_2)]^2 + \dots \}$$

$$= \frac{f_1 f_2}{1 - (1-f_1)(1-f_2)} \quad (7.2.4a)$$

Esta expressão pode ser convenientemente reescrita como segue:

$$\frac{1-f_\ell}{f_\ell} = \frac{1-f_1}{f_1} + \frac{1-f_2}{f_2} \quad (7.2.4b)$$

O uso recursivo da eq. (7.2.4b) leva à seguinte expressão geral:

$$\frac{1-I(\ell)/I_0}{I(\ell)/I_0} = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{1-f_i}{f_i} \quad (\text{múltiplo}) \quad (7.2.5)$$

Se o coeficiente de transmissão é o mesmo para todos os centros ( $f_0$ ) então a eq. (7.2.5) fornece

$$\frac{I(\ell)}{I_0} = \frac{1}{1+\ell/\xi} \quad (\text{múltiplo}) \quad (7.2.6)$$

onde

$$\xi = \frac{f_0}{1-f_0} \quad (7.2.7)$$

Note-se que a hipótese do processo múltiplo leva, no limite de longas distâncias, a uma lei de potência ( $I(\ell)/I_0 \sim \xi/\ell$ ), em contraste com a lei exponencial correspondente ao espalhamento simples.

Consideremos agora o caso em que existe uma diluição de centros espalhadores na cadeia linear, isto é, a cada centro associamos a seguinte lei de distribuição:

$$P(f) = (1-p)\delta(f-1) + p\delta(f-f_0) \quad (0 \leq p, f_0 \leq 1) \quad (7.2.8)$$

Esta nova situação não é senão a anterior ( $p=1$ ) com distâncias reescaladas (note-se que a intensidade  $I(\ell)$  não deve depender, para  $\ell \gg 1$ , da ordem dos centros e vacâncias, desde que suas respectivas concentrações sejam preservadas); conseqüentemente as eqs. (7.2.2) e (7.2.6) continuam sendo válidas porém  $\xi$  muda para  $\xi/p$ , isto é, as eqs. (7.2.3) e (7.2.7) são, respectivamente, estendidas para

$$\xi = \frac{1}{p \ln \frac{1}{f_0}} \quad (\text{simples}) \quad (7.2.9)$$

e

$$\xi = \frac{f_0}{p(1-f_0)} \quad (\text{múltiplo}) \quad (7.2.10)$$

### 7.3 - ABORDAGEM ATRAVÉS DO USO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

Consideremos o caso onde todos os centros espalhadores são idênticos ( $f_i = f_0, \forall_i$ ). Seguindo o procedimento usual de GR, renormalizamos um "bloco" de  $b$  centros espalhadores em um bloco menor de  $b'$  centros; o comprimento de penetração  $\xi$  se escala da seguinte maneira:

$$\xi'/b' = \xi/b \quad (7.3.1)$$

A questão que se coloca é se esta equação e aquelas (a serem estabelecidas) que renormalizam  $f_0$  e  $p$  (em  $f_0'$  e  $p'$ ) nos permitem calcular a função  $\xi(f_0, p)$ .

Vamos primeiramente tratar o caso puro ( $p=1$ ). A equação recursiva para  $f_0$  é dada por

$$f_0^{b'} = f_0^b \quad (\text{simples}) \quad (7.3.2)$$

ou

$$b' \frac{1-f_0'}{f_0'} = b \frac{1-f_0}{f_0} \quad (\text{múltiplo}) \quad (7.3.3)$$

Imediatamente verificamos que as eqs. (7.3.1), (7.3.2) (eqs.(7.3.1) e (7.3.3)) levam, para todos os valores de  $b$  e  $b'$ , a eq. (7.2.3) (eq. (7.2.7)) exceto por uma constante multiplicativa arbitrária. Note-se também que tanto as eqs. (7.3.2) e (7.3.3) fornecem um ponto fixo (trivial) estável, a saber  $f_0 = 0$ , e também um ponto fixo (crítico) instável  $f_0 = 1$ .

A discussão (GR) do caso diluído ( $p \leq 1$ ) é menos direta e clara do que a anterior ( $p=1$ ). A lei binária (7.2.8) torna-se, para um "bloco" de  $b$  centros espalhadores, complexa e é dada por

$$P_b(f) = \sum_{i=0}^b \binom{b}{i} (1-p)^{b-i} p^i \delta(f - \bar{F}_i(f_0)) \quad (7.3.4)$$

onde

$$\bar{F}_i(f_0) = \begin{cases} f_0^i & (\text{simples}) & (7.3.5a) \\ \frac{f_0}{f_0+i(1-f_0)} & (\text{múltiplo}) & (7.3.5b) \end{cases}$$

Um GR  $b \rightarrow b'$  completamente satisfatório exigiria a identificação de  $P_b \equiv P_b(f; f_0, p)$  e  $P_{b'} \equiv P_{b'}(f; f_0', p')$ , que é obviamente impossível, já que as duas distribuições possuem quantidades diferentes

de funções  $\delta$ . Consequentemente, se não temos intenção de seguir a evolução completa e bastante complexa, sob renormalizações sucessivas, da lei de distribuição, precisamos fazer uma aproximação. A presente escolha será a de abordar a distribuição renormalizada verdadeira através da seguinte distribuição binária

$$P'(f) = (1-p')\delta(f-1) + p'\delta(f-f'_0) \quad (7.3.6)$$

Em outras palavras, substituímos a identificação impossível de  $P_b$  e  $P'_b$ , pela identificação possível de  $P$  e  $P'$ , enquanto preservamos tantos momentos quanto podemos (dois no nosso caso porque temos só dois parâmetros,  $p$  e  $f_0$ ). Assim, as relações de recorrência para  $p$  e  $f_0$  são construídas impondo-se

$$\langle g(f) \rangle_{P'_b} = \langle g(f) \rangle_{P_b} \quad (7.3.7)$$

e

$$\langle [g(f)]^2 \rangle_{P'_b} = \langle [g(f)]^2 \rangle_{P_b} \quad (7.3.8)$$

onde  $g(f)$  é uma função (em princípio) arbitrária a ser escolhida. Usando a eq. (7.3.4) podemos escrever as eqs. (7.3.7) e (7.3.8) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^{b'} \binom{b'}{i} (1-p')^{b'-i} p'^i g(\bar{f}_i(f'_0)) \\ &= \sum_{i=0}^b \binom{b}{i} (1-p)^{b-i} p^i g(\bar{f}_i(f_0)) \end{aligned} \quad (7.3.9)$$

e

$$\sum_{i=0}^{b'} \binom{b'}{i} (1-p')^{b'-i} p'^i [g(\bar{f}_i(f'_0))]^2 =$$

$$\sum_{i=0}^b \binom{b}{i} (1-p)^{b-i} [g(\bar{f}_i(f_0))]^2 \quad (7.3.10)$$

Estas equações determinam (pelo menos implicitamente)  $p' = p'(p, f_0)$  e  $f_0' = f_0'(p, f_0)$ , uma vez tendo escolhido a função  $g(f)$ . A escolha mais simples que se pode pensar é  $g(f) = f$  (denotamos por GR-f as relações recursivas correspondentes): ela fornece resultados bastante razoáveis em todo o espaço  $(p, f_0)$  (veja Fig. 7.3.1), bem como o comportamento "crítico" exato (a saber  $\xi \propto 1/p$ ) se  $p \rightarrow 0$  e  $0 < f_0 < 1$ , e  $\xi \propto 1/(1-f_0)$  se  $f_0 \rightarrow 1$  e  $0 < p \leq 1$ ) para os modelos de espalhamento simples e múltiplo.

