

ANNA MARIA NÓBREGA CHAME

SISTEMAS MAGNÉTICOS ANISOTRÓPICOS E
SEMI-INFINITOS: PROPRIEDADES CRÍTICAS

TESE DE
DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO, 1989

- À minha família.

AGRADECIMENTOS

A Constantino Tsallis, pela orientação competente que tornou possível este trabalho, pelo apoio e também pelo exemplo de entusiasmo e profissionalismo.

A Evandro Lins de Mello, pelo carinho e estímulo tão necessários em todos os momentos e pelas sugestões extremamente proveitosas.

A Sérgio Coutinho que, durante sua estada no CBPF, muito me incentivou.

A Aglaé de Magalhães, Evaldo Curado, Edson P. da Silva, Uriel Costa, Ananias Mariz, Luciano da Silva, Conceição Vieira, Sérgio Cannas, Hélio V. de Resende, Marcelo Martins, Francisco Tamarit, Welles Morgado, Fortunato de Menezes e Daniel Stariolo, pela amizade e apoio e também pelas discussões e sugestões sobre o trabalho. A Luiz Reis, pelo inestimável apoio computacional.

A Vanda, Miriam, Haroldo, Almério, D. Elza, Valéria, Socorro, Conceição, Paulo, Vera, Elias e outros funcionários do CBPF, pela atenção, amizade e boa vontade.

Aqueles alunos e professores deste Centro que nestes anos contribuíram para estabelecer um ambiente de companheirismo e cordialidade.

A Marcia Brum pela competência com que datilografou este trabalho.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

RESUMO

Este trabalho é dedicado ao estudo de propriedades críticas e equações de estado de sistemas magnéticos anisotrópicos e semi-infinitos. Vários sistemas são considerados: (a) o ferromagneto de Potts de q estados em rede quadrada anisotrópica; (b) o ferromagneto de Ising em rede cúbica semi-infinita; (c) o ferromagneto N-vetorial discreto em rede cúbica semi-infinita e (d) o ferromagneto de Ising em uma estrutura fractal, o tapete de Sierpinski.

Nestes trabalhos utilizamos a técnica de Grupo de Renormalização (GR) no espaço real. Generalizamos para o caso em que existe anisotropia (espacial) no sistema um método de GR introduzido recentemente que permite calcular diretamente (sem passar por cálculos de energia livre) as equações de estado. Aplicamos a extensão desse método ao sistema (a): calculamos a magnetização espontânea como função da temperatura e os expoentes críticos β e amplitudes correspondentes. Nossas estimativas para $q = 2$ estão em bom acordo com os resultados exatos conhecidos.

Aplicamos o método para o sistema (b), e obtivemos a magnetização de superfície e a de volume como função da temperatura para as diversas transições que podem ocorrer, bem como os expoentes críticos β e amplitudes correspondentes. Em particular, na transição extraordinária encontramos uma descontinuidade na primeira derivada da magnetização de superfície, que discutimos comparando com os resultados obtidos

por outras técnicas.

Estudamos a criticalidade do sistema (c), usando a técnica de GR usual. A evolução do diagrama de fases com N é obtida, e os expoentes críticos térmicos (ν) e de crossover (ϕ) nos vários pontos críticos e multicríticos são calculados.

Consideramos no caso do sistema (d), onde o parâmetro de ordem não é uniforme, uma aproximação em que distinguimos duas regiões diferentes no tapete. Aplicamos o método de GR e obtivemos as magnetizações como funções da temperatura para estas duas regiões, bem como os expoentes críticos β correspondentes.

SUMMARY

In the present work we study the critical properties and the equations of state of anisotropic and semi-infinite magnetic systems. We consider several systems: (a) the q -state Potts ferromagnet in anisotropic square lattice; (b) the Ising ferromagnet in a semi-infinite cubic lattice; (c) the discrete N -vector ferromagnet in a semi-infinite cubic lattice and (d) the Ising ferromagnet in a fractal structure, the Sierpinski carpet.

These problems are studied within a real-space Renormalisation Group (RG) approach. We extend to the anisotropic case a RG method recently introduced which yields directly (without calculations of the free energy) the equations of state. We apply this extension of the method to the system (a). The spontaneous magnetisation as a function of the temperature and the corresponding critical exponents β and amplitudes are obtained. Our $q = 2$ estimatives are in good agreement with the known exact results.

We apply the method to the system (b). The surface and bulk magnetisations as functions of the temperature for the several transitions which may occur are obtained, as well as the corresponding critical exponents β and amplitudes. Particularly at the extraordinary transition we find a discontinuity in the first derivative of the surface magnetisation, which we discuss in comparison with the results obtained through other techniques.

The criticality of the system (c) is studied within the standard RG technique. The N-evolution of the phase diagram is obtained, as well as the critical thermal exponents (ν) and the crossover exponent (ϕ) at the various critical and multicritical points.

We consider in the case of system (d), where the order parameter is non-uniform, an approximation in which we distinguish two different regions on the carpet. We apply the RG method and we obtain the magnetisations as functions of the temperature for these two regions, as well as the corresponding critical exponents β .

SUMÁRIO

	<u>PAG.</u>
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Summary	vi
Lista de figuras	x
Lista de tabelas	xii
<u>Introdução</u>	1
<u>Capítulo 1</u> - Grupo de Renormalização no Espaço Real e Transições de Fase	14
1.1 - Fenômenos Críticos	20
1.2 - O Grupo de Renormalização no Espaço Real	
1.3 - Equações de Estado	27
1.4 - A Aproximação de Redes Hierárquicas	29
<u>Capítulo 2</u> - Equação de Estado para um Ferromagneto de Potts em Rede Quadrada Anistrópica.	35
2.1 - Método para o Caso Isotrópico	35
2.2 - Caso Anisotrópico: Aplicação ao Ferro- magneto de Potts	51
2.3 - Resultados	61
<u>Capítulo 3</u> - Magnetização Espontânea para o Ferro- magneto de Ising em Rede Cúbica Semi- Infinita	72
3.1 - Fenômenos Críticos em Superfícies	72

3.2 - Equações de Estado para o Ferromagneto de Ising Semi-Infinito	93
3.3 - Resultados	105
3.4 - Influência de Natureza das Interações .	115
<u>Capítulo 4</u> - Criticalidade do Ferromagneto N-vetorial Discreto em Rede Cúbica com uma Superfície Livre	118
4.1 - O Modelo N-vetorial Discreto (Cúbico) .	118
4.2 - O Ferromagneto Cúbico em Rede Semi-Infinita	126
4.3 - Resultados	133
<u>Capítulo 5</u> - Magnetização Espontânea para o Ferromagneto de Ising em um Tapete de Sierpinski	158
5.1 - Geometria dos Tapetes de Sierpinski ...	158
5.2 - Magnetização para um Ferromagneto de Ising em um tapete de Sierpinski	160
<u>Conclusões</u>	176
<u>Bibliografia</u>	182

LISTA DE FIGURAS

<u>FIG.</u>	<u>PAG.</u>
2.1.1 - Transformação de GR com grafos auto-duais para a rede quadrada	41
2.1.2 - Fluxo de renormalização da variável μ/B^d	41
2.2.1 - Transformação com grafos auto-duais para rede quadrada anisotrópica	51
2.3.1 - Variação térmica da magnetização para diferentes q	62
2.3.2 - Variação térmica da magnetização para diferentes q e razões K_y/K_x	64
2.3.3 - Dependência do parâmetro de ordem P_∞ com p_x ($q = 1$)	65
2.3.4 - Amplitude A como função da temperatura ($q = 3$) para diferentes razões K_y/K_x e definição de $T_{\text{crossover}}$	70
3.1.1 - Assimetria A (da técnica de SPLEED) em função da temperatura para um filme fino de Gd	75
3.1.2 - Dependência da magnetização com a distância à superfície	79
3.1.3 - Diagrama de fases para o ferromagneto de Ising em rede cúbica semi-infinita	81
3.1.4 - Resultados de Monte Carlo para a magnetização das camadas em um ferromagneto de Ising	86
3.2.1 - Transformação de GR para o volume e a superfície em uma rede cúbica semi-infinita	99
3.3.1 - Variação térmica da magnetização de superfície ($\Delta < \Delta_c$)	107
3.3.2 - Variação térmica da magnetização de superfície ($\Delta = \Delta_c$)	108
3.3.3 - Variação térmica da magnetização de superfície ($\Delta > \Delta_c$)	109

4.4.1 - Superfície do grafite esfoliado com adsorção de H_2	121
4.1.2 - Diagrama de fases para o ferromagneto Cúbico (N), $N = 2$, em rede quadrada	124
4.2.1 - Transformação de GR para o volume e a superfície da rede cúbica	129
4.3.1 - Cubo $t_{1B} = 0$ ($N = 2$)	136
4.3.2 - Cubo $t_{2s} = 1$ ($N = 2$)	137
4.3.3 - Cubo $t_{2B} = 1$ ($N = 2$)	138
4.3.4 - Planos invariantes gerados pelos pontos fixos do volume infinito ($N = 2$)	141
4.3.5 - Planos invariantes envolvendo variáveis de volume e superfície ($N = 2$)	147
4.3.6 - Evolução com N dos planos invariantes envolvendo variáveis de volume e superfície	149
4.3.7 - Diagrama de fases no limite $N \rightarrow 0$	156
5.1.1 - Dois estágios da formação de tapetes de Sierpinski com lacunaridades diferentes	161
5.2.1 - Diagrama de fases para tapetes de Sierpinski ..	163
5.2.2 - Construção de uma rede hierárquica para simular o tapete de Sierpinski	167
5.2.3 - Variação térmica de M e M_w para diferentes razões J_w/J	170
5.2.4 - Variação térmica da magnetização da fronteira para um ferromagneto de Ising em rede quadrada semi-infinita	174

LISTA DE TABELAS

<u>TAB.</u>	<u>PAG.</u>
2.1.1 - Construção do momento magnético total para os grafos da transformação da fig. (2.1.1)	46
2.2.1 - Construção do momento magnético total para os grafos da transformação da fig. (2.2.1)	59
2.3.1 - Expoentes críticos β para o ferromagneto de Potts na rede quadrada anisotrópica	68
2.3.2 - Valores da amplitude A da magnetização para o ferromagneto de Potts na rede quadrada anisotrópica	68
3.1.1 - Expoentes de Campo Médio associados à superfície	84
3.2.1 - Construção da eq. (3.2.15) para a transformação de GR para o volume	103
3.2.2 - Construção da eq. (3.2.16) para a transformação de GR para a superfície	104
3.3.1 - Valores para as temperaturas críticas, expoentes β_1 e amplitudes A correspondentes a cada transição	112
4.3.1 - Evolução com N dos pontos fixos críticos para o ferromagneto Cúbico (N) na rede cúbica semi-infinita	145
4.3.2 - Evolução com N dos pontos fixos críticos para o ferromagneto Cúbico (N) na rede cúbica	146
4.3.3 - Valores das quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da fig. 4.3.5 (a), para diferentes N	150
4.3.4 - Valores das quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da fig. 4.3.5 (b), para diferentes N	151

4.3.5 - Valores das quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da fig. 4.3.5 (c), para diferentes N	151
4.3.6 - Valores das quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da fig. 4.3.5 (d), para diferentes N	154

A criação é um perene desdobramento e
uma perene reestruturação. É uma
intensificação da vida.

Fayga Ostrower

INTRODUÇÃO

Os sistemas magnéticos exibem uma grande variedade de fenômenos interessantes devido a natureza dos diferentes ordenamentos que podem ocorrer. Como exemplos, citamos: o ferromagnetismo, o antiferromagnetismo, ferrimagnetismo e vidros de spin. Historicamente, a teoria microscópica do magnetismo desenvolveu-se através de modelos em que considerava-se momentos magnéticos atômicos interagindo entre si como responsáveis pela ordem no sistema. Mais tarde, esclareceu-se a origem destes momentos magnéticos (através da existência do spin dos elétrons) e a natureza da interação entre eles (a interação de troca, de natureza coulombiana, associada ao princípio de exclusão de Pauli). Basicamente, o magnetismo pode ser caracterizado como um fenômeno de natureza quântica e de caráter cooperativo, onde um número grande de graus de liberdade comportam-se de modo correlacionado. Um resumo do desenvolvimento desta área da física pode ser encontrado na ref. 1.

Um modelo simples que tem sido utilizado em Mecânica Estatística como protótipo para sistemas magnéticos é o modelo de Ising. Neste modelo, associa-se um momento magnético (σ) a cada sítio em uma rede, o qual só pode estar orientado em duas direções (opostas), $\sigma = \pm 1$. A energia de interação entre momentos magnéticos σ_i e σ_j é descrita pela Hamiltoniana

$$H_{ij} = -J \sigma_i \sigma_j$$

onde J é a integral de troca. De acordo com o sinal de J a orientação preferencial relativa entre os momentos será ferromagnética ($J > 0$) ou antiferromagnética ($J < 0$). Este modelo descreve substâncias magnéticas isolantes (elétrons com pouca mobilidade) uniaxiais (anisotropia muito forte no espaço dos spins), além de ser um protótipo para outros tipos de sistema, como ligas binárias e sistemas gás-líquido, por exemplo.

Este modelo pode ser generalizado de diversas maneiras. Se a variável σ assume N orientações (correspondendo a N valores), e a energia de interação entre vizinhos i e j é descrita por

$$H_{ij} = -NJ \delta_{\sigma_i \sigma_j} \quad , \quad \sigma_i = 1, 2, \dots, N$$

(dando origem a apenas dois níveis de energia), obtemos o modelo de Potts de N estados. Se a interação entre vizinhos depende apenas do módulo da diferença angular entre as orientações das variáveis σ , obtemos o modelo $Z(N)$. Se a cada sítio associa-se além da variável de Ising $\sigma_i = \pm 1$ uma outra variável α_i que pode assumir N valores (associada a direção de eixos em um hipercubo N -dimensional), sendo a Hamiltoniana dada por

$$H_{ij} = -NJ_{ij} \delta_{\alpha_i \alpha_j} \sigma_i \sigma_j$$

obtemos o modelo cúbico N-vetorial. Se consideramos a generalização onde σ^x , σ^y e σ^z são as matrizes de Pauli associadas respectivamente às componentes S^x , S^y e S^z de um spin $1/2 \vec{S}$, sendo a interação descrita por acoplamentos nas 3 componentes de \vec{S} , obtemos o caso quântico. O Hamiltoniano mais utilizado neste caso é

$$H_{ij} = -J [\Delta(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z]$$

onde $\Delta = 0, 1$ e ∞ corresponde respectivamente ao modelo de Ising, Heisenberg isotrópico (isotropia na interação entre spins) e modelo XY (simetria planar).

Quando mudam as condições externas a que um sistema magnético está submetido, ou mesmo quando sua composição interna varia, o tipo de ordenamento do sistema pode mudar. Se nesta mudança de fase está envolvido um calor latente, a transição é dita de primeira ordem (descontínua), caso contrário, de segunda ordem (contínua). As transições de fase de uma maneira geral ocorrem em sistemas diversos, tais como fluidos, ligas binárias, supercondutores, etc, envolvendo outros tipos de ordem além da magnética. Neste trabalho daremos ênfase ao estudo das transições de fase de segunda ordem em sistemas magnéticos. Um exemplo deste tipo de transição ocorre no modelo de Ising. O modelo foi resolvido exatamente em uma dimensão⁽²⁾ (onde não existe ordenamento a temperaturas diferentes do zero absoluto) e em duas dimensões⁽³⁾, quando apresenta uma transição de fase de segunda ordem a uma temperatura crítica T_c finita, entre uma fase ordenada e outra paramagnética.

Próximo a uma transição de fase (criticalidade) ocorrem anomalias em muitas propriedades (tanto estáticas quanto dinâmicas). A existência de correlações de longo alcance, que provocam o aparecimento de grandes flutuações no sistema, é o fator responsável pelo aparecimento destas anomalias.

A principal dificuldade para tratar teoricamente os fenômenos críticos consiste no fato de que é necessário considerar um número grande de graus de liberdade, já que eles comportam-se de modo correlacionado. Inicialmente considerou-se a aproximação que consiste em substituir o efeito de um conjunto de graus de liberdade por um campo efetivo. Posteriormente surgiu a teoria de Landau, baseada em hipóteses gerais sobre a forma da energia livre na transição. Estas teorias (chamadas de Campo Médio), por não levarem em conta apropriadamente o efeito das flutuações, superestimam a ordem nos sistemas e prevêm expoentes críticos (que caracterizam as singularidades de algumas funções termodinâmicas) em desacordo com os obtidos experimentalmente.

A natureza das singularidades que ocorrem na criticalidade tem sido compreendida melhor através do tratamento de Grupo de Renormalização (GR), que considera o efeito das flutuações de maneira apropriada. Esta teoria, baseada em um processo de redução dos graus de liberdade (Kadanoff⁽⁴⁾), foi sistematizada por Wilson⁽⁵⁾ utilizando idéias que já vinham sendo desenvolvidas em Teoria de Campos. O GR é atualmente a técnica analítica aproximada mais adequada para tratar os fenômenos críticos (em especial os relacionados

a transições de fase contínuas). Neste formalismo os conceitos de invariância por escala e universalidade (que caracterizam os fenômenos críticos) aparecem de uma maneira natural.

Comportamentos verdadeiramente não-analíticos e invariância por escala só são possíveis para os sistemas Hamiltonianos habituais, rigorosamente, no limite termodinâmico. Assim, nos modelos teóricos usualmente considera-se magnetos ideais infinitos, translacionalmente invariantes. No entanto, os sistemas reais são finitos e possuem superfícies (que quebram a simetria de translação).

Desprezar estes efeitos em uma teoria de fenômenos críticos é justificável dependendo do sistema que pretendemos tratar e em que propriedades temos interesse. Efeitos de tamanho finito podem ser muito importantes em sistemas mesoscópicos ou quando as interações microscópicas são de longo alcance (como em ligas metal-hidrogênio, por exemplo), sendo necessário considerar a forma do sistema. Neste trabalho estamos interessados em sistemas com interações de curto alcance, como por exemplo os ferromagnetos, em que momentos microscópicos (spins) interagem através de interações de troca cujo alcance é o de alguns parâmetros de rede. Neste caso efeitos de tamanho devem poder ser desprezados, desde que estejamos interessados em grandezas associadas ao volume. Isto porque as partículas estão correlacionadas somente dentro de uma certa região - cujo tamanho linear é definido como o comprimento de correlação ξ . O comprimento de correlação é finito a menos que estejamos no ponto crítico. Assim, efeitos associados à presença de superfícies só são sentidos dentro de uma camada de largura da ordem do comprimento de correlação. No

ponto crítico, em sistemas ideais, este comprimento torna-se do tamanho do sistema, mas na prática isto só acontece em filmes finos ou partículas pequenas. Experimentalmente os comprimentos de correlação típicos são muito menores que as dimensões do sistema. Consequentemente efeitos de superfície são pequenos em qualquer grandeza extensiva em que estejamos interessados.

Em resumo, poderíamos pensar que estes efeitos são irrelevantes para o comportamento crítico de sistemas com interações de curto alcance. No entanto, desvios nos valores de grandezas extensivas em relação ao seu valor no volume já foram medidos (estas medidas podem ser feitas, por exemplo, em filmes de largura variável). Neste caso, em um tratamento teórico, faz sentido separar todas as quantidades extensivas do sistema (como a energia livre, por exemplo) em um termo proporcional ao volume do sistema e um outro termo proporcional à área da superfície. Assim como o comportamento crítico da contribuição do volume pode ser descrito (como veremos adiante) em termos de expoentes críticos e leis de escala, uma descrição similar surge para a contribuição da superfície. Por outro lado, se estamos interessados em *quantidades locais*, cujas médias termodinâmicas próximo à superfície são diferentes do seu valor no interior do volume (como consequência do efeito "geométrico" de haver uma superfície), então é necessário considerar estes efeitos. Neste caso, considera-se como modelo teórico, por exemplo, sistemas semi-infinitos, sistemas limitados por duas superfícies, etc. A introdução de expoentes críticos associados às grandezas locais torna-se necessária para descrever o

comportamento crítico desses sistemas. No capítulo 3 voltaremos a esta questão.

Recentemente, fenômenos ligados a superfícies têm despertado grande interesse tanto devido à sua riqueza teórica quanto à sua importância tecnológica (por exemplo, processos químicos como a corrosão e a catálise ocorrem na superfície dos sólidos; o armazenamento de informações em um meio magnético é feito na sua superfície). Teoricamente, a dificuldade em abordar sistemas com superfícies consiste no fato de que há uma quebra na invariância por translação e na isotropia. Em redes cristalinas infinitas perfeitas, cada sítio tem exatamente a mesma vizinhança, o que não ocorre em sistemas com superfícies. Na melhor das hipóteses, a periodicidade é mantida em duas dimensões, se não houver um rearranjo dos átomos superficiais. Próximo à superfície, o momento magnético associado a cada sítio sofre a ação de um campo cristalino (devido aos outros momentos magnéticos) diferente do campo que atua no interior do sólido (o número de coordenação de um sítio superficial é diferente do de um sítio interno). O comportamento crítico de superfícies é complicado ainda pelo fato de que, além do efeito geométrico de ter sítios vizinhos a menos, os acoplamentos microscópicos próximo à superfície podem ter valores diferentes daqueles do volume. Devido a isto a superfície pode ordenar-se, para temperaturas decrescentes, a uma temperatura mais alta que a do volume, ou pode apresentar um tipo de ordenamento de caráter diferente do associado ao volume. Atualmente sabemos que as propriedades magnéticas (por exemplo) de superfícies podem diferir drasticamente daquelas do volume a que estão acopladas⁽⁶⁾. Esta diferença depende

inclusive da simetria da superfície em questão (se é uma superfície (100), (110), etc).

Por outro lado, há também interesse em sistemas puramente bidimensionais, em oposição a sistemas em que uma superfície está acoplada ao volume. Os filmes finos que aderem à superfície dos sólidos, consistindo de aproximadamente uma camada molecular, são exemplos de sistemas reais que podem ter as propriedades de um sólido bidimensional. Isto ocorre quando as forças entre átomos deste filme são muito mais fortes que as forças entre filme e substrato, e tanto o parâmetro de rede quanto a simetria naturais do sólido bidimensional são substancialmente diferentes dos do conjunto de sítios de adsorção. Neste caso o filme fica em uma fase em que ele está livre da estrutura do substrato.

Atualmente é possível obter informações sobre propriedades locais dos materiais através de diversas técnicas experimentais que, em princípio, permitem estudar os efeitos de superfície separadamente dos efeitos de tamanho finito. Uma técnica bastante utilizada, por exemplo, é a de SPLEED ("spin-polarized low-energy electron diffraction"), que consiste no espalhamento de um feixe de elétrons de spin polarizado por uma superfície magnetizada. Mede-se a intensidade de assimetria A

$$A = \frac{I_{\uparrow\uparrow} - I_{\uparrow\downarrow}}{I_{\uparrow\uparrow} + I_{\uparrow\downarrow}}$$

onde $I_{\uparrow\uparrow}$ é a intensidade do feixe espalhado quando o momento magnético do elétron incidente é paralelo à magnetização e $I_{\uparrow\downarrow}$ quando é antiparalelo. A assimetria é proporcional, em primeira aproximação, ao alinhamento dos spins na superfície. Uma outra técnica importante é a de ECS ("electron-capture spectroscopy"), que consiste basicamente na captura de elétrons dos átomos de superfície por deuteronos rápidos que incidem sobre o material, sendo refletidos a ângulos pequenos. Dependendo da polarização dos spins destes elétrons capturados, definida como

$$P = \frac{(n^+ - n^-)}{(n^+ + n^-)} ,$$

onde n^+ e n^- são respectivamente o número de elétrons com momento magnético paralelo e antiparalelo ao campo magnetizante interno, obtém-se informações sobre o ordenamento magnético da superfície. Outras técnicas disponíveis são LEED ("low-energy electron diffraction"), "spin-polarized photo-emission", espectroscopia Mössbauer e varredura por microscopia eletrônica com análise de polarização (ver ref. 7).

Na prática, obter dados experimentais em superfícies (ou em filmes) é um processo bastante complexo, devido às enormes dificuldades em preparar superfícies atômicamente limpas que permaneçam sem contaminação e bem definidas durante os múltiplos ciclos de aquecimento e resfriamento necessários à obtenção de dados confiáveis. Além disso, deve-se obter informações concernentes apenas às primeiras camadas da amostra.

O efeito da dimensionalidade do sistema no ordenamento magnético tem sido objeto de muita discussão. Através dos trabalhos pioneiros de Bloch e Peierls (nas primeiras décadas deste século), pensava-se que vários tipos de estados ordenados, tais como cristais perfeitos, magnetos, superfluidos e supercondutores, não podiam existir em uma linha única ou em uma camada única de átomos (supondo-se sistemas de simetria contínua). A temperatura do zero absoluto podia-se encontrar um estado ordenado estável, mas à temperaturas finitas as excitações cristalinas (magnons e fonons) destruiriam qualquer ordem de longo alcance.

Estas idéias foram consideradas quase como teoremas, até que nos anos 60 mostrou-se que estes "teoremas" estavam incompletos. Novas idéias surgiram com o trabalho de Berezenskii, Lasher e Mermin. O teorema de Mermin-Wagner⁽⁸⁾ afirma, em resumo, que não pode existir ordem de longo alcance (entendida, por exemplo, como magnetização espontânea para ferromagnetos e magnetização de subrede para antiferromagnetos) para qualquer temperatura finita em sistemas de simetria contínua, com interações de curto alcance, em duas dimensões. Assim, ordem cristalina de longo alcance nestas condições é excluída. O teorema não exclui a possibilidade de haver outros tipos de transição. Na verdade não existe contradição em não existir ordem de longo alcance e ocorrer uma transição de fase à temperatura finita T_c , ocorrendo singularidades em funções tais como a suscetibilidade. Stanley e Kaplan⁽⁹⁾ explicaram esta possibilidade através de um decaimento da função de

correlação $\Gamma(R) = \langle \vec{s}_0 \cdot \vec{s}_R \rangle$ como lei de potência, para $T \leq T_c$, fazendo com que a suscetibilidade $\chi \sim \sum \Gamma(R)$ divirja neste intervalo de temperaturas. Para $T > T_c$ a função de correlação decairia exponencialmente, implicando em suscetibilidade finita. Esta transição ocorre sem que $\Gamma(\infty)$ seja finita (sem ordem de longo alcance, portanto). Efetivamente, mais tarde, o trabalho de Kosterlitz e Thouless⁽¹⁰⁾ mostrou que para o modelo planar (XY clássico) um meio bidimensional comporta transições de fase à T finita, do tipo predito por Stanley e Kaplan, envolvendo um tipo adicional de ordem de longo alcance, a ordem "topológica". Fröhlich e Lieb⁽¹¹⁾ provaram a existência de transição de fase à T finita para uma variedade de modelos com simetria contínua em duas dimensões. Assim, tudo indica que problemas em duas dimensões são delicados, no sentido de que mudanças aparentemente inócuas nos parâmetros do modelo podem causar mudanças profundas na termodinâmica.

Avançando um pouco mais na questão da influência da dimensionalidade no magnetismo, consideremos agora o caso da superfície acoplada ao sólido. Devido às experiências⁽¹²⁾ em que observou-se camadas magneticamente "mortas" (paramagnéticas) em filmes finos de Ni em substratos de Cu, pensou-se durante cerca de dez anos que uma superfície "limpa" em um sólido não podia estar magnetizada, apesar dos resultados experimentais não serem convincentes e algumas vezes contraditórios. A diferença entre magnetismo em duas dimensões e magnetismo de superfície ainda não estava clara. No caso de superfícies ou camadas adsorvidas em um sólido sempre existe alguma interação entre a superfície (ou camada) e o volume. Mostrou-se posteriormente através de novas experiências em Ni⁽¹³⁾, usando SPLEED, e em

Fe_3O_4 (14), usando a técnica de "spin polarized photo emission", que o aspecto bidimensional da superfície nestes sistemas apenas reforça as excitações de spin mas não destrói a ordem de longo alcance. Assim, por exemplo, para o Fe_3O_4 a magnetização de superfície decresce mais rapidamente que a do volume, quando variamos a temperatura. Muito progresso tem sido feito desde então, embora alguns pontos ainda não estejam suficientemente claros. Retomaremos esta questão mais adiante.

Ao longo deste trabalho, estudamos algumas propriedades críticas estáticas (fronteiras críticas, expoentes, classes de universalidade, magnetização espontânea) para alguns dos modelos estatísticos que foram mencionados nesta introdução.

No capítulo 1, fazemos um resumo das idéias básicas sobre fenômenos críticos e descrevemos o procedimento do Grupo de Renormalização no espaço real, aplicado a sistemas de spins localizados. Destacamos o procedimento usual para calcular grandezas termodinâmicas como a energia livre, por exemplo, em função dos parâmetros externos e a aproximação por redes hierárquicas.

No capítulo 2 discutimos um método (recentemente introduzido) que permite calcular diretamente, sem passar por cálculos de energia livre, as equações de estado para sistemas térmicos. Como estamos interessados em sistemas semi-infinitos, é necessário saber tratar a anisotropia nas ligações da rede, inerente a este tipo de problema. Generalizamos o método já mencionado para o caso anisotrópico, aplicando-o como teste ao ferromagneto de Potts em rede quadrada anisotrópica.

No capítulo 3 aplicamos este formalismo ao ferromagneto de Ising em rede cúbica semi-infinita, discutindo as diferentes classes de universalidade das transições que ocorrem no sistema e obtendo a magnetização espontânea da superfície e do volume como funções da temperatura.

No capítulo 4 estudamos a criticalidade do modelo cúbico n -vetorial em uma rede cúbica semi-infinita, onde novos tipos de ordem surgem devido a presença da superfície.

No capítulo 5 estudamos o comportamento da magnetização em um ferromagneto de Ising sobre uma estrutura fractal, o tapete de Sierpinski, motivados pela questão da influência da dimensão no magnetismo.

Nas conclusões apresentamos um resumo dos resultados obtidos e perspectivas para a continuação do trabalho nesta linha.

CAPÍTULO 1

GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO REAL E TRANSIÇÕES DE FASE

Nosso objetivo neste capítulo é descrever brevemente as principais características dos fenômenos críticos e apresentar os conceitos fundamentais do grupo de Renormalização, aplicando o método na versão do espaço real à sistemas de spins localizados. O método padrão para obter grandezas termodinâmicas como função dos parâmetros externos e a aproximação por redes hierárquicas são discutidas.

1.1 - Fenômenos Críticos

Uma grande variedade de sistemas exibem fenômenos críticos. Uma revisão detalhada deste assunto pode ser encontrada na ref. 15. Aqui consideraremos, apenas para efeito de comparação, sistemas fluidos e nos concentraremos em sistemas magnéticos.

Para um sistema fluido homogêneo isotrópico, a equação de estado é da forma $f(P, \rho, T) = 0$, onde as variáveis são respectivamente pressão, densidade e temperatura. Esta equação define uma superfície no espaço (P, ρ, T) . A projeção de alguns segmentos desta superfície no plano PT , por exemplo, define curvas de coexistência, onde cada ponto representa um estado do sistema

em que coexistem em equilíbrio duas das três fases possíveis. As curvas de coexistência se encontram no ponto triplo, onde as três fases coexistem. A curva de coexistência entre vapor e líquido não continua indefinidamente, acabando em um ponto crítico (P_c, ρ_c, T_c) . A partir deste ponto é possível converter líquido em gás continuamente, sem passar pela linha de transição de fase.

À baixas temperaturas, existe uma grande diferença entre as densidades do líquido e do gás, ρ_L e ρ_G , mas quando nos aproximamos da temperatura crítica esta diferença tende a zero. $(\rho_L - \rho_G)$ é o *parâmetro de ordem* do sistema, definido em geral como uma grandeza que é diferente de zero abaixo da temperatura crítica do sistema e nula acima desta temperatura.

A projeção da superfície dada pela equação de estado no plano $P\rho$ define isotermas. Essas isotermas apresentam uma parte plana na vizinhança do ponto crítico, isto é, para $T \rightarrow T_c^+$, $\partial P/\partial \rho \rightarrow 0$. Como a compressibilidade do fluido é definida através de $1/\rho$ ($\partial \rho/\partial P$), ela diverge quando nos aproximamos do ponto crítico. Esta divergência significa que a distribuição de densidades é muito sensível a flutuações pequenas de pressão.

Em um magneto simples, por exemplo, como o de Ising, onde os spins \vec{S}_i podem ter apenas duas orientações, aparecem duas fases. À temperaturas altas, se comparadas com J , a entropia domina sobre a energia e os spins flutuam quase que independentemente. A simetria global nos spins é preservada nesta fase (paramagnética). A correlação entre dois spins separados por uma distância r cai como $\Gamma(r) \sim e^{-r/\xi}$, onde ξ é o comprimento de correlação característico. À baixas

temperaturas a energia domina sobre a entropia e os spins estão predominantemente alinhados em um dos dois sentidos possíveis (fase ferromagnética). Quando um dos dois sentidos é escolhido, há uma quebra de simetria, e o sistema adquire magnetização espontânea M (que é o parâmetro de ordem neste caso). Na fase ordenada, a correlação entre dois spins é diferente de zero (M^2) quando a distância entre eles tende a infinito (*ordem de longo alcance*). A transição entre as duas fases ocorre a uma temperatura crítica T_c da ordem de J , onde ξ diverge e a magnetização espontânea se anula (se o sistema está sendo aquecido).

Em um magneto a equação de estado é dada através de uma função ligando H , M e T , respectivamente campo magnético, magnetização e temperatura. Estes parâmetros, nesta ordem, guardam uma analogia estreita com os parâmetros P , ρ e T do fluido. A projeção da superfície dada pela equação de estado no plano HT define uma linha de coexistência para $H = 0$, T abaixo de T_c : coexistem duas fases caracterizadas por magnetizações iguais em módulo mas com sentidos opostos ao longo de um dado eixo.

A projeção da superfície correspondente à equação de estado no plano HM define isotermas. Para o magneto a grandeza análoga à compressibilidade isotérmica do fluido é a suscetibilidade isotérmica $\chi_T = (\partial M / \partial H)_{H=0, T}$, que diverge em T_c (a divergência está associada à parte plana que aparece na isoterma $T = T_c$). Esta divergência corresponde a uma sensibilidade muito grande das flutuações de spin a pequenas

variações no campo.

As transições de fase em geral são caracterizadas pelo comportamento singular apresentado por algumas grandezas físicas na *criticalidade*. Mencionamos as principais e seus expoentes críticos associados, para um sistema magnético ($t = (T-T_c)/T_c$):

(a) O parâmetro de ordem

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

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

(b) A susceptibilidade a campo nulo

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

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

(c) O calor específico

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

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

(d) A função de correlação, definida como $\Gamma(\vec{r}) \equiv \langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle$,

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

d = dimensionalidade

(e) O comprimento de correlação, que mede o alcance da função de correlação,

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

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

Guggenheim⁽¹⁶⁾, em 1945, reunindo dados sobre a curva de coexistência de oito fluidos simples, mostrou que essas curvas se reduziam a uma única, quando os dados eram propriamente normalizados (ilustrando a lei dos estados correspondentes). O parâmetro de ordem variava perto de T_c com um expoente $\beta \sim 1/3$ para *todos* esses fluidos. Começava a delinear-se a idéia de universalidade nos fenômenos críticos.

Esta característica dos fenômenos críticos foi percebida com clareza a partir da década de 60, quando foram realizadas muitas experiências com grande precisão na vizinhança dos pontos críticos. Observou-se então que sistemas inteiramente diferentes, com temperaturas críticas distintas, acabavam exibindo o mesmo tipo de comportamento assintótico (caracterizado pelos mesmos expoentes críticos), na vizinhança do ponto crítico.

Os expoentes críticos assumem valores universais, diferentes dos previstos pelas teorias de campo médio. Eles dependem, em princípio, apenas de alguns fatores como (i) a dimensionalidade dos sistemas físicos (ii) a dimensionalidade

do parâmetro de ordem (por exemplo, em uma transição líquido-gás a diferença de densidades é um escalar, em uma transição ferromagnética isotrópica a magnetização é um vetor de 3 componentes) e (iii) o alcance das interações microscópicas.

Os expoentes críticos estão relacionados entre si. Pode-se mostrar, através de argumentos gerais, que valem as seguintes desigualdades:

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad (\text{Rushbrooke}) \quad \text{a)}$$

$$\alpha' + \beta(1+\delta) \geq 2 \quad (\text{Griffiths}) \quad \text{b)}$$

$$(2-\eta)v \geq \gamma \quad (\text{Fisher}) \quad \text{c)} \quad (1.1.10)$$

$$dv' \geq 2 - \alpha' \quad \text{d)}$$

$$dv \geq 2 - \alpha \quad (\text{Josephson}) \quad \text{e)}$$

Uma propriedade importante dos sistemas na criticalidade é a invariância por escala, já que as flutuações do parâmetro de ordem estão presentes em todas as escalas de tamanho. As hipóteses de escala⁽¹⁷⁻¹⁹⁾, baseadas nesta propriedade, permitem obter relações adicionais entre os expoentes críticos. Obtém-se que (i) as relações acima são satisfeitas como igualdades; (ii) os expoentes α' , γ' , v' são iguais respectivamente a α , γ , v ; (iii) é possível estabelecer equações de estado independentes da substância normalizando as variáveis apropriadamente, como no caso da lei de estados

correspondentes para fluidos.

1.2 - O Grupo de Renormalização no Espaço Real

O método de Grupo de Renormalização (GR) ((20), (21), (22)) aplica-se a problemas caracterizados por envolver, de modo essencial, um grande número de graus de liberdade. Os fenômenos críticos são um exemplo desta classe de problemas.

Em muitas situações é possível reduzir o tamanho de um sistema (de modo a ter um número menor de graus de liberdade) sem mudar qualitativamente suas propriedades. Pode-se chegar então a um problema em que seja possível a aplicação de métodos tradicionais. O tamanho mínimo até onde se pode ir neste processo é o comprimento de correlação ξ , que depende do estado do sistema. Perto de uma transição de fase, por exemplo, ξ torna-se grande e no ponto crítico, ξ é infinito. O comportamento de sistemas em que muitos graus de liberdade atuam cooperativamente dentro de uma região de tamanho ξ é qualitativamente diferente do comportamento de sistemas que possuem apenas alguns graus de liberdade nesta região. No primeiro caso o comportamento é determinado fundamentalmente pelo fato de haver comportamento cooperativo, muito mais do que pelos detalhes da natureza dos graus de liberdade em questão. Deste ponto surge a noção de universalidade nos fenômenos críticos.

Um dos objetivos do GR é simplificar a tarefa de resolver sistemas em que existem muitos graus de liberdade

dentro de um comprimento de correlação. A idéia essencial é substituir os graus de liberdade microscópicos originais do sistema por um conjunto menor de graus de liberdade efetivos (processo que pode ser visto como uma mudança de escala onde as flutuações microscópicas são eliminadas). Isto é feito em etapas sucessivas, em princípio até que os novos graus de liberdade estejam separados por distâncias da ordem de ξ . Em cada etapa obtém-se interações efetivas, dando origem a uma Hamiltoniana renormalizada. Os novos acoplamentos podem ser obtidos considerando-se apenas uma região do sistema da ordem do alcance dessas interações. Assim chega-se idealmente a uma situação em que apenas alguns graus de liberdade em um comprimento ξ precisam ser considerados, o que pode ser feito através dos métodos convencionais.

O GR também pode ser utilizado para obter as características do comportamento cooperativo dos sistemas, tais como os expoentes críticos associados ao parâmetro de ordem, à suscetibilidade e ao comprimento de correlação. Para isso considera-se a própria transformação do GR, isto é, a transformação τ que leva a Hamiltoniana original H_0 na renormalizada H_1 , H_1 em H_2 , etc, enquanto faz-se as mudanças de escala:

$$\tau(H_i) = H_{i+1} \quad . \quad (1.2.1)$$

Iterando-se τ n vezes (n grande já que próximo a um ponto crítico ξ é grande) no caso mais simples atinge-se assintoticamente um ponto fixo da transformação

$$\tau(H^*) = H^* \quad (1.2.2)$$

Este ponto fixo é propriedade da transformação τ , sendo o limite da sequência de H 's para todo um conjunto de escolhas iniciais H_0 . A um ponto fixo corresponde um estado do sistema invariante sob a transformação de escala, isto é, associado a $\xi = \infty$ (ponto fixo crítico) ou $\xi = 0$ (ponto fixo trivial). Os tipos possíveis de comportamento cooperativo são determinados pelos possíveis pontos fixos críticos de τ . Cada ponto fixo terá seu domínio de atração, de modo que o conceito de universalidade vale separadamente em cada domínio.

Em um espaço de parâmetros (temperatura, campos, constantes de acoplamento), onde cada ponto representa uma Hamiltoniana a uma dada temperatura T , a sucessão de H 's obtidas através das iterações do RG pode ser visualizada como uma trajetória. Se consideramos, por exemplo, um sistema apresentando uma transição de fase ferromagnética, o ponto representativo do sistema descreve uma linha ("linha física") enquanto T varia. Neste espaço dos parâmetros, pode-se representar superfícies de ξ constante, S_ξ . A linha física atravessa estas superfícies, já que ξ é função de T . Quando a linha física cruza a superfície S_∞ (superfície crítica) em um ponto P , ocorre a transição de fase. De cada ponto da linha física o GR faz partir trajetórias de sistemas correspondentes. Do ponto P parte uma trajetória que permanece em S_∞ , já que ξ permanece infinito quando se reduz o número de graus de

liberdade, indo em direção a um ponto fixo nesta superfície. A trajetória que parte de um ponto vizinho a P se afasta de S_∞ , atravessando superfícies S_ξ de ξ cada vez menores e sendo atraída por um ponto fixo trivial ($\xi = 0$).