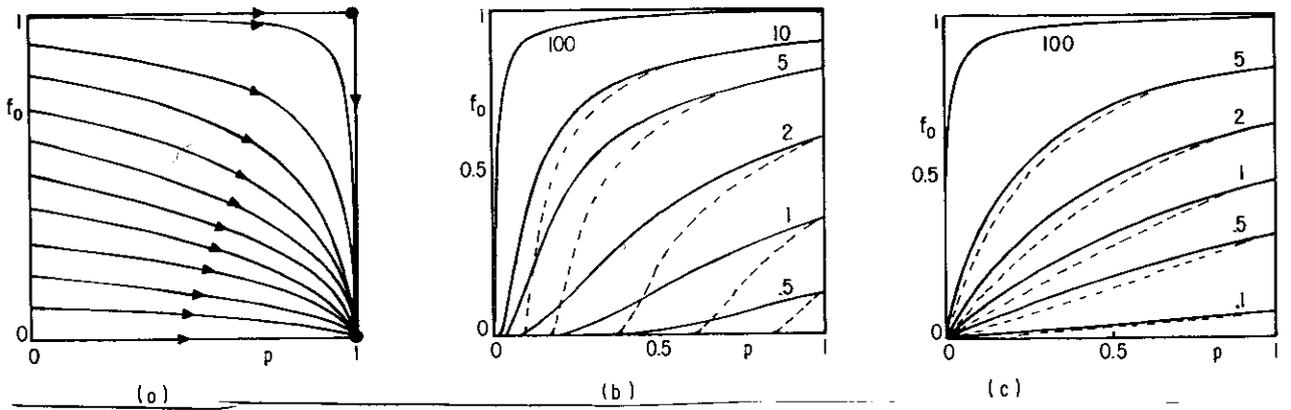


FIGURA 7.3.1 - (a) Diagrama indicativo do fluxo-GR no espaço  $f_0$  (coeficiente de transmissão) X  $p$  (concentração) para ambos GR-f e GR-s, para modelos de espalhamento simples e múltiplo (● denota pontos fixos; a linha  $p = 0$  e  $0 \leq f_0 \leq 1$  é uma linha de pontos fixos). Linhas típicas iso- $\xi$  (o valor do comprimento de penetração é indicado nas curvas) correspondendo a modelos de espalhamento simples (b) e múltiplo (c): as linhas cheias são resultados exatos (reobtido pelo GR-s,  $\forall b, b'$ ), e as linhas tracejadas correspondem ao GR-f com  $b'=1$  e  $b=2$  (note-se a melhora dos resultados quando  $\xi$  aumenta: para  $\xi = 100$  não existe nenhuma discrepância gráfica).

Contudo a escolha mais simples não é a melhor: se escolhermos  $g(f) = s(f)$  (denotamos por GR-s as relações recursivas correspondentes), onde

$$s(f) = \begin{cases} \ln \frac{1}{f} & \text{(simples)} \\ \frac{1-f}{f} & \text{(m\u00faltiplo)} \end{cases} \quad \begin{matrix} (7.3.11a) \\ (7.3.11b) \end{matrix}$$

verificamos que  $g(\bar{f}_1(f_0)) = ig(f_0)$  para ambos espalhamentos, simples e m\u00faltiplo. Usando esta propriedade as eqs. (7.3.9) e (7.3.10) podem ser diretamente somadas, e obtemos

$$b'p's(f'_0) = b ps(f_0) \quad (7.3.12)$$

e

$$b'p'(1-p')[s(f'_0)]^2 = bp(1-p)[s(f_0)]^2 \quad (7.3.13)$$

A eq. (7.3.12) juntamente com a eq. (7.3.1) fornecem imediatamente (exceto por uma constante multiplicativa arbitr\u00e1ria)

$$\xi = \frac{1}{ps(f_0)} \quad (7.3.14)$$

que \u00e9 a resposta exata para ambos os tipos de espalhamento. Em certo sentido \u00e9 surpreendente verificar que existe uma escolha relativamente simples de  $g(f)$  que compensa exatamente os erros introduzidos pela nossa aproxima\u00e7\u00e3o (em princ\u00edpio) grosseira, a saber a substitui\u00e7\u00e3o de uma lei de distribui\u00e7\u00e3o bastante complexa por uma bin\u00e1ria simples. Finalmente \u00e9 importante notar que as eqs. (7.3.12) e (7.3.13) fornecem uma rela\u00e7\u00e3o de recorr\u00eancia para  $p$  independente de  $f_0$ :

$$b' \frac{p'}{1-p'} = b \frac{p}{1-p} \quad (7.3.15)$$

que apresenta os pontos fixos  $p = 0$  (inst\u00e1vel) e  $p = 1$  (est\u00e1vel) .

Esta equação é bastante diferente daquela típica de percolação, a saber  $q^{b'} = q^b$ , onde introduzimos a variável  $q \equiv 1-p$  correspondendo à concentração de "buracos" de centros espalhadores.

#### 7.4 - MODELOS GENERALIZADOS

Vamos agora estender os modelos de espalhamento que estivemos considerando associando a cada centro espalhador a seguinte lei de distribuição

$$P(f) = (1-p)\delta(f-f_1) + p\delta(f-f_2) \quad (0 \leq f_1, f_2 \leq 1) \quad (7.4.1)$$

a qual para  $f_1 = 1$  e  $f_2 = f_0$ , reproduz a eq. (7.2.8). As eqs. (7.2.2) e (7.2.6) continuam válidas, com as expressões (7.2.3) e (7.2.7) generalizadas para

$$\xi = \frac{1}{(1-p)s(f_1) + ps(f_2)} \quad (7.4.2)$$

com  $s(f)$  dado pela eq. (7.3.11) (para uma distribuição arbitrária  $P(f)$  a eq. (7.4.2) se tornaria  $\xi = 1/\langle s(f) \rangle_p$ ).