Na vizinhança de um ponto fixo crítico é possível fazer uma teoria linear para estudar a renormalização dos parâmetros pouco diferentes dos do ponto fixo. Diagonalizando o Jacobiano da transformação de GR definem-se eixos locais, associados a campos de escala, para os quais, na vizinhança do ponto fixo, a transformação é linearizada. Em geral os eixos locais são diferentes para cada ponto fixo.

A um ponto fixo corresponde um comportamento crítico definido, determinando pelos campos de escala e autovalores do Jacobiano no ponto. A cada ponto fixo está associado uma bacia atratora na superfície crítica. Todo sistema cuja linha física atravessa uma dada bacia atratora apresenta o comportamento crítico associado ao ponto fixo correspondente. As competições entre pontos fixos dão lugar aos fenômenos de crossover: uma trajetória pode passar perto de um ponto fixo, apresentando inicialmente o regime crítico característico deste ponto, depois passar por uma zona de transição e por fim, bem próximo à temperatura crítica T_c , apresentar um segundo regime crítico característico de um outro ponto fixo, que seria o limite definitivo da trajetória.

Para tornar estas idéias operacionais, consideremos um sistema de spins de Ising em uma rede d -dimensional com Hamiltoniana generalizada

$$H(S) = K_1 \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j + K_2 \sum_i S_i + \dots \quad (1.2.3)$$

onde $S_i = \pm 1$ é a variável de spin associada a cada sítio i da rede, o fator $(-\beta)$ já está incorporado a H e o espaço dos parâmetros de H é dado pelo conjunto $\{K\} = \{K_1, K_2, \dots, K_\alpha, \dots, K_N\}$, onde o índice α se refere ao tipo de acoplamento (entre dois spins, primeiros vizinhos, segundos vizinhos, campo, entre três spins, etc). Seguindo as idéias de Kadanoff⁽⁴⁾, divide-se a rede em blocos de b^d spins e transforma-se cada bloco em um novo spin S'_i , os quais formam uma rede isomorfa à original, escalada por um fator b . As interações efetivas entre spins S'_i e o campo efetivo dão origem a nova Hamiltoniana

$$H'(S') = K'_1 \sum_{\langle i, j \rangle} S'_i S'_j + K'_2 \sum_i S'_i + \dots \quad (1.2.4)$$

Como a origem das energias também é renormalizada, surge um termo adicional em $H'(S')$, G , que depende das constantes de acoplamento iniciais mas não da configuração dos spins $\{S'_i\}$. Para preservar os aspectos físicos relevantes, impõe-se em geral que alguns funcionais permaneçam invariantes sob a transformação. No caso impomos que a função de partição seja preservada,

$$\sum_{(S)} \exp [H(S)] = \sum_{(S')} \exp [G + H'(S')] \quad (1.2.5)$$

onde as somas são sobre todas as configurações dos spins.

Desta relação pode-se obter os parâmetros renormalizados em função dos originais,

$$K'_\alpha = R_b^\alpha (\{K\}) \quad (1.2.6)$$

que são as equações de renormalização a serem iteradas. Próximo a um ponto fixo $(K_1^*, K_2^*, \dots, K_N^*)$ destas equações, obtém-se a linearização da transformação através do Jacobiano $J_{\alpha\beta} = (\partial K'_\alpha / \partial K_\beta) |_{(\{K^*\})}$, de modo que a transformação pode ser escrita

$$K'_\alpha - K_\alpha^* = \sum_\beta J_{\alpha\beta} (K_\beta - K_\beta^*) \quad . \quad (1.2.7)$$

Calculando-se os autovalores λ_i e autovetores associados u_i de J , os campos de escala q_i são escritos em função das antigas variáveis

$$q_i = \sum_\alpha u_\alpha^i (K_\alpha - K_\alpha^*) \quad (1.2.8)$$

de modo que $q'_i = \lambda_i q_i$. Se $|\lambda_i| > 1$, q'_i vai se afastando cada vez mais do ponto fixo por transformações sucessivas de GR. O campo de escala q_i é então dito relevante. Se $|\lambda_i| < 1$, q'_i vai se aproximando do ponto fixo, e o campo é dito irrelevante. O ponto fixo é estável se todos os $|\lambda_i|$ são menores que 1. Se $|\lambda_i| = 1$, o campo correspondente é dito *marginal*.

A partir da linearização da transformação de GR próximo a um ponto fixo é possível obter os expoentes críticos associados a ele. Como exemplo, vamos obter uma expressão para o expoente crítico ν .

Como a transformação de GR reescala o parâmetro de rede

por um fator b , os comprimentos de correlação escritos nas unidades de parâmetro de rede correspondente satisfazem

$$\xi(\{K'\}) = \frac{1}{b} \xi(\{K\}) \quad (1.2.9)$$

onde se supõe que $\xi'(\{K'\}) = \xi(\{K'\})$ já que depois da transformação de GR o sistema continua possuindo um número infinito de graus de liberdade. Por outro lado, o comportamento do comprimento de correlação na região crítica em função dos $\{q_i\}$ pode ser dada por

$$\xi(\{q_i\}) \propto |q_\rangle|^{-\nu} \quad (1.2.10)$$

onde q_\rangle é o campo de escala associado ao maior autovalor (λ_\rangle) de J maior que 1. Este autovalor λ_\rangle corresponde ao eixo local aproximadamente perpendicular à fronteira crítica, sendo q_\rangle um campo de escala tipo temperatura. Quando existe mais de um autovalor maior que 1 associado a um ponto fixo, a fronteira crítica é sempre tangencial ao eixo local associado ao menor autovalor (por construção).

Assim, tem-se que

$$|q'_\rangle|^{-\nu} = \frac{1}{b} |q_\rangle|^{-\nu} \quad (1.2.11)$$

e

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda_\rangle} \quad (1.2.12)$$

1.3 - Equações de Estado

Não existe nenhum motivo a priori pelo qual o GR tenha que se restringir a fenômenos que ocorrem nas vizinhanças da temperatura crítica, especialmente se estamos interessados em soluções aproximadas. Existem procedimentos de GR disponíveis na literatura que permitem calcular grandezas termodinâmicas para valores arbitrários dos parâmetros externos. Resumimos aqui o procedimento usual, que é discutido em detalhes nas refs. 21 e 23.

Partindo da eq. (1.2.5) obtém-se uma relação entre as energias livres adimensionais original e renormalizada, F e F'

$$F = G + F' \quad (1.3.1)$$

Se N e N' são respectivamente o número de sítios da rede antes e depois da renormalização ($N/N' = b^d$), no limite termodinâmico temos que $F = N f(\{K\})$ e $F' = N' f(\{K'\})$, onde $f(\{K\})$ ($f(\{K'\})$) é a energia livre por sítio no sistema original (renormalizado). Introduzindo a definição $G = Ng$, podemos reescrever a eq. (1.3.1) como

$$f(\{K\}) = g(\{K\}) + b^{-d} f(\{K'\}) \quad (1.3.2)$$

Através desta equação básica é possível obter a energia livre do sistema como função dos parâmetros externos (temperatura, campo magnético, etc) e obter, através de derivadas apropriadas, outras grandezas termodinâmicas como por exemplo a magnetização espontânea, o calor específico, a

suscetibilidade, etc, em função destes parâmetros.

Basicamente, a partir da equação (1.3.2) iterada n vezes obtém-se

$$f(\{K\}) = \sum_{m=0}^{n-1} b^{-md} g(\{K^{(m)}\}) + b^{-nd} f(\{K^{(n)}\}) , \quad (1.3.3)$$

onde $\{K^{(n)}\}$ representa o conjunto de acoplamentos do sistema iterados n vezes. No limite $n \rightarrow \infty$, o segundo termo se anula e obtém-se uma solução de série infinita para a energia livre por spin. Na prática esta solução pode ser calculada numericamente para valores arbitrários de K, depois que as equações de renormalização para um número finito de spins forem obtidas.

Na presença de um campo magnético H, no entanto, o limite $\partial[b^{-nd} f(\{K^{(n)}\})]/\partial H$ é finito abaixo da temperatura crítica para $H = 0_{\pm}$ e é deste termo que surge a magnetização espontânea. A magnetização é dada por

$$\frac{\partial f(\{K\})}{\partial H} = M(\{K\}) = \sum_{m=0}^{n-1} b^{-md} \frac{\partial g(\{K^{(m)}\})}{\partial H} + \frac{\partial [b^{-nd} f(\{K^{(n)}\})]}{\partial H} . \quad (1.3.4)$$

Como a função $g(\{K^{(m)}\})$ é par sob trocas de sinal simultâneas de todas as interações ímpares entre os spins (já que pode ser vista como a auto-energia por spin, interação par) no limite $H = 0$, $\partial g(\{K^{(m)}\})/\partial H = 0$ e então a magnetização espontânea é dada somente pelo último termo da eq. (1.3.4). Desde que os acoplamentos iniciais não estejam na

superfície crítica, sob transformação de GR $\lim_{n \rightarrow \infty} \{K^{(n)}\}$ tende para algum dos pontos fixos atratores caracterizados por valores dos acoplamentos iguais a 0 ou ∞ . Nestes pontos pode-se calcular $b^{-nd} f(\{K^{(n)}\})$ diretamente através da função de partição. É importante ressaltar que para $H = 0$, a ordem ao considerar a derivada parcial com respeito a H e o limite $n \rightarrow \infty$ não pode ser trocada.

Procedimentos similares podem ser encontrados nas refs.24 e 25, envolvendo a aproximação por redes hierárquicas.

Este processo para calcular grandezas termodinâmicas como função dos parâmetros externos tende a ser bastante trabalhoso. Recentemente foi introduzido⁽²⁶⁾ por Caride e Tsallis um procedimento fenomenológico de GR que permite obter para sistemas térmicos o parâmetro de ordem como função de parâmetros externos, isto é, as equações de estado, sem passar por cálculos de energia livre. Este procedimento é mais simples operacionalmente que o anterior, adaptando-se ao GR envolvendo redes hierárquicas. Este método será discutido em detalhe e aplicado a alguns modelos nos próximos capítulos.

1.4 - A Aproximação de Redes Hierárquicas

Em geral no sistema renormalizado podem surgir novos tipos de acoplamento que não estavam presentes na Hamiltoniana original. O que se faz é incorporar estes novos acoplamentos e reconsiderar o problema, na tentativa de que ele permaneça fechado sob transformação de GR. Se isto não ocorre, isto é, se há proliferação de parâmetros, é necessário fazer um truncamento em algum ponto, alguma aproximação baseada na

física do sistema. A ocorrência de proliferação de interações em redes de Bravais depende da simetria do modelo e da topologia da rede em questão.

Utiliza-se frequentemente um GR no espaço real em que aproxima-se redes de Bravais (translacionalmente invariantes) por redes hierárquicas⁽²⁷⁾ (que são invariantes por escala), escolhidas de modo a preservar as simetrias mais relevantes da rede original e a respeitar a simetria do estado fundamental do modelo. As redes hierárquicas são geradas no limite de infinitas iterações sucessivas de uma transformação como por exemplo, a ilustrada na fig. 2.1.1 do capítulo 2. Começando com uma única ligação, a cada passo uma rede maior é formada decorando cada ligação da rede anterior com uma célula básica. Transformações por decimação nestas redes constituem GR exatos; mais precisamente, são exatos na medida em que sistemas clássicos são considerados, no sentido de que todos os comutadores relevantes anulam-se e pode-se considerar partes do sistema separadamente. O motivo pelo qual se usa a aproximação de redes hierárquicas é que, nestas redes, é possível estudar uma variedade de modelos cujas Hamiltonianas permanecem fechadas sob GR (i.e., não havendo proliferação de parâmetros). Frequentemente, neste formalismo, os modelos de simetria discreta finita são fechados ou pelo menos sempre é possível depois de algum alargamento do espaço dos parâmetros obter uma Hamiltoniana generalizada que é fechada. Para modelos de simetria contínua o problema de proliferação de parâmetros permanece em muitos casos e em geral é necessário algum truncamento.

No contexto de GR envolvendo redes hierárquicas consideramos a transformação de um grafo original em um grafo renormalizado, os quais podem corresponder por exemplo, a duas etapas na construção da rede hierárquica. Os grafos são constituídos de sítios internos e sítios terminais (ou raízes), com ligações entre eles (ver fig. 2.1.1). A menor distância topológica entre terminais é chamada de distância química, b . Um grafo com N ligações e distância química b dá origem (através de infinitas iterações) à uma rede hierárquica de dimensão fractal intrínseca definida por Melrose⁽²⁷⁾ como $d_b = \ln N / \ln b$. No caso do grafo ser constituído por uma única ligação, $N = b = 1$, d_b ficaria indeterminada; pode-se mostrar, no entanto, que para este caso trivial $d_b = 1$. Impõe-se que a função de correlação entre as raízes dos grafos original e renormalizado seja preservada, de modo que

$$e^{-\beta H'} = \text{Tr}_{\text{(sítios internos)}} e^{-\beta H} \quad (1.4.1)$$

onde o traço é tomado sobre os graus de liberdade internos enquanto os graus de liberdade externos são mantidos fixos em configurações quaisquer. Esta condição é mais forte que a condição de que a função de partição seja preservada.

A operação descrita acima é grandemente simplificada pelo método introduzido em⁽²⁸⁾, o método de "corte e colapso". Este algoritmo permite realizar traços parciais sobre os sítios internos de um grafo sem necessidade de efetuar a soma direta das configurações destes sítios. O método foi inicialmente

desenvolvido para o modelo de Potts (e casos particulares deste modelo) ⁽²⁸⁾ e foi estendido para o modelo $Z(N)$, entre vários outros ⁽²⁹⁾.

O método de "corte e colapso" passa pela introdução de variáveis mais convenientes, as transmissividades ⁽³⁰⁾, que são diferentes para cada modelo. Uma das vantagens do uso destas variáveis é que para combinações em série e paralelo das ligações elas possuem algoritmos semelhantes ao de combinações de probabilidades. Mostrou-se ⁽³¹⁾ que obter a função de correlação entre dois spins S_1 e S_2 em uma célula equivale a calcular a "transmissividade equivalente" entre os dois sítios associados. Portanto, o procedimento para obter as relações de recorrência do GR neste formalismo consiste em encontrar a transmissividade equivalente do grafo original e a do grafo renormalizado.

Como exemplo, consideremos em um modelo de Potts de q estados uma ligação entre dois sítios associada ao acoplamento J_1 . Se um dos sítios está em uma determinada configuração e se p_1^c e p_1^d são as probabilidades condicionais de que o outro sítio esteja respectivamente na mesma configuração (sítios conectados) ou em uma outra particular diferente (sítios desconectados), define-se transmissividade térmica como

$$t \equiv p_1^c - p_1^d = \frac{1 - \exp(-q J_1 / k_B T)}{1 + (q-1) \exp(-q J_1 / k_B T)} \quad (1.4.2)$$

Se temos duas ligações em série com transmissividade t_1 e t_2 , a transmissividade equivalente t_s é dada por $t_s = t_1 t_2$. Se as

ligações estão em paralelo obtemos a transmissividade equivalente t_p , dada por $t_p^D = t_1^D t_2^D$, onde

$$t_i^D = (1-t_i)/[1 + (q-1)t_i] \quad (i = 1, 2, p). \quad (1.4.3)$$

(D denota o "dual").

Consideremos um grafo mais geral, irredutível a sequências do tipo série e paralelo. As ligações estão associadas a transmissividades $\{t_i\}$ e queremos a transmissividade equivalente $G(\{t_i\}) = N(\{t_i\})/D(\{t_i\})$ onde o numerador N e o denominador D são ambas funções multilineares de $\{t_i\}$ (28). Escolhe-se uma das ligações, associada a t_j , digamos, e considera-se dois casos $t_j = 0$ (corte) e $t_j = 1$ (colapso). As novas transmissividades equivalentes associadas às duas situações são:

$$G_j^{\text{cortado}}(\{t_i\}') = N_j^{\text{cortado}}(\{t_i\}')/D_j^{\text{cortado}}(\{t_i\}') \quad \text{a) '}$$

$$e \quad (1.4.4)$$

$$G_j^{\text{colapsado}}(\{t_i\}') = N_j^{\text{colapsado}}(\{t_i\}')/D_j^{\text{colapsado}}(\{t_i\}') \quad \text{b)}$$

onde $\{t_i\}'$ exclui t_j . A transmissividade equivalente do grafo original é dada através das novas quantidades através de



$$N(\{t_i\}) = (1-t_j)N_j^{\text{cortado}}(\{t_i\}') + t_jN_j^{\text{colapsado}}(\{t_i\}') \quad \text{a)}$$

(1.4.5)

$$D(\{t_i\}) = (1-t_j)D_j^{\text{cortado}}(\{t_i\}') + t_jD_j^{\text{colapsado}}(\{t_i\}') \quad \text{b)}$$

O uso sequencial destas equações constitui o método de "corte e colapso".

CAPÍTULO 2

EQUAÇÃO DE ESTADO PARA UM FERROMAGNETO DE POTTS
EM REDE QUADRADA ANISOTRÓPICA

Neste capítulo discutimos em detalhe o método de GR proposto por Caride e Tsallis, que permite obter diretamente o parâmetro de ordem para temperaturas arbitrárias sem passar por cálculos de energia livre. Generalizamos este formalismo para o caso anisotrópico, onde as constantes de acoplamento não são necessariamente iguais ao longo das diversas direções cristalinas. Aplicamos⁽³²⁾ este procedimento ao ferromagneto de Potts em rede quadrada anisotrópica, obtendo sua equação de estado.

2.1 - Método para o Caso Isotrópico

As técnicas de GR tem sido utilizadas principalmente para calcular pontos críticos e expoentes. Vimos no capítulo 1, no entanto, que existem técnicas de GR que possibilitam calcular a energia livre para valores arbitrários dos parâmetros termodinâmicos^{((21), (23), (24), (25))}. A partir da energia livre, muitas outras grandezas de interesse podem ser calculadas.

Um outro tipo de procedimento de GR no espaço real tem sido desenvolvido com o objetivo de calcular diretamente

equações de estado para valores arbitrários dos parâmetros externos, envolvendo a aproximação por redes hierárquicas.

Inicialmente, a motivação para introduzir esta nova abordagem foi o cálculo de equações de estado para problemas geométricos (como percolação, por exemplo), os quais não estão associados a uma Hamiltoniana. O método proposto⁽³³⁾ permite obter quantidades geométricas como função dos parâmetros do problema. O procedimento foi aplicado à percolação por ligações e a uma rede de resistores. No primeiro caso, por exemplo, cada ligação na rede tem probabilidade p de estar ativa, e o parâmetro de ordem, P_∞ , é a probabilidade de um sítio pertencer a ilha percolante infinita. A cada sítio foi associada uma nova variável, uma massa adimensional m_0 . Basicamente, além das condições usuais do tipo expresso na eq. (1.4.1), impõe-se que a massa total da ilha infinita no sistema original tem que ser a mesma que no sistema renormalizado (já que é uma quantidade extensiva). A partir destas condições, encontra-se P_∞ como função de p .

Como os resultados obtidos para sistemas geométricos foram bastante satisfatórios, introduziu-se⁽²⁶⁾ um método análogo para tratar sistemas térmicos. Sua vantagem sobre os métodos usuais é ser operacionalmente simples. O método permite que os resultados sejam otimizados sistematicamente, através da escolha de transformações com grafos cada vez maiores. Vamos inicialmente resumir o método para o caso isotrópico. Aqui nos referimos ao caso onde o campo magnético $H = 0$, mas o procedimento pode ser estendido ao caso $H \neq 0$.

Consideremos uma rede hipercúbica em d dimensões, de tamanho linear L , cujos sítios primeiros vizinhos interagem ferromagneticamente através de $K \equiv J/k_B T$ (esta constante de acoplamento pode estar associada a modelos como o de Ising, XY, Heisenberg, Potts e similares). O parâmetro de ordem pode ser definido como $M = N_L(K)/L^d$, no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$. $N_L(K)$ é a média canônica térmica do número de sítios cujo spin aponta na direção fácil de magnetização menos aqueles cujo spin aponta em qualquer outra direção; no caso do spin poder estar inclinado em relação ao eixo fácil (como no modelo de Heisenberg, por exemplo) dever-se-ia considerar a sua projeção sobre este eixo. Associamos a cada sítio um momento magnético elementar adimensional μ (assim como no problema geométrico de percolação associa-se uma massa elementar a cada sítio); μ será uma variável do GR, como K .

Seguindo as idéias de escala introduzidas por Kadanoff, dividimos o sistema de L^d sítios em um sistema de L'^d células de tamanho $B = L/L' > 1$. A cada célula associamos as variáveis renormalizadas K' e μ' (constante de acoplamento e momento magnético efetivos), que dependem das variáveis originais K e μ . O momento magnético *total* do sistema original tem que ser o mesmo que o do sistema renormalizado (já que é uma grandeza extensiva), isto é

$$N_{L'}(K')\mu' = N_L(K)\mu \quad (2.1.1)$$

Dividindo-se ambos os termos por L'^d , obtemos

$$M(K')\mu' = M(K) \mu B^d \quad (2.1.2)$$

onde $M(K') = N_L(K')/L'^d$ é o parâmetro de ordem para o sistema renormalizado. Iterando a eq. (2.1.2) n vezes, a partir de valores iniciais K e $\mu^{(0)}$, obtemos

$$M(K^{(n)})\mu^{(n)} = B^{nd} M(K)\mu^{(0)} \quad (2.1.3)$$

No limite $n \rightarrow \infty$, a eq. (2.1.3) fica

$$M(K) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{M(K^{(n)})\mu^{(n)}}{B^{nd}} \quad (2.1.4)$$

onde escolhemos arbitrariamente $\mu^{(0)} = 1$ (veremos mais adiante que a equação para μ' é invariante sob a transformação de escala $\mu \rightarrow \lambda\mu$, $\mu' \rightarrow \lambda\mu'$, para qualquer λ).

A eq. (2.1.4) será utilizada juntamente com a relação de recorrência para a constante de acoplamento, isto é,

$$K' = f(K) \quad (2.1.5)$$

que normalmente admite três pontos fixos: $K = 0$ (estável, atrator da fase paramagnética), $K = \infty$ (estável, atrator da fase ferromagnética), e $K = K_c$ (instável, ponto crítico). Se $K < K_c$, o limite de sucessivas iterações da eq. (2.1.5) é $K^{(\infty)} = 0$. Nesse caso, $M(K^{(\infty)}) = 0$ (sistema completamente desordenado) e através da eq. (2.1.4) obtemos o resultado esperado $M(K) = 0$, para $K < K_c$. Se $K > K_c$, $K^{(\infty)} \rightarrow \infty$ e $M(K^{(\infty)}) = 1$ (valor de saturação do parâmetro de ordem de um sistema completamente ordenado). Da

eq. (2.1.4) obtém-se então

$$M(K) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{B^{nd}} \quad , \quad \text{para } K > K_c \quad (2.1.6)$$

que é a fórmula básica que permite obter a dependência do parâmetro de ordem com a temperatura para valores de $T < T_c$.

Para ilustrar o método, lembrando que a eq. (2.1.6) deve ser usada juntamente com as relações de recorrência para K e μ , apresentamos na fig. 2.1.2 o fluxo de renormalização de μ/B^d , como função da variável apropriada (transmissividade) $t = \tanh(J/k_B T)$, para o ferromagneto de Ising. Na região paramagnética ($t < t_c$), através de transformações sucessivas de GR, t se aproxima do ponto fixo $t = 0$ enquanto μ/B^d se aproxima de zero (portanto, $M(T)$ será zero para qualquer temperatura nesta região). Na região ferromagnética ($t > t_c$), através de transformações sucessivas de GR, t se aproxima do ponto fixo $t = 1$ (correspondendo a temperatura zero), enquanto μ/B^d converge para algum valor que depende do valor inicial de t (ou equivalentemente, do valor inicial da temperatura T). $M(T)$ para a fase ordenada será dada então pelo valor para o qual μ/B^d converge, de acordo com a eq. (2.1.6).

Neste ponto, é relevante discutir a conexão entre a eq. (2.1.2) e a equação que se obtém para a magnetização a partir da derivada da energia livre em relação ao campo magnético H (método tradicional⁽²¹⁾), eq. (1.3.4). No limite $H \rightarrow 0$ a eq. (1.3.4) pode ser escrita (apenas uma iteração do GR foi feita)

$$\frac{\partial f((K))}{\partial H} = b^{-d} \frac{\partial f((K'))}{\partial H} = b^{-d} \sum_{\alpha'} \frac{\partial f((K'))}{\partial K'_{\alpha}} \frac{\partial K'_{\alpha}}{\partial H} \quad (2.1.7)$$

onde o somatório estende-se apenas sobre as constantes de acoplamento renormalizadas ímpares. Esta expressão e a eq. (2.1.2) são similares, no caso em que o GR aproximado utilizado não gera acoplamentos renormalizados ímpares (além do campo magnético). Neste caso o somatório na eq. (2.1.7) reduz-se a um termo. Além disso, para comparar as eqs. (2.1.2) e (2.1.7) é necessário identificar $\mu'/\mu = \partial H'/\partial H$. No entanto, notamos que as hipóteses usadas para obter a eq. (2.1.2) são muito diferentes das usadas para obter a eq. (2.1.7). Convém lembrar que μ é uma variável introduzida fenomenologicamente enquanto H , na referência⁽²¹⁾ por exemplo, é um acoplamento que aparece na Hamiltoniana. Além disso, como vimos no capítulo 1, no formalismo de GR envolvendo redes hierárquicas (que vamos utilizar) frequentemente é possível trabalhar em um espaço de parâmetros fechado.

Resta agora especificar como encontrar as relações de recorrência para K e μ .

Existem diversos procedimentos através dos quais se pode obter $f(K)$. No capítulo 1 mostramos alguns. Aqui escolhemos o procedimento que aproxima redes de Bravais por redes hierárquicas. Neste caso, o fator B^d que aparece na eq. (2.1.6) será aproximado por $B^{d_{bb'}}$, que definimos a seguir.

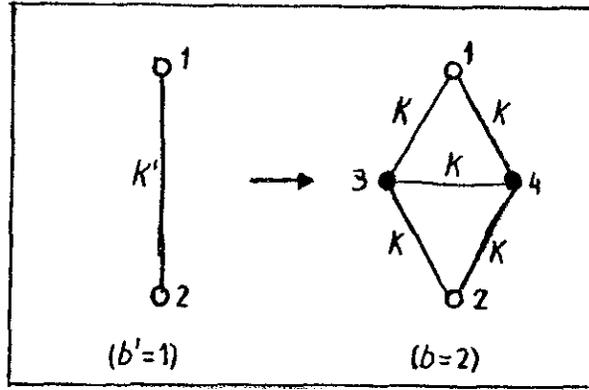


Fig. 2.1.1 - Grafos usados para construir uma transformação de GR para a rede quadrada; ● e o indicam respectivamente, sítios internos e terminais.

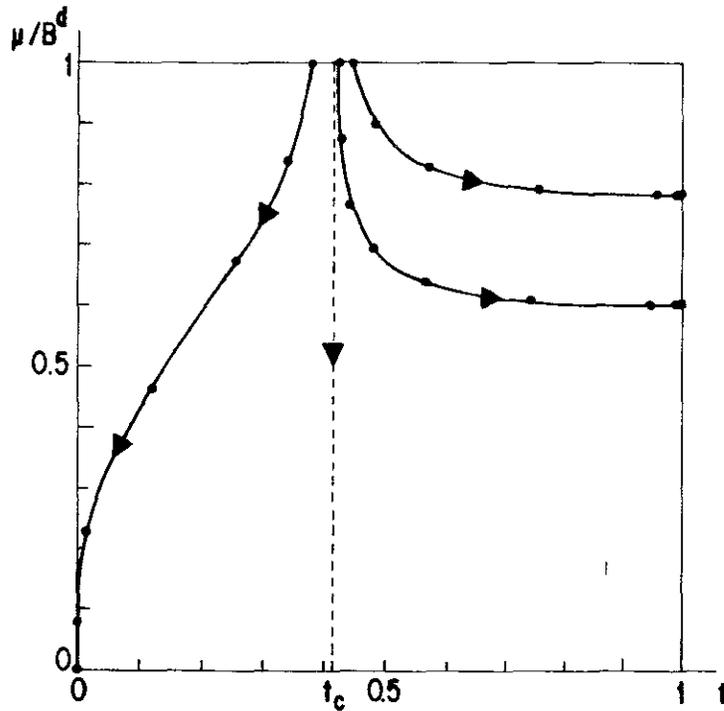


Fig. 2.1.2 - Fluxo de renormalização de μ/B^d como uma função da variável $t = \tanh(J/k_B T)$ para o modelo de Ising, caso isotrópico. A temperatura crítica corresponde ao valor $t = t_c$. $t > t_c$ ($t < t_c$) corresponde à região ferromagnética (paramagnética). O valor para o qual μ/B^d converge é a magnetização associada ao valor inicial de t . As linhas unindo os pontos de renormalização são para melhor visualização.

Em geral renormalizamos um grafo G (de distância química b e N_b ligações, e que pode gerar uma rede hierárquica de dimensão fractal intrínseca $d_b = \ln N_b / \ln b$) em um grafo G' (de distância química b' e $N_{b'}$ ligações, e que pode gerar uma rede hierárquica com $d_{b'} = \ln N_{b'} / \ln b'$). Na fig. 2.1.1 mostramos um exemplo deste tipo de transformação ($b' = 1$, $b = 2$, $N_b = 5$, $N_{b'} = 1$, $d_{bb'} = d_b = \ln 5 / \ln 2$). Portanto o fator de escala é $B = b/b'$. É conveniente definir a dimensionalidade $d_{bb'}$, através de

$$B^{d_{bb'}} \equiv N_b / N_{b'}, \quad (2.1.8)$$

de modo que

$$B^{d_{bb'}} = b^{d_b} / (b')^{d_{b'}}, \quad (2.1.9)$$

logo

$$d_{bb'} = \frac{d_b \ln b - d_{b'} \ln b'}{\ln b - \ln b'} \quad (2.1.10)$$

No caso em que $b' = 1$, $d_{b1} = d_b$. Se os grafos G e G' foram escolhidos consistentemente para aproximar a rede de Bravais em d dimensões, esperamos que

$$\lim_{\substack{b \rightarrow \infty \\ b' < b}} d_{bb'} = \lim_{b \rightarrow \infty} d_b = d \quad (2.1.10)$$

Impomos que nesta transformação a função de correlação entre os sítios terminais 1 e 2 do grafo original e do renormalizado (fig. 2.1.1) seja preservada

$$\text{Tr}_{3,4, \dots, N'_s} e^{-H' + K_0} = \text{Tr}_{3,4, \dots, N_s} e^{-H} \quad (2.1.11)$$

onde H' e H são as Hamiltonianas adimensionais correspondentes aos grafos G' e G (que possuem N'_s e N_s sítios respectivamente) e K_0 é uma constante a ser determinada. A partir da eq. (2.1.11) encontramos a relação de recorrência para K .

Precisamos ainda obter a relação de recorrência para μ . Para quebrar a simetria, o que é necessário para estabelecer a equação para o parâmetro de ordem, impomos que o spin do terminal 1 (digamos), de ambos os grafos G e G' , esteja fixo ao longo da direção fácil de magnetização. Os outros spins permanecem livres. Consideramos cada configuração possível do conjunto dos spins, e a cada uma delas atribuímos o peso de Boltzmann correspondente e um momento magnético. O momento magnético de uma dada configuração é obtido somando todas as contribuições de sítios.

Neste ponto, é importante lembrar que estamos aproximando uma rede de Bravais por uma rede hierárquica, neste tipo de formalismo. O parâmetro de ordem em uma rede hierárquica não é uniforme (o mesmo em todos os sítios) como em

uma rede de Bravais, acreditamos que ele está relacionado ao número de primeiros vizinhos com os quais um dado sítio está interagindo. A magnetização espontânea uniforme bem conhecida em uma rede de Bravais deve ser uma consequência da sua invariância por translação (perdida em uma rede hierárquica). Consequentemente, o número de coordenação deve desempenhar um papel importante na determinação do parâmetro de ordem local. Para que a rede de Bravais seja aproximada pela rede hierárquica, consideramos então que cada sítio contribui para o momento magnético total proporcionalmente a seu número de coordenação. Intuitivamente, podemos argumentar que se um sítio da rede hierárquica está ligado a um número maior (menor) de vizinhos do que na rede de Bravais correspondente, o spin associado a este sítio tem maior (menor) tendência a acompanhar o comportamento de seus vizinhos do que teria na rede de Bravais. O peso que consideramos faz com que ele esteja tão "preso" ("livre") quanto estaria na rede de Bravais. Esta hipótese é equivalente a supor que o campo magnético relevante (termodinamicamente conjugado ao parâmetro de ordem) é proporcional ao número de coordenação: isto é precisamente o que vários autores ((24), (27), (34)) consideraram em contextos similares. Esta hipótese também é reforçada em um contexto diferente, através da análise do modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG). Este modelo em uma rede de Bravais contém o modelo de Potts de 3 estados como caso particular, supondo-se algumas relações apropriadas entre as constantes de acoplamento do modelo BEG. Este mesmo fato só

acontece em uma rede hierárquica se o termo de um sítio da Hamiltoniana BEG for suposto proporcional ao número de coordenação.

Retornando ao procedimento para obter a relação de recorrência para μ , impomos que a média canônica térmica do momento magnético total para os grafos G e G' seja preservada (analogamente ao que impomos para obter a eq. (2.1.1))

$$\langle m \rangle_{G'} = \langle m \rangle_G \quad . \quad (2.1.12)$$

O procedimento para encontrar $\langle m \rangle_G$ e $\langle m \rangle_{G'}$, está ilustrado na tab. 2.1.1, para um ferromagneto de Ising, usando a transformação da fig. 2.1.1 (adequada para tratar a rede quadrada, por ser auto-dual).

Vemos da tab. 2.1.1 que a partir da eq. (2.1.12), obtemos uma relação de recorrência para μ tipicamente da forma

$$\mu' = g(K)\mu \quad (2.1.13)$$

Para que o procedimento descrito pela eq. (2.1.6) convirja para algum valor finito diferente de zero quando estamos na fase ordenada, $g(K)$ satisfaz

$$g(K^{(\infty)} \rightarrow \infty) = B^d \quad (2.1.14)$$

e se o parâmetro de ordem diminui quando a temperatura aumenta, $g(K)$ satisfaz

(a)

G' configurações	peso	m
	$e^{K'}$	$2\mu'$
	$e^{-K'}$	0

Tab. 2.1.1 - Obtenção do momento magnético total dos grafos G e G' associados a transformação da fig. 2.1.1 para um ferromagneto de Ising (caso isotrópico) com Hamiltoniana dada por

$$-\beta H = K \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j$$

$$(a) \langle m \rangle_{G'} = 2e^{K'} \mu' / (e^{K'} + e^{-K'}).$$

$$(b) \langle m \rangle_G = (10e^{5K} + 8e^{-K} - 2e^{-3K})\mu / (e^{5K} + 2e^K + 4e^{-K} + e^{-3K}).$$

(b)

G configurações

peso

m

	$e^{5\kappa}$	10μ
	e^{κ}	6μ
	$e^{-\kappa}$	4μ
	$e^{-3\kappa}$	-2μ
	$e^{-\kappa}$	0
	e^{κ}	-6μ

$$g(\infty) > g(K_c) > g(0) > 0 \quad . \quad (2.1.15)$$

Das eqs. (2.1.3), (2.1.6) e (2.1.13) podemos obter, no limite $T \rightarrow T_c$, expressões analíticas para os expoentes críticos ν e β , associados ao comprimento de correlação e à magnetização espontânea. No capítulo 1 mostramos como obter o expoente crítico ν . No nosso caso, em que consideramos apenas uma constante de acoplamento, temos

$$\nu = \ln B / \ln [df(K)/dK]_{K_c} \quad (2.1.16)$$

Resta obter a expressão analítica para o expoente β . Consideremos dois valores de K , K_1 e K_2 , onde $K_2 = f(K_1)$. K_1 e K_2 estão associados a temperaturas T_1 e T_2 , próximas à temperatura crítica T_c . Da eq. (2.1.16) temos

$$M(K_1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{g(f^{(n)}(K_1)) \dots g(f(K_1))g(K_1)}{B^{nd_{bb'}}} \quad (2.1.17)$$

$$M(K_2) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{g(f^{(n)}(K_2)) \dots g(K_2)}{B^{nd_{bb'}}} \quad (2.1.18)$$

Dividindo $M(K_2)$ por $M(K_1)$, como $K_2 = f(K_1)$, obtemos

$$\frac{M(K_2)}{M(K_1)} = \frac{B^{d_{bb'}}$$
(2.1.19)

já que estamos na fase ordenada e $g(K)$ satisfaz a eq. (2.1.14), cancelando-se com o denominador B^d quando $n \rightarrow \infty$. Por outro lado, podemos escrever a magnetização próximo a T_c ($T_1 = T_c + \varepsilon$, $T_2 = f(T_1)$) como

$$M(T_1) = A \left(1 - \frac{T_1}{T_c} \right)^\beta = A \left(1 - \frac{T_c + \varepsilon}{T_c} \right)^\beta$$
(2.1.20)

$$M(T_2) = A \left(1 - \frac{T_2}{T_c} \right)^\beta = A \left(1 - \frac{f(T_1)}{T_c} \right)^\beta$$
(2.1.21)

Mas

$$f(T_1) = f(T_c + \varepsilon) \cong f(T_c) + \left. \frac{\partial f(T)}{\partial T} \right|_{T_c} \varepsilon \cong T_c + \lambda \varepsilon$$
(2.1.22)

Logo

$$\frac{M(T_2)}{M(T_1)} = \frac{(1 - (T_c + \lambda \varepsilon)/T_c)^\beta}{(1 - (T_c + \varepsilon)/T_c)^\beta} = \lambda^\beta$$
(2.1.23)

Da eq. (2.1.19) temos

$$\lambda^\beta = \frac{B^{d_{bb'}}}{g(T_1)} = \frac{B^{d_{bb'}}}{g(T_c + \epsilon)} \cong \frac{B^{d_{bb'}}}{g(T_c)} \quad (2.1.24)$$

e

$$\beta = \frac{\ln(B^{d_{bb'}/g(T_c)})}{\ln(\partial f(T)/\partial T)|_{T_c}} \quad (2.1.25)$$

A amplitude A da magnetização ($M = A(1 - T/T_c)^\beta$, $T \rightarrow T_c$) pode ser calculada apenas numericamente: por exemplo, conhecido o β , podemos ir substituindo valores de T e M de modo que quando $T \rightarrow T_c$, a razão $M/(1 - T/T_c)^\beta$ convirja para um determinado valor de A .

Este método foi aplicado a um ferromagneto de Potts em rede quadrada⁽²⁶⁾. Sua eficiência foi testada através de transformações de GR com diversos valores de b e b' ($b = 1$, $b' = 2$; $b = 1$, $b' = 3$; $b = 2$, $b' = 4$; $b = 3$, $b' = 6$, etc.). Para $q = 2$ (Ising), a dependência do parâmetro de ordem com a temperatura converge para o resultado exato para valores crescentes de b e b' . A tendência correta da variação do expoente β com q (β diminui quando q cresce) é obtida através deste método para valores suficientemente grandes de b e b' . Em geral os resultados numéricos são bastante confiáveis, podendo ser otimizados através de extrapolações para valores crescentes de b e b' .

Mencionamos ainda que o método de GR em questão falha em reproduzir, para $q > 4$, a transição de fase de primeira ordem esperada para o ferromagneto de Potts em redes de Bravais

bi-dimensionais. Para superar esta dificuldade (comum a todos os GR fenomenológicos e GR envolvendo aproximações por redes hierárquicas, para o modelo puro) o espaço dos parâmetros do GR teria que ser expandido⁽³⁵⁾.

2.2 - Caso Anisotrópico: Aplicação ao Ferromagneto de Potts

Vamos generalizar o método descrito na última seção para o caso anisotrópico, onde as constantes de acoplamento do sistema não são necessariamente iguais. Aplicamos esta extensão do método para calcular o parâmetro de ordem espontâneo para o ferromagneto de Potts de q estados em uma rede quadrada, onde consideramos constantes de acoplamento arbitrárias J_x e J_y ao longo dos eixos x e y (o caso $q = 2$, cuja solução exata é conhecida, serve como teste para o método).

Como vimos na Introdução, o modelo de Potts de q estados (para uma revisão ver ref.36 e as referências aí citadas) é uma generalização do modelo de Ising, o qual corresponde ao caso $q = 2$. O modelo de Potts contém ainda vários outros casos particulares de interesse. Em especial, em $d = 2$, o modelo está associado ao problema de adsorção de camadas em superfícies cristalinas. Nestes sistemas pode-se considerar os átomos adsorvidos como um gás de rede. Assim, por exemplo, sistemas adsorvidos em um substrato hexagonal com cobertura $1/2$ exibem comportamento do tipo Ising ($q = 2$); ^4He adsorvido em grafite com cobertura $1/3$ é uma realização do modelo para $q = 3$: para $q = 4$ temos como exemplos o N_2 adsorvido em Criptônio calçado em grafite e O_2 adsorvido em Ni. Em $d = 3$ o modelo aplica-se a diversas situações: por exemplo, às transições estruturais de

primeira ordem em substâncias tais como SrTiO_3 ($q = 3$), a antiferromagnetos em redes fcc, como o CeAs ($q = 4$). Mostrou-se ainda que certas transições nos processos de gelação e vulcanização em polímeros ramificados estão na mesma classe de universalidade do modelo de Potts de q estados, com $0 \leq q \leq 1$. O caso $q \rightarrow 1$ corresponde ao modelo de percolação por ligações.