Se queremos abordar este modelo estendido com um formalismo de GR, podemos seguir ao longo das linhas da Seção III, e introduzir a lei de distribuição renormalizada

$$P'(f) = (1-p')\delta(f-f_1') + p'\delta(f-f_2') \quad (7.4.3)$$

que generaliza a eq. (7.3.6). Agora temos um espaço de parâmetros

tri-dimensional (a saber  $p, f_1$  e  $f_2$ ); conseqüentemente, às eqs. (7.3.7) e (7.3.8) adicionamos a seguinte equação

$$\langle [g(f)]^3 \rangle_{P_{b'}} = \langle [g(f)]^3 \rangle_{P_b} \quad (7.4.4)$$

onde  $P_b$  (e analogamente  $P_{b'}$ ) agora é dado por

$$P_b(f) = \sum_{i=0}^b \binom{b}{i} (1-p)^{b-i} p^i \delta(f - \bar{f}_i(f_1, f_2)) \quad (7.4.5)$$

onde

$$\bar{f}_i(f_1, f_2) = \begin{cases} f_1^{b-i} f_2^i & \text{(simples)} \\ \frac{1}{1+(b-i) \frac{1-f_1}{f_1} + i \frac{1-f_2}{f_2}} & \text{(múltiplo)} \end{cases} \quad (7.4.6a)$$

$$(7.4.6b)$$

Se escolhemos  $g(f) = s(f)$  dado pela eq. (7.3.11) (denotado por GR-s), verificamos que  $g(\bar{f}_i(f_1, f_2)) = (b-i)g(f_1) + ig(f_2)$  para ambos espalhamentos, simples e múltiplo. Usando esta propriedade, as eqs. (7.3.7), (7.3.8) e (7.4.4) fornecem

$$b' [(1-p')s(f_1') + p's(f_2')] = b [(1-p)s(f_1) + ps(f_2)] \quad , \quad (7.4.7)$$

$$b'p'(1-p') [s(f_2') - s(f_1')]^2 = bp(1-p) [s(f_2) - s(f_1)]^2 \quad , \quad (7.4.8)$$

$$b'p'(1-p')(1-2p') [s(f_2') - s(f_1')]^3 = bp(1-p)(1-2p) [s(f_2) - s(f_1)]^3 \quad (7.4.9)$$

A eq. (7.4.7) juntamente com a eq. (7.3.1) proporcionam (a menos de uma constante multiplicativa arbitrária) a resposta exata, a saber, a eq. (7.4.2).

## 7.5 - CONCLUSÕES

Discutimos o espalhamento (unidimensional) elástico incoerente simples e múltiplo em cadeia linear semi-infinita pura, diluída e de centros mistos (distribuição binária que recupera os casos puro e diluído como casos particulares). Este modelo é equivalente a uma situação na qual o feixe que está sendo espalhado tem incidência normal em um meio semi-infinito estratificado composto por fatias espalhadoras. Os principais resultados exatos que estabelecemos (re-estabelecidos para os mais triviais entre eles) são:

i) A dependência da intensidade com a distância para centros espalhadores de coeficientes de transmissão arbitrários (eqs. (7.2.1) e (7.2.5)); no caso de centros idênticos as leis são respectivamente exponenciais (eqs. (7.2.2) e (7.2.3)) e de potências (eqs. (7.2.6) e (7.2.7)) para espalhamento simples e múltiplo.

ii) A extensão do caso (i) para as cadeias lineares diluída (eqs. (7.2.9) e (7.2.10) para os modelos simples e múltiplo, respectivamente) e de centros mistos (eqs. (7.4.2) e (7.3.11)) para cadeia linear.

Também mostramos que estes fenômenos podem, frutiferamente, serem vistos como "críticos", e como tal devem ser tratáveis em um contexto de GR. Mostramos como isto pode ser feito nos sistemas uni-dimensionais mencionados acima, usando-se técnicas usuais de GR no espaço real. Neste sentido nossos principais resultados são:

i) Renormalizando "blocos" de  $b$  centros espalhadores em "blocos" de  $b'$  centros ( $b' < b$ ), obtivemos, para todos os valores de  $b$  e  $b'$ , o comprimento de penetração  $\xi$  exato para a cadeia linear pura.

ii) No caso das cadeias lineares diluída e de centros mistos, aproximamos a distribuição complexa (do coeficiente de transmissão  $f$ ) que emerge sob renormalizações sucessivas, por uma distribuição binária. Não existe uma única maneira de fazer isto: nós escolhemos preservar tantos primeiros momentos (dois no caso diluído, três no caso de centros mistos) de  $g(f)$  quanto possível, onde  $g(f)$  é uma função arbitrária. A escolha mais simples  $g(f) = f$  já é bastante satisfatória (veja Fig. 7.3.1a,b). Entretanto a melhor escolha é  $g(f) = s(f)$  onde  $s(f)$  é aditiva (no sentido de que  $s(i \text{ centros}) = is$  (um centro); veja eq. (7.3.11)): para esta escolha o comprimento de penetração  $\xi$  exato é reobtido, para todos os valores de  $b$  e  $b'$ , para as cadeias diluída e de centros mistos e modelos de espalhamento simples (lei exponencial) e múltiplo (lei de potência). Em certo sentido é surpreendente que uma função  $s(f)$  exista tal que compense exatamente o erro envolvido em nossa aproximação onde somente um número finito (em vez de infinito) de momentos é preservado. Entretanto tais funções convenientes já foram usadas em uma variedade de sistemas, tais como os modelos de Ising <sup>(116)</sup>, Potts <sup>(117, 56)</sup>,  $Z(N)$  <sup>(118)</sup> e resistores <sup>(119)</sup>.

iii) A natureza geométrica do presente problema de espalhamento na cadeia diluída é diferente daquela da percolação (padrão), como pode ser visto através da maneira como a concentração  $p$  se renormaliza (veja eq. (7.3.15)).

A extensão destas idéias para tipos mais complexos de espalhamento ( $d$ -dimensional, anisotrópico, inelástico, coerente) em sistemas  $d$ -dimensionais seria desejável.

## CAPÍTULO VIII

### CONCLUSÕES

Através da técnica de Grupo de Renormalização (GR) no espaço real discutimos as propriedades críticas térmicas (fronteiras críticas, classes de universalidade, expoentes de "crossover") e geométricas (parâmetros de ordem, comprimento de penetração) para vários sistemas físicos. Entre os sistemas que estudamos podemos encontrar os seguintes: puros (isotrópicos, anisotrópicos), desordenados (diluição de sítios, de ligações diluídas ou mistas), homogêneos, inhomogêneos, descritos em redes regulares, em redes hierárquicas, descritos por formalismos Hamiltonianos ou não.

Inicialmente discutimos o ferromagneto de Potts de  $q$ -estados na rede cúbica simples, completamente anisotrópica ( $J_x$ ,  $J_y$  e  $J_z$  arbitrários). Analisamos para todo o valor de  $q$  onde a transição é de segunda ordem, a dependência em  $q$  da temperatura crítica  $T_c$ , dos expoentes críticos  $\nu_1$ ,  $\nu_2$  e  $\nu_3$  do comprimento de correlação, associados respectivamente a  $d = 1, 2$ , e  $3$ , e os expoentes críticos de "crossover"  $\Phi_{1d}$  ( $d = 1 \iff d > 1$ ) e  $\Phi_{23}$  ( $d = 2 \iff d = 3$ ). O nosso GR reproduziu uma quantidade considerável de resultados exatos conhecidos e sempre que nossos resultados numéricos não coincidem com valores disponíveis exatos ou de séries, as discrepâncias existentes são pequenas, o que nos levou a adquirir confiança no quadro geral. Assim acreditamos que no limite  $q \rightarrow 0$ , nossos resul-

tados (inéditos) para  $d = 3$ ,  $\phi_{23} \propto 1/\sqrt{q}$ ,  $t_c^{(3)}(q) \sim t_c^{(3)}(0) + t_c^{(3)'}(0)q$  e  $v_3(q) \sim v_3(0) + v_3'(0)q$  (com valores finitos para  $t_c^{(3)}(0), t_c^{(3)'}(0), v_3(0)$  e  $v_3'(0)$ ) são corretos. As classes de universalidade que encontramos são as esperadas, isto é, a de três dimensões para todos os valores de  $J_x > 0, J_y > 0$  e  $J_z > 0$ ; a bi-dimensional quando um e somente um dos três J's é zero; a uni-dimensional quando somente um dos J's é diferente de zero. Através de um procedimento de extrapolação calculamos  $T_c$  para várias razões arbitrárias  $J_y/J_x$  e  $J_z/J_x$  e  $q = 1, 2, 3$ . Sempre que a comparação com outros resultados disponíveis (tipicamente de séries) foi possível, nossos resultados mostraram ser muito satisfatórios.

Em uma segunda etapa tratamos do ferromagneto de Potts em uma rede inhomogênea constituída por dois volumes cúbicos simples semi-infinitos (caracterizados pelas constantes de acoplamento  $J_1$  e  $J_2$  respectivamente) separados por uma interface  $(1,0,0)$  correspondendo a rede quadrada (caracterizada pela constante  $J_s$ ). O diagrama de fases exibiu quatro fases fisicamente diferentes, a saber, a paramagnética, a ferromagnética de um volume único, a ferromagnética de dois volumes e a ferromagnética de superfície (onde somente a superfície está ordenada). Neste diagrama podemos encontrar quatro classes de universalidade. Se aquecemos o sistema de tal maneira que  $\Delta < \Delta_c$  (veja Fig. 4.3.3) as magnetizações dos volumes se anulam com um expoente enquanto a superfície se anula com um expoente diferente do  $\beta$  bi-dimensional. Para  $\Delta > \Delta_c$  os volumes continuam com o mesmo expoente enquanto a superfície que se desordena em uma temperatura mais elevada, apresenta desta vez o expoente crítico bi-dimensional. Para  $\Delta = \Delta_c$  obtemos uma nova classe de universalidade. Os volumes têm sempre o mesmo expoente enquanto a magnetização da superfície vai a zero com um expoente crítico diferente de todos os

anteriores. Apresentamos pela primeira vez, a evolução de  $\Delta_c$  com  $q$  e  $J_2/J_1$ . Para o modelo de Ising ( $q=2$ ) obtemos para o caso da superfície livre ( $J_2/J_1 = 0$ ),  $\Delta \approx 0,76$  que deve ser comparado com o resultado de séries  $0,6 \pm 0,01$  de Binder e Hohenberg <sup>(97)</sup>, com o resultado de Monte Carlo  $0,5 \pm 0,03$  de Binder e Landau <sup>(98)</sup> e com o valor de campo médio  $0,25$ ; para o caso de volumes iguais ( $J_1=J_2$ ) obtemos  $\Delta \approx 0,10$  que deve ser comparado com o valor zero obtido de campo médio.

Discutimos também o problema da superfície livre ( $J_2 = 0$ ) onde a superfície é diluída. Analisamos a evolução da fase ferro - magnética de superfície com a concentração de ligações  $p$  para  $q = 1$  e  $q = 2$ . Existe uma competição entre  $p$  e o valor da intensidade  $J_s$  das ligações da superfície. O decréscimo de  $p$  desfavorece a fase de superfície;  $J_s$  comporta-se no sentido contrário. Para  $p < 0,41$  a fase de superfície desaparece totalmente. Para este valor da probabilidade (menor que a probabilidade crítica  $p_c = 1/2$  associada à percolação bi-dimensional)  $\Delta_c$  diverge. Constatamos que para os casos estudados ( $q=1$  e  $q=2$ ), a diluição da superfície não altera a criticalidade do sistema. Extensões naturais deste problema seriam a inclusão do segundo volume ( $J_2 \neq 0$ ), assim como a discussão para outros valores de  $q$ , de tal maneira que fosse possível existir a mudança de classe de universalidade que é prevista <sup>(100,122)</sup> para um certo valor de  $q$  a ser determinado. Isto foi feito por Cavalcanti e Tsallis <sup>(92)</sup>, no entanto as células que eles usaram não levam a resultados quantitativamente bons. Seria interessante também fazer o mesmo tipo de discussão empregando outros modelos (eg. o ferromagneto de Heisenberg).

Neste trabalho desenvolvemos também um formalismo de GR (baseado em uma célula apropriada que estende o trabalho de Tsallis

e colaboradores <sup>(49)</sup>, para calcular para todas as concentrações de ligações em uma rede quadrada anisotrópica, os parâmetros de ordem da célula infinita percolante e sua associada espinha dorsal ( $P_\infty(p_x, p_y)$  e  $P_\infty^B(p_x, p_y)$ ). Eles apresentaram características distintas: enquanto  $P_\infty(p_x, p_y)$  é descontínuo em  $(p_x, p_y) = (1, 0)$  e  $(0, 1)$ ,  $P_\infty^B(p_x, p_y)$  anula-se continuamente à medida que se aproxima da linha crítica  $p_x + p_y = 1$  (recuperada exatamente dentro da presente abordagem). Para obter valores numéricos mais confiáveis ao longo dos eixos  $p_x = p_y = p$  (rede quadrada isotrópica), implementamos um procedimento de extrapolação que mostrou ser muito eficiente em outros problemas similares. Na vizinhança do ponto crítico  $p_c = 1/2$  obtemos  $P_\infty \sim A(p-1/2)^\beta$  com  $\beta = 5/36$  <sup>(106)</sup> e  $A \sim 1,25$  e  $P_\infty^B \sim A^B(p-1/2)^{\beta^B}$  com  $\beta^B = 0,53$  <sup>(107)</sup> e  $A^B = 1,92$ . Dentro do quadro consideravelmente simples do GR no espaço real (de complexidade operacional comparável à da teoria de Campo Médio) foi possível obter resultados numéricos confiáveis para parâmetros de ordem "geométricos", para todo o domínio de variação dos parâmetros externos. A extensão deste tipo de técnica para calcular outras grandezas (geométricas, térmicas) bem como o tratamento para outros tipos de redes significaria um avanço desejável.