A natureza das transições no modelo de Potts para $d = 2$ é bem conhecida (embora não se conheça soluções exatas para o modelo, exceto para $q = 2$). No caso ferromagnético a transição é de primeira ordem para $q > 4$ e é contínua para $q \leq 4$. [No caso antiferromagnético, em uma rede quadrada, é de segunda ordem para $0 \leq q < 3$, para $q = 3$ a temperatura de Neel é nula e para $q > 3$ não existe transição de fase.]. Em $d = 3$ nenhum resultado exato é conhecido. Através de estudos numéricos sabe-se que já para $q = 3$ a transição é de primeira ordem.

Para estender o método da seção 2.1, inicialmente consideremos o caso "anisotrópico" geral (inhomogêneo): uma rede hipercúbica em d dimensões, de tamanho linear L , onde os sítios primeiros vizinhos interagem ferromagneticamente através de $K_\alpha = J_\alpha/k_B T$ ($\alpha = x, y, z, \dots$). Onde um ordenamento das constantes de acoplamento se tornar conveniente, usaremos a convenção $J_x \geq J_y \geq J_z \dots$. O parâmetro de ordem é definido como $M \equiv N_L (K_x, K_y, K_z \dots)/L^d$, no limite $L \rightarrow \infty$. Para o ferromagneto de Potts, $N_L (K_x, K_y, K_z)$ é a média térmica do número de sítios cuja variável de Potts está em um estado privilegiado, digamos $\sigma_1 = 1$ menos aqueles cuja variável de Potts está em qualquer outro estado. Cada sítio está associado

a um momento magnético elementar μ .

Transformamos o sistema inicial em um sistema renormalizado de tamanho L' , ao qual associamos as variáveis K'_x, K'_y, K'_z, \dots e μ' . O procedimento para obter a equação para o parâmetro de ordem é análogo ao isotrópico. Obtemos assim

$$M(K_x, K_y, K_z, \dots) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{M(K_x^{(n)}, K_y^{(n)}, K_z^{(n)}, \dots) \mu^{(n)}}{B^{nd}} \quad (2.2.1)$$

Esta equação será utilizada junto com as equações de recorrência para $\{K'_\alpha\}$. Tipicamente estas equações dão origem a uma fronteira crítica no espaço dos parâmetros em d dimensões. Esta hipersuperfície crítica dividirá o espaço em duas (ou mais) fases. No caso do ferromagneto de Potts temos a fase desordenada (paramagnética) atraída sob renormalização pelo ponto fixo estável $K_x = K_y = K_z = \dots = 0$, e a fase ordenada (ferromagnética), que é atraída sob renormalização para o ponto fixo estável $K_x = K_y = K_z = \dots \rightarrow \infty$. Da eq. (2.2.1), portanto, obtemos, para a fase paramagnética $M(K_x, K_y, K_z, \dots) = 0$. Para a fase ferromagnética, temos

$$M(K_x, K_y, K_z, \dots) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{B^{nd}} \quad (2.2.2)$$

Para completar o procedimento, vamos obter as equações de recorrência para $\{K_\alpha\}$ e μ , aplicando o método a uma transformação particular conveniente para tratar o ferromagneto de Potts na rede quadrada anisotrópica.

Adotamos a transformação⁽³⁷⁾ de células pequenas

indicada na fig. 2.2.1. Os grafos (de dois terminais) correspondentes são auto-duais, e portanto, muito apropriados para tratar a rede quadrada (que é auto-dual). O grafo G tem distância química $b = 3$ e o grafo G' , $b' = 1$ ($B = b/b' = 3$). Esta transformação tem sido utilizada com sucesso em muitos outros problemas similares nesta rede.

O fator B^d da eq. (2.2.2) deve ser, como no caso isotrópico, substituído por $B^{d_{bb'}}$, devido à aproximação por redes hierárquicas. No caso de sistemas anisotrópicos a eq. (2.1.8), que define $B^{d_{bb'}}$ através da razão entre o número de ligações dos dois grafos, deve ser estendida para

$$B^{d_{bb'}} = \frac{N_b^x + N_b^y K_y/K_x}{N_{b'}^x + N_{b'}^y K'_y/K'_x} \quad (2.2.3)$$

onde N_b^x e N_b^y ($N_{b'}^x$, e $N_{b'}^y$) são os números de ligações do grafo $G(G')$ respectivamente associadas a K_x e K_y (K'_x , e K'_y). Para a transformação particular que usamos, $B^{d_{bb'}} = 5 + 4 K_y/K_x$. Esta definição recupera a anterior, eq. (2.1.8), nos seguintes casos particulares: $(K_y/K_x, K'_y/K'_x) = (0,0), (1,0), (0,1)$ e $(1,1)$. A definição da eq. (2.2.3) é a expressão contínua mais simples que satisfaz esta condição. Naturalmente outras definições similares alternativas poderiam ser introduzidas. Por exemplo, para o modelo de Potts de q -estados, podemos introduzir

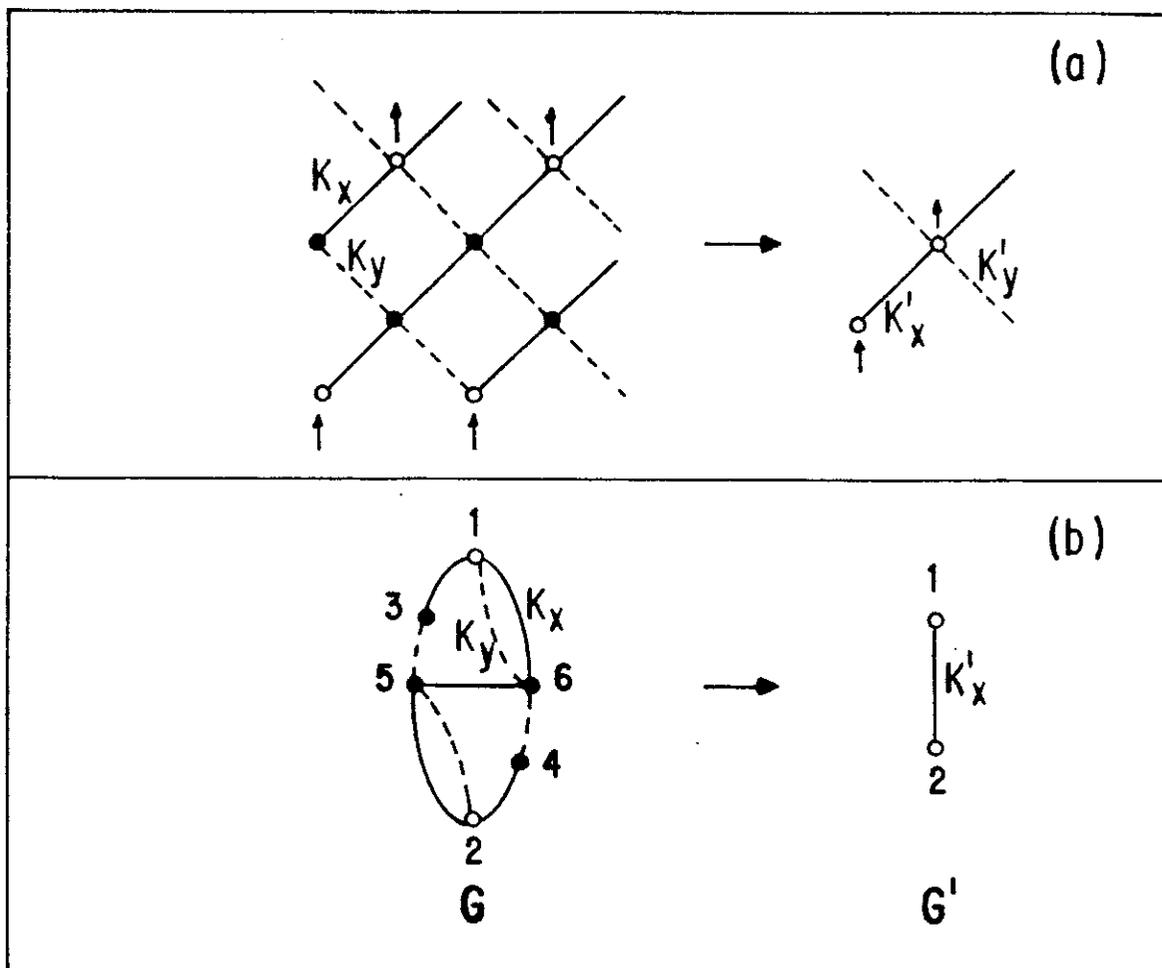


Fig. 2.2.1 - (a) Transformação auto-dual utilizada no presente tratamento de GR para renormalizar K_x (as setas indicam as "entradas" e "saídas". (b) Os grafos G e G' correspondentes (o e \bullet , respectivamente, indicam os terminais e os sítios internos).

$$B_{bb'}^d \equiv \frac{N_b^x + N_b^y t_y/t_x}{N_{b'}^x + N_{b'}^y t'_y/t'_x} \quad (2.2.4)$$

onde t_i indica a transmissividade térmica para este modelo (eq. (1.4.2)).

Para a transformação da fig. 2.2.1, determinamos as relações de recorrência para $\{K_\alpha\}$ impondo que a função de correlação entre os dois terminais dos grafos seja preservada, isto é,

$$e^{-\beta H'_{12}} = \text{Tr}_{3,4,5,6} e^{-\beta H_{123456}} \quad (2.2.5)$$

onde $(\sigma_i = 1, 2, \dots, q, \forall i)$

$$-\beta H'_{12} = q K'_x \delta_{\sigma_1, \sigma_2} + K_o \quad (2.2.6)$$

e

$$-\beta H_{123456} = q K_x (\delta_{\sigma_1, \sigma_3} + \delta_{\sigma_1, \sigma_6} + \delta_{\sigma_5, \sigma_6} + \delta_{\sigma_5, \sigma_2} + \delta_{\sigma_4, \sigma_2}) + q K_y (\delta_{\sigma_1, \sigma_6} + \delta_{\sigma_3, \sigma_5} + \delta_{\sigma_5, \sigma_2} + \delta_{\sigma_4, \sigma_6}) \quad (2.2.7)$$

H'_{12} e H_{123456} , sendo, respectivamente, as Hamiltonianas dos grafos G' e G da fig. 2.2.1. A eq. (2.2.5) determina

$$K'_x = f(K_x, K_y) \quad (2.2.8)$$

logo,

$$K'_y = f(K_y, K_x) \quad (2.2.9)$$

onde usamos a invariância da rede em questão sob troca de x por y e vice-versa.

A relação de recorrência para μ é obtida seguindo-se um procedimento análogo ao do caso isotrópico. Para o ferromagneto de Potts, quebramos a simetria fixando um dos terminais dos grafos em um estado, digamos $\sigma_i = 1$. No total temos q (q^5) configurações para o grafo menor (maior). O momento magnético m de uma dada configuração é obtido somando-se as contribuições de cada sítio. Como já discutimos na seção 2.1, no caso isotrópico cada sítio contribui para o momento magnético total proporcionalmente a seu número de coordenação. Na extensão para o caso anisotrópico o número de coordenação é generalizado em uma média natural das constantes de acoplamento em um dado sítio. Assim, cada sítio contribui para o momento magnético total proporcionalmente ao seu *número de coordenação médio*, definido atribuindo a cada ligação um peso proporcional a sua constante de acoplamento (se adotamos a definição da eq. (2.2.3)), ou analogamente, proporcional à sua transmissividade (se adotamos a definição da eq. (2.2.4)). Na tab.2.2.1 mostramos o peso de Boltzmann e o momento magnético associados

a algumas das configurações, para o modelo de Ising (caso particular $q = 2$ do modelo de Potts). Esta definição de número de coordenação médio é a expressão contínua mais simples que recupera aquela do caso isotrópico nos casos particulares $K_y/K_x = 1$ e $K_y/K_x = 0$. Impondo que o momento magnético de ambos os grafos seja preservado sob renormalização, encontramos a equação de recorrência para μ :

$$\mu' = g(K_x, K_y)\mu \quad (2.2.10)$$

onde $g(K_x, K_y)$ é uma função contínua que satisfaz

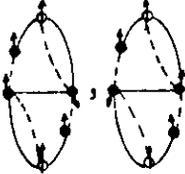
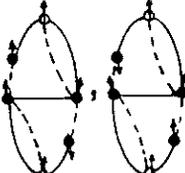
$$g(\infty, \infty) = B^{d_{bb'}} > g(0, 0) > 0 \quad (2.2.11)$$

A determinação da função $g(K_x, K_y)$ passa pela construção, para q arbitrário, de uma tabela como a tab.2.2.1 onde devemos levar em conta o fato de que o parâmetro de ordem de Potts é proporcional a $(q \langle \delta_{\sigma_i, 1} \rangle - 1)/(q - 1)$. Em geral, $g(K_x, K_y) \neq g(K_y, K_x)$ (por exemplo, o maior grafo da fig. (2.2.1) tem cinco ligações K_x mas apenas quatro ligações K_y). Uma consequência indesejável deste fato é que, em geral, a presente aproximação de GR não será invariante sob permutações de $K_x \leftrightarrow K_y$, como deveria. No entanto as discrepâncias são muito pequenas: por exemplo, encontramos discrepâncias de no máximo 3% entre os casos ($q = 2$) $K_y/K_x = 0.5$ e $K_y/K_x = 2$. Essas diferenças devem desaparecer no limite $b \rightarrow \infty$.

(a) G' configuração	peso	m
	$e^{K'_x}$	$2\mu'$
	$e^{-K'_x}$	0

Tab. 2.2.1 - Obtenção do momento magnético total dos grafos G e G' associados a transformação da fig. 2.2.1 para um ferromagneto de Ising anisotrópico ($q = 2$). (a) $\langle m \rangle_{G'} = 2\mu' \frac{e^{K'_x} + e^{-K'_x}}{e^{K'_x} + e^{-K'_x}}$. (b) Apenas sete entre as 2^5 configurações possíveis estão representadas:

$$\begin{aligned} \langle m \rangle_G = & [e^{5K_x + 4K_y} (10 + 8 K_y/K_x) + 2e^{K_x} (6 + 4 K_y/K_x) + \\ & + 2e^{3K_x + 2K_y} (8 + 6 K_y/K_x) + e^{K_x + 2K_y} (6 + 6 K_y/K_x) + \\ & e^{-3K_x - 2K_y} (-2 - 2 K_y/K_x) + \dots] \mu / (e^{5K_x + 4K_y} + 2e^{K_x} + \\ & 2e^{3K_x + 2K_y} + e^{K_x + 2K_y} + e^{-3K_x - 2K_y} + \dots) \end{aligned}$$

(b) 6 configuração	peso	m
	$e^{5K_x + 4K_y}$	$(10 + 8K_y/K_x) \mu$
	e^{K_x}	$(6 + 4K_y/K_x) \mu$
	$e^{3K_x + 2K_y}$	$(8 + 6K_y/K_x) \mu$
	$e^{K_x + 2K_y}$	$(6 + 6K_y/K_x) \mu$
	$e^{-3K_x - 2K_y}$	$(-2 - 2K_y/K_x) \mu$

2.3 - Resultados

A partir das eqs. (2.2.2), (2.2.8), (2.2.9) e (2.2.10), obtivemos a magnetização para $q = 1, 2, 3$ e 4 para o caso isotrópico, $K_x = K_y$ (fig. 2.3.1) e para o caso anisotrópico, para valores típicos da razão $r \equiv K_y/K_x$ (fig. 2.3.2). Na fig. 2.3.2(b), que corresponde ao caso $q = 2$, fazemos uma comparação entre as nossas curvas e as exatas⁽³⁸⁾, obtidas através da expressão:

$$M = [1 - (\text{sh } 2\beta J_x \text{ sh } 2\beta J_y)^{-2}]^{1/8} \quad (2.3.1)$$

Para temperaturas intermediárias e valores típicos de r o erro é da ordem de 10%.

Para o caso particular $q = 1$ também apresentamos nossos resultados (fig. 2.3.3) da maneira comumente usada em percolação por ligações: o parâmetro de ordem P_∞ (probabilidade de uma ligação pertencer a uma ilha percolante) versus p_x , a probabilidade das ligações x estarem presentes. No caso, as transmissividades do problema são as próprias probabilidades p_x e p_y , dadas por

$$\begin{aligned} t_x = p_x &= 1 - e^{-J_x/k_B T} & \text{a)} \\ t_y = p_y &= 1 - e^{-J_y/k_B T} & \text{b)} \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

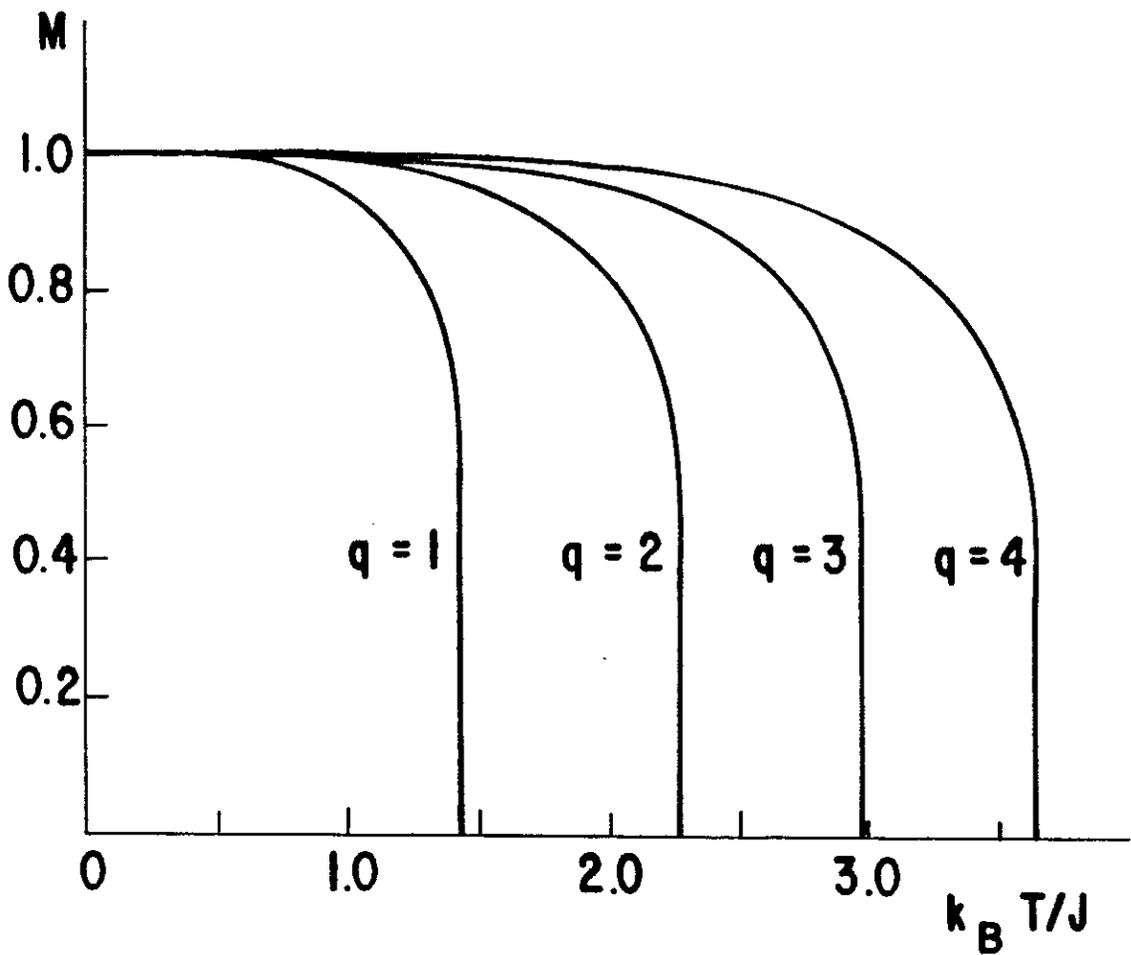


Fig. 2.3.1 - Magnetização como função da temperatura para o caso isotrópico, para valores típicos de q .

e a fronteira crítica, em termos destas variáveis, é obtida da equação $p_{x_c} + p_{y_c} = 1$ (por argumentos de dualidade). Os gráficos da fig. 2.3.3 foram obtidos fixando-se a razão η

$$\eta = \frac{1 - p_y}{1 - p_x} \quad . \quad (2.3.3)$$

Portanto, a probabilidade crítica em função de η é $p_{x_c} = \eta/(1+\eta)$. Para $\eta = 0.5$ e $\eta = 1$ comparamos nossas curvas (ver fig. 2.3.3) com os resultados obtidos por da Silva et al ⁽³³⁾ através do método para problemas geométricos mencionado na seção 2.1.

É importante notar que nossos resultados foram obtidos através do procedimento utilizando médias com as constantes de acoplamento (nós adotamos a definição da eq. (2.2.3)). Comparamos os resultados assim obtidos para o caso $q = 2$, $r = 0.4$ com os resultados obtidos usando médias com as transmissividades (definição da eq. (2.2.4)). Nossas curvas concordam dentro de um erro máximo da ordem de 1%; a curva obtida através de médias com as transmissividades está ligeiramente por baixo.

A transformação de GR particular escolhida recupera as temperaturas críticas T_c exatas para todos os (q,r) . Isto se deve a escolha de grafos *auto-duais* (a auto-dualidade é uma propriedade básica da rede quadrada). Para encontrar o ponto crítico, parte-se da relação entre as transmissividades t_x e t_y para o modelo de Potts, obtida através de argumentos de dualidade, satisfeita na criticalidade

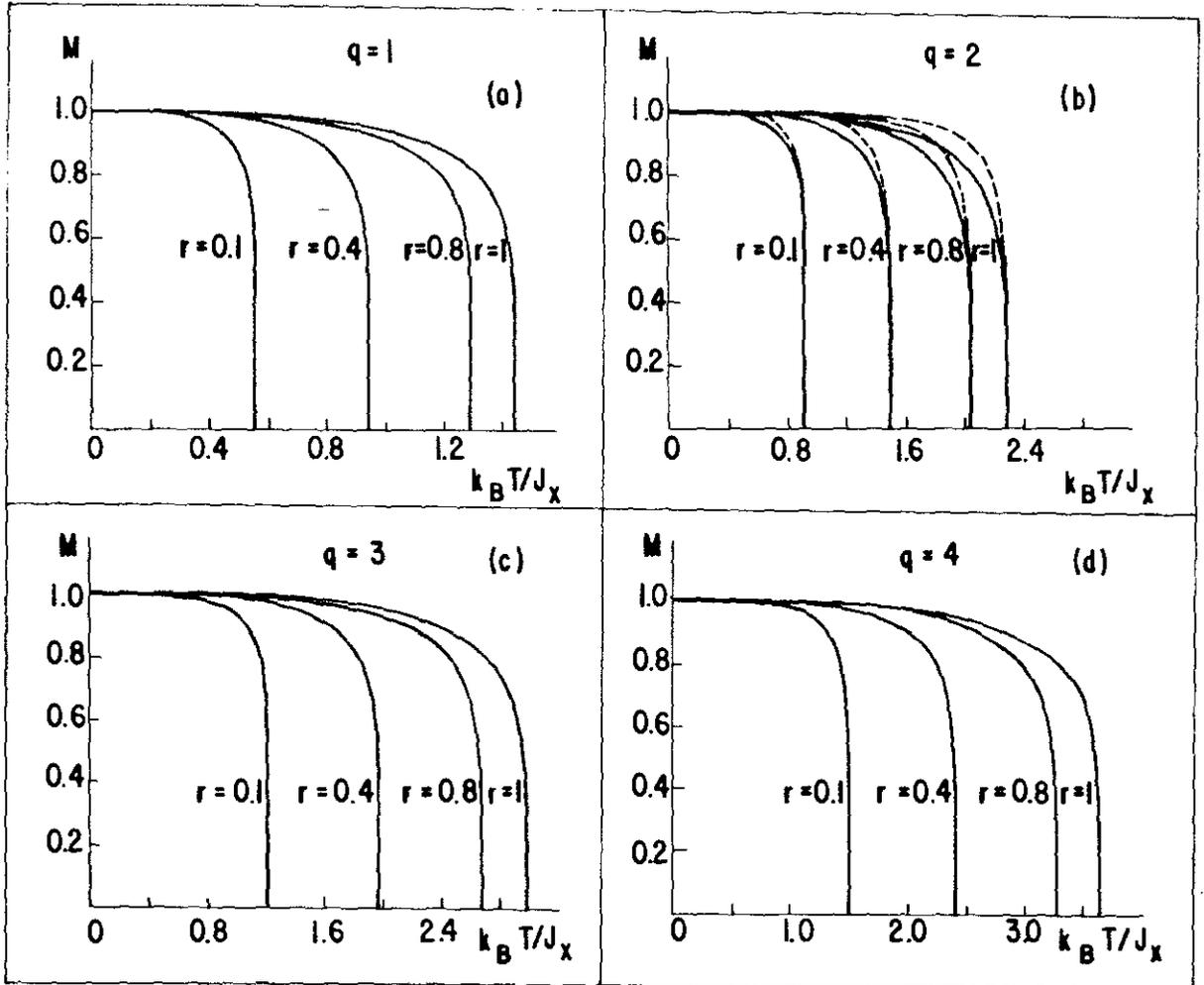


Fig. 2.3.2 - Magnetização como função da temperatura, para várias razões $r = K_y/K_x$: (a) $q = 1$; (b) $q = 2$ (as curvas pontilhadas são exatas ⁽³⁷⁾); (c) $q = 3$; (d) $q = 4$.

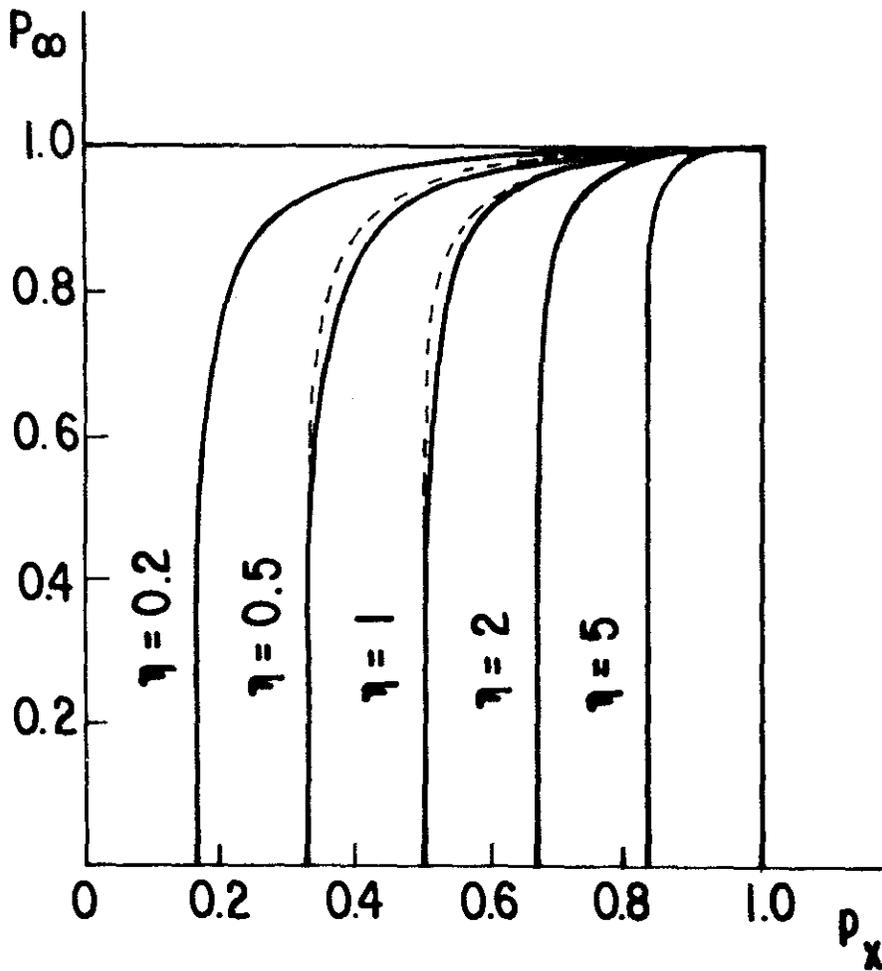


Fig. 2.3.3 - Probabilidade P_∞ de uma ligação pertencer a uma ilha percolante infinita como função da concentração $p_x \equiv 1 - e^{-J/k_B T}$ de ligações "horizontais", para $\eta = (1-p_y)/(1-p_x)$ fixo. Para $\eta = 0.5$ e $\eta = 1$ comparamos nossas curvas com os resultados (tracejados) da ref. 33.

$$t_x = \frac{1 - t_y}{1 + (q-1)t_y} \quad (2.3.5)$$

(Através da construção da rede dual da rede quadrada - que é a própria - vemos que o dual de uma ligação t_y é uma ligação t_x). No caso isotrópico $t_x = t_y$ o ponto crítico exato pode ser encontrado analiticamente:

$$e^{qK_c} = \sqrt{q} + 1 \quad (2.3.6)$$

Como existe uma única função f ligando K'_x e K'_y a K_x e K_y (eqs. (2.2.8) e (2.2.9)) o expoente β (associado à magnetização quando $T \rightarrow T_c$) pode ser obtido, para diversos valores de q , através da eq. (2.1.25) para o caso isotrópico $K_x = K_y = K_c$.

$$\beta = \frac{\ln[B^{d_{bb'}} / g(K_c, K_c)]}{\ln[df(K, K) / dK]_{K_c}} \quad (2.3.7)$$

Verificamos que β depende de q mas não da razão r ($r \neq 0$). Este fato já era esperado, com base em argumentos de universalidade (a anisotropia em um modelo de Potts é um campo irrelevante). Este comportamento bem conhecido constitui um teste importante para as hipóteses que fizemos para estender o método (por ex., o fator $B^{d_{bb'}}$, o peso em cada sítio) para o caso anisotrópico. Apresentamos os valores numéricos de β na tab. 2.3.1, comparados com os resultados exatos⁽³⁶⁾. Embora as discrepâncias numéricas sejam aceitáveis, observamos uma

tendência incorreta de β para aumentar (ao invés de diminuir) quando q aumenta. Acreditamos que este erro deve desaparecer no limite $b \rightarrow \infty$. De fato, a inversão desta tendência foi explicitamente verificada na ref. 26 (ver fig. 3) para o caso isotrópico, onde se mostra que para transformações de GR_{bb} , com b e b' cada vez maiores a dependência de β com q vai aproximando-se cada vez mais da dependência exata. Apresentamos os valores da amplitude $A \sim M/(1-T/T_c)^\beta$ ($T \rightarrow T_c$) obtidos para valores típicos de (q,r) na tab. 2.3.2. Comparações com resultados exatos são possíveis para $q = 2$. Obtivemos a expressão exata para amplitude A no caso $q = 2$ expandindo a eq. (2.3.1) em torno de $K_{xc} = K_c$, e usando o fato de que $\text{sh}(2K_c) \text{sh}(2K_c r) = 1$ para $K_c > 0$ e $r > 0$ (que vem da expressão da magnetização quando $T = T_c$). A amplitude A exata é então dada por

$$A = [4r \text{sh}(2K_c) \text{ch}(2K_c r) + 4 \text{sh}(2K_c r) \text{ch}(2K_c)]^{1/8} (K_c)^{1/8} \quad (2.3.8)$$

Comparando nossos valores para A com os exatos observamos que as discrepâncias são inesperadamente pequenas.

Voltemos à questão da universalidade do expoente β , o qual só depende de q e não de r ($r \neq 0$). Para estudar o crossover isotropia versus anisotropia neste problema, consideramos, como exemplo, o caso $q = 3$ e calculamos a amplitude $A \sim M/(1-T/T_c)^\beta$ para diversos valores de $(1-T/T_c)^\beta$, para razões de anisotropia $r = 1, 0.4, 0.1, 0.04$ e 0.01 (ver fig. 2.3.4.a). Para temperaturas próximas de zero, a magnetização $M \rightarrow 1$ e portanto $A \rightarrow 1$ para qualquer valor de r . Observamos que quando r diminui, isto é, a anisotropia aumenta, é preciso chegar mais próximo de T_c para que o comportamento crítico do sistema seja o comportamento crítico do sistema isotrópico (a amplitude A torna-se uma constante apenas para

q	β (RG)	β (exato) ^a
0	0.10	$\frac{1}{6} \approx 0.167$
1	0.152	$\frac{2}{36} \approx 0.139$
2	0.168	$\frac{1}{8} \approx 0.125$
3	0.178	$\frac{1}{9} \approx 0.111$
4	0.187	$\frac{1}{12} \approx 0.0833$
∞	$\ln(\frac{9}{5})/\ln 5 \approx 0.365$	

Tab. 2.3.1 - Resultados do nosso GR para o expoente crítico β e os valores exatos correspondentes.

$r \backslash q$	0	1	2	3	4
1	1.1	1.17	1.21 (1.22)	1.24	1.26
0.8	1.1	1.18	1.22 (1.22)	1.26	1.28
0.4	1.1	1.21	1.28 (1.23)	1.32	1.37
0.1	1.1	1.27	1.37 (1.26)	1.44	1.51

Tab. 2.3.2 - Resultados do nosso GR para a amplitude A da magnetização (os valores exatos para $q = 2$ são apresentados entre parênteses). No limite $q = 0$, devido a limitações de precisão, não podemos afirmar que A é independente de r .

temperaturas cada vez mais próximas de T_c). O crossover do regime isotrópico ($r \neq 0$) para o regime anisotrópico ($r = 0$) pode ser caracterizado quantitativamente por uma temperatura de crossover, $T_{\text{crossover}}$, definida, por exemplo, pela construção indicada pelas linhas pontilhadas da fig. 2.3.4.a. Na fig. 2.3.4.b apresentamos $T_{\text{crossover}}$ como função de r para $q = 3$.

Calculamos ainda alguns comportamentos assintóticos de interesse. Obtivemos o comportamento assintótico exato da magnetização à baixas temperaturas, a partir da eq. (2.3.1), no caso $q = 2$, isotrópico:

$$M \sim 1 - 10 e^{-8K} \quad ; \quad T \rightarrow 0 \quad (2.3.9)$$

Comparamos esta expressão com a que obtivemos usando o nosso GR, neste caso ($q = 2$, isotrópico). Através de uma expansão para baixas temperaturas para a nossa relação de recorrência para a transmissividade t , onde usamos o artifício $t' \sim 1 + \epsilon'$, $t \sim 1 + \epsilon$, ($\epsilon', \epsilon < 0$), obtemos uma relação entre ϵ' e ϵ . Esta relação pode ser escrita em termos de K e K' (já que $\epsilon \sim t-1$ e t é uma função de K), lembrando que $K \rightarrow \infty$. Substituindo K' na relação de recorrência para μ' , obtemos para o parâmetro de ordem

$$M \sim 1 - \frac{4}{9} e^{-4K} \quad ; \quad T \rightarrow 0 \quad (2.3.10)$$

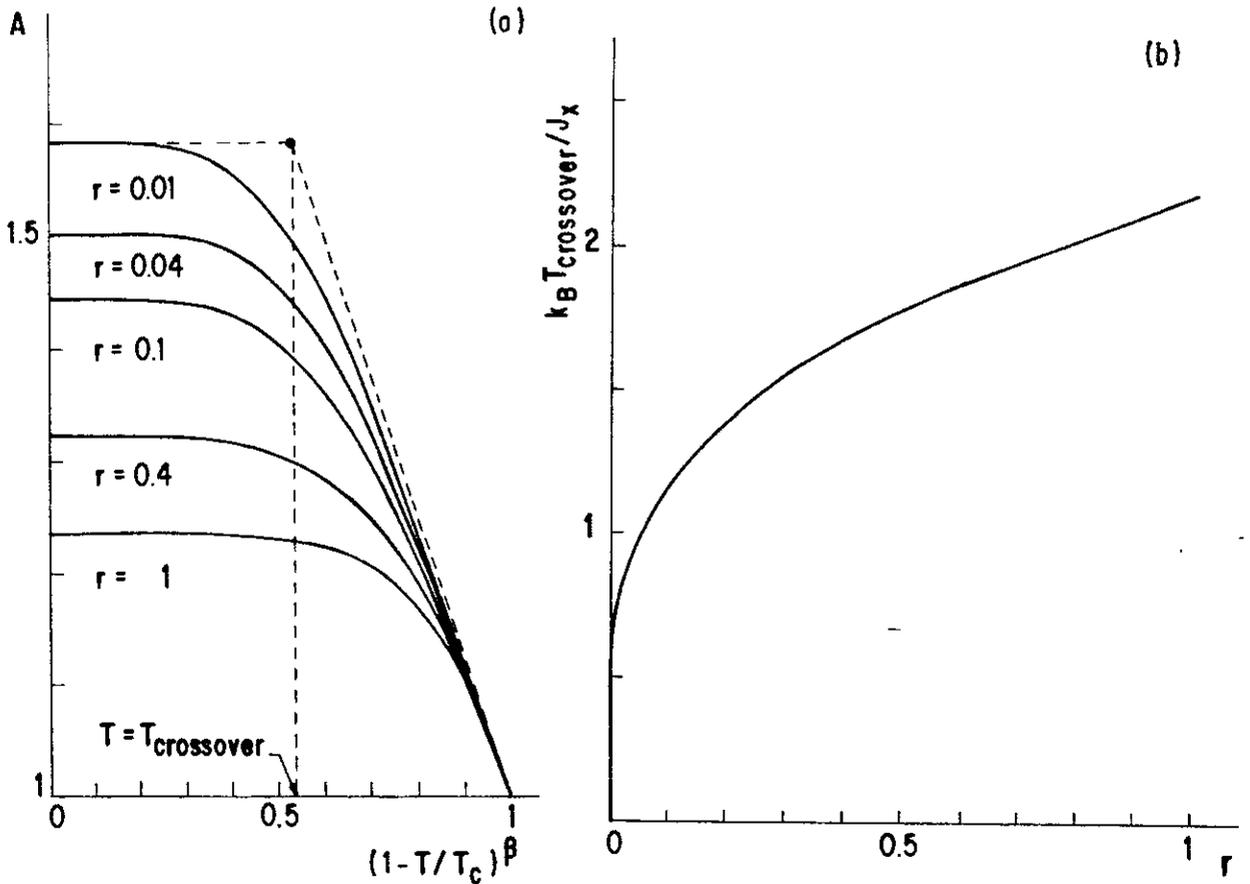


Fig. 2.3.4 - Modelo de Potts $q = 3$ (a) Amplitude $A \sim M(1-T/T_c)^\beta$ como uma função da temperatura, para valores típicos de $r \equiv K_y/K_x$ ($T_{\text{crossover}}$ é definida pela construção indicada pelas linhas pontilhadas). (b) Dependência de $T_{\text{crossover}}$ com a razão r .

Vemos que neste limite, embora a forma da função seja a mesma, a nossa expressão não aproxima bem a expressão exata.

Calculamos também o comportamento assintótico exato da amplitude A , no caso $q = 2$, $r \rightarrow 0$, para verificar se a tendência da amplitude, neste limite de anisotropia, era a que observamos ao estudar o crossover isotropia versus anisotropia (para $q = 3$). A partir da eq. (2.3.8), considerando que quando $r \rightarrow 0$, $K_c \rightarrow \infty$ e usando a eq. (2.3.5), obtemos

$$A = \left(\frac{2}{K_c} + 4 \right)^{1/8} K_c^{1/8} \rightarrow \infty ; \quad r \rightarrow 0 \quad (2.3.11)$$

que é o limite para o qual tende a amplitude obtida através do nosso GR no caso já mencionado (ver fig. 2.3.4(a)).

Um outro limite obtido foi o do expoente crítico β quando $q \rightarrow \infty$

$$\beta = \frac{\ln(9/5)}{\ln(5)} \approx 0.37 \quad (q \rightarrow \infty) \quad (2.3.12)$$

Concluimos que a extensão para o caso anisotrópico deste método de GR que permite calcular equações de estado foi bem sucedida. Os resultados obtidos para o ferromagneto de Potts anisotrópico no caso $q = 2$ mostram, em geral, bom acordo com os resultados exatos. Este formalismo não prevê as transições de fase de primeira ordem que ocorrem para este modelo em redes de Bravais com $d = 2$, para valores suficientemente altos de q , como já mencionamos na discussão do método para o caso isotrópico.

CAPÍTULO 3

MAGNETIZAÇÃO ESPONTÂNEA PARA O FERROMAGNETO DE ISING
EM REDE CÚBICA SEMI-INFINITA

Usando o método de GR desenvolvido no capítulo anterior estudamos⁽³⁹⁾ o comportamento da magnetização espontânea de volume e superfície como função da temperatura para um ferromagneto de Ising em rede cúbica semi-infinita para razões J_s/J_B arbitrárias (J_s e J_B são respectivamente as constantes de acoplamento da superfície e do volume). Em particular estudamos a transição extraordinária, onde a superfície mantém sua magnetização enquanto o volume se desordena. A criticalidade do sistema (classes de universalidade, expoentes críticos e amplitudes) também é discutida.