Outro ponto que nos interessou neste trabalho foi a análise da convergência das grandezas físicas estudadas através da aproximação de GR no espaço real. Mostramos para duas famílias de células hierárquicas que a convergência é tão mais rápida quanto mais próximo de  $b$  (tamanho da célula a ser renormalizada) for  $b'$  (célula renormalizada) e que portanto a situação ideal, para  $b$  e  $b'$  inteiros, ocorre quando  $b' = b-1$ . Em seguida tratamos da transformação infinitesimal ( $b' = 1; b = 1+\eta$ ) que se obtém através de uma extensão analítica das expressões correspondentes à renormalização com fator de escala racional. Constatamos que as duas famí-

lias estudadas levaram ao mesmo resultado para a temperatura e expoentes críticos. Com relação à temperatura crítica obtivemos a resposta assintótica exata no limite  $d \rightarrow 1$  <sup>(109)</sup> para redes hipercúbicas de Bravais quase uni-dimensionais e para  $d=2$  correspondente à rede quadrada. Para os expoentes críticos conseguimos reproduzir o resultado assintótico exato somente no limite  $d \rightarrow 1$  <sup>(109)</sup>. A análise que fizemos poderia ser estendida a outros tipos de sistemas a fim de que as idéias que analisamos possam ser estabelecidas.

Por fim, com a intenção de exibir a versatilidade do emprego de técnica de GR no espaço real discutimos o espalhamento uni-dimensional) elástico incoerente, simples e múltiplo em cadeia linear semi-infinita pura, diluída e de centros mistos. Obtivemos a dependência da intensidade com a distância, para centros espalhadores com coeficientes de transmissão arbitrários. Mostramos que as leis obtidas para as intensidades podem ser vistas como "críticas" e como tal podem ser tratadas pela técnica de GR. Ao renormalizarmos "blocos" de  $b$  centros espalhadores em "blocos" de  $b'$  centros ( $b' < b$ ) obtivemos o comprimento de penetração  $\xi$  exato para a cadeia linear pura. Para o caso das cadeias lineares diluída e de centros mistos, utilizamos no processo de renormalização uma conveniente variável  $s$  (análoga à usada em problemas anteriores) com a qual reproduzimos o comprimento de penetração  $\xi$  exato, para todos os valores de  $b$  e  $b'$ , para modelos simples (lei exponencial) e múltiplo (lei de potências). Temos visto também, que a natureza geométrica do problema em questão é diferente daquela da percolação (padrão), como pode ser visto através da maneira como a concentração  $p$  se renormaliza (veja eq. (7.3.15)). A extensão natural deste tratamento é abordar tipos mais complexos de espalhamento como  $d$ -dimensional, anisotrópico, inelástico, coerente entre ou

tros.

Retornando à discussão do ferromagneto de Potts em rede cúbica anisotrópica, uma extensão que poderia ser feita para este problema seria adaptar os cálculos que fizemos incluindo valores negativos para as constantes  $J$ 's de acoplamento de modo que a problemática anti-ferromagnética poderia ser analisada. Em um segundo nível, seria interessante calcular as magnetizações inerentes aos vários tipos de sistemas estudados. A formulação de uma teoria que fosse capaz de prever transições de fase de primeira ordem que eventualmente ocorrem nos referidos sistemas enriqueceria bastante a discussão.

## APÊNDICE A

### MÉTODO CORTE-COLAPSO: MODELO DE POTTS

O método de Corte-Colapso <sup>(72,120,121)</sup> para o modelo de Potts é um algoritmo de cálculo que permite determinar a função de correlação de qualquer grafo a dois terminais, de uma maneira sistemática.

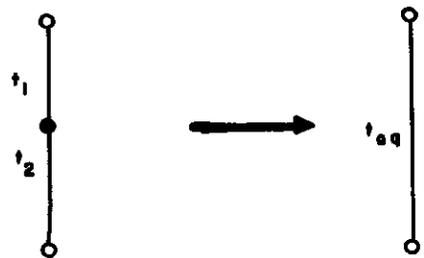
A transmissividade associada a uma ligação descrita pelo modelo de Potts de q-estados em uma dada rede é obtida através da seguinte equação

$$t_{\alpha} \equiv \frac{1 - e^{-qJ_{\alpha}/k_B T}}{1 + (q-1)e^{-qJ_{\alpha}/k_B T}} \quad (\text{A.1})$$

A composição de duas transmissividades em série resultando em uma transmissividade equivalente  $t_{eq}$  é dada por (veja Fig. A.1)

FIGURA A.1 - Diagrama mostrando a composição de duas transmissividades em série;  $\circ$  indica sítio terminal e  $\bullet$  indica sítio interno.

$$t_{eq} = t_1 t_2 \quad (\text{A.2})$$



que é obtida através do cálculo do

traço parcial sobre o sítio interno da Fig. A.1.

A composição de transmissividades em paralelo é obtida de acordo com o esquema indicado na Fig. A.2, que leva ao seguinte algoritmo para o cálculo de  $t_{eq}$

$$t_{eq}^D = t_1^D t_2^D \quad (A.3)$$

onde  $t_i^D$  entende-se por transmissividade dual e é dada por

$$t_i^D = \frac{1 - t_i}{1 + (q-1)t_i} \quad (A.4)$$

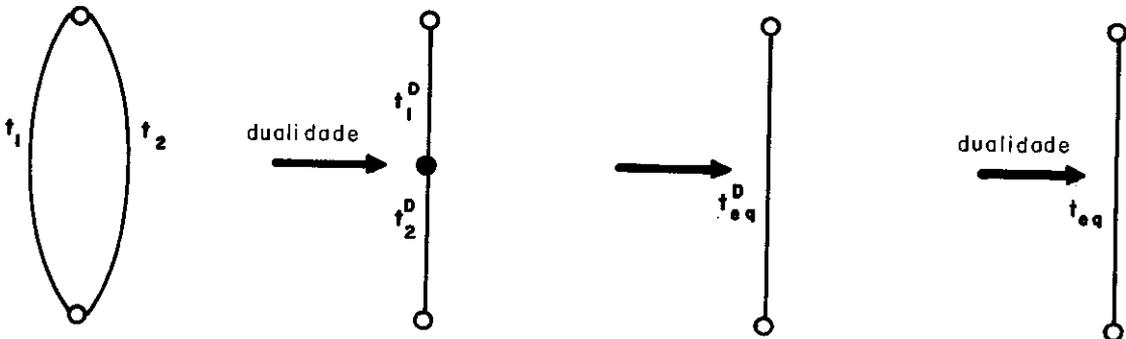


FIGURA A.2 - Esquema indicando como se obtém a transmissividade equivalente no caso de ligações em paralelo.  $t_i^D$  é a transmissividade dual.