3.1 - Fenômenos Críticos em Superfícies

Como mencionamos na Introdução, a média termodinâmica de grandezas locais próximo a uma superfície é diferente de seu valor no interior do volume, como consequência da quebra da invariância translacional e da anisotropia. Espera-se que o comportamento da magnetização local e da função de correlação, por exemplo, sejam fortemente modificados. O comportamento crítico em superfícies é complicado, ainda, pelo fato de que, além do efeito da "falta de vizinhos", as interações microscópicas próximo à superfície podem ter valores bastante diferentes daqueles do interior do volume. Como resultado, a superfície pode se ordenar, para temperaturas decrescentes, a

uma temperatura maior que a do volume, ou pode ainda exibir ordenamento de natureza diferente do ordenamento do volume, como por exemplo, uma transição antiferromagnética na superfície de um material ferromagnético. Uma revisão sobre o comportamento crítico em geral em superfícies pode ser encontrada em⁽⁴⁰⁾.

Em particular, o problema de magnetismo de superfície tem atraído bastante interesse nos últimos anos, pois além da riqueza teórica e variedade de aplicações práticas, houve recentemente um grande avanço nas técnicas utilizadas na construção de superfícies atômicamente limpas e na obtenção de informações sobre estas superfícies. Algumas experiências usando técnicas como "spin-polarized photo emission"⁽⁴¹⁾, SPLEED^(13,42) e ECS⁽⁴³⁾ foram capazes de obter o comportamento crítico de sistemas como o Ni, Cr, Gd e Tb, mostrando que a magnetização local na superfície destes sistemas comporta-se perto da temperatura de transição do volume, T_c^B , de modo diferente da magnetização do volume. Como exemplo, temos os resultados obtidos para um cristal de Ni com superfície livre^(13,42a), onde observa-se que a superfície desordena-se à mesma temperatura que o volume, sendo o expoente crítico associado à magnetização de superfície diferente do associado à magnetização de volume. Já para filmes de Gd encontra-se^(42b) que a temperatura crítica de superfície, T_c^S , é mais alta que T_c^B . Neste caso ocorre uma transição de fase de superfície em T_c^S (ver fig. 3.1.1.a). Nos terras raras esta fase em que existe ordem apenas na superfície foi inicialmente observada no Gd^(43a,42b) e mais tarde no Tb^(43d) (ver fig. 3.1.1.b), esperando-se que também ocorra em outros. Esta fase também foi

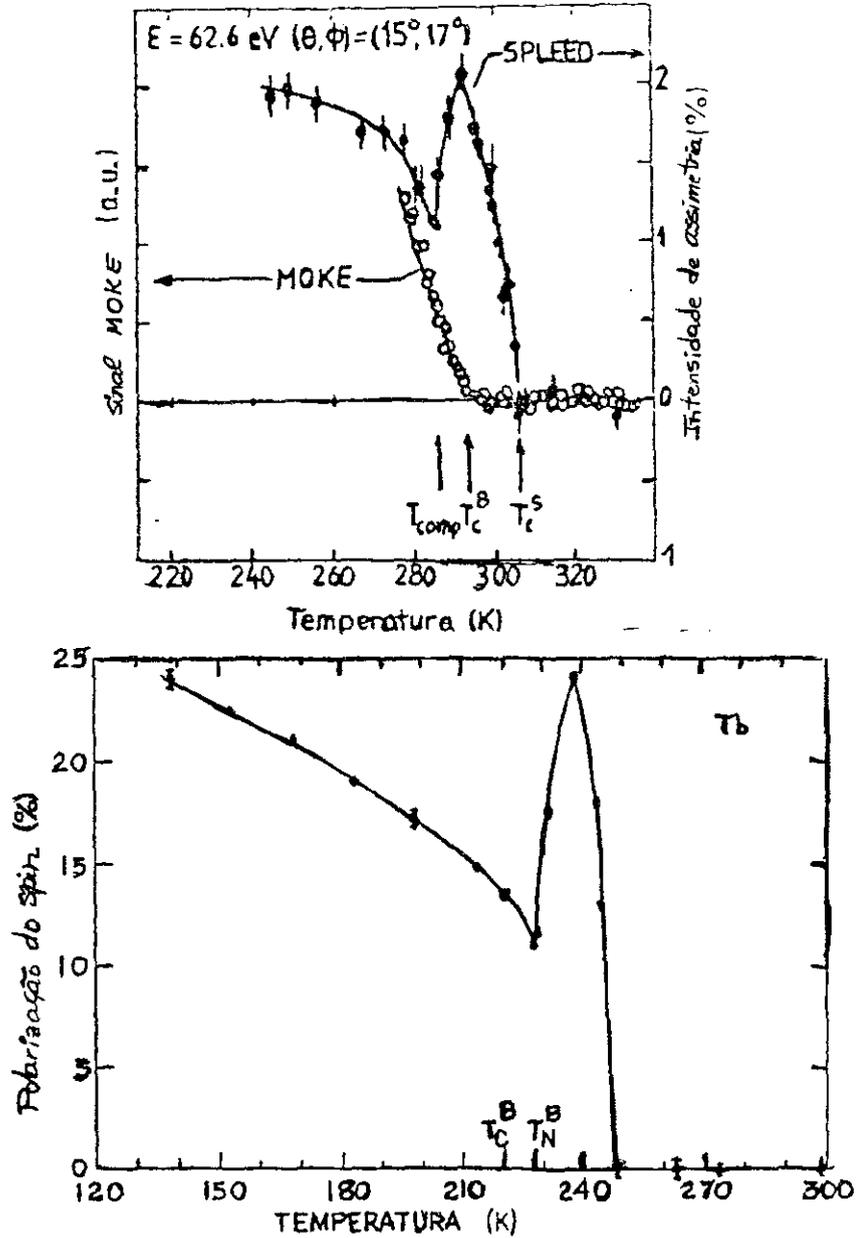


Figura 3.1.1 - (a) Intensidade de assimetria A (proporcional à magnetização de superfície) em função da temperatura para um filme de Gd de largura 500 \AA . A curva com os círculos mostra medidas de magnetização de volume através de técnica de efeito Kerr magneto-ótico (MOKE), que fornece $T_c^B = 293 \text{ K}$. $T_c^S = 307 \text{ K}$, obtida por SPLEED. (b) Polarização do spin dos elétrons da camada superficial de uma amostra de Tb de 1 mm de largura, como função de T . T_c^B é a temperatura de Curie do volume e T_N^B é a temperatura de Néel do volume: o Tb apresenta uma fase antiferromagnética entre estas duas temperaturas.

observada no $v^{(43e)}$, cujo volume é paramagnético.

Teoricamente, o ordenamento magnético de superfície tem sido estudado em diversos contextos: aproximação de Campo Médio^(44,45), teorias de campo efetivo⁽⁴⁶⁾, teorias tipo Kikuchi⁽⁴⁷⁾, teorias de flutuações de spin⁽⁴⁸⁾, RPA ("random-phase approximation")⁽⁴⁹⁾, técnicas de Monte Carlo⁽⁵⁰⁾ e Grupo de Renormalização⁽⁵¹⁾ (GR) (ver refs. ⁽⁵²⁾e⁽⁵³⁾ para revisões dos tratamentos de GR no espaço recíproco e no espaço real, respectivamente). A seguir revemos com algum detalhe os passos teóricos principais contidos nestas referências.

Em um trabalho pioneiro, Mills⁽⁴⁴⁾ considerou, através da teoria de Campo Médio aplicada a sistemas semi-infinitos, os efeitos de superfície no antiferromagneto e no ferromagneto de Heisenberg ($d = 3$) próximo à temperatura de ordenamento.

Binder e Hohenberg⁽⁵⁰⁾ em 1972 estudaram as transições de fase em modelos de Ising em d dimensões com superfícies livres, através de teorias fenomenológicas de Landau e expansões em série de altas temperaturas. Estes autores fazem a distinção entre as contribuições de superfície para as quantidades extensivas e as quantidades locais, e definem novos expoentes críticos associados a estas grandezas. Revemos esta distinção a seguir.

Devido à existência da superfície, a energia livre do sistema possui um termo proporcional ao número de átomos da superfície, f_s , além da contribuição de volume, f_B , proporcional ao número total de átomos. As contribuições de superfície para as quantidades extensivas do sistema em geral são obtidas através de derivadas apropriadas de f_s . Define-se expoentes de superfície associados a estas quantidades na

criticalidade de maneira análoga aos associados ao volume ($t \equiv (T - T_c)/T_c$):

$$\begin{aligned}
 C_s &\propto |t|^{-\alpha_s} & \text{a)} \\
 M_s &\propto (-t)^{\beta_s} & \text{b)} \\
 \chi_s &\propto |t|^{-\gamma_s} & \text{c)} \\
 M_s &\propto H^{1/\delta_s} & \text{d)}
 \end{aligned}
 \tag{3.1.1}$$

Por outro lado, a média termodinâmica de um operador local será diferente próximo à superfície do seu valor no interior do volume. Associados a essas quantidades definem-se expoentes locais:

$$\begin{aligned}
 M_1 &\propto (-t)^{\beta_1} & \text{a)} \\
 \chi_1 &\propto |t|^{-\gamma_1} & \text{b)} \\
 \chi_{1,1} &\propto |t|^{-\gamma_{1,1}} & \text{c)} \\
 M_1 &\propto H^{1/\delta_1} & \text{d)}
 \end{aligned}
 \tag{3.1.2}$$

Observamos que esta distinção entre expoentes de superfície e locais ainda não é tudo, já que existem, por exemplo, ao menos duas suscetibilidades "locais" na superfície: a primeira é a resposta χ_1 de um spin na superfície a um campo uniforme H agindo sobre todo o sistema, e a segunda é a resposta $\chi_{1,1}$ à um

campo H_1 agindo só na superfície. Mencionamos que é necessário, ainda, definir expoentes associados às funções de correlação perpendicular e paralela à superfície, respectivamente Γ_{\perp} e Γ_{\parallel} , na criticalidade

$$\Gamma_{\perp}(z, z') \propto |z-z'|^{-(d-2+\eta_{\perp})}, \quad |z-z'| \rightarrow \infty \quad \text{a)}$$

e (3.1.3)

$$\Gamma_{\parallel}(\vec{\rho}-\vec{\rho}') \propto |\vec{\rho}-\vec{\rho}'|^{-(d-2+\eta_{\parallel})}, \quad |\vec{\rho}-\vec{\rho}'| \rightarrow \infty. \quad \text{b)}$$

onde z é a distância da superfície, $z = 0$, e $\vec{\rho}$ é um vetor no plano perpendicular à direção z . Em princípio poderíamos ter dois comprimentos de correlação ξ_{\perp} e ξ_{\parallel} descrevendo o decaimento de Γ_{\perp} e Γ_{\parallel} na criticalidade. Devido à anisotropia introduzida pela superfície, Binder e Hohenberg partiram justamente desta hipótese (os expoentes associados à correlações, ν e η , dependeriam da direção). Através de expansões em série eles obtiveram, para os casos $d = 2$ e 3 , que o expoente ν é independente da direção, enquanto o expoente η é fortemente anisotrópico. A distinção que se fará necessária diz respeito à região (se no interior do volume ou se próximo à superfície) na qual observa-se o comprimento de correlação. Do ponto de vista experimental, as quantidades mais interessantes são a magnetização de superfície M_1 e a função de correlação para spins na superfície, já que elas podem ser obtidas através de técnicas como LEED, por exemplo. Estes autores desenvolveram ainda uma teoria de escala para funções termodinâmicas e funções de correlação próximo à superfície, que mostraram ser

exata no caso $d = 2$ (onde a "superfície" é uma linha), e que foi satisfeita pelos expoentes de Campo Médio ($d = 4$). Todos os expoentes críticos para o modelo de Ising ($d = 3$) semi-infinito são estimados através dos cálculos e destas relações de escala.

Em um trabalho posterior (1974), Binder e Hohenberg⁽⁵⁰⁾ obtiveram através de cálculos de Monte Carlo a dependência da magnetização com o espaço (perfil $M(z)$, ver fig. 3.1.2) e com a temperatura em sistemas de Ising e Heisenberg com superfície livre. Sistemas de Ising com acoplamentos na superfície diferentes dos acoplamentos no volume são estudados através de Campo Médio e de expansões em séries para altas temperaturas. Vamos descrever a seguir, em detalhe, um destes sistemas, o ferromagneto de Ising semi-infinito.

O ferromagneto de Ising em rede cúbica semi-infinita com superfície (001) é um protótipo simples comumente utilizado em magnetismo de superfície. Neste modelo, os primeiros vizinhos interagem através de

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma_i = \pm 1, \forall i) \quad (3.1.4)$$

Considera-se a aproximação em que a constante de acoplamento $J_{ij} = J_s$ ($J_s > 0$), se os sítios i e j pertencem à superfície e $J_{ij} = J_B$ ($J_B > 0$) em qualquer outra situação. Introdz-se o parâmetro $\Delta \equiv J_s/J_B - 1$. Se $\Delta < \Delta_c$, para temperaturas abaixo da temperatura crítica do volume ($T < T_c^B$) temos a fase *ferromagnética de volume* (BF), onde o volume e a superfície estão magneticamente ordenados; para $T > T_c^B$ o volume e a superfície estão desordenados (fase *paramagnética* (P)). Se $\Delta >$

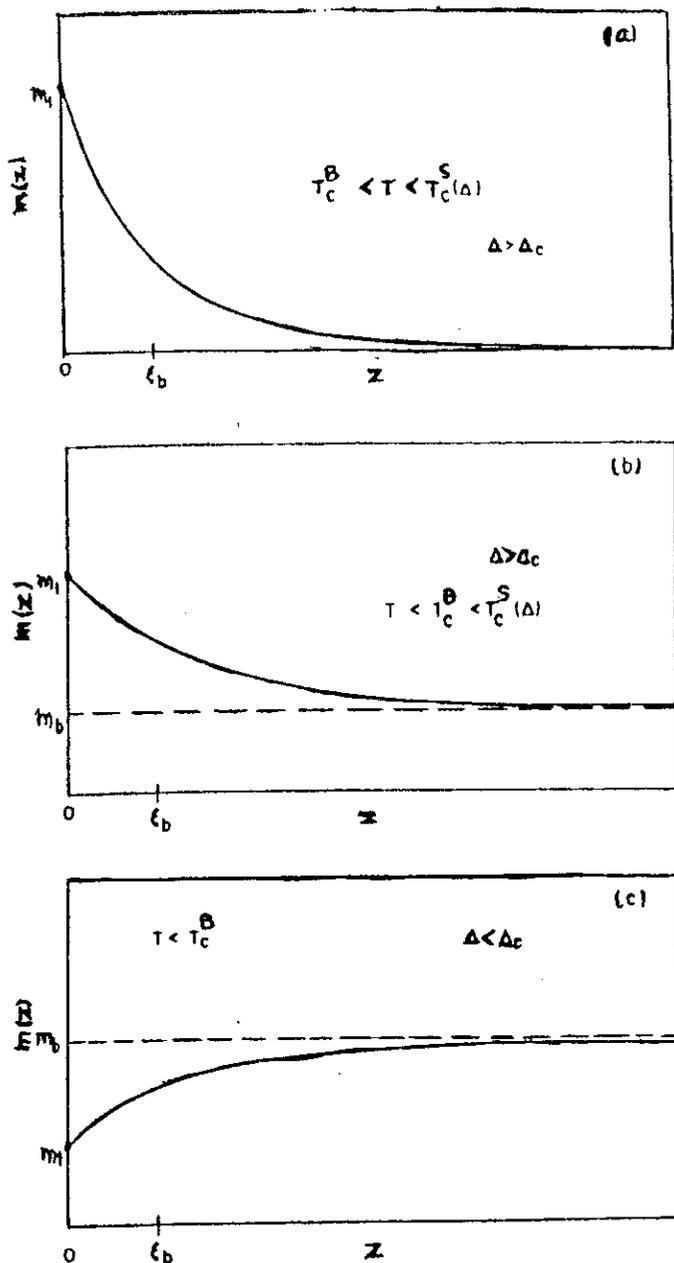


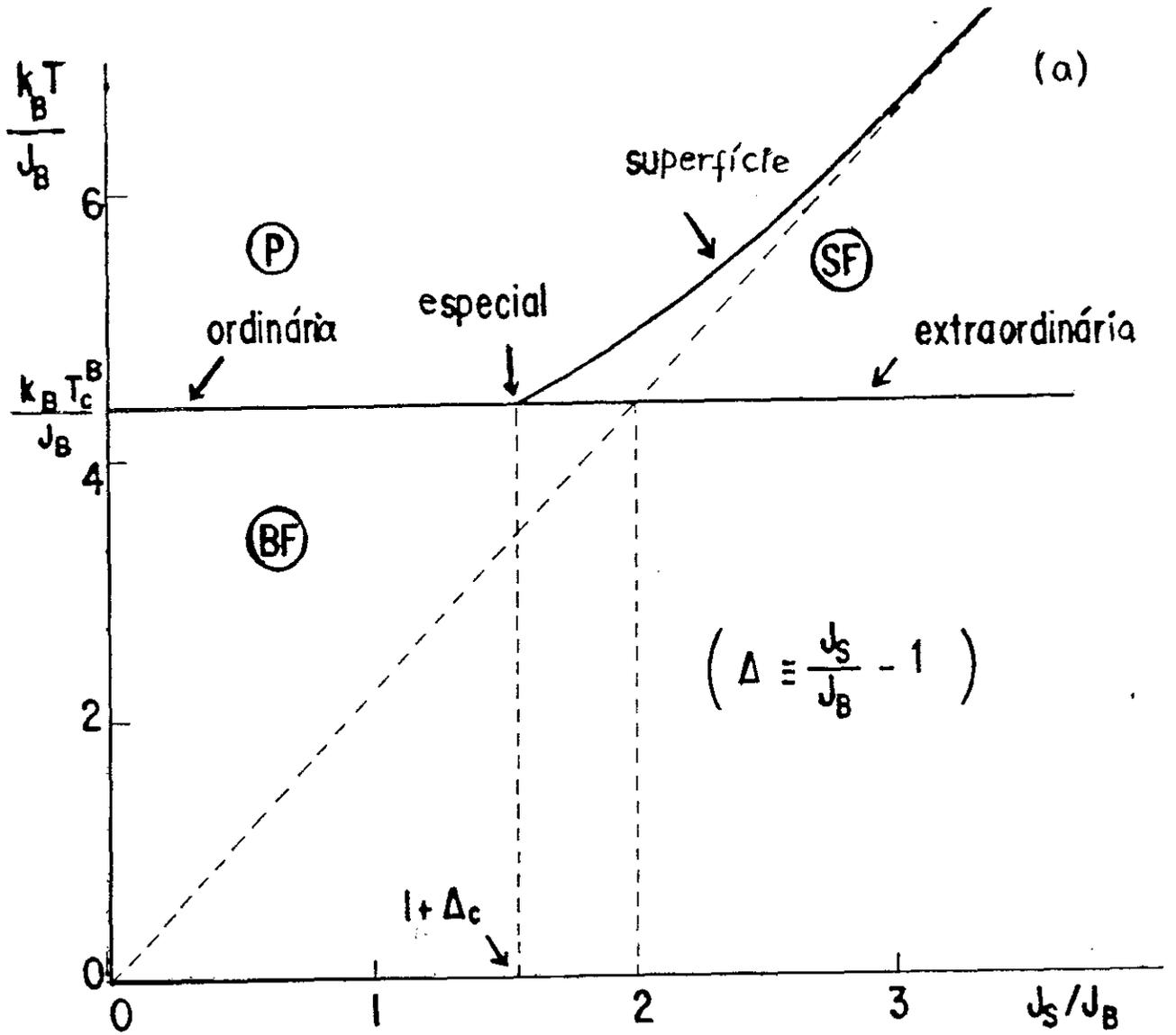
Figura 3.1.2 - Diagrama esquemático da magnetização como função da distância da superfície, localizada em $z = 0$. O acoplamento na superfície é $J_s = J_B(1+\Delta)$, onde J_B é o acoplamento de volume. (a) Para $\Delta > \Delta_c$, a superfície ordena-se antes do volume e a magnetização decai exponencialmente quando z aumenta; (b) para $T < T_c^B$, a magnetização atinge seu valor finito de volume, para z grande. (c) Para $\Delta < \Delta_c$ a superfície somente ordena-se quando o volume o faz, e $M(z)$ é menor na superfície que no volume.

Δ_c , uma terceira fase torna-se possível para valores intermediários de T , entre as fases ferromagnética de volume e a paramagnética. Nesta região, para $T_c^B < T < T_c^S(\Delta)$, a superfície mantém-se magneticamente ordenada enquanto o volume está desordenado (fase ferromagnética de superfície (SF)). Nesta fase, a magnetização decai exponencialmente quando z (distância da superfície) aumenta (ver fig. 3.1.2) com um comprimento característico igual ao comprimento de correlação do volume. Apresentamos o diagrama de fases para o sistema na fig. 3.1.3.a.

Este sistema está associado à diversas classes de universalidade. Para ilustrá-las vamos considerar os comportamentos críticos associados à magnetização. A magnetização de volume, M_B , comporta-se próximo à T_c^B , para qualquer valor de Δ como $M_B(T) \sim A_{3D}(1-T/T_c^B)^{\beta_{3D}'}$. O comportamento crítico associado à magnetização de superfície (M_1 , que por simplicidade denotaremos M_s) é: (i) para $\Delta < \Delta_c$, $M_s(T) \sim A_{ord}(1 - T/T_c^B)^{\beta_1^{ord}}$ (transição ordinária); (ii) para $\Delta = \Delta_c$, $M_s(T) \sim A_{sp}(1-T/T_c^B)^{\beta_1^{sp}}$ (transição especial); (iii) para $\Delta > \Delta_c$, $M_s(T) \sim A_s(1-T/T_c^S(\Delta))^{\beta_1^{2D}}$ (transição de superfície, o expoente β_1^{2D} é o de um sistema de Ising bidimensional). Esperamos também a presença de uma quinta singularidade não trivial neste problema: para $\Delta > \Delta_c$, M_s próximo à T_c^B comporta-se como (transição extraordinária)

$$M_s(T) - M_s(T_c^B) \sim \begin{cases} A_-(1-T/T_c^B)^{\beta_1^{ex}} & \text{para } T \rightarrow T_c^B - 0 \\ -A_+(T/T_c^B - 1)^{\beta_1^{ex}} & \text{para } T \rightarrow T_c^B + 0 \end{cases}$$

(3.1.5)



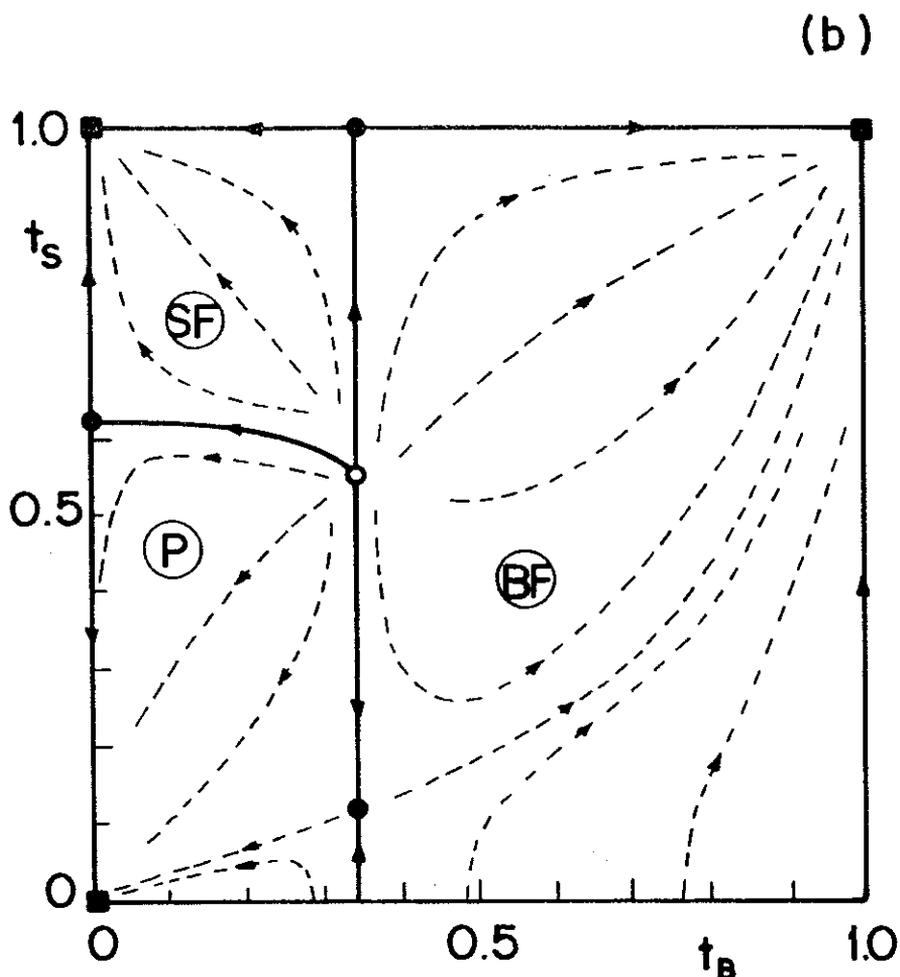


Figura 3.1.3 - (a) Diagrama de fases para o ferromagneto de Ising em uma rede cúbica semi-infinita com uma superfície livre (001). Na fase ferromagnética de volume (BF), o volume e a superfície estão ordenados; na fase ferromagnética de superfície (SF), somente a superfície permanece ordenada; na fase paramagnética (P), ambos estão desordenados. (b) Diagrama de fases em termos das variáveis $t_B = \tanh(J_B/k_B T)$ e $t_s = \tanh(J_s/k_B T)$, as transmissividades de volume e de superfície para o modelo de Ising. O fluxo do GR está indicado; ■, ● e ○ respectivamente indicam os pontos fixos triviais (completamente estáveis), críticos (semi-estáveis) e multicríticos (completamente instáveis).

já que é razoável que M_s reflita de alguma maneira a singularidade que ocorre em M_B . Mostramos na tab. 3.1.1 os expoentes críticos associados a estas transições de acordo com a teoria de Campo Médio (os expoentes de volume também são apresentados).

Binder e Hohenberg encontraram para o modelo descrito nos parágrafos anteriores o valor de Δ_c através de séries: $\Delta = 0.6$, que podemos comparar com o valor obtido através de Campo Médio, $\Delta_c = 0.25$. Para $\Delta > \Delta_c$ estes autores observam que a superfície ordena-se a uma temperatura mais alta que a temperatura de ordenamento do volume. No caso de acoplamento de superfície fraco ($J_s < J_B$), cálculos de Monte Carlo mostram que M_s depende linearmente de T para um intervalo grande de temperaturas abaixo de T_c^B (ver fig. 3.1.4). Em 1975, Lubensky e Rubin⁽⁴⁵⁾, usando Campo Médio, estudaram o comportamento crítico de um sistema semi-infinito contínuo de spins e também encontraram a fase SF.

Em 1977, Svrakic e Wortis⁽⁵¹⁾ utilizam pela primeira vez o GR no espaço real (do tipo Niemeijer e van Leeuwen) para estudar um modelo de Ising ($d = 2$) semi-infinito, mostrando como calcular as propriedades termodinâmicas críticas (e não críticas).

Bray e Moore⁽⁴⁵⁾ investigaram o comportamento crítico de um sistema semi-infinito de simetria de spin $O(N)$ usando teorias de Campo Médio, expansão em ϵ e argumentos de escala. Observamos que, no caso da transição extraordinária, Bray e Moore encontraram, através de CM, as seguintes expressões para a magnetização de superfície, quando $T \rightarrow T_c^B$,

expoente	transição ordinária	transição especial	transição de superfície	transição extraordinária
α	1/2	-	0	1/2
β_s	0	-	1/2	0
β_1	1	1/2	1/2	1
γ_s	3/2	-	1	3/2
γ_1	1/2	1	1	0
γ_2	1/2	1	1	-1/2
$\gamma_{1,1}$	-1/2	1/2	1	0
$\gamma_{1,1}^1$	0	1/2	1	0
Δ_s	1/2	1	3	1/2
δ_s	∞	-	3	∞
δ_1	3/2	3	3	3/2
$\delta_{1,1}$	1	2	3	1
$\delta_{1,1}^1$	1/2	2	3	1/2
η_\perp	1	0	-	3
η_\parallel	2	0	0	6
λ_s	2	-	2	
ϕ	-	1/2	-	-
α_b	0	0	o volume não está na criticalidade	0
β_b	1/2	1/2		1/2
γ_b	1	1		1
δ_b	3	3		3
η_b	0	0		0
ν_b	1/2	1/2		1/2
Δ_b	3/2	3/2		3/2

Tabela 3.1.1 - Expoentes críticos em superfícies de acordo com a teoria de Campo Médio.

$$\tilde{m} = 1 - \frac{1}{2} \tilde{t} - \frac{1}{8} \tilde{t}^2 + o(\tilde{t}^3) \quad \tilde{t} > 0 \quad \text{a)} \quad (3.1.6)$$

$$\tilde{m} = 1 - \frac{1}{2} \tilde{t} - \frac{1}{4} \tilde{t}^2 + o(\tilde{t}^3) \quad \tilde{t} < 0 \quad \text{b)}$$

onde $\tilde{m} \propto M_s$ e $\tilde{t} \propto (T - T_c^{CM})$. Vemos que a singularidade ocorreria no termo de ordem \tilde{t}^2 , o que significa que somente apareceria uma descontinuidade na segunda derivada de M_s (para $\tilde{t} = 0$) - seria uma singularidade suave. Bray e Moore definem um expoente para M_s na transição extraordinária (β_1^e de acordo com a sua notação) que é *identificado* com o expoente do termo que apresenta a singularidade. Eles encontram assim $\beta_1^e = 2$. Esta identificação do expoente difere daquela adotada por Lubensky e Rubin⁽⁴⁴⁾, os quais, baseados no termo linear das eqs. (3.1.6) identificam $\beta_1^e = 1$ (ver tab. 3.1.1). Discussão análoga⁽⁴⁵⁾ surge para a suscetibilidade e expoente associado na transição extraordinária. Adotaremos aqui a definição de Bray e Moore.

Em 1978, Burkhardt e Eisenriegler⁽⁵¹⁾ utilizam uma modificação do GR de Kadanoff para tratar o modelo de Ising semi-infinito em $d = 2$ e $d = 3$ (rede bcc), obtendo o diagrama de fases para o caso $d = 3$. Diehl e Dietrich⁽⁵¹⁾, em 1980, estudam o comportamento crítico de um sistema semi-infinito com simetria $O(N)$ no espaço dos spins através de métodos de GR de Teorias de Campo. Estes autores derivam relações de escala para os expoentes de superfície e comparam com as relações obtidas por outros autores. Binder e Landau⁽⁵⁰⁾, em 1984, apresentam estimativas mais precisas para os expoentes críticos de superfície para o modelo de Ising ($d = 3$) com superfície

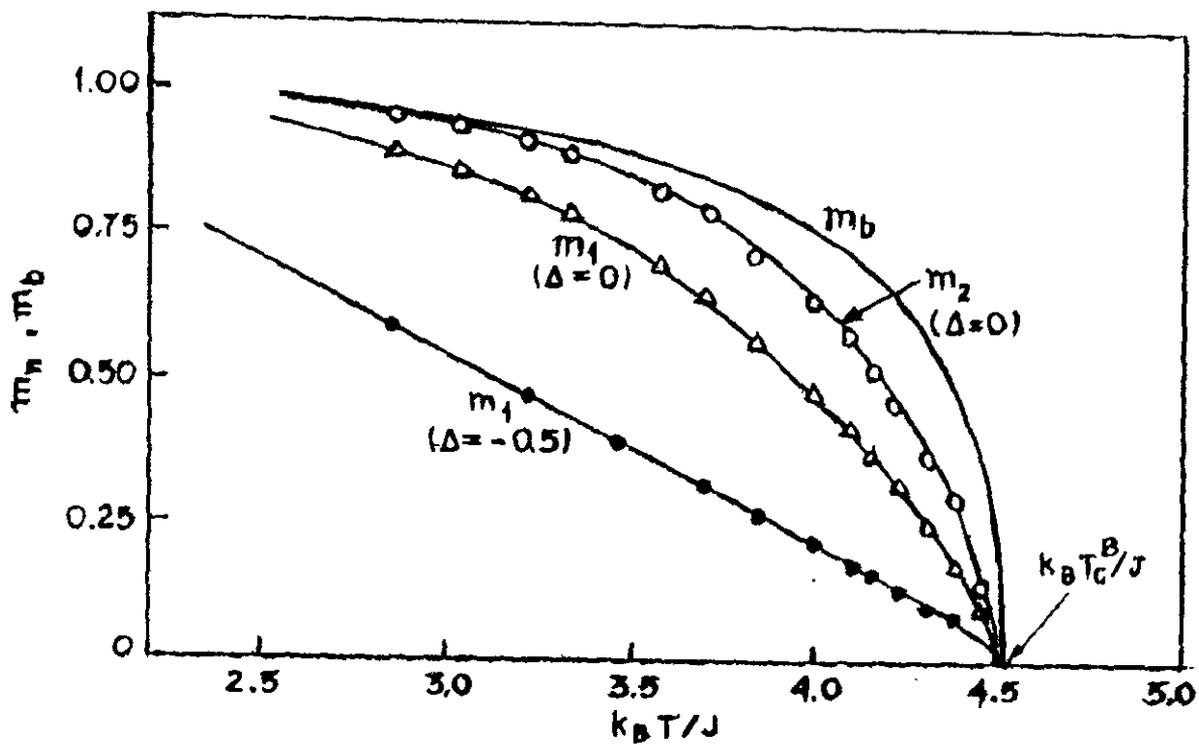


Figura 3.1.4 - Resultados de Monte Carlo⁽⁵⁰⁾ para a magnetização em um modelo de Ising como função da temperatura, para diferentes camadas n .

livre, obtidas através de novas simulações de Monte Carlo. Os perfis de magnetização também são obtidos, e para $\Delta = \Delta_c$ observa-se que este perfil não é independente de z , que é o resultado de Campo Médio, mas que $M(z)$ decresce quando z aumenta. Os resultados para os expoentes críticos estão em bom acordo com os de ⁽⁵¹⁾ e são consistentes com as relações de escala propostas por Binder e Hohenberg.

Uma revisão dos esforços realizados no sentido de encontrar relações de escala entre os expoentes associados à funções termodinâmicas de superfície encontra-se em ⁽⁴⁰⁾. Estas relações são encontradas a partir de hipóteses de homogeneidade, em geral baseadas na teoria de "finite-size scaling" ⁽⁵⁴⁾, que pode ser considerada como uma generalização do caso do volume para um filme fino de largura L . Assim como a parte singular de f_B escala-se como

$$f_B(T, H) = |t|^{2-\alpha_B} \tilde{f}_B^{\pm}(|t|^{-\Delta_B} H) \quad (3.1.7)$$

(onde \tilde{f}_B^{\pm} denota a função de escala para $T \gtrless T_c$), a parte singular de f_s escala-se como

$$f_s(H, H_1, T) = |t|^{2-\alpha_s} \tilde{f}_s^{\pm}(|t|^{-\Delta_B} H, |t|^{-\Delta_1} H_1) . \quad (3.1.8)$$

Esta expressão pode ser considerada como a generalização natural para superfícies da eq. (3.1.7), acreditando-se que seja mais geral do que a própria teoria de "finite-size scaling".

Das eqs. (3.1.7) e (3.1.8) obtém-se ⁽⁴⁰⁾ as seguintes relações de escala, dentre outras:

$$2 - \alpha_s - \beta_s = \gamma_s + \beta_s = \beta_s \delta_s = \Delta_B \quad \text{a)}$$

$$2 - \alpha_s = \gamma_s + 2\beta_s \quad \text{b)}$$

$$\beta_1 + \gamma_1 = \beta_1 \delta_1 = \Delta_B = \beta_B + \gamma_B = \beta_B \delta_B \quad \text{c)}$$

$$\beta_1 (1 + \delta_{1,1}) = \beta_s (1 + \delta_s) \quad \text{d)}$$

$$\gamma_1 (\delta_{1,1} - 1) = \gamma_{1,1} (\delta_1 - 1) \quad \text{e)} \quad (3.1.9)$$

$$\gamma_{1,1} + \beta_1 = \beta_1 \delta_{1,1} = \Delta_1 \quad \text{f)}$$

$$\beta_1 + \Delta_1 = 2\beta_1 + \gamma_{1,1} = 2 - \alpha_s \quad \text{g)}$$

$$2\gamma_1 - \gamma_{1,1} = \gamma_s \quad \text{h)}$$

$$2 - \alpha_s = 2\beta_1 + \gamma_{1,1} = \beta_1 (1 + \delta_{1,1}) \quad \text{i)}$$

Estas relações seriam válidas para a transição ordinária. Para a transição extraordinária seriam válidas desde que considerássemos a definição dos expoentes β_1 , γ_1 e $\gamma_{1,1}$ de Bray e Moore⁽⁴⁵⁾ (mesmo assim, não todas).

Relações de escala adicionais são obtidas através de hipóteses de homogeneidade para a função de correlação. Para o volume, tem-se⁽²⁰⁾

$$\Gamma_B(\vec{r}-\vec{r}') = |\vec{r}-\vec{r}'|^{-(d-2+\eta_B)} \tilde{\Gamma}_B(|\vec{r}-\vec{r}'|/\xi_B) \quad (3.1.10)$$

$$|\vec{r}-\vec{r}'| \rightarrow \infty, \quad T \rightarrow T_c^B$$

Esta hipótese foi generalizada para sistemas com superfícies livres ⁽⁵⁵⁾

$$\Gamma(\vec{r}, \vec{r}') = |\vec{r}-\vec{r}'|^{-(d-2+\eta_\perp)} \tilde{\Gamma}_\perp(|\vec{r}-\vec{r}'|/\xi_B, \theta) +$$

$$|\vec{r}-\vec{r}'|^{-(d-2+\eta_\parallel)} \tilde{\Gamma}_\parallel(|\vec{r}-\vec{r}'|/\xi_B, \theta) \quad , \quad (3.1.11)$$

onde a função de escala $\tilde{\Gamma}_\perp$ anula-se se o ângulo θ entre $|\vec{r}-\vec{r}'|$ e a normal à superfície torna-se igual a $\pi/2$, e então inclui-se um termo de correção associado à correlações paralelas à superfície ($\tilde{\Gamma}_\parallel$). Em particular para a transição de superfície, correlações perpendiculares à superfície não são críticas e η_\perp não está definido.

Destas hipóteses obtém-se as relações adicionais

$$\gamma_1 = \nu_B (2-\eta_\perp)$$

$$\gamma_{1,1} = \nu_B (1-\eta_\parallel) \quad (3.1.12)$$

$$\eta_\parallel = 2\eta_\perp - \eta_b$$

As duas primeiras seriam válidas para as transições ordinária e especial, enquanto a terceira seria válida para as

transições ordinária, especial e extraordinária.

No ponto multicrítico é necessário considerar outra hipótese de escala, que substitui a eq. (3.1.8),

$$f_s(H, H_1, T, \Delta) = t^{2-\alpha_s^m} \tilde{f}_s^m(t^{-\Delta_b^m} H, t^{-\Delta_1^m} H_1, gt^{-\phi}) \quad (3.1.13)$$

onde $g \equiv \Delta - \Delta_c$, "m" denota o valor dos expoentes no ponto multicrítico e ϕ é o expoente de crossover, definido por

$$(T_c^s(\Delta)/T_c^B - 1) \sim (\Delta/\Delta_c - 1)^{1/\phi} \quad (3.1.14)$$

Desta hipótese obtém-se que, no ponto multicrítico,

$$\alpha_1 = \alpha_s + \phi - 1 \quad \text{a)} \quad (3.1.15)$$

enquanto que para a transição ordinária tem-se

$$\alpha_1 = \alpha_s - 1 - \nu_B = \alpha_B - 1 \quad \text{b)}$$

Estas relações de escala implicam que para a transição ordinária existe um novo expoente descrevendo o comportamento crítico na superfície, além dos de volume, que podemos escolher como Δ_1 ou η_{\parallel} , por exemplo. Todos os outros expoentes podem ser expressos em termos deste expoente básico e os do volume. Se escolhermos η_{\parallel} , encontramos

$$\beta_1 = (\nu_B/2) (d - 2 + \eta_{\parallel}) \quad (3.1.16)$$

analogamente a

$$\beta_B = (\nu_B/2) (d - 2 + \eta_B) \quad (3.1.17)$$

e os outros expoentes podem ser expressos em termos de η_B e expoentes do volume.

Se existisse mais uma relação independente entre os expoentes de superfície e de volume, poderíamos expressar todos os expoentes de superfície somente em termos dos de volume. Várias tentativas foram feitas neste sentido: a relação sugerida por Wolfran⁽⁵⁶⁾ ($\beta_1 = \beta_B + \nu_B$) falha quando aplicada aos resultados exatos em modelos de Ising em duas dimensões e modelos esféricos; já a relação sugerida por Fisher⁽⁵⁷⁾ ($\beta_1 = 3/2 - \alpha_B - \nu_B$) é violada em expansões em ϵ em primeira ordem, mas é uma aproximação numérica razoável. Bray e Moore⁽⁴⁵⁾ sugeriram que, na transição ordinária, os expoentes de superfície poderiam ser expressos completamente em termos dos do volume. Eles consideraram que o principal efeito de uma superfície seria a quebra de simetria de translação; conseqüentemente o comportamento crítico local na superfície de um sistema semi-infinito poderia ser relacionado à questão do comportamento crítico local em um sistema *infinito* com um "defeito" planar interno. A partir desta hipótese obtiveram relações de escala ($\beta_1 = 3/2 - \alpha_B/2 - \nu_B$ e $\eta_B = 1/\nu_B$) consistentes com resultados de CM e resultados exatos para o modelo de Ising bidimensional, porém em desacordo com resultados para o modelo esférico. Embora em acordo com resultados para o modelo n-vetorial no limite n grande e expansões em ϵ em primeira ordem para n arbitrário, as relações

de escala se mostraram inválidas para expansões até segunda ordem em ϵ . Assim, as relações de escala encontradas, mais uma vez, não são exatas, mas aproximações numéricas razoáveis.

Bray e Moore⁽⁴⁵⁾ também sugeriram que se poderia relacionar todos os expoentes da *transição extraordinária* aos do volume, argumentando que nesta transição o que ocorre é apenas uma transição no volume na presença de magnetização na superfície, independentemente da origem desta magnetização. Em vez de estudar esta transição para um acoplamento de superfície suficientemente grande, poder-se-ia equivalentemente estudar a transição em T_c^B na presença de uma magnetização de superfície devida a um campo não nulo H_1 , independente do acoplamento superficial. Baseados em argumentos de escala, Bray e Moore afirmam que a singularidade da magnetização de superfície é idêntica a da energia livre do volume, encontrando assim a relação de escala para o expoente β_1 (transição extraordinária)

$$\beta_1 = 2 - \alpha_B \quad , \quad (3.1.18)$$

consistente com os resultados obtidos através de Campo Médio. Para esta transição, eles sugerem ainda outras relações, tais como $\eta_{\parallel} = d + 2$ e $\eta_{\perp} = \frac{1}{2} (d + 2 + \eta_B)$.

Para a transição especial, Binder e Hohenberg⁽⁵⁰⁾ sugeriram uma relação de escala entre um expoente associado a suscetibilidade e expoentes de volume, que se mostrou inconsistente com expansões em ϵ . Bray e Moore⁽⁴⁵⁾ sugeriram uma relação de escala entre o expoente de crossover, ϕ , e o expoente ν_B , $\phi = 1 - \nu_B$. Mostrou-se, em expansões em ϵ até segunda ordem, que esta expressão não era válida em geral. Assim, na transição especial, existem dois novos expoentes, ϕ e

Δ_1 por exemplo, nenhum dos quais pode ser relacionado a expoentes de volume através de relações de escala simples.

Para concluir, Diehl e Dietrich⁽⁵⁰⁾, usando técnicas de Teoria de Campos, mostraram que, em todas as ordens em ϵ , os expoentes críticos em uma superfície podem ser expressos em termos dos do volume mais um expoente adicional (para a transição ordinária), estabelecendo a validade das eqs. (3.1.9), (3.1.12), (3.1.15), (3.1.16) e (3.1.17). Nenhuma das relações adicionais propostas para a transição ordinária foi verificada.

3.2 - Equações de Estado para o Ferromagneto de Ising Semi-Infinito

As técnicas de GR tem sido usualmente aplicadas a sólidos magnéticos semi-infinitos para obter expoentes críticos e diagramas de fase^{((58), (59))}, sendo raramente usadas para calcular funções termodinâmicas de superfície^{((58), (60))}. Até o presente, que saibamos, nenhuma destas técnicas tem sido aplicada para obter a magnetização de superfície como função da temperatura, ou seja, a equação de estado. Como dispomos de uma técnica de GR operacionalmente tão simples quanto Campo Médio, mas que fornece resultados não-triviais e permite obter o parâmetro de ordem, vamos aplicar a extensão deste formalismo ao caso não homogêneo (onde podem existir diferentes constantes de acoplamento) para estudar o ferromagneto de Ising em rede cúbica semi-infinita com superfície livre (001), com Hamiltoniana dada pela eq. (3.1.1). Como esta é uma primeira aplicação do método a sistemas semi-infinitos, consideramos a

aproximação em que somente na superfície a constante de acoplamento, J_s , difere do seu valor no interior do volume, J_B . Uma aproximação mais realista seria considerar as constantes de acoplamento entre e nas camadas próximas à superfície também diferentes de J_s e J_B .

Inicialmente consideramos uma rede em d_B dimensões de tamanho linear L , com uma superfície privilegiada em d_s dimensões, onde as constantes de acoplamento adimensionais são $K_s = J_s/k_B T$ nesta superfície e $K_B = J_B/k_B T$ em qualquer outra situação. Consideramos o limite especial $L \rightarrow \infty$ tal que a superfície privilegiada dá origem a uma superfície livre em uma rede semi-infinita. Neste limite, definimos os parâmetros de ordem de volume e superfície como $M_B = N_L^B(K_B)/L^{d_B}$ e $M_s = N_L^s(K_B, K_s)/L^{d_s}$, onde $N_L^B(N_L^s)$ é a média térmica do número de sítios de volume (da região superficial) cujo spin está orientado ao longo da direção fácil de magnetização menos aqueles cujo spin está na direção oposta. Associamos a cada sítio da rede semi-infinita um dipolo magnético adimensional μ .

Transformamos o sistema original em um sistema similar de tamanho linear L' ($l = \text{fator de escala} = L/L' > 1$) com variáveis renormalizadas K'_B , K'_s e μ' . Impomos a condição de que sob renormalização, o momento magnético total de volume e o momento magnético total de superfície devem ser preservados (já que ambos são grandezas extensivas). Para o momento magnético total de volume temos

$$N_{L'}^B(K'_B)\mu' = N_L^B(K_B)\mu \quad (3.2.1)$$

onde as médias térmicas $N_{L'}^B(K'_B)$ e $N_L^B(K_B)$ devem ser tomadas

sobre os sítios do volume do sistema. Temos uma equação similar para o momento magnético total de superfície envolvendo médias térmicas como $N_L^S(K'_B, K'_S)$ e $N_L^B(K_B, K_S)$, tomadas sobre os sítios superficiais. Trabalhando por simplicidade só com a equação para o volume, se dividimos por L^{dB} a eq. (3.2.1), obtemos

$$M_B(K'_B)\mu' = L^{dB} M_B(K_B)\mu \quad (3.2.2)$$

onde $M_B(K'_B) = N_L^B(K'_B)/L'^{dB}$. Iterando n vezes esta equação, tomando o limite quando $n \rightarrow \infty$ e escolhendo arbitrariamente $\mu^{(0)} = 1$, obtemos

$$M_B(K_B) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{M_B(K_B^{(n)})\mu^{(n)}}{L^{nd_B}} \quad (3.2.3)$$

Analogamente, também encontramos uma relação para o parâmetro de ordem superficial

$$M_S(K_B, K_S) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{M_S(K_B^{(n)}, K_S^{(n)})\mu^{(n)}}{L^{nd_S}} \quad (3.2.4)$$

As eqs. (3.2.3) e (3.2.4) devem ser usadas junto com as equações de recorrência para K'_B e K'_S . Para sistemas ferromagnéticos de Ising com uma superfície livre, estas equações dão origem a um diagrama de fases com três regiões distintas, as fases P, BF e SF (ver fig. 3.1.1). Na região paramagnética, um ponto (K_B, K_S) é atraído através de

renormalização sucessivas para $(K_B^{(\infty)}, K_S^{(\infty)}) = (0, 0)$. Como $M_B(K_B^{(\infty)}) = 0$ e $M_S(K_B^{(\infty)}, K_S^{(\infty)}) = 0$, obtemos (através das eqs. (3.2.3) e (3.2.4))

$$M_B(K_B) = 0 \quad , \quad \text{a)} \quad (3.2.5)$$

$$M_S(K_B, K_S) = 0 \quad , \quad \text{b)}$$

em toda a região paramagnética, como esperado. Se (K_B, K_S) é atraído para o ponto $(K_B^{(\infty)}, K_S^{(\infty)}) = (\infty, \infty)$, o qual é associado à fase ferromagnética de volume, temos $M_B(K_B^{(\infty)}) = 1$ e $M_S(K_B^{(\infty)}, K_S^{(\infty)}) = 1$ (valores convencionais para os parâmetros de ordem M_B e M_S quando o volume e a superfície estão completamente ordenados). Neste caso, das eqs. (3.2.3) e (3.2.4) temos

$$M_B(K_B) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{l^{nd_B}} \quad , \quad \text{a)} \quad (3.2.6)$$

$$M_S(K_B, K_S) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{l^{nd_S}} \quad , \quad \text{b)}$$

para a fase ferromagnética de volume. Na região ferromagnética de superfície, (K_B, K_S) é atraído para o ponto $(K_B^{(\infty)}, K_S^{(\infty)}) = (0, \infty)$, o qual corresponde à situação onde a superfície está completamente ordenada e o volume desordenado. Então temos $M_B(K_B^{(\infty)}) = 0$ e $M_S(K_B^{(\infty)}, K_S^{(\infty)}) = 1$, e através das eqs. (3.2.3) e (3.2.4), obtemos

$$M_B(K_B) = 0 \quad \text{a)} \quad (3.2.7)$$

$$M_s(K_B, K_s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{l_s^{nd_s}} \quad \text{b)}$$

para a fase ferromagnética de superfície.

Vamos especificar então o procedimento para obter a relação de recorrência para K_B , K_s e μ .

Aplicando o esquema de Migdal-Kadanoff (que foi introduzido pela primeira vez para estudar o modelo de Ising semi-infinito em⁽⁵⁸⁾), vamos usar a mesma transformação de células simples já introduzida em⁽⁵⁹⁾ para tratar o magnetismo de superfície para o modelo de Potts (e modelos relacionados). Usamos a aproximação de Migdal-Kadanoff como um compromisso entre a necessidade de usar uma célula grande o suficiente para estudar um sistema tridimensional e que seja ao mesmo tempo tratável no contexto de uma primeira aplicação do nosso GR para calcular a magnetização de um sistema semi-infinito. As células para o volume e a região da superfície livre são mostradas nas figs. 3.2.1.a e 3.2.1.b. A transformação indicada na fig. 3.2.1.a simula, através do procedimento padrão de "bond-moving", a renormalização do volume do sistema. No lado esquerdo desta figura mostramos um passo intermediário da construção do grafo final: uma célula composta de oito cubos nos quais as ligações horizontais já foram removidas, e os sítios do topo e da base da célula foram colapsados em dois terminais. Na fig. 3.2.1.b a transformação é do mesmo tipo:

consideramos que a célula maior está sobre a superfície livre do nosso sistema de modo que 1/3 das suas 27 ligações iniciais estão fora da rede semi-infinita, e assim, 9 ligações estão ausentes.

Como estamos aproximando a rede de Bravais que queremos estudar por redes hierárquicas, os fatores l^d_B e l^d_s nas eqs. (3.2.6) e (3.2.7) devem ser substituídos (ver capítulo 2) por $l^{d_{bb'}}_B$ e $l^{d_{bb'}}_s$. Para a transformação da fig. 3.2.1.a, na qual todas as constantes de acoplamento são iguais (caso homogêneo, isto é, $K_B = K_s$), $l^{d_{bb'}}_B$ é dado por

$$l^{d_{bb'}}_B = \frac{N_{b_1}}{N_{b'_1}} \quad (3.2.8)$$

onde N_{b_1} e $N_{b'_1}$ são, respectivamente, o número de ligações dos grafos G_1 e G'_1 (o quais tem distâncias químicas b_1 e b'_1 entre seus terminais).

Para a transformação da fig. 3.2.1.b (caso inhomogêneo), onde temos K_B e K_s arbitrários, usamos a extensão da definição da eq. (3.2.8), e $l^{d_{bb'}}_s$ é dado por

$$l^{d_{bb'}}_s = \frac{N_{b_2}^B + N_{b_2}^s K_s/K_B}{N_{b'_2}^B + N_{b'_2}^s K'_s/K'_B} \quad (3.2.9)$$

onde $N_{b_2}^B$ e $N_{b_2}^s$ ($N_{b'_2}^B$ e $N_{b'_2}^s$) são os números de ligações do grafo G_2 (G'_2) respectivamente associados a K_B e K_s (K'_B e K'_s), e b_2 (b'_2) é a distância química entre os terminais do grafo.

A definição da eq. (3.2.9), como vimos no capítulo 2, é a expressão continua mais simples que recupera a definição da

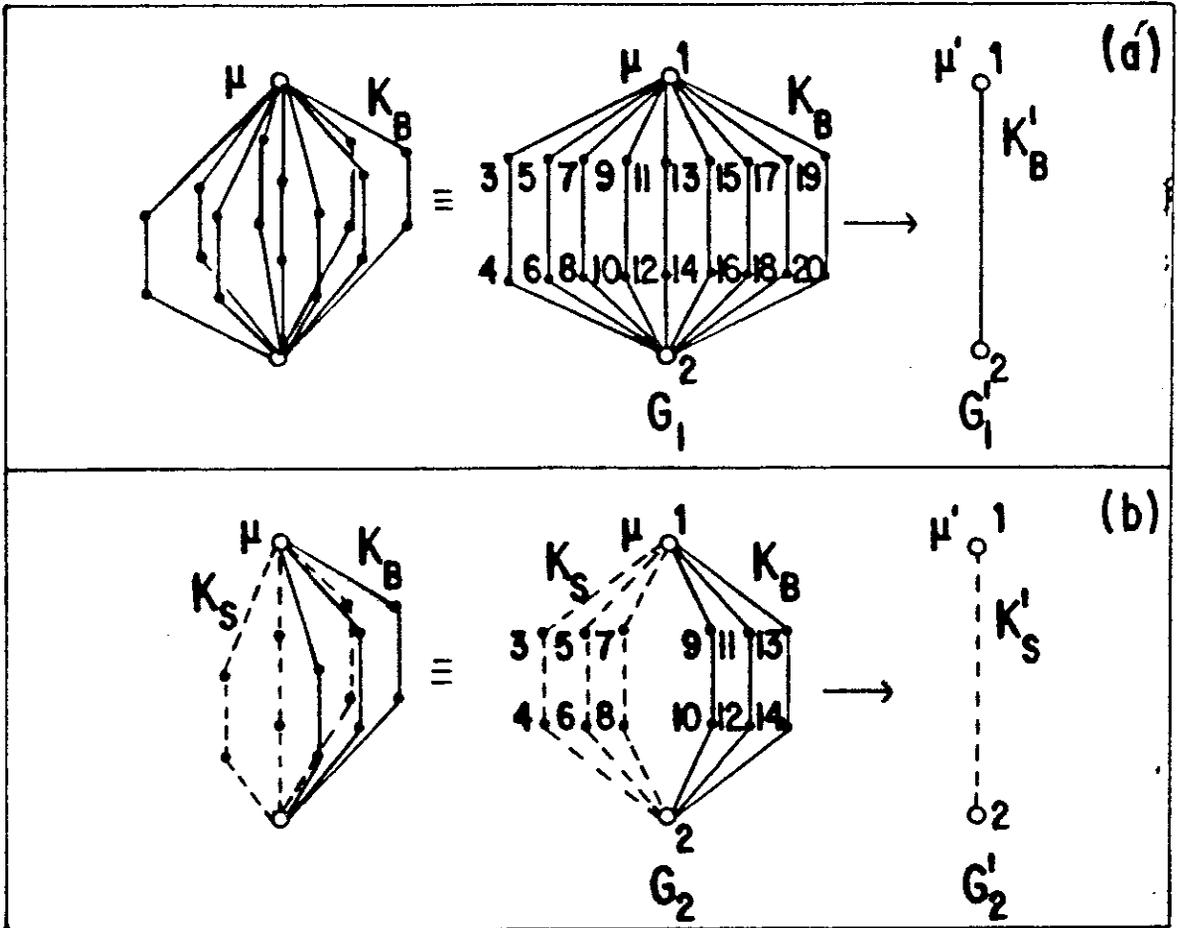


Figura 3.2.1 - Células da transformação de GR (a) para o volume: todas as ligações são associadas à constante de acoplamento K_B ; (b) para a região de superfície: as ligações tracejadas são associadas à constante de acoplamento K_S .

eq. (3.2.8) nos casos particulares $(K_s/K_B, K'_s/K'_B) = (0,0), (1,0), (0,1)$ e $(1,1)$.

Voltando então às transformações de GR indicadas na fig. 3.2.1, impomos que a função de correlação entre as duas raízes dos grafos G_1 e G'_1 (G_2 e G'_2) deve ser preservada, isto é,

$$e^{-\beta H'_B 12} = \text{Tr}_{3, \dots, 20} e^{-\beta H_B 123 \dots 20}, \quad (3.2.10)$$

$$e^{-\beta H'_s 12} = \text{Tr}_{3, \dots, 14} e^{-\beta H_s 123 \dots 14}, \quad (3.2.11)$$

com

$$-\beta H'_B 12 = K'_B \sigma_1 \sigma_2 + K_B^0, \quad a)$$

(associada ao grafo G'_1),

$$-\beta H_B 123 \dots 20 = K_B (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_5 + \sigma_1 \sigma_7 + \dots + \sigma_3 \sigma_4 +$$

$$\sigma_5 \sigma_6 + \sigma_7 \sigma_8 + \dots + \sigma_4 \sigma_2 + \sigma_6 \sigma_2 + \sigma_8 \sigma_2 + \dots) \quad b)$$

(3.2.12)

(associada ao grafo G_1),

$$-\beta H'_s 12 = K'_s \sigma_1 \sigma_2 + K_s^0, \quad c)$$

(associada ao grafo G'_2) e

$$\begin{aligned}
-\beta H_{s_{123\dots 14}} &= K_s (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_1 \sigma_5 + \sigma_1 \sigma_7 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_5 \sigma_6 + \sigma_7 \sigma_8 + \\
&\sigma_4 \sigma_2 + \sigma_6 \sigma_2 + \sigma_8 \sigma_2) + K_B (\sigma_1 \sigma_9 + \sigma_1 \sigma_{11} + \sigma_1 \sigma_{13} + \sigma_9 \sigma_{10} + \\
&\sigma_{11} \sigma_{12} + \sigma_{13} \sigma_{14} + \sigma_{10} \sigma_2 + \sigma_{12} \sigma_2 + \sigma_{14} \sigma_2) \quad \text{d)}
\end{aligned}$$

(associada ao grafo G_2). K_B^0 e K_s^0 são duas constantes a serem determinadas. As eqs. (3.2.10) e (3.2.11) determinam

$$K'_B = f(K_B) \quad (3.2.13)$$

e

$$K'_s = g(K_B, K_s) \quad (3.2.14)$$

As eqs. (3.2.13) e (3.2.14) dão origem ao diagrama de fases do sistema (ver fig. 3.1.3.b).

Para estabelecer a relação de recorrência para μ , procedemos como descrito no capítulo 2. Fixamos um dos terminais de todos os grafos da fig. 3.2.1, e deixamos os spins associados aos sítios restantes livres. Consideramos todas as configurações possíveis, e a cada uma atribuímos seu peso de Boltzmann e momento magnético. Para a transformação da fig. 3.2.1.a (caso homogêneo $K_s/K_B = 1$), cada sítio contribui para o momento magnético total proporcionalmente ao seu número de coordenação. No caso não-homogêneo ($K_s/K_B \neq 1$), correspondente a transformação da fig. 3.2.1.b, cada sítio contribui proporcionalmente ao seu número de coordenação médio (definido

atribuindo-se a cada ligação um peso proporcional a sua constante de acoplamento). Na tab. 3.2.1 apresentamos, como exemplo, algumas configurações para os grafos G_1 e G'_1 (associados ao volume, onde temos somente a constante de acoplamento K_B). Na tab. 3.2.2 ilustramos o mesmo procedimento para os grafos G_2 e G'_2 , associados à superfície, onde temos ambas as constantes de acoplamento K_B e K_s . Finalmente impomos, como fizemos para obter a eq. (3.2.1), que a média térmica do momento magnético total nas células original e renormalizada seja preservada, para ambas as transformações de GR de volume e superfície, respectivamente:

$$\langle m \rangle_{G_1} = \langle m \rangle_{G'_1} \quad (3.2.15)$$

$$\langle m \rangle_{G_2} = \langle m \rangle_{G'_2} \quad (3.2.16)$$

Estas equações tem a forma

$$\mu'_B = j(K_B)\mu_B \quad (3.2.17)$$

$$\mu'_s = k(K_B, K_s)\mu_s \quad (3.2.18)$$

como podemos ver inspecionando as tabs. 3.2.1 e 3.2.2. A eq. (3.2.17) deve entrar na eq. (3.2.6.a), enquanto a eq. (3.2.18) deve entrar nas eqs. (3.2.6.b) e (3.2.7.b).

Em resumo, usamos as eqs. (3.2.5), (3.2.6), (3.2.7) juntamente com as eqs. (3.2.13) e (3.2.14) e eqs. (3.2.17) e (3.2.18), para obter a magnetização espontânea de superfície e

(a) G'_1 configuração	peso	m
	$e^{K'_B}$	$2\mu'_B$
	$e^{-K'_B}$	0

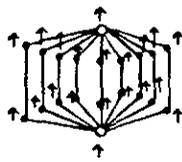
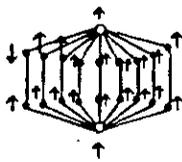
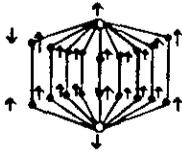
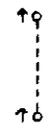
(b) G_1 configuração	peso	m
	e^{27K_B}	$54\mu_B$
	e^{23K_B}	$50\mu_B$
	e^{5K_B}	$32\mu_B$

Tabela 3.2.1 - Construção da eq. (3.2.15) para a transformação de GR para o volume. (a) Configurações possíveis para o grafo G'_1 ; $\langle m \rangle_{G'_1} = e^{K'_B} 2 \mu'_B / (e^{K'_B} + e^{-K'_B})$. (b) Três das 2^{19} configurações possíveis para o grafo G_1 ; $\langle m \rangle_G = (54 e^{27K_B} + 50 e^{23K_B} + 32 e^{5K_B} + \dots) / \mu_B (e^{27K_B} + e^{23K_B} + e^{5K_B} + \dots)$.

(a) G'_2 configuração	peso	m
	$e^{K'_s}$	$2\mu'_s$
	$e^{-K'_s}$	0

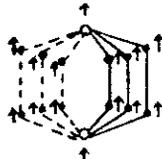
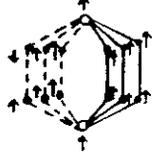
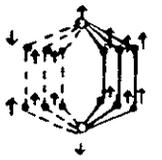
(b) G_2 configuração	peso	m
	$e^{9K_B + 9K_S}$	$(18 + 18 K_S / K_B) \mu_S$
	$e^{9K_B + 5K_S}$	$(18 + 14 K_S / K_B) \mu_S$
	$e^{3K_B - K_S}$	$(12 + 8 K_S / K_B) \mu_S$

Tabela 3.2.2 - Construção da eq. (3.2.16) para a transformação de GR para a superfície. (a) Configurações possíveis para o grafo G'_2 ; $\langle m \rangle_{G'_2} = e^{K'_s} 2 \mu'_s / (e^{K'_s} + e^{-K'_s})$. (b) Três das 2^{13} configurações possíveis para o grafo G_2 ; $\langle m \rangle_{G_2} = (e^{9K_B + 9K_S} (18 + 18 K_S / K_B) + e^{9K_B + 5K_S} (18 + 14 K_S / K_B) + e^{3K_B - K_S} (12 + 8 K_S / K_B) + \dots) \mu_S / (e^{9K_B + 9K_S} + e^{3K_B - K_S} + \dots)$.

do volume. Para a transformação da fig. 3.2.1.a, $l_B^{d_{bb'}} = 27$ (caso homogêneo) e para a da fig. 3.2.1.b, $l_s^{d_{bb'}} = \frac{9+9K_s/K_B}{K'_s/K'_B}$ (caso não-homogêneo).

3.3 - Resultados

Na fig. 3.3.1 mostramos as curvas que obtemos para a magnetização espontânea de superfície para $J_s/J_B = 0, 0.5, 1$ e 1.5 . Mostramos também a curva para a magnetização espontânea do volume. Como $\Delta < \Delta_c$ ($\Delta_c \approx 0.74$ neste procedimento de GR⁽⁵⁹⁾), a superfície e o volume ordenam-se, quando a temperatura vai diminuindo, à mesma temperatura T_c^B (transição ordinária). Observamos que a curva da magnetização de superfície, quando Δ vai aumentando, gradualmente aproxima-se da do volume e, para $\Delta < \Delta_c$, ela está *acima* desta curva.

Se $\Delta = \Delta_c$, a superfície ainda desordena-se à mesma temperatura T_c^B que o volume, mas esta transição (transição especial) é caracterizada por um conjunto diferente de expoentes. A curva da magnetização de superfície correspondente está na fig. 3.3.2, junto com a curva do volume. O comportamento de M_s quando $\Delta \lesssim \Delta_c$ mencionado no parágrafo anterior é bastante plausível, já que o expoente associado a magnetização de superfície na transição especial é menor que o associado a magnetização de volume. Isto significa que a curva de M_s para a transição especial é mais "quadrada" que a de M_B , e que por continuidade quando $\Delta \rightarrow \Delta_c - 0$ a curva de M_s deve estar acima da de M_B .

Na fig. 3.3.3 apresentamos as curvas de magnetização de

superfície para $J_s/J_B = 2, 2.5$ e 3 ; estes valores de J_s/J_B correspondem a $\Delta > \Delta_c$. Neste caso o volume ordena-se na presença de uma superfície já ordenada. Temos a transição de superfície para $T_c^s(\Delta) > T_c^B$, da fase ferromagnética de superfície para a fase paramagnética, e a transição extraordinária em T_c^B , onde espera-se que a curva da magnetização de superfície apresente algum tipo de singularidade suave. Nós obtemos que a primeira derivada da magnetização de superfície em relação à temperatura é descontínua em T_c^B , e que para temperaturas um pouco acima de T_c^B a tendência da superfície se desordenar é mais fraca do que um pouco abaixo de T_c^B . Este resultado pode surpreender a primeira vista, já que sabemos que a ordem do volume deve aumentar a ordem na superfície. Verificamos que $\beta_1^{ex} = 1$ e que A_-/A_+ é aproximadamente igual a 4 , para razões típicas de J_s/J_B . Como já mencionamos, as teorias de Campo Médio prevêem uma descontinuidade somente na segunda derivada (ver eq. (3.1.6)) e além disso, os argumentos de escala de Bray e Moore implicam em que $\beta_1^{ex} = 2 - \alpha_B$ (eq. 3.1.8), onde α_B é o expoente associado ao calor específico do volume. Apoiando a possibilidade de que a primeira derivada de $M_s(T)$ em T_c^B seja contínua, existem ainda os dados experimentais de Rau e Robert⁽⁴³⁾ no Gd (cujo comportamento crítico corresponde a uma classe de universalidade que ainda não está bem definida, se de Ising ou de Heisenberg). Por outro lado, um resultado similar ao nosso foi obtido, usando RPA, para um ferromagneto semi-infinito de Heisenberg⁽⁴⁹⁾. Além disso, teorias de campo efetivo com correlação sugeriram uma descontinuidade da primeira derivada de $M_s(T)$ em T_c^B para o modelo de Ising e para este modelo em um

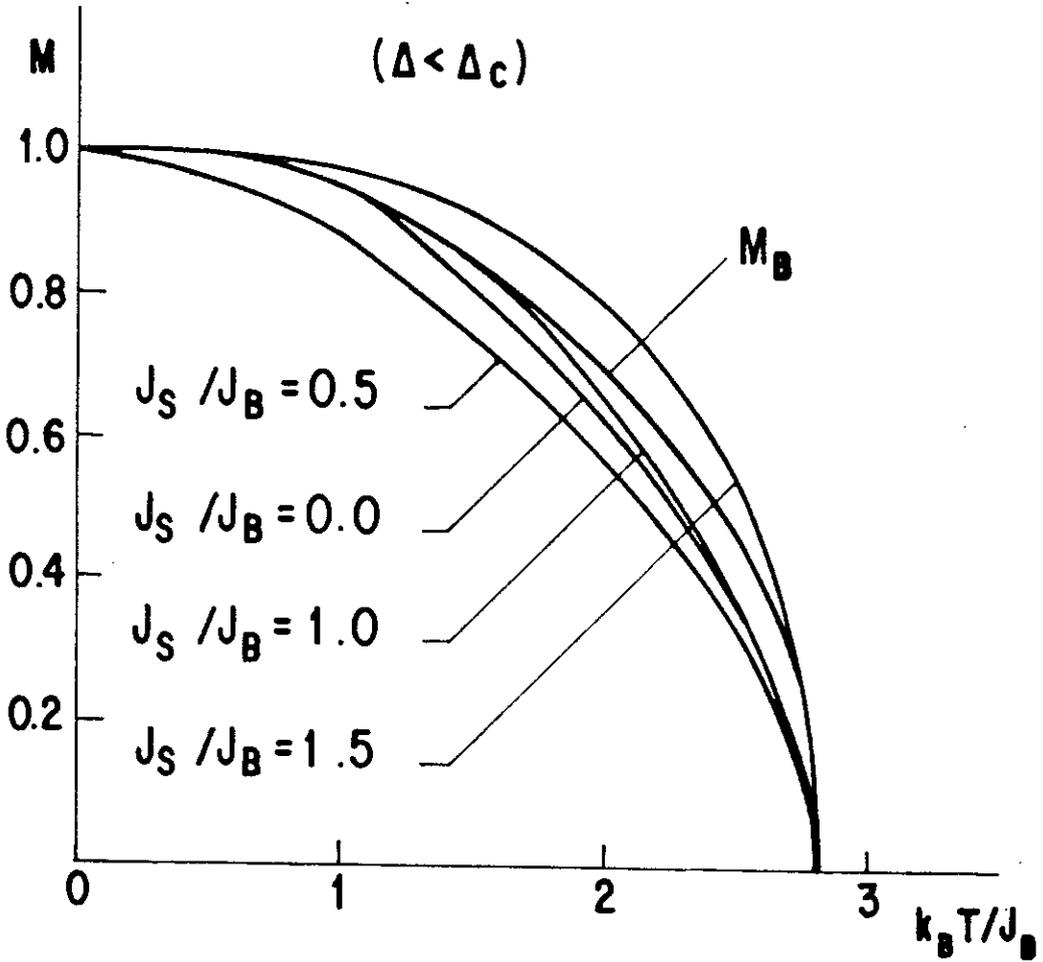


Figura 3.3.1 - Magnetização espontânea de superfície M_s como função da temperatura para o ferromagneto de Ising em rede cúbica semi-infinita com superfície livre (001). $J_s / J_B = 0, 0.5, 1$ e 1.5 ($\Delta < \Delta_c$). A magnetização de volume M_B também é mostrada como referência.

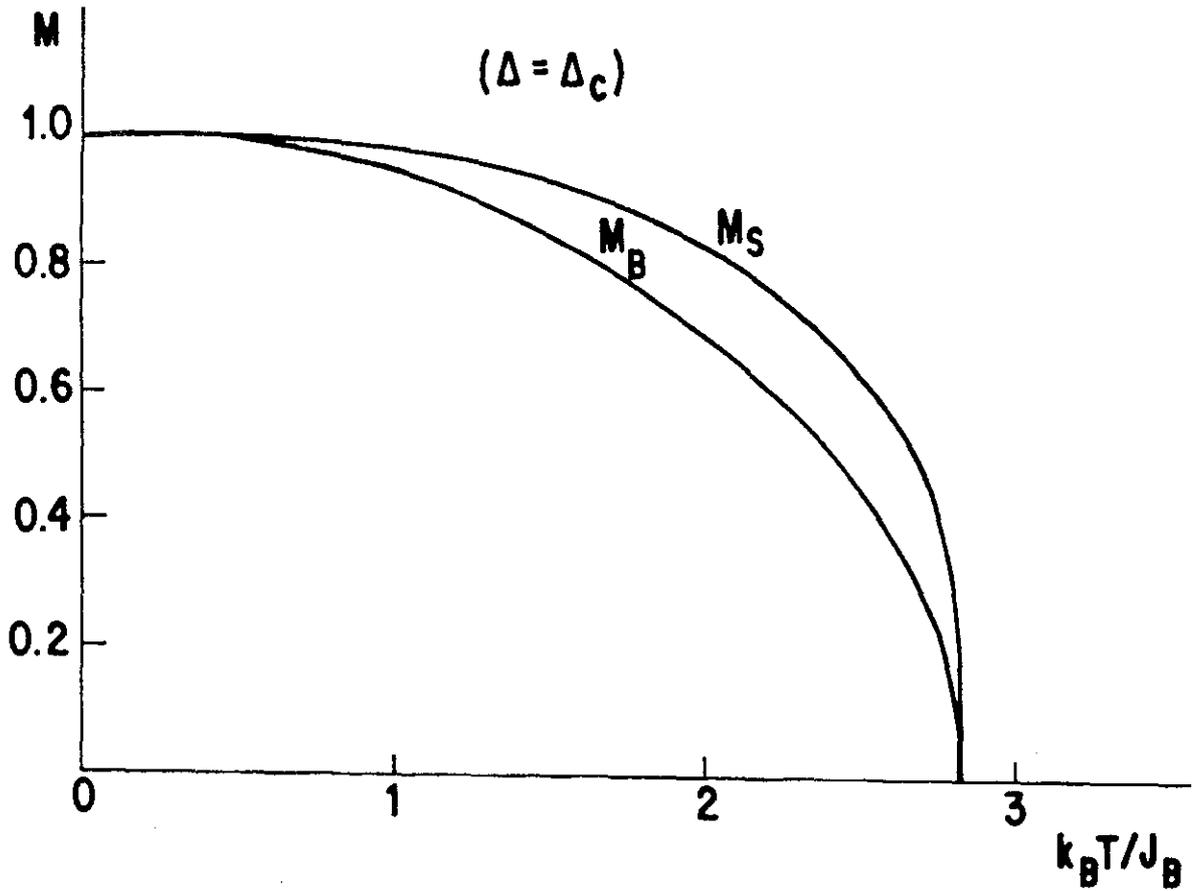


Figura 3.3.2 - Magnetização de superfície M_s como função da temperatura para $\Delta = \Delta_c$. A magnetização do volume M_B também é mostrada.

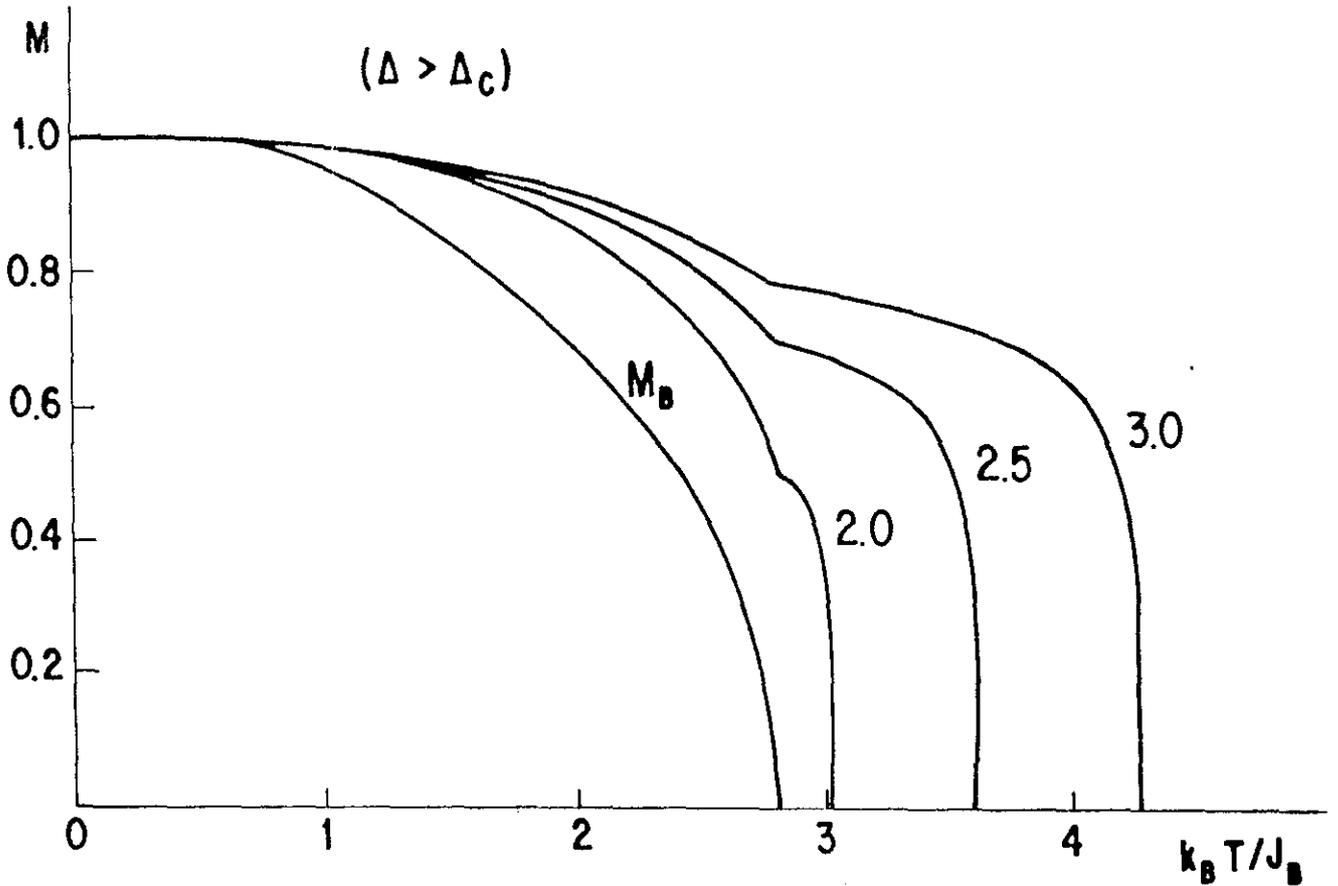


Figura 3.3.3 - Magnetização de superfície M_s como função da temperatura para $\Delta > \Delta_c$: $J_s / J_B = 2, 2.5$ e 3 . Em T_c^B , existe uma descontinuidade na primeira derivada de M_s com relação à temperatura. A magnetização do volume M_B também é mostrada.

campo transverso⁽⁴⁶⁾. Existem ainda experiências de grande precisão⁽⁶¹⁾ medindo a tensão superficial, na transição λ , para o ^4He líquido (cuja criticalidade espera-se que seja a mesma que a de alguns sistemas magnéticos de superfície), que sugerem uma *descontinuidade* na primeira derivada, em desacordo com algumas previsões teóricas para o sistema. Este ponto ainda é controvertido. Vamos apresentar alguns argumentos qualitativos que podem esclarecer a origem do que encontramos, isto é, uma *descontinuidade* na primeira derivada de $M_s(T)$. O volume atua na magnetização de superfície através de dois canais diferentes. O primeiro é o fato óbvio de que a magnetização de volume, enquanto não se anula, age como um campo efetivo na superfície. A segunda, mais sutil, refere-se aos efeitos da suscetibilidade de volume próximo à T_c^B , onde a suscetibilidade de volume diverge ($\chi_B(T) \sim C_- (1-T/T_c^B)^{-\gamma_B}$ para $T \rightarrow T_c^- 0$ e $\chi_B(T) \sim C_+ (T/T_c^B - 1)^{-\gamma_B}$ para $T \rightarrow T_c^+ 0$). Na vizinhança de T_c^B , a amplitude da suscetibilidade de volume do lado paramagnético (C_+) é maior (*duas vezes maior*, em cálculos de CM) do que a do lado ferromagnético (C_-). O efeito da suscetibilidade de volume do lado paramagnético poderia superar ambos os efeitos do campo do volume anulando-se e o da suscetibilidade de volume logo abaixo de T_c^B . Isto sugere uma explicação para o *decréscimo* na tendência da superfície se desordenar na região logo acima de T_c^B (isto é, $A_- > A_+$). O fato de que cálculos de CM fornecem $A_+ = A_-$ seria fortuito e possivelmente relacionado ao fator 2 mencionado acima. Nossos resultados estão em desacordo com os obtidos por Bray e Moore⁽⁴⁵⁾.

O formalismo de GR que utilizamos fornece os valores de T_c^B , $T_c^S(\Delta)$ (através das relações de

recorrência para K_B e K_s , da maneira usual), o expoente β_1 para cada transição e a amplitude correspondente A . Eles são mostrados na tab. 3.3.1 e comparados com outras estimativas, quando disponíveis. Nossos resultados concordam razoavelmente com estas estimativas.

Mencionamos ainda um fenômeno inesperado que ocorre quando J_s/J_B decresce, para $J_s/J_B \ll 1$: a magnetização de superfície apresenta uma leve não-monotonicidade. Espera-se⁽⁶²⁾ que, para um dado valor de J_s/J_B , a curva de magnetização de superfície esteja sempre abaixo das curvas associadas a valores maiores de J_s/J_B . Em vez disso, a partir de $J_s/J_B \approx 0.35$, observamos que a magnetização de superfície começa a aumentar, enquanto J_s/J_B diminui. Podemos ver na fig. 3.3.1 a curva de magnetização de superfície para $J_s/J_B = 0.5$, a qual está abaixo das curvas para $J_s/J_B = 1$ e 1.5 , como esperado. Mas a curva de magnetização de superfície para $J_s/J_B = 0$, por exemplo, está acima da curva para $J_s/J_B = 0.5$. Esta mudança de regime em $J_s/J_B \approx 0.35$ está diretamente relacionada a uma mudança de regime no fluxo de GR no diagrama de fases correspondente (ver fig. 3.1.3.b). De fato, a linha de fluxo conectando os atratores das fases BF e P bem como o ponto fixo que está na fronteira crítica P-BF precisamente corresponde a $J_s/J_B \approx 0.35$. Como estamos usando um GR aproximado, pode ser que este efeito seja espúrio.