$t_i^D$  mapeia a região de alta em baixa temperatura do modelo de Potts bi-dimensional. Uma vez calculado  $t_{eq}^D$  em (A.3), (A.4) leva a  $t_{eq}$ , já que  $[t_{eq}^D]^D = t_{eq}$ .

Vemos que qualquer grafo que seja redutível a sub-grafos onde só existem transmissividades em série ou em paralelo pode ser resolvido através do uso sistemático dos algoritmos (A.2) e (A.3) para se determinar a transmissividade  $t_{eq}$  correspondente. Existem porém grafos irredutíveis; nestes casos o uso de (A.2) e (A.3) não

é suficiente para determinar  $t_{eq}$  (veja Fig. A.3a).

O Método Corte-Colapso calcula a transmissividade equivalente de qualquer grafo a dois terminais, mesmo que eles não sejam redutíveis a sub-grafos com ligações em série ou em paralelo somente.

Consideremos um grafo a dois terminais com transmissividades  $\{t_i\}$ . O cálculo da transmissividade equivalente  $t_{eq}$  leva a uma expressão que consiste na razão entre dois polinômios nas variáveis  $t_i$ 's, ou seja,

$$t_{eq} = \frac{N(\{t_i\})}{D(\{t_i\})} \equiv G(\{t_i\}) \quad (A.5)$$

onde o numerador  $N$  e o denominador  $D$  são funções multilineares de  $\{t_i\}$ . Escolhamos a  $j$ -ésima ligação do conjunto  $\{t_i\}$  e a "cortamos" ("colapsamos"), quer dizer, consideramos  $t_j = 0$  ( $t_j = 1$ ). O resultado destas operações gera dois novos grafos os quais chamamos de grafo cortado e grafo colapsado. Chamemos  $G_j^{(0)}$  a transmissividade do grafo cortado e  $G_j^{(1)}$  a do colapsado. Assim temos que

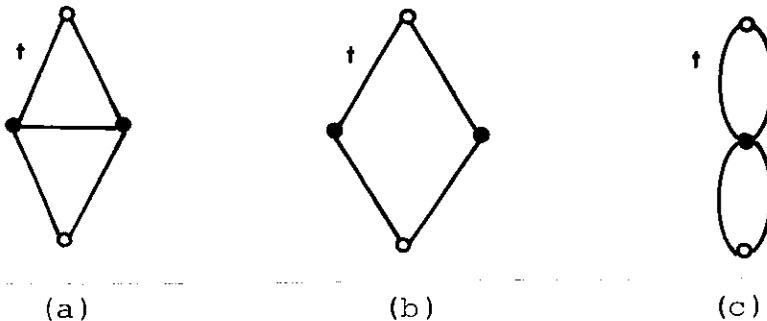


FIGURA A.3 - Grafos a dois terminais: (a) grafo que queremos calcular  $t_{eq}$ ; (b) grafo cortado; (c) grafo colapsado.

$$G_j^{(0)}(\{t'_i\}) = N_j^{(0)}(\{t'_i\})/D_j^{(0)}(\{t'_i\}) \quad (A.6)$$

e

$$G_j^{(1)}(\{t'_i\}) = N_j^{(1)}(\{t'_i\})/D_j^{(1)}(\{t'_i\}) \quad (A.7)$$

onde  $\{t'_i\}$  é o conjunto de transmissividades  $\{t_i\}$  excluindo a ligação  $j$ . A multilinearidade de  $N$  e  $D$  implica que

$$N(\{t_i\}) = (1-t_j)N_j^{(0)}(\{t'_i\}) + t_jN_j^{(1)}(\{t'_i\}) \quad (A.8)$$

$$D(\{t_i\}) = (1-t_j)D_j^{(0)}(\{t'_i\}) + t_jD_j^{(1)}(\{t'_i\}) \quad (A.9)$$

A utilização sistemática de (A.8) e (A.9) constitui a essência do Método de Corte-Colapso. Neste processo a preservação da função de correlação (onde é feito o traço parcial sobre todos os sítios internos) é satisfeita automaticamente.

Apliquemos, a título de ilustração, o método para o grafo da Fig. A.3. Ao cortarmos (colapsarmos) a ligação do centro (a escolha é arbitrária) do grafo A.3a obtemos para os grafos cortado e colapsado as seguintes expressões:

$$G^{(0)}(t) = \frac{N^{(0)}(t)}{D^{(0)}(t)} = \frac{2t^2 + (q-2)t^4}{1 + (q-1)t^4} \quad (A.10)$$

e

$$G^{(1)}(t) = \frac{N^{(1)}(t)}{D^{(1)}(t)} = \frac{4t^2 + 4(q-2)t^3 + (q-2)^2t^4}{1 + 2(q-1)t^2 + (q-1)t^4} \quad (A.11)$$

Usando (A.8) e (A.9), obtemos,

$$G(t) = \frac{2t^2 + 2t^3 + 5(q-2)t^4 + (q-2)(q-3)t^5}{1 + 2(q-1)t^2 + (q-1)t^4 + (q-1)(q-2)t^5}, \quad (A.12)$$

que é igual ao resultado que obteríamos se fizéssemos o traço parcial sobre os sítios internos da maneira usual. Convém lembrar que ao cortarmos (colapsarmos) a ligação central na Fig. A.3, os grafos gerados A.3b e A.3c são resolvidos trivialmente com o uso de (A.2) e (A.3).