Vamos discutir ainda o que ocorre em dois outros limites. Quando $J_s > 0$ e $J_B \rightarrow 0$, de modo que $J_s/J_B \rightarrow \infty$, a curva de magnetização de volume vai aproximando-se da reta $T = 0$ e finalmente colapsa nesta reta; a descontinuidade na primeira derivada da magnetização de superfície vai

MAGNETIZAÇÃO DE VOLUME			
β^{3D}	$k_B T_c^B / J_B$		A_{3D}
0.46	2.82		1.24
0.312 ⁽³⁶⁾	2.3062 (séries ⁽³⁶⁾)		-
MAGNETIZAÇÃO DE SUPERFÍCIE			
TRANSIÇÃO ORDINÁRIA			
β_1^{ord}	J_s / J_B		A_{ord}
0.55	0.5		1.1
0.78 (Monte Carlo ⁽⁵⁰⁾)	1.0		1.2
0.82 (Expansão em ϵ ⁽⁵²⁾)	1.5		1.8
TRANSIÇÃO ESPECIAL			
β_1^{sp}	J_s / J_B		A_{sp}
0.21	1.74		
0.175 (Monte Carlo ⁽⁵⁰⁾)	1.6	(séries ⁽⁵⁰⁾)	0.6
0.25 (Expansão em ϵ ⁽⁵²⁾)	1.5	(Monte Carlo ⁽⁵⁰⁾)	
TRANSIÇÃO DE SUPERFÍCIE			
β_1^{2D}	J_s / J_B	$T_c^s (J_s / J_B)$	A_s
0.17	2.0	3.03	0.8
0.125 (Exato ⁽³⁶⁾)	2.5	3.61	0.92
	3.0	4.26	0.96
TRANSIÇÃO EXTRAORDINÁRIA			
β_1^{ex}	J_s / J_B	A_-	A_+
1.0	2.0	3.0	0.8
2 (Campo Médio ⁽⁴⁵⁾)	2.5	1.1	0.3
	3.0	0.6	0.17

Tabela 3.3.1 - Valores do presente GR para as temperaturas críticas, expoentes β_1 e amplitudes A correspondentes a cada transição. Outras estimativas, quando disponíveis, também são apresentadas.

deslocando-se em direção à $T = 0$, até que desaparece e recuperamos a magnetização para uma superfície ($d = 2$). O limite $J_B > 0$ e $J_s \gg J_B$, de modo que $J_s/J_B \rightarrow \infty$ está associado a uma situação diferente, já que o volume está presente. À medida que J_s/J_B aumenta a descontinuidade da derivada da magnetização de superfície se mantém, mas as derivadas à esquerda e à direita são números em valor absoluto cada vez menores. Finalmente, quando $J_s/J_B \rightarrow \infty$, a magnetização de superfície torna-se a de saturação e $T_c^s \rightarrow \infty$, mostrando que só à temperatura infinita a superfície desordena-se (neste caso não temos uma superfície pura, mas uma superfície em um volume).

Voltando a questão da possível descontinuidade de $M_s(T)$ em T_c^B , na transição extraordinária, citamos ainda dois trabalhos posteriores a este, que se preocuparam justamente em esclarecer este ponto.

Morán-López e Sanchez⁽⁶³⁾ utilizaram a teoria de "Cluster variation method" para estudar M_s em um ferromagneto de Ising semi-infinito, argumentando que esta teoria, embora prevendo comportamento crítico clássico, fornece valores precisos para a temperatura crítica e uma dependência da magnetização com a temperatura em bom acordo com métodos mais elaborados, para temperaturas não muito próximas de T_c . Morán-López e Sanchez obtêm um comportamento para M_s que depende fortemente das condições de contorno impostas nos cálculos de superfície. Por exemplo, impondo-se as condições de contorno do volume logo na terceira camada mais próxima da superfície, encontra-se que, para as duas primeiras camadas, a derivada da magnetização é descontínua em T_c^B . No entanto, se as

condições de contorno de volume só são impostas na décima camada, esta descontinuidade não é mais apreciável nas primeiras camadas superficiais. Destes resultados os autores inferem o que seria resultado exato, que de acordo com o método seria obtido supondo-se um número infinito de camadas diferentes do volume: a primeira derivada de M_s seria contínua em T_c^B .

Ohno e Okabe⁽⁶⁴⁾ também estudaram a transição extraordinária em um sistema de Ising semi-infinito, usando expansão em $\epsilon = 4-d$, onde d é a dimensão do espaço. Em primeira ordem, esta expansão revela que a primeira derivada de M_s é descontínua em T_c^B , em contraste com as teorias de CM.

Acreditamos que a divergência entre os resultados obtidos no nosso trabalho e na ref. 64, e os resultados obtidos através de CM, poderia ser explicada através dos efeitos da suscetibilidade do volume, já que as teorias de CM não consideram apropriadamente as flutuações. Um outro ponto importante diz respeito às medidas que foram feitas no Gd⁽⁶¹⁾. Mais recentemente, um outro trabalho experimental⁽⁶⁵⁾ no Gd (acerca de propriedades de volume) levantou a discussão sobre a que classe de universalidade realmente está associado o comportamento crítico desta substância. As interações entre ions, do tipo RKKY implicam em comportamento crítico de Heisenberg perto de T_c . Por outro lado, a única direção fácil de magnetização neste material implica em anisotropia uniaxial, o que sugere comportamento crítico de Ising. Experimentalmente, a situação também é ambígua: obtém-se valores para os expoentes críticos associados a magnetização e ao calor específico tipicamente próximos dos valores teóricos de Heisenberg, enquanto os valores obtidos para o expoente associado a

suscetibilidade magnética são próximos do valor teórico de Ising. Geldart et al⁽⁶⁵⁾, através de medidas da suscetibilidade paramagnética, observaram uma anisotropia uniaxial no regime crítico. Esta anisotropia inesperada foi interpretada em termos da interação magnética dipolo-dipolo, a qual é não apenas surpreendentemente forte no Gd mas é também anisotrópica com respeito às direções cristalinas. Geldart et al⁽⁶⁵⁾ concluem que, em princípio, todas as experiências realizadas até o presente, acerca de propriedades críticas no Gd, devem ser interpretadas em termos de expoentes críticos efetivos, caracterizados na ref. 65.

3.4 - Influência da Natureza das Interações

Vamos discutir brevemente a relação entre a existência da fase SF e a natureza das interações no sistema semi-infinito⁽⁶⁶⁾. Consideremos um modelo de Heisenberg anisotrópico de spin 1/2, com Hamiltoniana

$$-\beta H = \sum_{\langle i, j \rangle} K_{ij} [(1-\eta_{ij})(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] \quad (3.4.1)$$

onde $(K_{ij}, \eta_{ij}) = (K_s, \eta_s)$ se ambos os sítios pertencem à superfície livre e $(K_{ij}, \eta_{ij}) = (K_B, \eta_B)$ em qualquer outra situação; $J_s, J_B \geq 0$ e $0 \leq \eta_B, \eta_s \leq 1$. ($\eta_{ij} = 1$ recupera a interação de Ising e $\eta_{ij} = 0$ recupera a interação de Heisenberg isotrópico).

O teorema de Mermin-Wagner essencialmente estabelece que não pode haver magnetização espontânea à temperatura finita

se as três condições seguintes são simultaneamente satisfeitas:

- (i) o sistema envolve somente interações de curto alcance;
- (ii) o sistema é bidimensional;
- (iii) a quebra de simetria corresponde a interações que são associadas a um grupo contínuo de simetrias;

A questão é se a fase SF existe quando $\eta_s = 0$, independente do valor de η_B . Este ponto é bastante delicado. Em princípio, poderia-se pensar que a condição (i) é satisfeita; a superfície é um sistema bidimensional então a condição (ii) também é satisfeita; finalmente $\eta_s = 0$ então a condição (iii) também é satisfeita; conseqüentemente a fase SF não pode existir e isto para qualquer valor de η_B . Na realidade isto não ocorre⁽⁶⁶⁾, somente se η_B também anular-se é que a fase SF não pode existir. Podemos pensar que o que está errado no argumento acima é que o teorema não se aplica porque a condição (ii) não é satisfeita, o sistema é de fato tridimensional (um volume semi-infinito). Realmente, isto é correto. No entanto, acredita-se que a magnetização de superfície anula-se (para $\Delta > \Delta_c$) exponencialmente quando vai-se entrando no interior do volume. Este comportamento exponencial leva a um sistema que, na prática, pode ser considerado como um sistema $\infty \times \infty \times$ largura finita, isto é, bidimensional e então a condição (ii) pode ser, na prática considerada satisfeita. Resta reexaminar a condição (iii). Observamos que para satisfazer (iii), todas as interações relevantes devem satisfazê-la, o que não é o caso. De fato, a largura finita da superfície ativa inclui muito mais camadas que uma única camada de superfície (para a qual $\eta_s = 0$). Assim, espera-se que a fase SF exista se η_s ou η_B for diferente de zero; esta fase deve desaparecer somente se

ambos η_s e η_B anularem-se, caso em que o teorema de Mermin-Wagner se aplica.

CAPÍTULO 4

CRITICALIDADE DO FERROMAGNETO N-VETORIAL DISCRETO
EM REDE CÚBICA COM UMA SUPERFÍCIE LIVRE

Neste capítulo estudamos⁽⁶⁷⁾ o ferromagneto N-vetorial discreto, dado pela Hamiltoniana adimensional

$$\beta H = - NK \sum_{\langle i, j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - N^2 L \sum_{\langle i, j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2$$

em uma rede cúbica semi-infinita. As constantes de acoplamento na superfície, K_s e L_s , podem ser diferentes das do volume, K_B e L_B . Usando um procedimento simples de GR no espaço real obtemos a evolução com N , para N real, do diagrama de fases, incluindo os limites $N \rightarrow 0$ e $N \rightarrow \infty$. Calculamos os expoentes críticos térmicos (ν) e de crossover (ϕ) em vários pontos críticos e multicríticos.

4.1 - O Modelo N-vetorial Discreto (Cúbico)

Hamiltonianas contendo termos de anisotropia cúbica, os quais quebram a invariância rotacional completa, têm sido usadas para descrever transições de fase estruturais em redes com simetria cúbica⁽⁶⁸⁾ bem como o comportamento de alguns ferromagnetos anisotrópicos⁽⁶⁹⁾.

O modelo N-vetorial discreto ou modelo Cúbico, que é um limite extremo de anisotropia cúbica destas Hamiltonianas, foi inicialmente introduzido⁽⁷⁰⁾ como uma tentativa para explicar o comportamento do tipo tricrítico observado em compostos de terras-raras cúbicos, em particular o HoSb. Este modelo pode ser definido de diversas maneiras. Usualmente é definido através de

$$-\beta H = NK \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.1.1)$$

com $\beta = 1/k_B T$ e onde $\langle i, j \rangle$ indica soma nos primeiros vizinhos. Os spins \vec{S}_i são vetores de N componentes, que somente podem apontar ao longo das direções positiva e negativa dos eixos de um hipercubo em N dimensões, isto é, $\vec{S}_i = (\pm 1, 0, 0, \dots)$, $(0, \pm 1, 0, \dots)$. O modelo também pode ser definido, de modo alternativo, associando-se a cada sítio i duas variáveis discretas: uma variável de eixo, $\alpha_i = 1, 2, \dots, N$ e a variável de Ising $\sigma_i = \pm 1$. Desse modo, a Hamiltoniana da eq. (4.1.1) é equivalente a

$$-\beta H = NK \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\alpha_i, \alpha_j} \sigma_i \sigma_j \quad (4.1.2)$$

Em duas dimensões, o modelo Cúbico discreto está associado à muitos sistemas, principalmente na área de adsorção de monocamadas (para uma revisão, ver ref. 71). Por exemplo, o ordenamento orientacional de moléculas diatômicas adsorvidas em

uma rede triangular⁽⁷²⁾, ver fig. 4.1.1, (como observado no N_2 adsorvido em grafite⁽⁷³⁾) pode ser simulado pelo modelo Cúbico com $N = 3$.

Teoricamente, o modelo cúbico tem sido estudado através de diversas técnicas, como teorias de Campo Médio (CM)⁽⁷⁰⁾, GR do tipo Niemeijer-van Leeuwen^(74a), GR do tipo Migdal⁽⁷⁵⁾, GR variacional⁽⁷⁶⁾ Monte Carlo⁽⁷⁷⁾, invariância conforme⁽⁷⁸⁾ e GR de Monte Carlo⁽⁷⁹⁾.

Uma generalização do modelo Cúbico N-vetorial, com Hamiltoniana adimensional

$$-\beta H = NK \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + N^2 L \sum_{\langle i, j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2, \quad (4.1.3)$$

foi recentemente estudada⁽⁸⁰⁾ em uma rede quadrada, através de um procedimento de GR no espaço real do tipo em que preserva-se funções de correlação. Usando a notação da eq. (4.1.2), a Hamiltoniana da eq. (4.1.3) é equivalente a

$$-\beta H = NK \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j \delta_{\alpha_i \alpha_j} + N^2 L \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\alpha_i \alpha_j}. \quad (4.1.4)$$

Além do fato de que esta extensão do modelo apresenta casos particulares interessantes, uma outra motivação para estudá-la é que, como veremos adiante, a Hamiltoniana dada pela eq. (4.1.3) permanece fechada, para todo N , sob este tipo de GR, enquanto que para a Hamiltoniana da eq. (4.1.1) isto não ocorre.

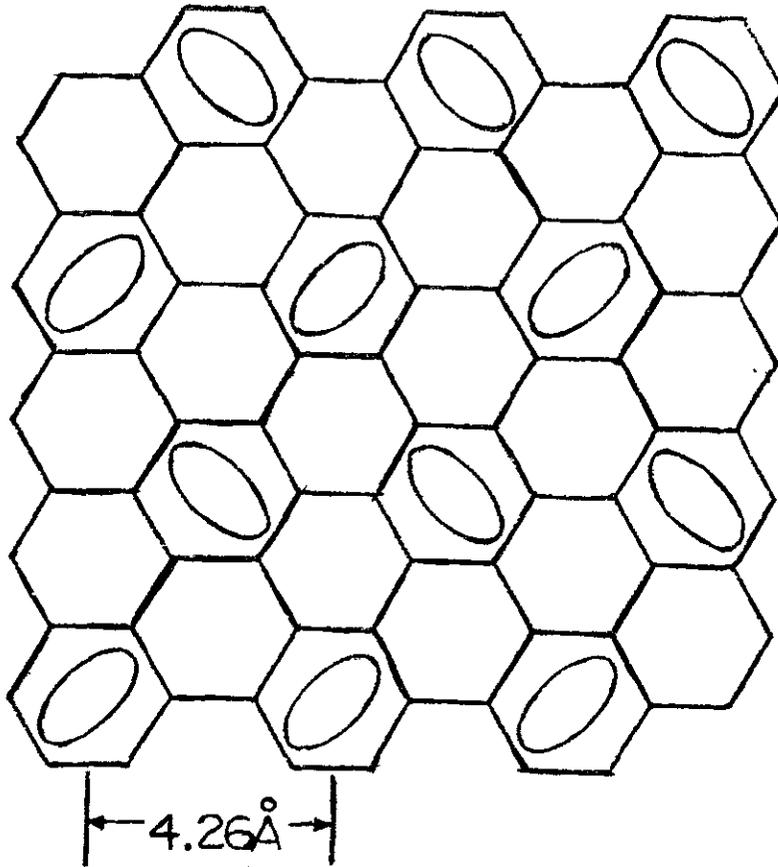


Figura 4.1.1 - Superfície do grafite esfoliado. Moléculas de H₂ (ou D₂) ocupam os sítios com 1/3 de cobertura. As elipses representam as distribuições de probabilidade para os eixos moleculares. Uma das fases ordenadas está representada.

Vamos rever alguns casos particulares e características importantes deste modelo (dado pela eq. (4.1.3) ou eq. (4.1.4), de modo equivalente). Observamos que a Hamiltoniana da eq. (4.1.4), quando $K = 0$, transforma-se na do modelo de Potts de N estados com constante de acoplamento adimensional N^2L . No limite $N \rightarrow 0$, o problema do "self avoiding walk" é obtido⁽⁷⁴⁾, com fugacidade K . Para $N = 1$, a eq. (4.1.4) reduz-se a do modelo de Ising com spin $1/2$ para qualquer valor de L . Para $N = 2$, recupera-se o modelo $Z(4)$ (ver ref. 81 e referências aí contidas). No caso $K = L$, obtém-se o modelo de Potts de $2N$ estados com constante de acoplamento $2NK$. Para K finito e $NL/|K| \rightarrow \infty$, o segundo termo na eq. (4.1.4) torna-se dominante, e um dos N eixos é escolhido preferencialmente; desse modo, o modelo de Ising de spin $1/2$ com constante de acoplamento NK é recuperado.

Mencionamos ainda alguns resultados importantes sobre este modelo. Conjectura-se⁽⁷⁷⁾ que a abordagem de Campo Médio é exata no limite $N \rightarrow \infty$, se $L = 0$. De modo semelhante ao que acontece para o ferromagneto de Potts, espera-se que ocorra uma transição de primeira ordem (em uma rede de Bravais) para $N > N_c$. A teoria de Campo Médio prevê⁽⁷⁰⁾ que o modelo da eq. (4.1.2), para $d = 3$, exhibe uma transição de primeira ordem para $N > 3$; resultados de expansão em série⁽⁸²⁾ indicam que já para $N = 3$ a transição é de primeira ordem. Para o modelo da eq. (4.1.4), $d = 3$, ocorrem várias transições (como veremos mais adiante), que correspondem a diferentes classes de universalidade: a de Potts de $2N$ estados, que é de primeira ordem para $2N \gtrsim 3$, a de Potts de N estados, que é de primeira ordem para $N \gtrsim 3$, a Cúbica, cuja natureza acredita-se⁽⁸³⁾ que

depende da razão das constantes de acoplamento L/K , quando $1.1 < N < 3.4$ e é de primeira ordem para valores maiores de N . Nós não nos preocuparemos aqui com transições de fase de primeira ordem, as quais foram estudadas, para $d = 2$, empregando a técnica de vacâncias no contexto de GR⁽⁸³⁾. O GR que usaremos mais adiante é exato para redes hierárquicas, que não apresentam transições de primeira ordem para o modelo Cúbico. Assim, os resultados serão relevantes para redes de Bravais somente para $N \leq N_c$ (N_c dependendo da transição em questão).

Vamos fazer uma revisão, brevemente, do diagrama de fases para o sistema em duas dimensões (que é qualitativamente igual ao do caso tridimensional, como será mostrado mais adiante). O diagrama apresenta três fases distintas. Para valores pequenos de K e L , temos a fase *paramagnética*, onde os spins \vec{S}_i estão desordenados. Para valores relativamente grandes de K e L , surge a fase *ferromagnética* (neste caso os spins \vec{S}_i estão preferencialmente ordenados ao longo de uma das $2N$ direções). Para valores pequenos de K e intermediários de L , surge uma nova fase, a fase *intermediária*, onde os spins \vec{S}_i estão preferencialmente alinhados ao longo de um dos N eixos do hipercubo, mas não existe preferência no que concerne à orientação ao longo deste eixo. Na fig. 4.1.2.a mostramos o diagrama de fases obtido⁽⁸³⁾ para o modelo cúbico em uma rede quadrada ($N = 3$). Mostramos também, na fig. 4.1.2.b. um diagrama de fases típico (para uma rede hierárquica "ponte de Wheatstone", $N = 2$), obtido na ref. 80, onde uma variável

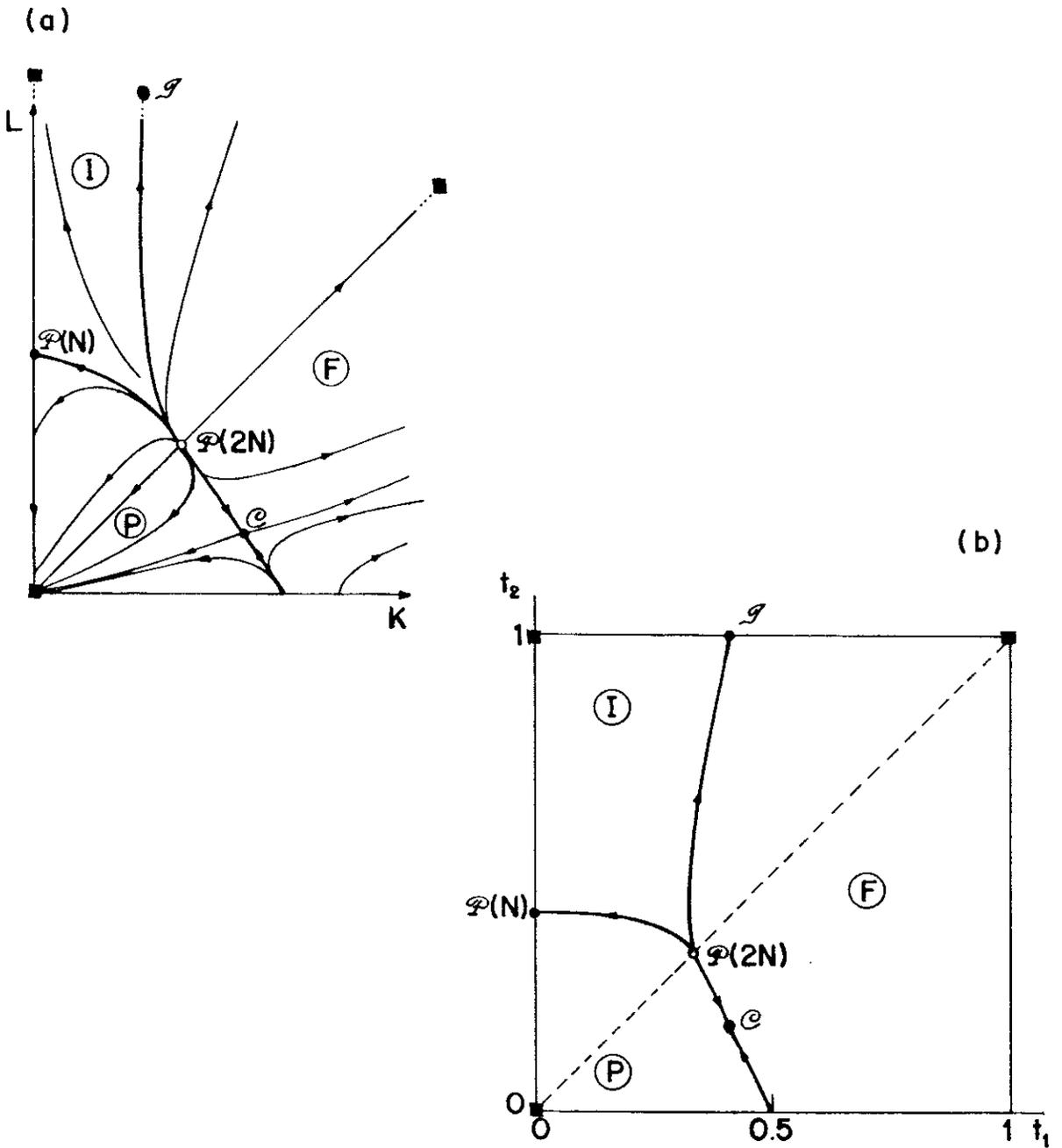


Figura 4.1.2 - Diagrama de fases para o ferromagneto Cúbico, (a) $N = 3$, em uma rede quadrada: P, F e I respectivamente denotam as fases paramagnética, ferromagnética e intermediária; (b) $N = 2$, em uma rede hierárquica (ponte de Wheatstone), no espaço (t_1, t_2) . As setas indicam o fluxo do GR; \blacksquare , \bullet e \circ respectivamente denotam os pontos fixos completamente estáveis, semi-estáveis e completamente instáveis.

conveniente foi utilizada, o vetor transmissividade térmica (t_1, t_2) (ver ref. 80 e referências aí contidas), com

$$t_1 \equiv \frac{1 - e^{-2NK}}{1 + 2(N-1)e^{-N(K+NL)} + e^{-2NK}} \quad \text{a)}$$

$$t_2 \equiv \frac{1 - 2e^{-N(K+NL)} + e^{-2NK}}{1 + 2(N-1)e^{-N(K+NL)} + e^{-2NK}} \quad \text{b)}$$

(4.1.5)

Mostramos também as relações inversas, que serão úteis mais adiante:

$$e^{-N(K+NL)} = \frac{1 - t_2}{1 + Nt_1 + (N-1)t_2} \quad \text{a)}$$

$$e^{-2NK} = \frac{1 - Nt_1 + (N-1)t_2}{1 + Nt_1 + (N-1)t_2} \quad \text{b)}$$

(4.1.6)

A existência de três fases distintas é bem conhecida para $N = 2$ (modelo Z(4)). Esta estrutura do diagrama de fases permanece a mesma (de acordo com o formalismo de GR utilizado nas refs. 80 e 83) para todos os valores de N , incluindo $N \leq 1$, onde deve ser considerada como um artifício matemático. De fato, para $N = 1$ (modelo de Ising) a fronteira crítica P-I deve ser considerada espúria, já que para este modelo somente duas fases distintas existem: a ferromagnética (F) e a paramagnética (P e I).

No contexto do GR⁽⁸⁰⁾⁽⁸³⁾, os atratores (pontos fixos triviais), das fases paramagnética, ferromagnética e intermediária estão localizados respectivamente em $(t_1, t_2) = (0,0)$, $(1,1)$ e $(0,1)$, que correspondem a $(K,L) = (0,0)$, (∞,∞) e

$(0, \infty)$. O ponto fixo semi-estável I (ver fig. 4.1.2), que corresponde à transição da fase intermediária para a ferromagnética (nesta transição os spins \vec{S} preferencialmente alinham-se em um sentido ao longo de um eixo previamente escolhido), está associado ao comportamento crítico de Ising. De modo semelhante, os outros dois pontos fixos semi-estáveis neste diagrama, $P(N)$ (ponto fixo de Potts de N estados) e C (ponto fixo Cúbico) são respectivamente associados a transições da fase paramagnética para a intermediária (um dos N eixos é escolhido) e da fase paramagnética para a ferromagnética (um eixo e um sentido neste eixo é escolhido). O ponto fixo completamente instável $P(2N)$ ($t_1 = t_2$) corresponde a $K = NL$; assim, como já mencionamos, temos o comportamento crítico do modelo de Potts de $2N$ estados. Para $N > N^*$, ocorre uma troca de papéis, no que diz respeito à estabilidade, entre os pontos fixos C e $P(2N)$ ⁽⁸³⁾.

4.2 - O Ferromagneto Cúbico em Rede Semi-infinita

Neste trabalho consideramos o ferromagneto Cúbico discreto (dado pela Hamiltoniana da eq. (4.1.3) em uma rede cúbica semi-infinita com superfície livre $(0,0,1)$. As interações entre primeiros vizinhos são caracterizadas por constantes de acoplamento K_s e L_s ($K_s > 0$ e $K_s + NL_s > 0$) se ambos os sítios i e j pertencem a superfície, e por K_B e L_B ($K_B > 0$ e $K_B + NL_B > 0$) em qualquer outra situação.

A presença de uma superfície neste problema introduz novas possibilidades de ordem. Em geral, este ordenamento dependerá das razões das constantes de acoplamento de

superfície e de volume. Por exemplo, para o ferromagneto de Ising em uma rede cúbica com superfície livre (0,0,1), um dos parâmetros que determina o tipo de ordem é $\Delta \equiv K_s/K_B - 1$, como vimos no capítulo anterior (ver o diagrama de fases para este sistema na fig. 3.1.1). Se em um ferromagneto semi-infinito de Ising consideramos, em lugar do parâmetro de ordem (como no capítulo 3), o comprimento de correlação, esperamos os seguintes expoentes críticos: enquanto o comprimento de correlação do volume diverge como $|T - T_c^B|^{-\nu^{3D}}$ para todos os valores de Δ , o comprimento de correlação de superfície diverge, sobre a linha P-BF ($\Delta < \Delta_c$), como $|T - T_c^B|^{-\nu^1}$ e sobre a linha P-SF ($\Delta > \Delta_c$) como $|T - T_c^S(\Delta)|^{-\nu^{2D}}$. Além disso, o comprimento de correlação de superfície pode apresentar uma singularidade suave sobre a linha BF-SF ($\Delta > \Delta_c$). Na vizinhança do ponto multicrítico ($\Delta \rightarrow \Delta_c + 0$), espera-se que $(T_c^S(\Delta)/T_c^B - 1) \propto (\Delta/\Delta_c - 1)^{1/\phi}$, o que define o expoente de crossover ϕ . Aqui obteremos os expoentes térmicos associados a transições de volume (ν^{3D}) e a transições de superfície (ν^{2D}), além dos expoentes de crossover ϕ nos pontos multicríticos.

Para obter o diagrama de fases para o modelo Cúbico no espaço quadridimensional (K_B, L_B, K_s, L_s), consideramos as transformações de GR da fig. 4.2.1 (células tipo diamante), similarmente ao tratamento de Migdal-Kadanoff utilizado por Domany e Riedel⁽⁷⁵⁾. As transformações da fig. 4.2.1 mostraram-se satisfatórias para tratar o problema de magnetismo de superfície no modelo de Potts⁽⁵⁹⁾. O maior grafo (de dois terminais) mostrado na fig. 4.2.1.a simula através do procedimento padrão de "bond-moving", o volume da rede cúbica. O maior grafo da fig. 4.2.1.b simula, do mesmo modo, a região

superficial do sistema, onde as ligações pontilhadas representam as interações na superfície livre. O grafo da fig. 4.2.1.b pode ser visto como o da fig. 4.2.1.a com seus dois terminais na superfície livre, nove ligações (ausentes) no vácuo, nove na superfície e nove no volume.

As relações de recorrência para (K_B, L_B, K_s, L_s) são obtidas impondo-se que, sob renormalização, a função de correlação entre os terminais dos grafos original e renormalizado seja preservada⁽³¹⁾ (mostrou-se⁽⁸⁰⁾ recentemente que este procedimento está relacionado ao do GR fenomenológico). Para a transformação do volume (fig. 4.2.1.a) obtemos

$$e^{-\beta H'_B{}_{12}} = \text{Tr}_{3, \dots, 20} e^{-\beta H_B{}_{123 \dots 20}} \quad (4.2.1)$$

e, para a transformação de superfície (fig. 4.2.1.b), obtemos

$$e^{-\beta H'_s{}_{12}} = \text{Tr}_{3, \dots, 14} e^{-\beta H_s{}_{123 \dots 14}} \quad (4.2.2)$$

com

$$-\beta H'_B{}_{12} = NK'_B \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + N^2 L'_B (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)^2 + K_B^0 \quad (\text{a}) \quad (4.2.3)$$

associada ao grafo G'_1 ,

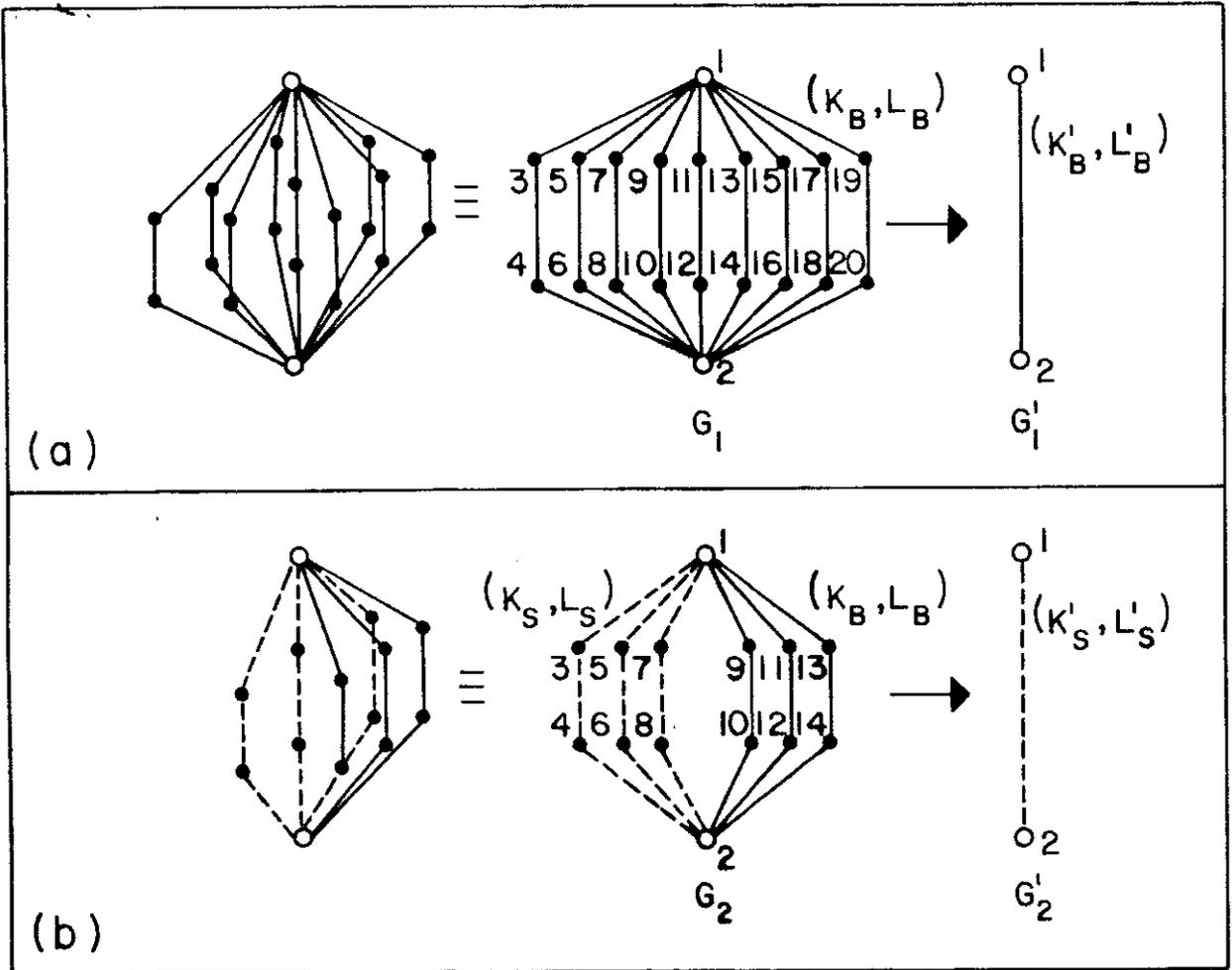


Figura 4.2.1 - Células da transformação de GR (a) para o volume (cada ligação é associada a constantes de acoplamento K_B e L_B) (b) para a região da superfície (cada ligação pontilhada é associada a constantes de acoplamento K_S e L_S).

$$\begin{aligned}
 -\beta H_{B_{123\dots 20}} &= NK_B (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_5 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_7 + \dots + \vec{S}_{20} \cdot \vec{S}_2) \\
 &+ N^2 L_B ((\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_5)^2 + (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_7)^2 + \dots + (\vec{S}_{20} \cdot \vec{S}_2)^2) \quad (b)
 \end{aligned}$$

associada ao grafo G_1 ,

$$-\beta H'_{s_{12}} = N K'_s (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) + N^2 L'_s (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)^2 + K_s^0 \quad (c)$$

associada ao grafo G'_2 e

$$\begin{aligned}
 -\beta H_{s_{123\dots 14}} &= NK_s (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_5 + \dots + \vec{S}_{14} \cdot \vec{S}_2) \\
 &+ N^2 L_s ((\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3)^2 + (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_5)^2 + \dots + (\vec{S}_{14} \cdot \vec{S}_2)^2) + \\
 &NK_B (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_9 + \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_{11} + \dots + \vec{S}_{14} \cdot \vec{S}_2) + \\
 &N^2 L_B ((\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_9)^2 + (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_{11})^2 + \dots + (\vec{S}_{14} \cdot \vec{S}_2)^2) \quad (d)
 \end{aligned}$$

associada ao grafo G_2 , onde K_B^0 e K_s^0 são constantes a serem determinadas.

As eqs. (4.2.1) e (4.2.2) determinam as relações de recorrência para K_B , L_B , K_s e L_s . Estas relações podem ser obtidas de modo equivalente usando o vetor transmissividade térmica definido na eq. (4.1.5). De fato, na prática nós obtivemos os vetores transmissividade de volume e de superfície equivalentes para o nosso sistema, usando as regras de composição em série e em paralelo e a definição do dual das transmissividades⁽⁸⁰⁾. Vamos resumir estas definições aqui. Para duas ligações em série (ligações 1 e 2), o vetor

transmissividade equivalente é dado através de:

$$t_{ru}^{(s)} = t_{ru}^{(1)} t_{ru}^{(2)} \quad (4.2.4)$$

onde $r = 1, 2$ denota a componente do vetor transmissividade e $u = B, s$ indica se a transmissividade está associada ao volume (B) ou à superfície (s). Para uma composição em paralelo das duas ligações, sabemos que a mesma relação é válida para o vetor transmissividade equivalente, se trocamos todas as variáveis pelos seus duais:

$$\left(t_{ru}^{(p)} \right)^D = \left(t_{ru}^{(1)} \right)^D \left(t_{ru}^{(2)} \right)^D, \quad (4.2.5)$$

onde

$$t_{1u}^D = \frac{1 - Nt_{1u} + (N-1)t_{2u}}{1 + Nt_{1u} + (N-1)t_{2u}} \quad \text{a)} \quad (4.2.6)$$

$$t_{2u}^D = \frac{1 - t_{2u}}{1 + Nt_{1u} + (N-1)t_{2u}} \quad \text{b)}$$

Para a transformação do volume (fig. 4.2.1.a) obtemos então:

$$\frac{1 - t'_{2B}}{1 + Nt'_{1B} + (N-1)t'_{2B}} = \left(\frac{1 - t_{2B}^3}{1 + Nt_{1B}^3 + (N-1)t_{2B}^3} \right)^9 \quad \text{a)}$$

e (4.2.7)

$$\frac{1 - Nt'_{1B} + (N-1)t'_{2B}}{1 + Nt'_{1B} + (N-1)t'_{2B}} = \left(\frac{1 - Nt_{1B}^3 + (N-1)t_{2B}^3}{1 + Nt_{1B}^3 + (N-1)t_{2B}^3} \right)^9 \quad \text{b)}$$

e, para a transformação de superfície (fig. 4.2.1b) obtemos

$$\frac{1 - t'_{2s}}{1 + Nt'_{1s} + (N-1)t'_{2s}} = \left(\frac{1 - t_{2s}^3}{1 + Nt_{1s}^3 + (N-1)t_{2s}^3} \right)^3 \left(\frac{1 - t_{2B}^3}{1 + Nt_{1B}^3 + (N-1)t_{2B}^3} \right)^3 \quad \text{a)}$$

e (4.2.8)

$$\frac{1 - Nt'_{1s} + (N-1)t'_{2s}}{1 + Nt'_{1s} + (N-1)t'_{2s}} = \left(\frac{1 - Nt_{1s}^3 + (N-1)t_{2s}^3}{1 + Nt_{1s}^3 + (N-1)t_{2s}^3} \right)^3 \left(\frac{1 - Nt_{1B}^3 + (N-1)t_{2B}^3}{1 + Nt_{1B}^3 + (N-1)t_{2B}^3} \right)^3 \quad \text{b)}$$

Iterando $(t'_{1B}, t'_{2B}, t'_{1s}, t'_{2s})$ como funções de $(t_{1B}, t_{2B}, t_{1s}, t_{2s})$, dadas pelas eqs. (4.2.7) e (4.2.8), obtemos para N fixo, o fluxo do GR, o qual determina os pontos fixos e o diagrama de fases, assim como as classes de universalidade e os expoentes críticos correspondentes. Para obter os expoentes térmicos e o de crossover ϕ , calculamos o Jacobiano $\partial (t'_{1B}, t'_{2B}, t'_{1s}, t'_{2s}) / \partial (t_{1B}, t_{2B}, t_{1s}, t_{2s})$ nos diversos pontos fixos (críticos): completamente instáveis ou semi-estáveis. Em geral, fazemos este cálculo em planos

invariantes, para os quais o Jacobiano correspondente é uma matriz 2×2 . Sendo λ_1 e λ_2 seus autovalores, temos:

(i) para os pontos fixos semi-estáveis, $\lambda_1 > 1 > \lambda_2$, e

$$v = \frac{\ln B}{\ln \lambda_1} \quad (4.2.9)$$

onde B é o fator da expansão linear (para a nossa transformação, $B = 3$);

(ii) para os pontos fixos completamente instáveis, $\lambda_1 > 1$ e $\lambda_2 > 1$, e

$$v_s = \frac{\ln B}{\ln \lambda_s} \quad (s = 1, 2) \quad (4.2.10)$$

$$\phi = \frac{\ln \lambda_2}{\ln \lambda_1} \quad (4.2.11)$$

onde $\lambda_1 > \lambda_2$. Como mencionamos antes, o expoente crítico térmico corresponderá ao comprimento de correlação de volume ou de superfície de acordo com a natureza do ponto fixo para o qual foi calculado.

4.3 - Resultados

Para valores arbitrários finitos de N , encontramos os seguintes pontos fixos $(t_{1B}^*, t_{2B}^*, t_{1s}^*, t_{2s}^*)$ completamente estáveis:

- (i) $(0,0,0,0)$, que corresponde a $K_B = L_B = K_s = L_s = 0$, caracterizando a *fase paramagnética (P)*.
- (ii) $(1,1,1,1)$, que corresponde a $K_B = L_B = K_s = L_s \rightarrow \infty$, caracterizando a *fase ferromagnética de volume (BF)*. Tanto o volume quanto a superfície têm seus spins alinhados preferencialmente ao longo de um eixo e em um sentido neste eixo.
- (iii) $(0,1,0,1)$, que corresponde a $K_B = 0$, $L_B \rightarrow \infty$, $K_s = 0$ e $L_s \rightarrow \infty$, caracterizando a *fase intermediária de volume (BI)*. Tanto o volume quanto a superfície têm seus spins preferencialmente alinhados ao longo de um eixo, sem restrição quanto à orientação ao longo deste eixo.
- (iv) $(0,1,1,1)$, que corresponde a $K_B = 0$, $L_B \rightarrow \infty$, $K_s = \infty$ e $L_s \rightarrow \infty$, caracterizando a *fase ferromagnética de superfície/intermediária de volume (SFBI)*. Nesta fase, a superfície permanece ferromagneticamente ordenada enquanto o volume mantém somente a ordem intermediária.
- (v) $(0,0,1,1)$, que corresponde a $K_B = 0$, $L_B = 0$, $K_s \rightarrow \infty$, $L_s \rightarrow \infty$, caracterizando a *fase ferromagnética de superfície (SF)*. Nesta fase o volume é paramagnético enquanto a superfície está ordenada ferromagneticamente.

(vi) $(0,0,0,1)$, que corresponde a $K_B = 0$, $L_B = 0$, $K_s = 0$ e $L_s \rightarrow \infty$, caracterizando a fase intermediária de superfície (SI). Nesta fase a superfície mantém a ordem intermediária e o volume é paramagnético.

Observamos que não é possível a superfície estar em uma fase menos ordenada que a fase correspondente do volume: a ordem do volume induz ordem na superfície (enquanto o contrário não é verdade).

Para valores finitos arbitrários de N , os subespaços $t_{1B} = 0$, $t_{2s} = 1$ e $t_{2B} = 1$ permanecem invariantes sob renormalização. Estes cubos invariantes são mostrados (para $N = 2$) nas figs. 4.3.1, 4.3.2, 4.3.3, respectivamente. Como usamos as transmissividades, uma região não-física (correspondendo a valores complexos das constantes de acoplamento) aparece nestas figuras. Esta região não física é dada através das condições (ver eqs. (4.1.6)):

$$1 \pm Nt_{1B} + (N-1)t_{2B} < 0 \quad \text{a)}$$

$$1 \pm Nt_{1s} + (N-1)t_{2s} < 0 \quad \text{b)}$$

(4.3.1)

$$1 - t_{2B} < 0 \quad \text{c)}$$

$$1 - t_{2s} < 0 \quad \text{d)}$$

Quando $t_{1B} = 0$ ($K_B = 0$), temos apenas o segundo termo na Hamiltoniana de volume. Isto significa que temos o modelo de Potts de N estados no volume e o modelo cúbico na superfície.

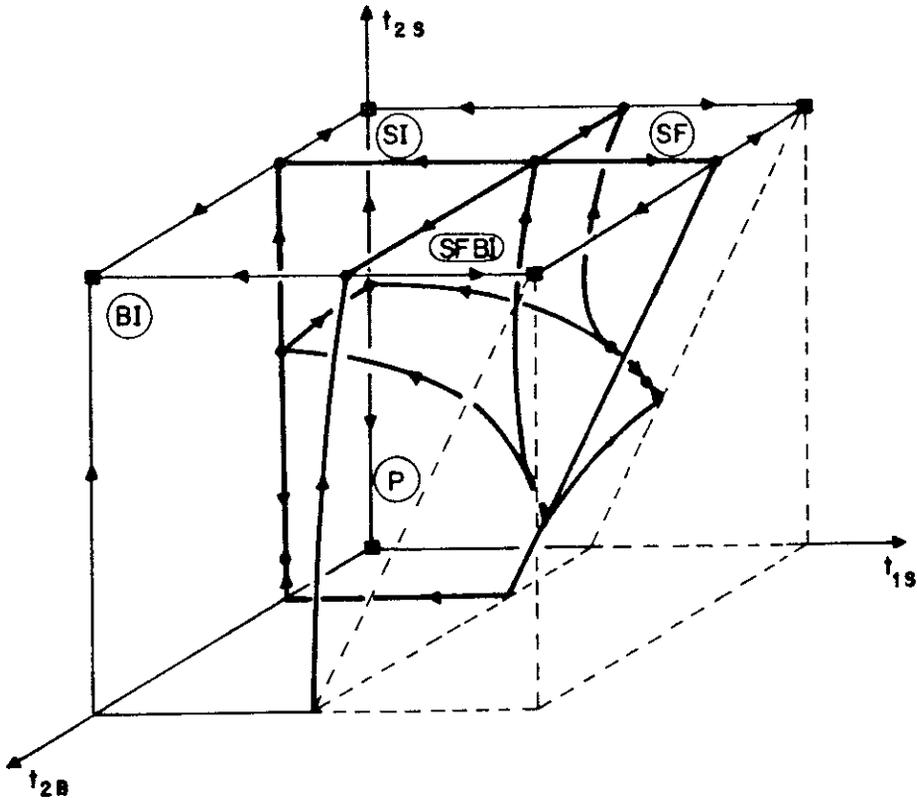


Figura 4.3.1 - Cubo $t_{1B} = 0$ ($N = 2$). Toda a região limitada pelas linhas pontilhadas é não-física. Os fluxos do GR estão indicados; ■, ● e ○ denotam, respectivamente, pontos fixos completamente estáveis, semi-estáveis e completamente instáveis.

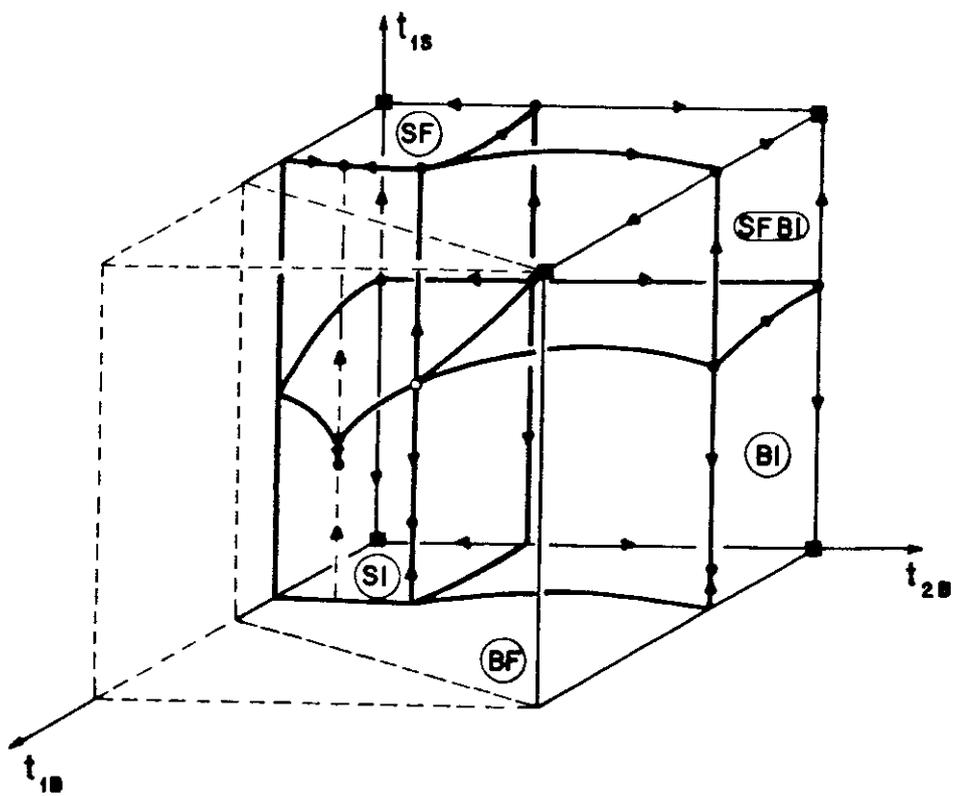


Figura 4.3.2 - Cubo $t_{2s} = 1$ ($N = 2$).

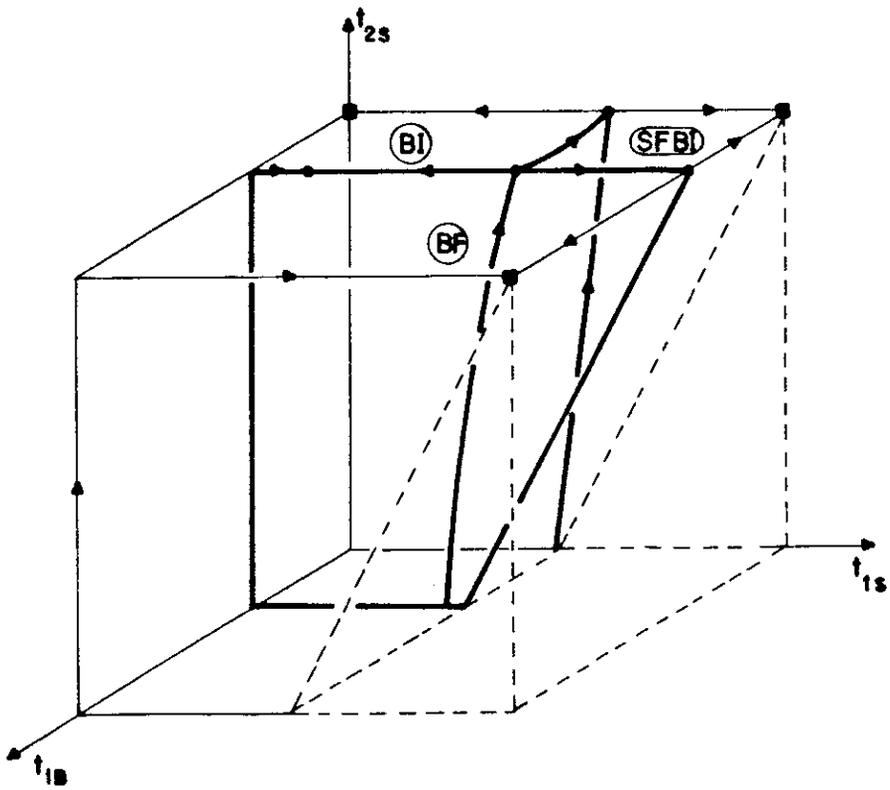


Figura 4.3.3 - Cubo $t_{2B} = 1$ ($N = 2$).

Este caso é bastante interessante, já que pode-se aplicá-lo para descrever um sistema semi-infinito de Potts com adsorção de uma monocamada na superfície livre. Cinco fases estão presentes no cubo unitário da fig. 4.3.1 ($t_{1B} = 0$): as fases P, BI, SFBI, SF e SI. Através desta figura observamos que os comportamentos críticos associados a todos os pontos críticos localizados no interior do cubo são governados pelos pontos fixos (críticos) localizados nas "paredes" $t_{2B} = 0$, $t_{1s} = 0$ e $t_{2s} = 1$.

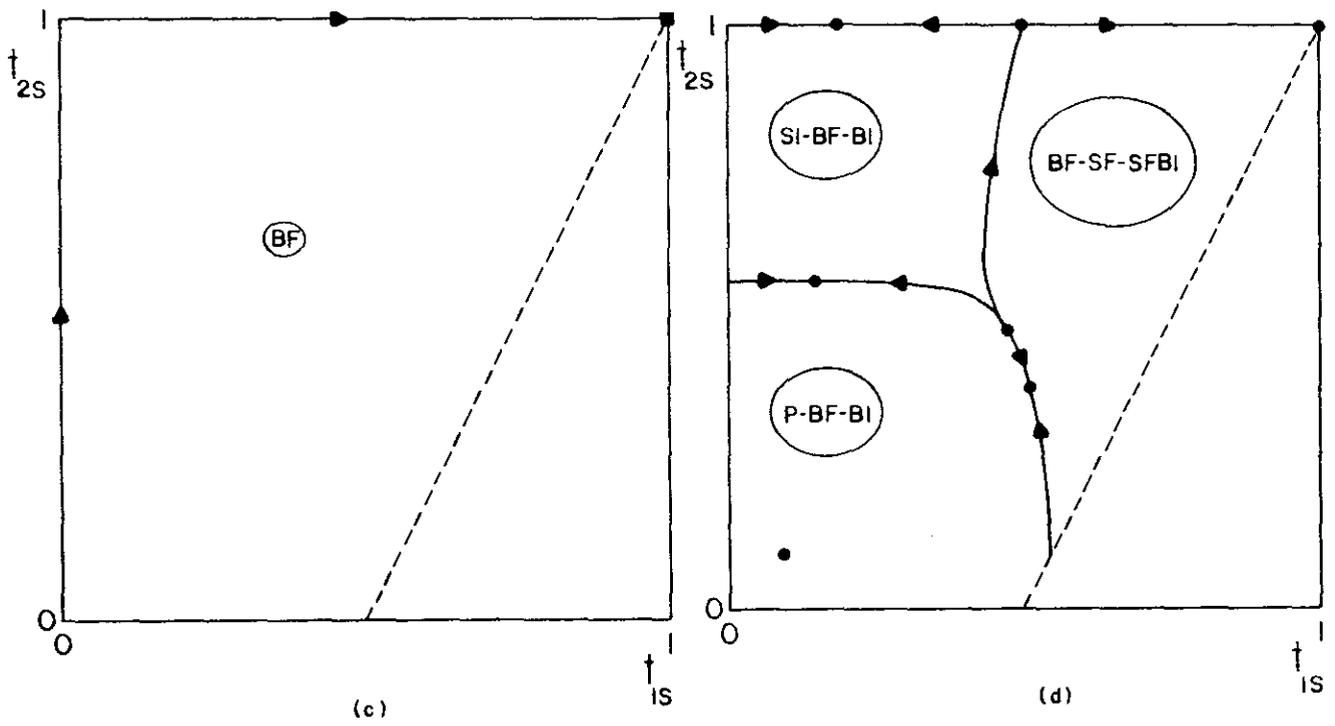
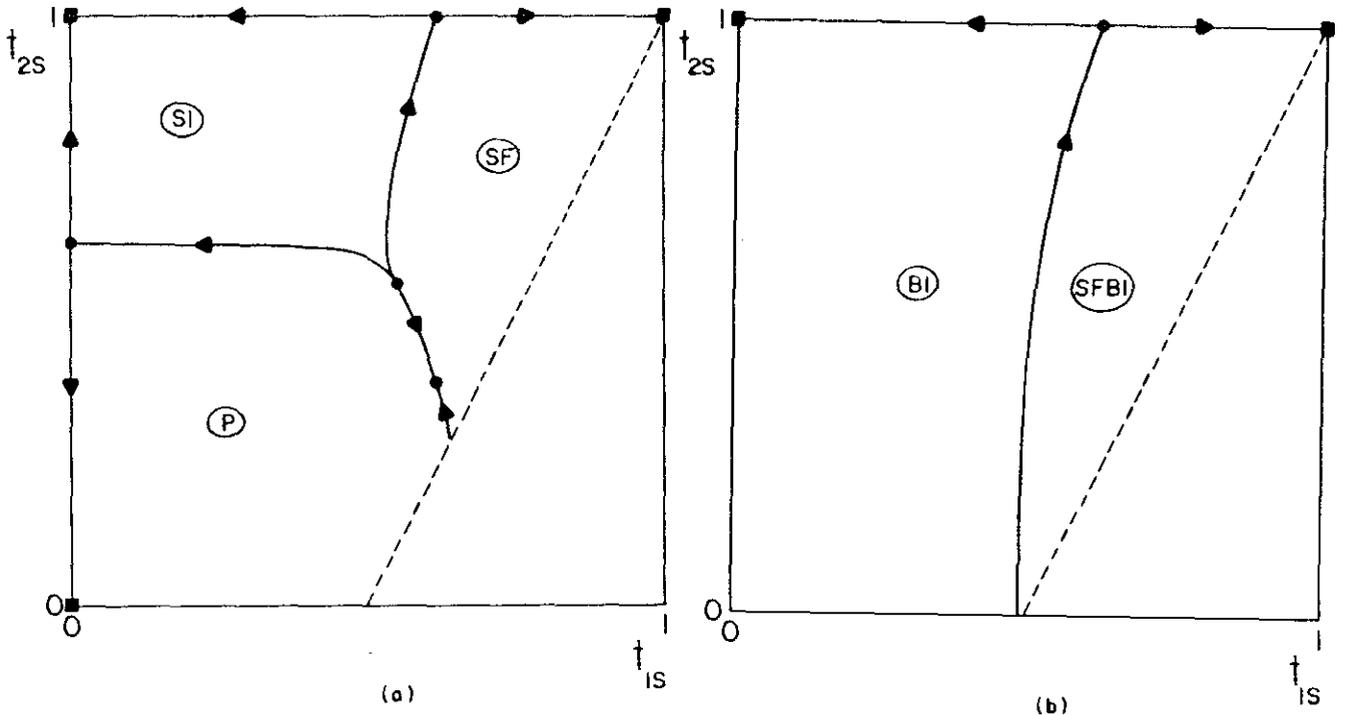
Quando $t_{2s} = 1$ ($L_s \rightarrow \infty$), o segundo termo da Hamiltoniana de superfície é dominante, implicando em que todos os spins de superfície estão alinhados ao longo de um dado eixo. O modelo de Ising (spin 1/2) é recuperado na superfície enquanto o volume continua associado ao modelo Cúbico. Cinco fases estão presentes no cubo unitário da fig. 4.3.2 ($t_{2s} = 1$): as fases SF, SFBI, SI, BI e BF. Mencionamos que neste cubo existe uma linha invariante $t_{1B} = t_{2B} \approx 0.31$, onde, para todos os valores de t_{1s} , três fases se encontram (as fases SF/SFBI/BF ou SI/BI/BF). Ao longo desta linha temos um ponto fixo completamente instável $(t_{1B}^*, t_{2B}^*, t_{1s}^*, t_{1s}^*) = (0.31, 0.31, 0.49, 0.49)$ onde as cinco fases presentes no cubo se encontram.

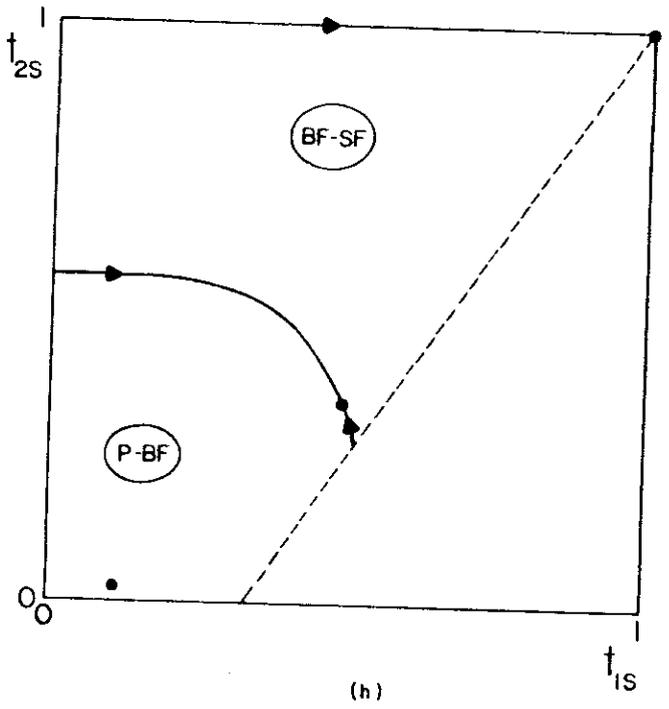
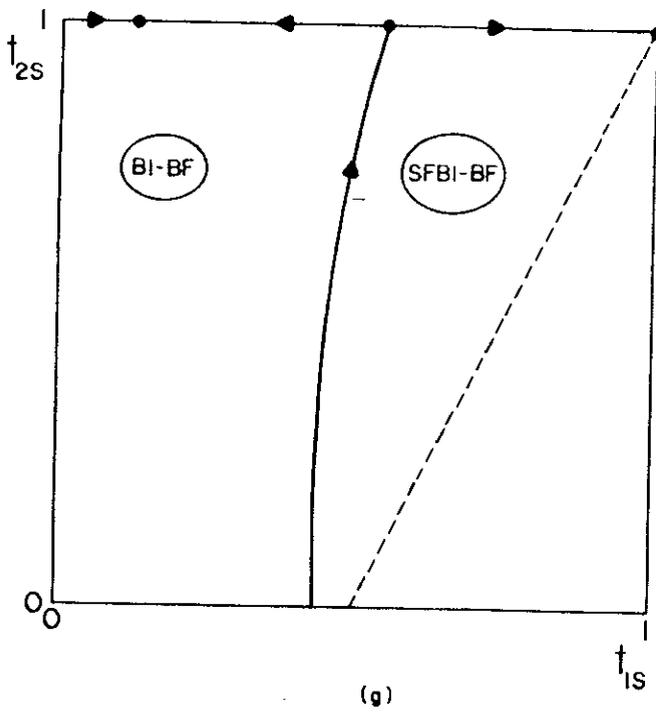
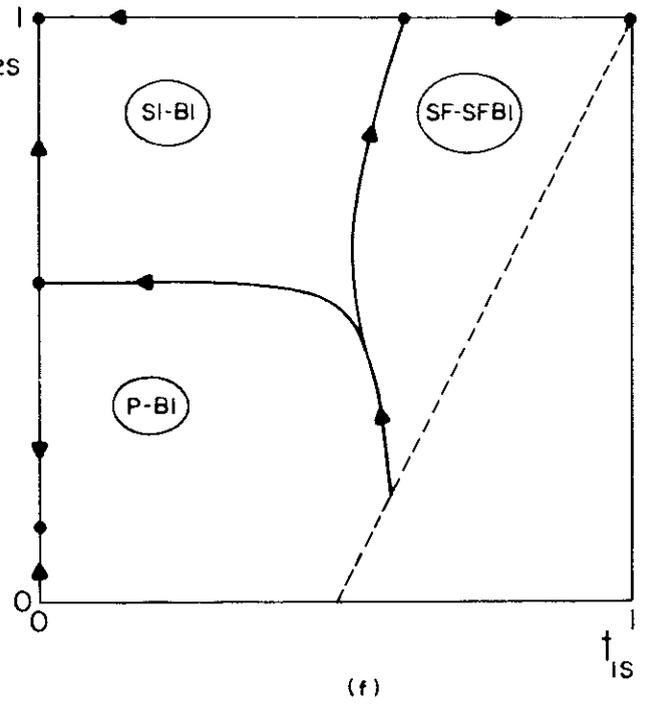
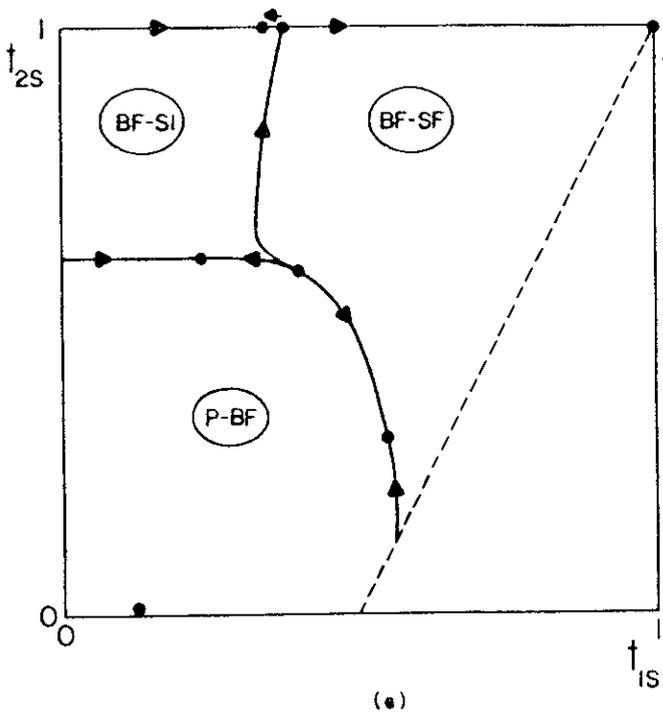
Quando $t_{2B} = 1$ ($L_B \rightarrow \infty$), o segundo termo da Hamiltoniana de volume é dominante, implicando em que todos os spins do volume estão alinhados ao longo de um eixo. Neste caso, a superfície permanece associada ao modelo Cúbico enquanto recuperamos o modelo de Ising de spin 1/2 para o volume. Assim, as fases correspondentes ao volume completamente desordenado não aparecem no cubo da fig. 4.3.3 ($t_{2B} = 1$), aparecem somente as fases BI, BF e SFBI. Mencionamos que, para

este cubo unitário, o plano $t_{2B} = 1$, $t_{2s} = 0$ é levado, na primeira iteração de GR, no plano $t_{2s} = t_{2B} = 1$.

Na tab. 4.3.1 apresentamos, para valores típicos de N , estimativas para o expoente crítico térmico (ν^{3D} , ν^{2D}) para os pontos fixos (críticos) que governam as diferentes transições neste sistema. Destes valores observamos que as transições SI-SF e SFBI-BI pertencem, para todo N , à mesma classe de universalidade, a de Ising em uma superfície. Analogamente, as transições BF-BI e BF-SFBI pertencem à classe de universalidade de Ising em um volume. Para um dado N , as transições SF-SFBI, BI-SI e BI-P pertencem à classe de universalidade de um volume de Potts de N estados. Analogamente, as transições BF-SF e P-BF, para um dado N , pertencem à classe de universalidade do modelo Cúbico N -vetorial em um volume.

Para qualquer valor finito de N temos uma classe de planos invariantes que têm origem nos pontos fixos do volume (ver tab. 4.3.2). Isto se deve ao fato de que as relações de recorrência para t'_{1B} e t'_{2B} envolvem somente as variáveis t_{1B} e t_{2B} . Mostramos estes planos invariantes na fig. 4.3.4, para $N = 2$. Os pontos fixos de volume completamente estáveis (t_{1B} , t_{2B}) = (0,0), (0,1) e (1,1) dão origem respectivamente aos diagramas de fase (a), (b) e (c) na figura. Identificamos estes planos como "paredes" do cubo $t_{1B} = 0$ (planos (a) e (b)) e do cubo $t_{2B} = 1$ (plano (c)). Os pontos fixos (críticos) de volume, $P(2N)$, C , $P(N)$ e I dão origem, respectivamente aos planos (d), (e), (f) e (g) na figura. Estes planos fazem parte da





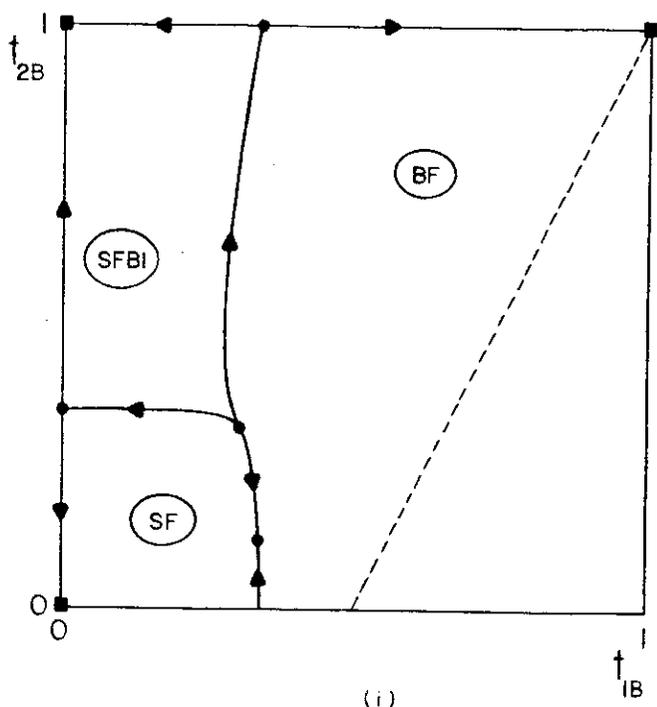


Figura 4.3.4 - Planos invariantes gerados pelos pontos fixos do volume infinito. Diagramas de fase ($N = 2$) correspondentes a (a) $(t_{1B}, t_{2B}) = (0,0)$; (b) $(t_{1B}, t_{2B}) = (0,1)$ e (c) $(t_{1B}, t_{2B}) = (1,1)$ (as fases presentes estão indicadas). Regiões críticas ($N = 2$) correspondentes a (d) $(t_{1B}, t_{2B}) = P(2N)$; (e) $(t_{1B}, t_{2B}) = C$; (f) $(t_{1B}, t_{2B}) = P(N)$ e (g) $(t_{1B}, t_{2B}) = I$ (as transições associadas estão indicadas). (h) Região crítica ($N = 3$), correspondente a $(t_{1B}, t_{2B}) = C$. (i) Diagrama de fases ($N = 2$) correspondente a $(t_{1s}, t_{2s}) = (1,1)$. A região não-física está à direita das linhas pontilhadas.

hipersuperfície crítica no espaço quadridimensional (t_{1B} , t_{2B} , t_{1s} , t_{2s}). Nestes planos, cada região está associada a uma superfície crítica separando duas ou mais fases (as transições correspondentes estão indicadas na figura). Notamos que no plano da fig. 4.3.4 (e) aparece pela primeira vez a transição P-BF e o ponto fixo (crítico) que a caracteriza (ver tab.4.3.1). A estrutura deste plano é diferente dependendo do valor de N , se menor (fig. 4.3.4(e)) ou maior ou igual (fig. 4.3.4(h)) a 3. Observamos que, para $N \geq 3$, a região crítica BF-SI desaparece. O plano da fig. 4.3.4(d) corresponde a superfícies críticas onde coexistem três fases (indicadas na figura). Isto pode ser observado alternativamente no cubo $t_{2s} = 1$, onde ao longo da linha $t_{1B} = t_{2B} = 0.31$ três fases coexistem (SF-SFBI-BF ou SI-BI-BF). Pontos na vizinhança desta linha, que pertençam superfície crítica, são atraídos sob renormalização para pontos fixos nas linhas $(t_{1B}, t_{2B}) = (0.34, 0.12)$, $(t_{1B}, t_{2B}) = (0, 0.34)$ ou $(t_{1B}, t_{2B}) = (0.34, 1)$. Isto indica que, dentro da hipersuperfície crítica o plano da fig. 4.3.4(d) é instável com respeito as variáveis t_{1B} e t_{2B} , enquanto os planos das figs. 4.3.4 (e), (f) e (g) são estáveis.

Para valores finitos arbitrários de N , temos também o plano invariante $t_{1s} = t_{2s}$ ($K_s, L_s \rightarrow \infty$), correspondendo a situação em que a superfície está completamente ordenada. Este plano é apresentado na fig. 4.3.4(i), para $N = 2$.

Vamos considerar ainda uma outra classe de planos invariantes, onde estão envolvidas variáveis de volume e de superfície. Estes planos estão na fig. 4.3.5 ($N = 2$), onde: (a)

TRANSIÇÃO	N = 1	N = 2	N = 3	N → ∞
SI - SF	(0, 0, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$	(0, 0, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$	(0, 0, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$	(0, 0, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$
SF - SFBI	(0, 0.37, 1, 1) $U^{3D}=1.24$	(0, 0.34, 1, 1) $U^{3D}=1.08$	(0, 0.32, 1, 1) $U^{3D}=0.99$	(0, 0, 1, 1) ~
SFBI - BI	(0, 1, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$	(0, 1, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$	(0, 1, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$	(0, 1, 0.62, 1) $U^{2D}=1.35$
BI - SI	(0, 0.37, 0, 1) $U^{3D}=1.24$	(0, 0.34, 0, 1) $U^{3D}=1.08$	(0, 0.32, 0, 1) $U^{3D}=0.99$	(0, 0, 0, 1) ~
P - BI	(0, 0.37, 0, 0.15) $U^{3D}=1.24$ (1.20 ^a) (0.88 ^a)	(0, 0.34, 0, 0.12) $U^{3D}=1.08$ (1.04 ^b) (0.63 ^b)	(0, 0.32, 0, 0.11) $U^{3D}=0.99$ (0.96 [*])	(0, 0, 0, 0,) ~
P - SI	(0, 0, 0, 0.62) $U^{2D}=1.64$ (1.65 [*]) (4/3 ^c)	(0, 0, 0, 0.62) $U^{2D}=1.35$ (1.37 [*]) (1 ^c)	(0, 0, 0, 0.58) $U^{2D}=1.22$ (1.24 [*]) (5/6 ^c)	(0, 0, 0, 0) ~
P - SF	(0, 0, 0.62, 0.15) $U^{2D}=1.35$	(0, 0, 0.62, 0.36) $U^{2D}=1.35$	(0, 0, 0.56, 0.44) $U^{2D}=1.11$	(0, 0, 0, 0) ~
BF - BI	(0.34, 1, 0.12, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 1, 0.12, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 1, 0.12, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 1, 0.12, 1) $U^{3D}=1.08$
BF - SI	(0.34, 0.05, 0.12, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 0.12, 0.34, 1) $U^{3D}=1.08$	-	-
BF - SFBI	(0.34, 1, 1, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 1, 1, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 1, 1, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 1, 1, 1) $U^{3D}=1.08$
BF - SF	(0.34, 0.05, 1, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 0.12, 1, 1) $U^{3D}=1.08$	(0.32, 0.12, 1, 1) $U^{3D}=0.97$	(0, 0, 1, 1) ~
P - BF	(0.34, 0.05, 0.12, 0.01) $U^{3D}=1.08$	(0.34, 0.12, 0.12, 0.02) $U^{3D}=1.08$	(0.32, 0.17, 0.11, 0.03) $U^{3D}=0.97$	(0, 0, 0, 0) ~

Tabela 4.3.1 - Evolução com N dos pontos fixos (t_{1B} , t_{2B} , t_{1s} , t_{2s}) que caracterizam as diferentes transições, com os expoentes ν correspondentes. * indica os valores encontrados na ref. 84, ^a na ref. 85, ^b na ref. 86 e ^c na ref. 87. ~ indica que neste limite houve um colapso entre um ponto fixo instável e um ponto fixo estável.

N	$P(N)$	$P(2N)$	C	I
1	(0, 0.37)	(0.34, 0.34)	(0.34, 0.05)	(0.34, 1)
2	(0, 0.34)	(0.31, 0.31)	(0.34, 0.12)	(0.34, 1)
3	(0, 0.32)	(0.29, 0.29)	(0.33, 0.17)	(0.34, 1)
∞	(0, 0)	(0, 0)	(0, 0)	(0.34, 1)

Tabela 4.3.2 - Pontos fixos para o volume infinito, para diversos valores de N , obtidos através da transformação de GR da Fig. 4.2.1 (a). A troca de estabilidade entre os pontos fixos C e $P(2N)$ ocorre quando $N = N^* \cong 13$, na nossa aproximação.

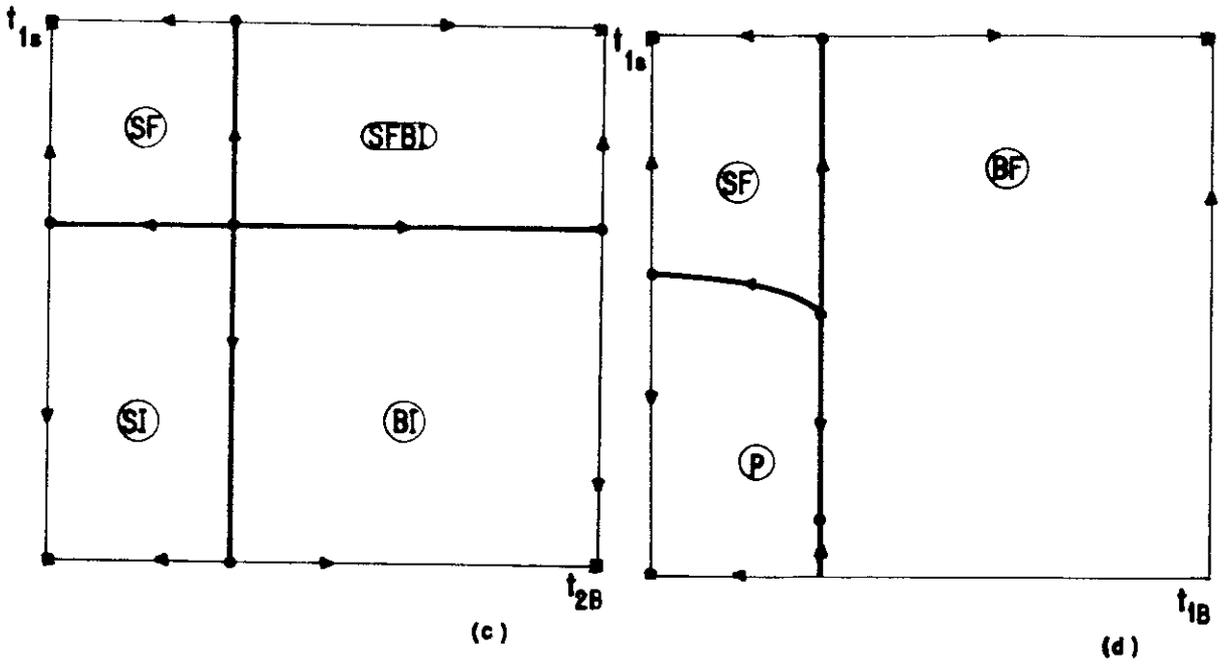
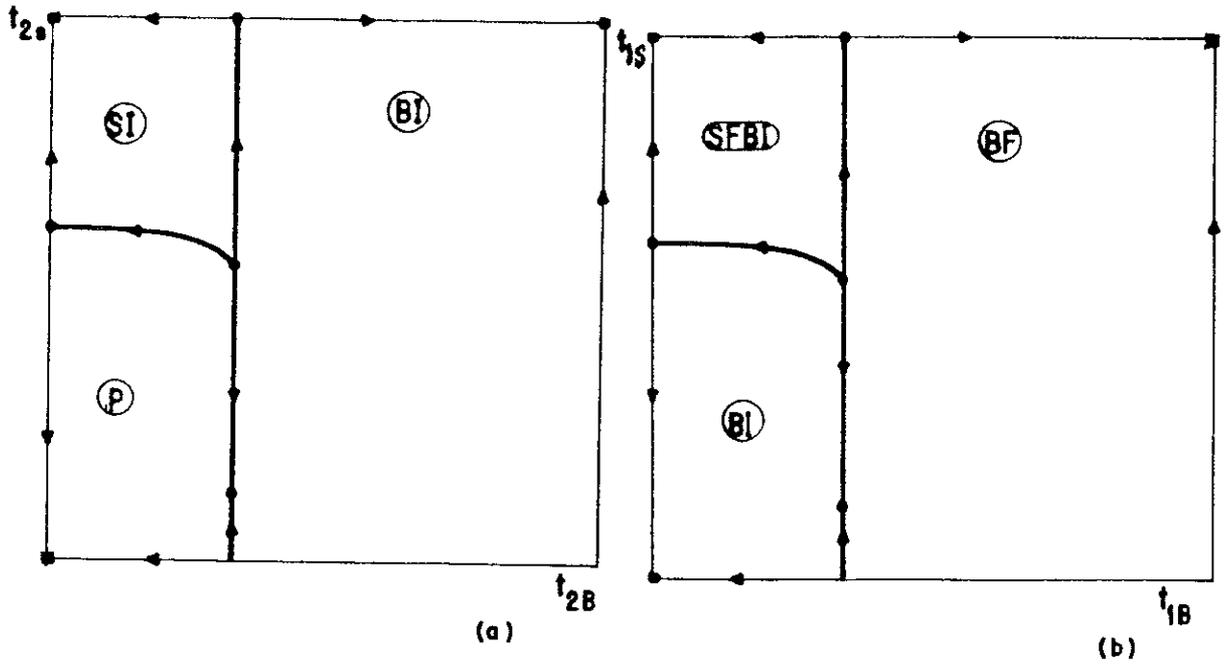


Figura 4.3.5 - Diagrama de fases ($N = 2$) nos casos (a) $t_{1B} = t_{1s} = 0$; (b) $t_{2B} = t_{2s} = 1$; (c) $t_{1B} = 0$, $t_{2s} = 1$ e (d) $t_{1B} = t_{2B}$, $t_{1s} = t_{2s}$.

$t_{1B} = t_{1s} = 0$ ($K_B = K_s = 0$, correspondendo ao modelo de Potts de N estados); (b) $t_{2B} = t_{1s} = 1$ ($L_B, L_s \rightarrow \infty$, que corresponde ao modelo de Ising); (c) $t_{1B} = 0, t_{2s} = 1$ ($K_B = 0, L_s \rightarrow \infty$, que corresponde a uma superfície de Ising e a um volume de Potts de N estados) e (d) $t_{1B} = t_{2B'}, t_{1s} = t_{2s}$ ($K_B = NL_B, K_s = NL_s$, correspondendo ao modelo de Potts de $2N$ estados). Os casos (a), (b) e (d) apresentam uma estrutura familiar (ver fig. 4.3.5): três fases encontram-se no ponto multicrítico, sendo uma delas uma fase de superfície. Os pontos fixos semi-estáveis do caso (d) estão associados à coexistência de três fases, como indicado na figura. O caso (c) apresenta uma estrutura diferente, já que quatro fases estão presentes. Vários pontos fixos semi-estáveis que aparecem nesta classe de planos invariantes estão indicados na tab. 4.3.1.