## REFERÊNCIAS

- 1 - Onsager L., Phys. Rev. 65(1944)117.
- 2 - Baxter R.J., "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics" (Academic Press, London)(1982).
- 3 - Weiss M.P., conferência feita na Sociedade Francesa de Física, 4 de abril de 1907.
- 4 - Kasteleyn P.W. e Kranendonk J.V., Physica 22(1956)317.
- 5 - Kasteleyn P.W., Physica 22(1956)387.
- 6 - Domb C., Adv. Phys. 9(1960)149.
- 7 - Huang K., "Statistical Mechanics", 1ª ed. (Wiley, New York) (1963) 220.
- 8 - Smart J.S., "Effective Theories of Magnetism" (Saunders, Philadelphia) (1966).
- 9 - Feynman R.P., "Statistical Mechanics: Set of Lectures" (Benjamin, New York)(1972) Cap. 2.
- 10 - Tsallis C. e Furtado Valle J.W., Revista Brasileira de Física 9(1979)759.
- 11 - da Silva L.R. e Tsallis C., Revista Brasileira de Física 9 (1979)619.
- 12 - Tsallis C. e da Silva L.R., Phys. Rev. A 26, nº 2(1982) 1095.
- 13 - Honmura R. e Kaneyoshi T., Prog. Theor. Phys. 60(1978)635.
- 14 - Honmura R. e Kaneyoshi T., J.Phys. C 12(1979)3979.
- 15 - Sarmiento E.F. e Tsallis C., Phys. Rev. B 27, nº 9(1983)5784.
- 16 - Brout R. e Thomas H., Physics 3(1967)317.
- 17 - Gusmão M.A. e Scherer C., Phys. Status Solidi 92(1979)595.
- 18 - Zubarev D.N., Soviet Phys. Uspeki 3(1960)320.
- 19 - Kirkpatrick S., Velicky B. e Ehrenreich H., Phys. Rev. B1 (1970)3250.

- 20 - Brouers F., Cyrot M. e Cyrot-Lackman F., Phys. Rev. B7(1973) 4370.
- 21 - Pines D., "The Many Body Problem" (Benjamin, New York)(1961).
- 22 - Hammersley J.M. e Handscomb D.C. "Monte Carlo Methods" (Methuen, London)(1964).
- 23 - Binder K., "Monte Carlo Methods in Statistical Physics" (Topics in current Physics, vol. 7), ed. Binder K. (Springer, N. York)(1978).
- 24 - Swendsen R.H., "Real-Space Renormalization" (Topics in Current Physics) ed. Burkhardt T.W. e Van Leeuwen J.M.J. (Springer, New York)(1982) Cap. 3.
- 25 - Stanley H.E., "Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena" (Clarendon Press, Oxford)(1971).
- 26 - Barber M.N., "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. Domb C. e Lebowitz J.L. (Academic Press, London)(1983) Cap.2.
- 27 - Kadanoff L.P., Physics 2(1966)263.
- 28 - Wilson K.G., Phys. Rev. B4(1971)3174.
- 29 - Wilson K.G. e Kogut J., Phys.Reports 12C(1974)75.
- 30 - Fisher, M.E., Rev. Mod. Phys. 46(1974)597.
- 31 - Burkhardt T.W., "Real-Space Renormalization" (Topics in Current Physics) ed. Burkhardt T.W. e Van Leeuwen J.M.J. (Springer, New York)(1982) Cap. 2.
- 32 -Indekeu J.O., Maritan A. e Stela A.L., J. Phys. A Math. Gen 15 (1982) L291.
- 33 - Nightingale M.P., Physica 83A(1976)561.
- 34 - Nightingale M.P., Proc. Kon. Ned. Akad. Wet. 82(1979)235.
- 35 - Potts R.B., Proc. Camb. Phil. Soc. 48(1952)106.
- 36 - Wu F.Y., Rev. Mod. Phys. 54(1982)235.
- 37 - Kramers H.A. e Wannier G.H., Phys. Rev. 60(1941)252.
- 38 - Bretz M., Phys. Rev. Lett. 38(1977)501.
- 39 - Park R.L., Einstein T.L., Kartan A.R. e Roelofs L.D., "Ordering in two Dimensions", ed. Sinha S.K. (North Holland, New

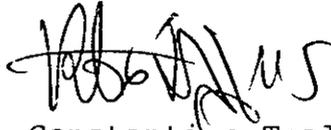
- York)(1980)17.
- 40 - Barbara B., Rossignol M.F. e Per Balk, J. Phys. C11(1978)L183.
- 41 - Aharony A., Muller K.A. e Berlinger W., Phys. Rev. Lett. 38  
(1977)33.
- 42 - Fortuin C.M. e Kasteleyn P.W., Physica 57(1972)536.
- 43 - Aharony A., J. Phys. C11(1978)L457.
- 44 - Aharony A. e Pfeuty P., J. Phys. C12(1979)L125.
- 45 - Kasteleyn P.W. e Fortuin C.M., J. Phys. Soc. Jap. (suppl.)26  
(1969)11.
- 46 - Martin H.O. e Tsallis C., Z. Phys. B, Condensed Matter 44  
(1981)325.
- 47 - Martin H.O. e Tsallis C., J. Phys. C, Solid State Phys. 16  
(1983)2787.
- 48 - Niemeijer T. e Van Leeuwen J.M.J., in "Phase Transitions and  
Critical Phenomena", ed. Domb C. e Green M.S., vol. 6 (Acade  
mic Press, London)(1976)425.
- 49 - Tsallis C., Coniglio A. e Schwachheim G., Phys. Rev. B 32,  
nº 5(1985)3322.
- 50 - Migdal A.A., Sov. Phys. JETP 42(1976)743.
- 51 - Migdal A.A., Sov. Phys. JETP 42(1976)413.
- 52 - Kadanoff L.P., Ann. Phys. (N.Y.)100(1976)359.
- 53 - de Oliveira P.M.C. e Tsallis C., J.Phys. A 15(1982)2865.
- 54 - Blöte H.W.J. e Swendsen R.H., Phys. Rev. Lett. 43(1979)799.
- 55 - da Silva L.R., Tsallis C. e Schwachheim G., J. Phys. A 17  
(1984)3209.
- 56 - de Magalhães A.C.N. e Tsallis C., J. Physique 42(1981)1515.
- 57 - Baxter R.J., Temperley H.N.V. e Ashley S.E., Proc. R. Soc. A  
(1978)535.
- 58 - Burkhardt T.W. e Southern B.W., J. Phys. A: Math. Gen. 11  
(1978) L247.
- 59 - Hintermann A., Kunz H. e Wu F.Y., J. Stat. Phys. 19(1978)623.

- 60 - den Nijs M.P.M., Physica 95 A(1979)449.
- 61 - Redner S. e Stanley H.E., J. Phys. A: Math. Gen. 12(1979)1267.
- 62 - Gaunt D.S. e Ruskin M., J. Phys. A 11(1978)1369.
- 63 - Zinn-Justin J., J. Physique 40(1979)969.
- 64 - Jensen S.J.K. e Mouritsen O.G., Phys. Rev. Lett. 43(1979)1736.
- 65 - Kasteleyn P.W. e Fortuin C.M., J. Phys. Soc. Japan (Suppl.) 26  
(1969)11.
- 66 - Heerman D.W. e Stauffer D., Z. Phys. B 44(1981)339.
- 67 - Le Guillou J.C. e Zinn-Justin J., Phys. Rev. B 21(1980)3976.
- 68 - Liu L.L. e Stanley H.E., Phys. Rev. Lett. 29(1972)927.
- 69 - Liu L.L. e Stanley H.E., Phys. Rev. B 8(1973)2279.
- 70 - Cittert C.A. e Kasteleyn P.W., Phys. Lett. A 42(1972)143.
- 71 - Cittert C.A. e Kasteleyn P.W., Physica 68(1973)491.
- 72 - Tsallis C. e Levy S.V.F., Phys. Rev. Lett. 47(1981)950.
- 73 - Tsallis C., J. Phys. C: Solid State Phys. 14(1981)L85.
- 74 - Tsallis C. e de Magalhães A.C.N., J. Phys. Lett. 42(1981)227.
- 75 - Essam J.W. e Tsallis C., J. Phys. A, em impressão.
- 76 - Tsallis C., J. Phys. C(1985) (em impressão).
- 77 - Melrose J.R., J. Phys. A 16(1983)L407.
- 78 - Melrose J.R., J. Phys. A 16(1983)3077.
- 79 - Oitmaa J. e Enting I.G., Phys. Lett. A 36(1971)91.
- 80 - Paul G. e Stanley H.E., Phys. Rev. B 5(1972)2578.
- 81 - Pierce D.T. e Meier F., Phys. Rev. B 13(1976)27.
- 82 - Alvarado S.F., Campagna M. e Hopster H., Phys. Rev. Lett. 48  
(1982)51.
- 83 - Alvarado S.F., Campagna M., Cicacci F. e Hopster H., J. Appl.  
Phys. 53(1982)7920.
- 84 - Klebanoff L.E., Robey S.W., Liv. G. e Shirley D.A., Phys. Rev.  
B 30(1984)1048.

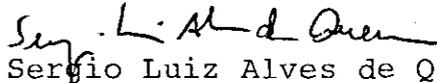
- 85 - Lipowsky R., Z. Phys. B 45(1982)22.
- 86 - Lipowsky R., J. Phys. A 15(1982)L195.
- 87 - Lam P.M. e Zhang Z.Q., Z. Phys. B: Cond. Matter 52(1983)315,  
(errata) Z. Phys. B.: Cond. Matter. 55(1983)371.
- 88 - Tsallis C. e Sarmiento E.F., J. Phys. C: Solid State Physics  
18(1985)2777.
- 89 - Costa U.M.S., Tsallis C. e Sarmiento E.F., J. Phys. C (em im-  
pressão).
- 90 - da Silva L.R., Costa U.M.S. e Tsallis C., J. Phys. C (em im-  
pressão).
- 91 - Kaneyoshi T., Tamura I. e Sarmiento E.F., Phys. Rev. B 28(1983)  
6491.
- 92 - Cavalcanti S.B. e Tsallis C., pré-publicação.
- 93 - Burkhardt W. e Eisenriegler E., Phys. Rev. B 16(1977)3213.
- 94 - dos Santos R.J.V., Sarmiento E.F. e Tsallis C., pré-publicação.
- 95 - Toulouse G. e Pfeuty P., "Introduction au Groupe de Renormali-  
zation et a ses applications" (Presses Universitaires de Gre-  
noble)(1975).
- 96 - de Magalhães A.C.N., Tsallis C. e Schwachheim G., J. Phys. C  
14(1981)1393.
- 97 - Binder K. e Hohenberg P.C., Phys. Rev. B 9(1974)2194.
- 98 - Binder K. e Landau D.P., Phys. Rev. Lett. 52(1984)318.
- 99 - Diehl H.W. e Dietrich S., Phys. Lett. 80A(1980)408.
- 100 - Harris A.B., J. Phys. C 7(1974)1671.
- 101 - da Silva L.R., Almeida N.S. e Tsallis C., Phys. Rev. B 32, nº 7  
(1985)4725.
- 102 - Curado E.M.F., Tsallis C., Levy S.V.F. e de Oliveira M.J.,  
Phys. Rev. B 23(1981)1419.
- 103 - de Oliveira P.M.C., Phys. Rev. B 23(1982)2034.
- 104 - Sykes M. e Essam J.W., Phys. Rev. Lett. 10(1963)3.
- 105 - Nakanishi H. e Stanley H.E., Phys. Rev. B 22(1980)2466.

- 106 - Nienhuis B., Riedel E.K. e Shick M., J. Phys. A 13(1980)L189.
- 107 - Herrmann H.J., Hong D.C. e Stanley H.E., J. Phys. A 17(1984) L261.
- 108 - Essam J.W., "Phase Transitions and Critical Phenomena" (Academic Press, London) ed. Domb C. e Green M.S., vol.2(1972).
- 109 - Stephen M.J., Phys. Lett. 56A(1976)149; da Silva L.R., Tsallis C. e Shapiro B., para ser publicado.
- 110 - Uscinski B.J., "The Elements of wave Propagation in Random Media" (McGraw Hill, New York)(1977).
- 111 - Hulst H.C. Van de, "Multiple Light Scattering" (Academic Press, New York, London) vols. 1, 2 (1982).
- 112 - Lucena L.S., Nobre F.D., Tsallis C. e da Silva L.R., Z. Phys. B: Condensed Matter. 59(1985)207.
- 113 - Domb C. e Green M.S., Phase Transitions and Critical Phenomena" (Academic Press, London) Vols. 1-9, (1972-1985).
- 114 - Derrida B. e Pomeau Y., Phys. Rev. Lett. 48(1982)627.
- 115 - Napiorkowsky, M.J., J. Phys. A 16(1983)3065.
- 116 - Levy S.V.F., Tsallis C. e Curado E.M.F., Phys. Rev. B 21 (1980)2991.
- 117 - Tsallis C., J. Phys. C 14(1981)L85.
- 118 - Alcaraz F.C. e Tsallis C., J. Phys. A 15(1982)587.
- 119 - Tsallis C., Coniglio A. e Redner S., J.Phys. C 16(1983)4339.
- 120 - Tsallis C., Physics Reports, para ser publicado.
- 121 - Mariz A.M., Tsallis C. e Fulco P., Phys. Rev. B, em impressão.
- 122 - Costa U.M.S. e Tsallis C., Physica 128A(1984)207.

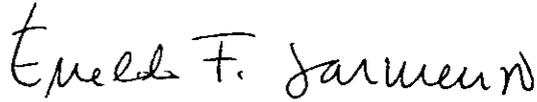
Tese apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



Constantino Tsallis - Presidente



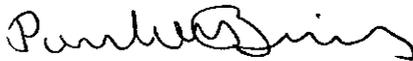
Sergio Luiz Alves de Queiroz



Enaldo Fonseca Sarmento



Juan Alberto Mignaco



Paulo Mascarello Bisch

Rio de Janeiro, 06 de dezembro de 1985