Na fig. 4.3.6 apresentamos a evolução com N dos planos da fig. 4.3.5 nas variáveis padrão (a) $1/L_B$ e L_s/L_B ($\Delta_a \equiv L_s/L_B - 1$); (b) $1/K_B$ e K_s/K_B ($\Delta_b \equiv K_s/K_B - 1$); (c) $1/L_B$ e K_s/L_B ($\Delta_c \equiv K_s/L_B - 1$) e (d) $1/K_B$ e K_s/K_B ($\Delta_d \equiv K_s/K_B - 1$). Os casos das figs. 4.3.6(a), (b) e (d) são bem similares: para $\Delta_i < \Delta_{ic}$, duas fases são possíveis, dependendo do valor da temperatura (se mais alta ou mais baixa que a temperatura crítica do volume); para $\Delta_i > \Delta_{ic}$, uma fase de superfície aparece para valores intermediários da temperatura. Note-se que na fig. 4.3.6(b) podemos representar as fronteiras críticas, para qualquer valor de N , sobre um único gráfico, usando a variável $1/NK_B$ em lugar de $1/K_B$. Isto se deve ao fato de que os spins \vec{S} já estão alinhados ($L_B, L_s \rightarrow \infty$) em um determinado eixo, e conseqüentemente o problema é levado,

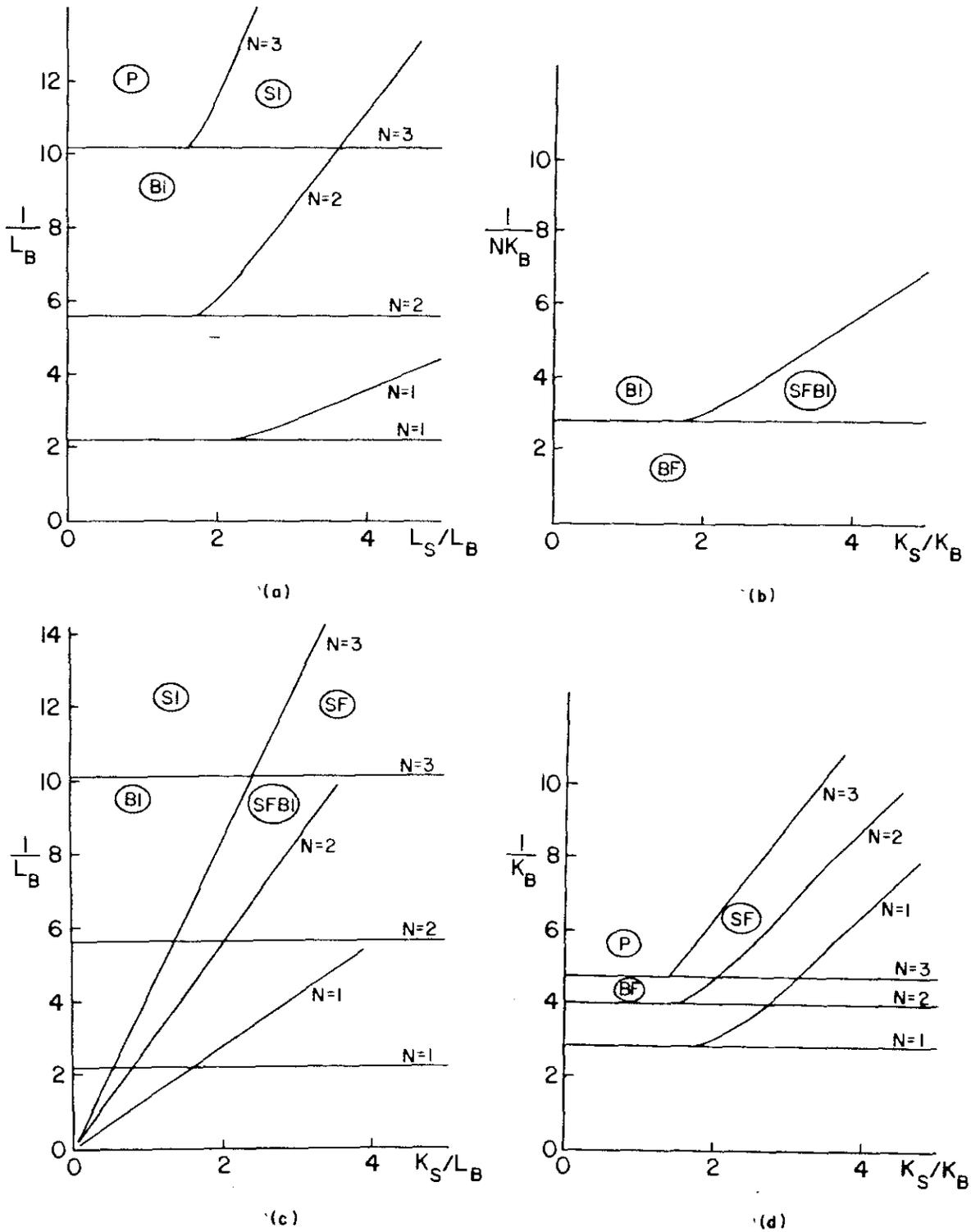


Figura 4.3.6 - Para valores típicos de N , os mesmos planos invariantes da fig. 4.3.5, nas variáveis padrão (em termos das constantes de acoplamento).

N	PONTO MULTICRÍTICO ($t_{1B}, t_{2B}, t_{1S}, t_{2S}$)	$\Delta_c = L_S / L_B - 1$	$1/L_B^c$	ν^{3D}	ϕ^{-1}
1	(0, 0,37, 0, 0.62)	1.11 (1.10 [*])	2.18	1.24	1.63 (1.68 [*])
2	(0, 0.34, 0, 0.55)	0.74 (0.76 [*]) (0.6 ^d , 0.5 ^e)	5.65	1.08	1.53 (1.54 [*]) (1.47 ^f)
3	(0, 0.32, 0, 0.51)	0.59 (0.63 [*])	10.2	0.99	1.50 (1.49 [*])
∞	(0, 0, 0, 0)			~	

Tabela 4.3.3 - Estimativas do presente GR para as quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da Fig. 4.3.5 (a) ($t_{1B} = t_{1S} = 0$ ou $K_B = K_S = 0$), para valores típicos de N. * indica os resultados encontrados na ref. 84; ^d em Binder e Hohenberg⁽⁵⁰⁾; ^e em Binder e Landau⁽⁵⁰⁾; ^f em Diehl e Dietrich⁽⁵¹⁾.

N	PONTO MULTICRÍTICO ($t_{1B}, t_{2B}, t_{1S}, t_{2S}$)	$\Delta_c = K_S / K_B - 1$	$1/K_B^c$	\mathcal{U}^{3D}	ϕ^{-1}
QUALQUER	(0.34, 1, 0.55, 1)	0.74 (0.76 [*])	2.82	1.08	1.53 (1.54 [*]) (1.47 ^f)

Tabela 4.3.4 - Estimativas do presente GR para as quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da fig. 4.3.5 (b) ($t_{2B} = t_{2S} = 1$ ou $L_B, L_S \rightarrow \infty$), os resultados são independentes de N.

N	PONTO MULTICRÍTICO ($t_{1B}, t_{2B}, t_{1S}, t_{2S}$)	$\Delta_c = K_S / L_B - 1$	$1/L_B^c$	\mathcal{U}^{3D}	ϕ^{-1}
1	(0, 0.37, 0.62, 1)	0.58	2.1B	1.24	1.09
2	(0, 0.34, 0.62, 1)	1.04	5.65	1.0B	1.25
3	(0, 0.32, 0.62, 1)	1.45	10.2	0.99	1.36
∞	(0, 0, 0.62, 1)			~	

Tabela 4.3.5 - Estimativas do presente GR para as quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da fig. 4.3.5 (c) ($t_{1B} = 0, t_{2S} = 1$ ou $K_B = 0, L_S \rightarrow \infty$), para valores típicos de N.

para qualquer valor de N , no problema de Ising (que corresponde a $N = 1$). No diagrama da fig. 4.3.6(c), enquanto aumentamos a temperatura, o sistema pode evoluir de duas maneiras: se $\Delta < \Delta_c$, partindo da fase SFBI o sistema vai para a fase BI e depois para a fase SI; se $\Delta > \Delta_c$, da fase SFBI o sistema evolui para a fase SF e depois para a fase SI. É importante ressaltar que, nos casos (b) e (c), as condições são tais que a transição final do sistema como um todo para a fase paramagnética ocorre à temperatura infinita.

Nas tabs. 4.3.3, 4.3.4, 4.3.5 e 4.3.6 apresentamos para valores típicos de N , para os diagramas das figs. 4.3.6 (a), (b), (c) e (d), respectivamente, nossas estimativas para Δ_c em cada caso, para os acoplamentos críticos de volume, os expoentes térmicos críticos e o expoente de crossover ϕ (para os pontos multicríticos). Observamos que para um dado N , o valor de v^{3D} nos pontos multicríticos dos diagramas (a) e (c) é o mesmo, correspondendo à classe de universalidade de um volume de Potts de N estados.

No caso em que $L_B, L_s \rightarrow \infty$ (fig. 4.3.5 (b) ou 4.3.6 (b)), recuperamos os resultados encontrados ⁽⁵⁹⁾ para o ferromagneto de Ising semi-infinito. O ferromagneto de Potts de N estados semi-infinito é obtido quando fazemos $K_B = K_s = 0$ (fig. 4.3.5 (a) ou 4.3.6 (a)). Nas tabs. 4.3.1, 4.3.3 e 4.3.4 comparamos nossas estimativas para o expoente crítico térmico, para o expoente de crossover ϕ e para Δ_c com as encontradas na ref. 84, onde foram utilizadas células mais sofisticadas para a transformação de GR para este modelo. Como podemos observar através dos resultados de expansões em série e de Monte Carlo (que também estão nas tabs.4.3.1, 4.3.3 e 4.3.4), nossas

estimativas estão qualitativamente corretas (em particular no que concerne à evolução das diversas quantidades relevantes quando N varia).

Para discutir o limite $N \rightarrow \infty$, vamos inicialmente considerar o caso em que o volume é infinito. Verificamos que, neste caso, $t'_{2B} = 1$ para valores arbitrários de t_{1B} e t_{2B} ($t_{2B} \neq 0$), e que portanto a fase paramagnética colapsa no ponto $t_{1B} = t_{2B} = 0$ (ver fig. 4.1.2 (b)). A linha crítica IF torna-se uma curva que simplesmente une o ponto fixo $t_{1B} = t_{2B} = 0$ ao ponto fixo I (ver tab. 4.3.2). O colapso da fase paramagnética quando $N \rightarrow \infty$ é similar ao que ocorre no modelo de Potts (caso particular do Cúbico) quando q aumenta: a fase ordenada cresce.

Retornando ao caso do volume semi-infinito, vemos que o colapso mencionado acima implica na não-existência, neste limite, dos planos gerados pelos pontos fixos de volume $P(N)$, $P(2N)$ e C. Quando $N \rightarrow \infty$, as relações de recorrência para t_{2B} e t_{2s} tomam uma forma muito simples: $t'_{2B} = 1$ e $t'_{2s} = 1$ para valores quaisquer de t_{1B} , t_{2B} , t_{1s} e t_{2s} (desde que $t_{2B} \neq 0$, $t_{2s} \neq 0$). O plano invariante gerado pelo ponto fixo de volume $(t_{1B}, t_{1s}) = (0,0)$ (fig. 4.3.4 (a)) apresenta apenas as fases SI e SF, a fase P colapsa no ponto $(t_{1B}, t_{2B}, t_{1s}, t_{2s}) = (0,0,0,0)$. Existe apenas um ponto fixo não trivial, o que está sobre a linha $t_{2s} = 1$. A estrutura dos planos invariantes das figs. 4.3.4 (b), (c) e (g), gerados respectivamente pelos pontos fixos de volume $(t_{1B}, t_{2B}) = (0,1)$, $(1,1)$ e I, se mantém.

N	PONTO MULTICRÍTICO (t_{1B} , t_{2B} , t_{1S} , t_{2S})	$\Delta_c = K_s / K_B - 1$	$1/K_B^c$	U^{3D}	ϕ^{-1}
1	(0.34, 0.34, 0.55, 0.55)	0.74	2.82	1.08 (1.04 [*]) (0.63 ^b)	1.53
2	(0.31, 0.31, 0.48, 0.48)	0.51	1.96	0.94	1.48
3	(0.29, 0.29, 0.44, 0.44)	0.42	1.62	0.87	1.45
∞	(0, 0, 0, 0)			~	

N	PONTO FIXO SEMI-ESTÁVEL P-SI-SF	U^{2D}	PONTOS FIXOS SEMI-ESTÁVEIS SF-SFBI-BF e P-BI-BF	U^{3D}
1	(0, 0, 0.62, 0.62)	1.35 (1.37 [*]) (1 ^c)	(0.34, 0.34, 1, 1) e (0.34, 0.34, 0.12, 0.12)	1.08 (1.04 [*]) (0.63 ^b)
2	(0, 0, 0.55, 0.55)	1.55	(0.31, 0.31, 1, 1) e (0.31, 0.31, 0.10, 0.10)	0.94
3	(0, 0, 0.51, 0.51)	1.05	(0.29, 0.29, 1, 1) e (0.29, 0.29, 0.08, 0.08)	0.87
∞	(0, 0, 0, 0)	~	(0, 0, 1, 1) e (0, 0, 0, 0)	~

Tabela 4.3.6 - Estimativas do presente GR para as quantidades associadas ao ponto multicrítico do diagrama da fig. 4.3.5 (d) ($t_{1B} = t_{2B}$, $t_{1S} = t_{2S}$ ou $K_B = NL_B$, $K_s = NL_s$). Estimativas para os pontos fixos semi-estáveis e expoentes térmicos correspondentes, associados respectivamente à coexistência das fases P-SI-SF, SF-SFBI-BF e P-BI-BF.

No limite $N \rightarrow \infty$, no plano invariante da fig. 4.3.5 (a) ($t_{1B} = t_{1s} = 0$) as fases P e SI colapsam, respectivamente, no ponto $t_{2B} = t_{2s} = 0$ e na linha $t_{2B} = 0$. No diagrama da fig. 4.3.5(c) ($t_{1B} = 0, t_{2s} = 1$), as fases SF e SI colapsam respectivamente nas linhas $t_{2B} = 0, t_{1s} > 0.62$ e $t_{2B} = 0, t_{1s} < 0.62$. No plano invariante da fig. 4.3.5(d) ($t_{1B} = t_{2B}, t_{1s} = t_{2s}$), as fases P e SF colapsam, respectivamente, no ponto $t_{1B} = t_{1s} = 0$ e na linha $t_{1B} = 0$. A estrutura do plano da fig. 4.3.5 (b) ($t_{2B} = t_s = 1$) não se altera.

O limite $N \rightarrow 0$ é um caso especial em que recupera-se o problema do "self-avoiding walk" (SAW) ⁽⁷⁴⁾, quando as constantes de acoplamento L_B e L_s são zero. De fato, os termos em L na Hamiltoniana da eq. (4.1.3) são proporcionais a N^2 e de qualquer modo se tornarão desprezíveis em relação aos termos em K (proporcionais a N), no limite $N \rightarrow 0$. Neste limite obtivemos as relações de recorrência expandindo em N as expressões de t_{1B}, t_{2B}, t_{1s} e t_{2s} em função de K_B, L_B, K_s, L_s e N e então reescrevendo as relações de recorrência em termos de $K_B, L_B, K_s, L_s, K'_B, L'_B, K'_s, L'_s$ e N . Assim, quando $N \rightarrow 0$ temos as relações de recorrência:

$$K'_B = 9 K_B^3 \quad \text{a)}$$

(4.3.2)

$$K'_s = 3(K_B^3 + K_s^3) \quad \text{b)}$$

que reproduzem a "corner rule" ^(74 b).

Se considerarmos um volume infinito encontramos $K_B^c = 1/3$ e o expoente crítico associado $\nu^{3D} = 1$. Considerando um volume semi-infinito com uma superfície livre, obtemos o diagrama de

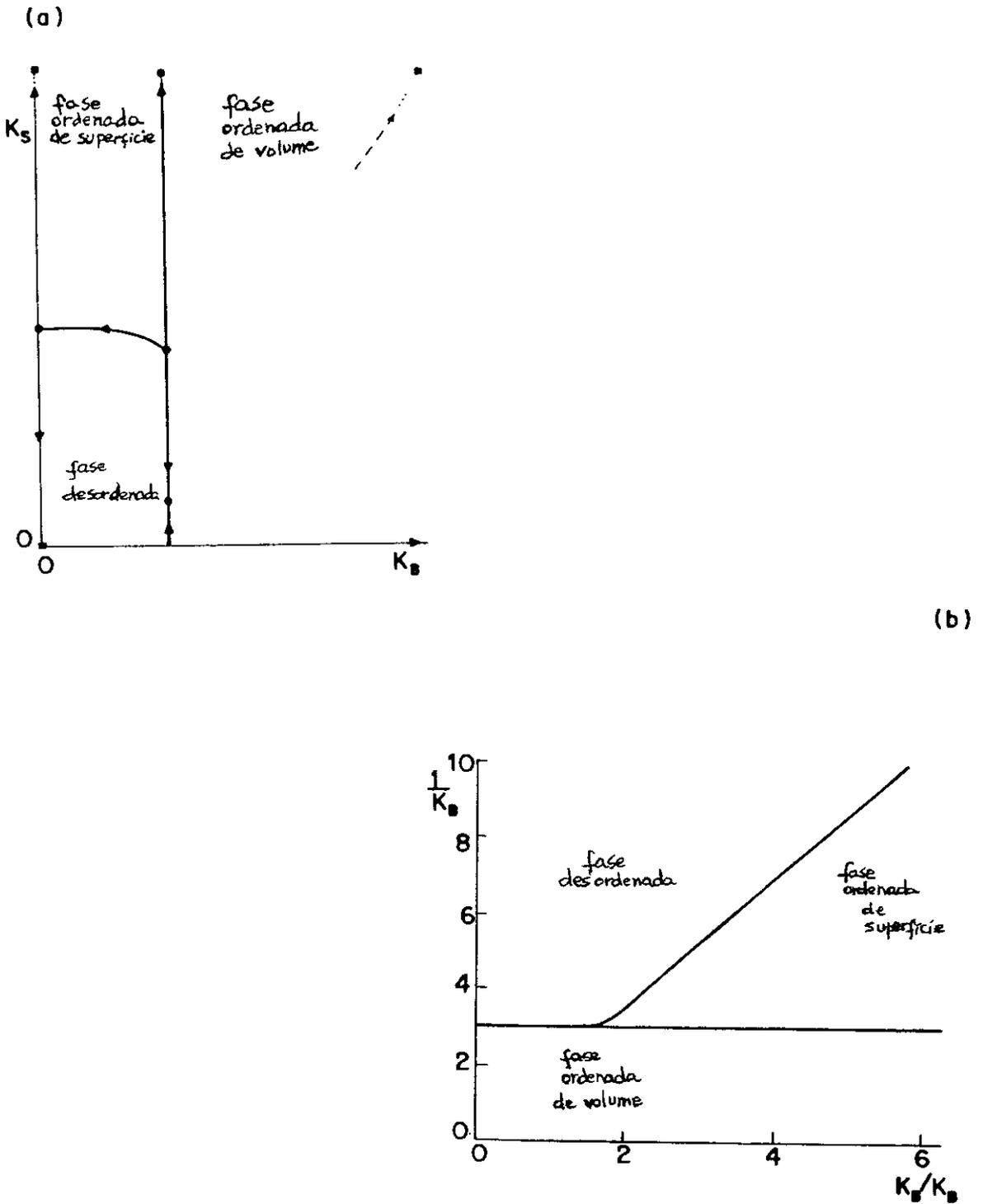


Figura 4.3.7 - Limite $N \rightarrow 0$: (a) Diagrama de fases nas variáveis K_S e K_B , o fluxo do GR está indicado pelas setas; (b), diagrama de fases nas variáveis $1/K_B$ e K_S/K_B .

fases da fig. 4.3.7 onde estão presentes as fases desordenada, ordenada de superfície e ordenada de volume. No ponto multicrítico (transição especial) $\Delta_c = K_s^c/K_B^c - 1 = 0.53$ e $1/K_B^c = 3$. O expoente crítico térmico associado é $\nu^{3D} = 1$ e $\phi^{-1} = 1.29$. No ponto fixo $(K_B, K_s) = (1/3, 0.12)$ (transição ordinária) temos $\nu^{3D} = 1$ e no ponto fixo $(K_B, K_s) = (0, 0.58)$ (transição de superfície), $\nu^{2D} = 1$.

Concluindo, as características gerais do diagrama de fases obtido para o ferromagneto Cúbico semi-infinito reproduzem, como caso particular, resultados já conhecidos e são consistentes com o que poderíamos esperar para este problema, que de fato foi estudado aqui pela primeira vez.

CAPÍTULO 5

MAGNETIZAÇÃO ESPONTÂNEA PARA O FERROMAGNETO DE
ISING EM UM TAPETE DE SIERPINSKI

Motivados pela influência da dimensionalidade no magnetismo, consideramos neste capítulo o ferromagneto de Ising em um fractal geométrico, o tapete de Sierpinski⁽⁸⁸⁾. Como neste sistema a magnetização não é uniforme (no espaço), consideramos a aproximação em que distinguimos apenas duas regiões qualitativamente diferentes no tapete. Aplicando o método do capítulo 2 obtivemos a magnetização espontânea como função da temperatura para estas duas regiões, bem como os expoentes β correspondentes.

5.1 Geometria dos Tapetes de Sierpinski

Estabelecer como a natureza fractal de um sistema altera suas propriedades físicas tem sido uma área de interesse ativo atualmente. Em particular o estudo de fenômenos críticos em redes fractais tem sido objeto de muita atenção⁽⁽⁸⁹⁾⁻⁽⁹⁴⁾⁾.

Neste trabalho consideraremos as redes fractais chamadas de tapetes de Sierpinski. Os tapetes são construídos da seguinte maneira: começando com um quadrado de área unitária, subdividimos este quadrado em b^2 quadrados menores, dos quais retiramos \tilde{n} quadrados. O procedimento é então repetido para

os quadrados menores e iterado até que se chega a escala de tamanho "microscópica". A forma geométrica resultante é auto-similar em todas as escalas de tamanho intermediárias. Estaremos interessados no caso em que $\tilde{n} = l^2$ (l inteiro) e onde os \tilde{n} quadrados são eliminados de uma maneira simétrica. Uma possibilidade é o caso em que os l^2 quadrados formam uma ilha grande no centro de cada quadrado maior, como na fig. 5.1.1(a) (para $b = 7$ e $l = 3$).

A *dimensionalidade fractal*, D , é geralmente definida de tal modo que b^D é igual ao número de novas unidades menores⁽⁹⁴⁾. No nosso caso, $b^D = b^2 - \tilde{n} = b^2 - l^2$, e temos⁽⁹⁴⁾

$$D = \ln(b^2 - l^2) / \ln b \quad (5.11)$$

Com b suficientemente grande e variando-se l pode-se construir tapetes com D arbitrariamente próximo de qualquer valor entre 1 (se $b \gg (b-1)$) e 2 (se $b \gg 1$). Estes fractais estão embebidos em um espaço euclideano bidimensional ($d=2$) e tem a *dimensionalidade topológica* $d_T = 1$. A relação geral⁽⁹⁵⁾ $d \geq D \geq d_T$ é satisfeita.

A *ordem de ramificação* R em um ponto P é igual ao número de ligações que tem-se que cortar de modo a isolar um conjunto arbitrariamente grande de pontos conectados a P ⁽⁹⁵⁾. Para os tapetes, este número cresce como uma potência do tamanho deste conjunto limitado, de modo que $R = \infty$. Neste caso então consideramos as *dimensionalidades fractais* das "superfícies" dos conjuntos isolados, $\{D'\}$. A *conectividade* Q é definida como o menor valor de D' , $Q = \min(D')$.

Outra característica geométrica destes fractais é a lacunaridade L ^{(89), (95)}. Podemos construir dois tapetes de Sierpinski com os mesmos D e Q nos quais os quadrados são eliminados de maneiras diferentes. Apresentamos um exemplo nas figs. 5.1.1(a) e 5.1.1.(b). O tapete da fig. 5.1.1(a) (com um grande quadrado eliminado no centro) é mais lacunar que o da fig. 5.1.1(b) (com muitos quadrados eliminados pequenos). Como estes exemplos sugerem, um dos papéis da lacunaridade é medir o quanto o fractal falha em ser translacionalmente invariante. Para redes translacionalmente invariantes, $L = 0$. Uma expressão aproximada para L nos tapetes de Sierpinski foi obtida na ref. 91.

5.2 Magnetização para um Ferromagneto de Ising em um Tapete de Sierpinski

Associamos uma variável de spin a cada sítio da rede microscópica obtida através de sucessivas iterações do procedimento descrito na seção 5.1. Os spins estão em todos os sítios da rede, incluindo os que estão nas bordas das áreas eliminadas. Mostrou-se⁽⁸⁹⁾ que sistemas de Ising em redes fractais apresentam uma temperatura crítica não nula se a ordem de ramificação é infinita. Assim, o ferromagneto de Ising em um tapete de Sierpinski apresenta uma transição de fase à temperatura finita. Gefen et al⁽⁸⁹⁾ mostraram que as propriedades críticas para sistemas de Ising em diversas redes fractais (entre elas as tapetes de Sierpinski) dependem não somente de

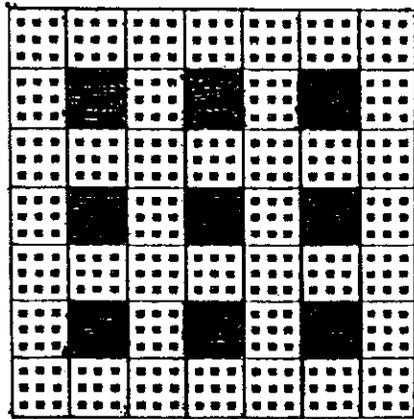
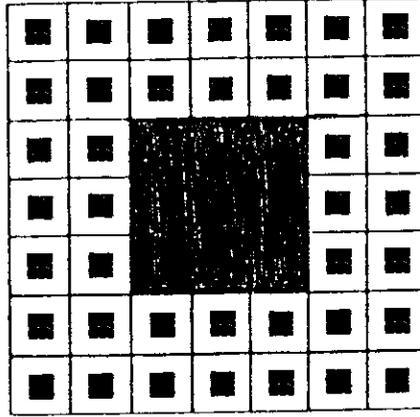


Fig. 5.1.1 - Dois estágios dos tapetes de Sierpinski ($R = \infty$) com $b = 7$ e $l = 3$. (a) Lacunaridade grande. (b) Lacunaridade pequena.

D mas também de diversos fatores topológicos como a ramificação, conectividade, lacunaridade, etc.

Gefen et al⁽⁹¹⁾, em 1984, trataram ferromagnetos de Ising nos tapetes de Sierpinski usando um esquema de GR de Migdal-Kadanoff, considerando que a iteração da transformação de GR gera duas variáveis de acoplamento básicas. A Hamiltoniana de Ising é dada por

$$-\beta H = \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad , \quad (5.2.1)$$

onde $K_{ij} = K = J/k_B T$ se a ligação entre os sítios i e j separa dois subquadrados não eliminados e $K_{ij} = K_w = J_w/k_B T$ se a ligação está na borda de um subquadrado eliminado (K e $K_w > 0$). A transformação de GR utilizada por estes autores, no caso $b = 3$, $l = 1$ (para tapetes com um quadrado eliminado central), envolve as células da fig. 5.2.2(a) e (d), associadas respectivamente à construção de K' e K'_w . Gefen et al⁽⁹¹⁾ mostraram que existem três situações básicas para a fronteira crítica de um tapete de Sierpinski construído retirando-se simetricamente l^2 quadrados centrais. Estas situações são: (a) $b = 3$, $l = 1$, (b) $b = l+2$, $b > 3$ e (c) $b > l+2$. Exemplos dos fluxos de GR⁽⁹⁰⁾ típicos no espaço $t = \tanh K$ e $t_w = \tanh K_w$ são apresentados na fig. 5.2.1, para os casos (a) $b = 3$, $l = 1$, (b) $b = 7$, $l = 5$ e (c) $b = 7$, $l = 3$. Nestes diagramas o ponto A, correspondendo a $K = K_w = 0$, é o atrator da fase desordenada e o ponto C, que corresponde a $K = K_w \rightarrow \infty$ é o atrator da fase ferromagnética.

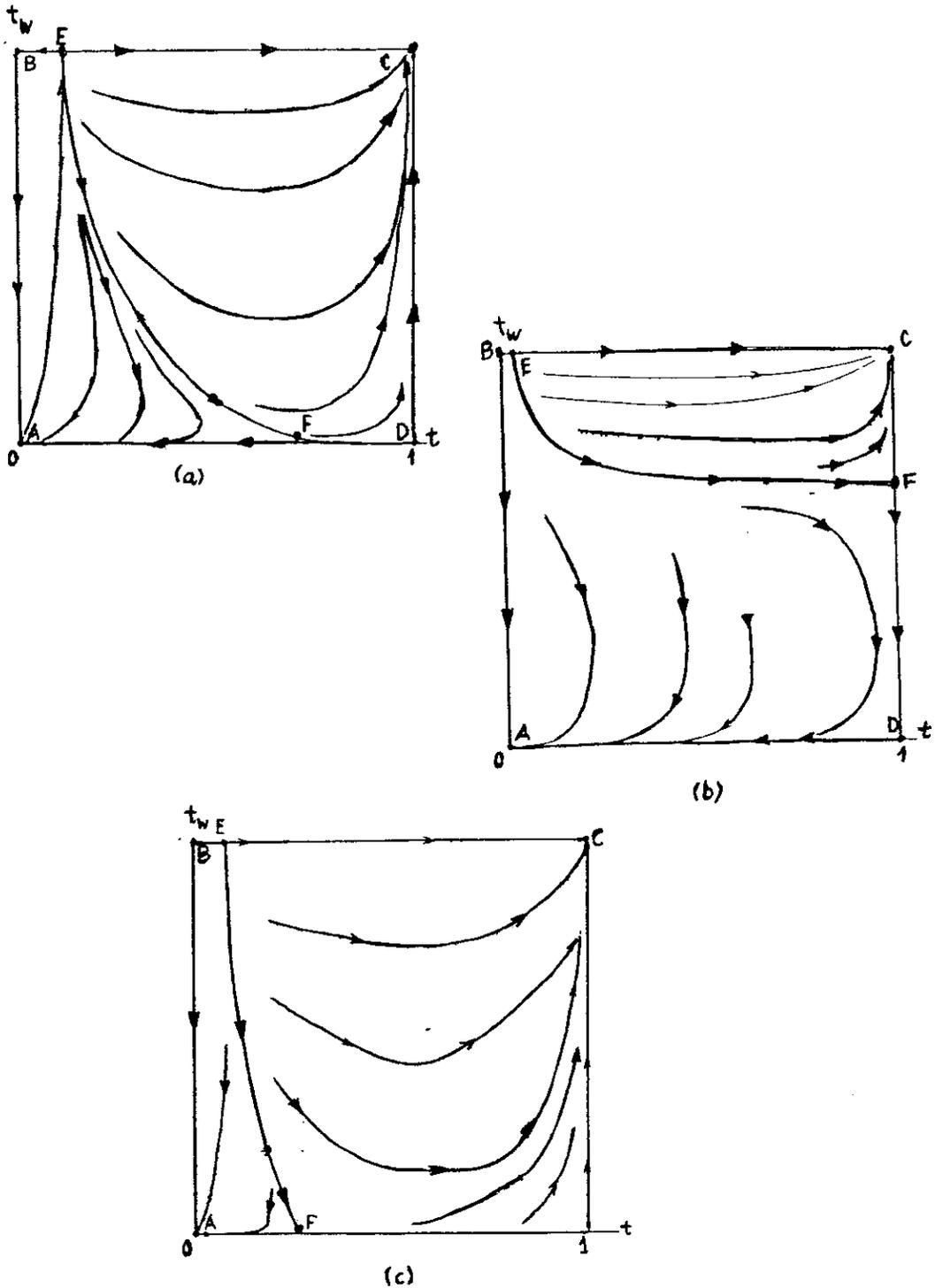


Fig. 5.2.1 - Diagramas de fluxo para os tapetes de Sierpinski com quadrado eliminado central (a) $b = 3$, $l = 1$; (b) $b = 7$, $l = 5$ e (c) $b = 7$, $l = 3$, nas variáveis transmissividades $t = \text{tgh } K$ e $t_w = \text{tgh } K_w$ para o modelo de Ising.

A fronteira crítica entre estas fases é a linha que une os pontos fixos E e F. O ponto B corresponde a $K = 0$, $K_w \rightarrow \infty$ e descreve a situação anisotrópica onde os sítios nas bordas de áreas eliminadas estão infinitamente acoplados. O ponto D é um ponto fixo nos casos (a) e (b), mas não em (c). Este ponto é também um ponto associado à temperatura zero, mas onde sítios na borda de áreas eliminadas não interagem; toda a linha $t_w = 0$ representa sistemas em que não existam ligações entre estes sítios. Nos casos (a) e (b), se $t_w = 0$ a ordem de ramificação passa a ter um valor finito, e assim, ao longo deste eixo não existe ordem; no caso (c) a ordem de ramificação continua infinita e a situação é bem diferente.

Um ponto de vista similar, usando técnicas de GR, foi adotado por Costa et al.⁽⁹⁶⁾ para obter uma análise quantitativa do ferromagneto de Potts de q estados, desta vez simulando o tapete de Sierpinski por redes hierárquicas⁽²⁷⁾ apropriadas. Este esquema forneceu boas estimativas numéricas para a criticalidade dos tapetes de Sierpinski (com um quadrado eliminado central), mostrando que a transformação usada é bastante satisfatória.

Aqui nós consideramos o ferromagneto de Ising dado pela Hamiltoniana da eq. (5.2.1) em um tapete de Sierpinski simples ($b = 3$, $l = 1$) e a partir da transformação utilizada na ref. 96, obtemos a magnetização deste sistema através do método de GR do capítulo 2.

Inicialmente, consideramos um tapete de Sierpinski de tamanho linear L . Associamos a cada sítio desta rede fractal um momento magnético elementar μ ; K , K_w e μ são as variáveis

da transformação de GR. O parâmetro de ordem em uma rede fractal (que é auto-similar mas não é translacionalmente invariante) não é uniforme no espaço. Como uma aproximação, consideramos apenas duas regiões distintas no tapete. Definimos os parâmetros de ordem no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$ para (a) o sistema composto pelo conjunto de sítios nas bordas das áreas eliminadas, como $M_w = N_w(K, K_w)/L_w^D$ e para (b) o sistema composto por todos os sítios que não pertencem as bordas, o "interior" do tapete, como $M = N(K, K_w)/L^D$. $N_w(K, K_w)$ é a média térmica dos sítios do sistema (a) cujos spins estão alinhados na direção privilegiada menos aqueles cujos spins estão na outra direção (analogamente, $N(K, K_w)$ corresponde ao sistema (b)). D_w e D são dimensões tais que $L_w^{D_w} \sim M_w$, a massa (número de sítios) do sistema (a) e $L^D \sim M$, a massa (número de sítios) do sistema (b).

O sistema original é transformado em um tapete renormalizado de tamanho linear L' , com variáveis renormalizadas K' , K'_w e μ' . Impomos que, sob renormalização, os momentos magnéticos totais dos sistemas (a) e (b) devem ser preservados:

$$\begin{aligned} N_w(K', K'_w)\mu' &= N_w(K, K_w)\mu & \text{a)} \\ N(K', K'_w)\mu' &= N(K, K_w)\mu & \text{b)} \end{aligned} \tag{5.2.2}$$

Seguindo o procedimento detalhado no capítulo 2, a partir das eqs. (5.2.2) obtemos as expressões para M e M_w para um ponto (K, K_w) pertencendo a fase ordenada:

$$M_w(K, K_w) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{B^{nD_w}} \quad (a)$$

(5.2.3)

$$M(K, K_w) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{B^{nD}} \quad (b)$$

onde $B = L/L' > 1$ é o fator de escala linear e n é o número de iterações da transformação de GR. Se o ponto (K, K_w) pertence à fase desordenada, obtemos que $M_w(K, K_w)$ e $M(K, K_w)$ são nulos, como esperado.

Vamos especificar então como gerar as relações de recorrência para K , K_w e μ .

Adotamos os mesmos procedimentos de agregação de Costa et al⁽⁹⁶⁾ para o tapete de Sierpinski com $b = 3$ e $l = 1$, mostrados na fig. 5.2.2. A vizinhança da interface entre uma célula e uma célula eliminada (fig. 5.2.2 (d)) é associada à renormalização da ligação K_w e a vizinhança da interface entre duas células (fig. 5.2.2 (a)) é associada à renormalização da ligação K . Nas fig. 5.2.2 (c) e (f) mostramos o processo para obter as redes hierárquicas que utilizaremos, cada uma simulando uma destas vizinhanças. Griffiths e Kaufman⁽²⁷⁾ interpretam o processo de formação da rede hierárquica como uma agregação, onde ligações primitivas (de ordem zero) são reunidas para formar uma nova unidade (ligação de ordem 1) e assim por diante. No nosso caso as redes hierárquicas são do tipo chamado de "não-uniforme" por Griffiths e Kaufman: misturam dois (ou mais) tipos de ligações, cada uma com seu próprio esquema de agregação. Podemos pensar que a estrutura interna de uma ligação contém,

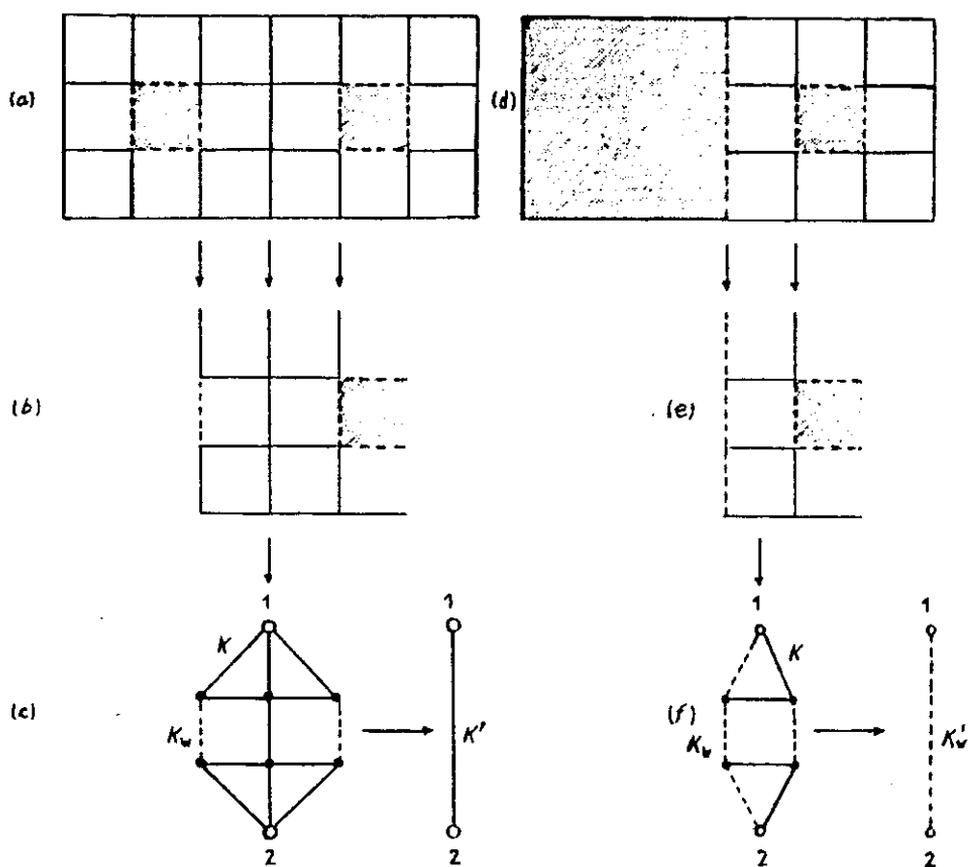


Fig. 5.2.2 - Construção de uma rede hierárquica adequada para simular o tapete de Sierpinski com $b = 3$, $l = 1$: (a), (b) e (c) mostram como K' é obtido; (d), (e) e (f) mostram como obter K'_w . As linhas cheias denotam a constante de acoplamento K enquanto as linhas tracejadas denotam K_w .

além da mesma ligação, outras com uma estrutura interna diferente.

Como vamos aproximar as duas regiões do tapete mencionadas acima por redes hierárquicas apropriadas, os fatores B^w e B^D que aparecem nas eqs. (5.2.3) serão aproximados (ver capítulo 2) por B^w e B^d , respectivamente, onde

$$B^w = \frac{R + R_w K_w / K}{R' + R'_w K'_w / K'} \quad (a)$$

e (5.2.4)

$$B^d = \frac{S + S_w K_w / K}{S' + S'_w K'_w / K'} \quad (b)$$

R e R_w são respectivamente o número de ligações K e K_w no maior grafo da fig. 5.2.2(f) enquanto S e S_w são respectivamente o número de ligações K e K_w no maior grafo da fig. 5.2.2(e). As quantidades linha denotam quantidades nos grafos renormalizados, de modo análogo.

As equações de renormalização para K e K_w foram obtidas ⁽⁹⁶⁾ através do método de "corte e colapso" ⁽²⁸⁾, usando as variáveis transmissividades t e t_w . Estas equações têm a forma

$$t'_w = f(t, t_w) \quad (a)$$

$$t' = g(t, t_w) \quad (b)$$

(5.2.5)

e dão origem a um diagrama de fases similar ao encontrado por Gefen et al⁽⁹¹⁾, discutido anteriormente.

Precisamos ainda da equação que permite calcular o momento magnético efetivo para as duas células renormalizadas, que correspondem às duas regiões típicas do tapete já mencionadas. Impomos que o momento magnético total do grafo original e renormalizado de ambas as transformações da fig. 5.2.2 sejam preservados, seguindo o procedimento descrito no capítulo 2. Obtemos assim duas equações da forma:

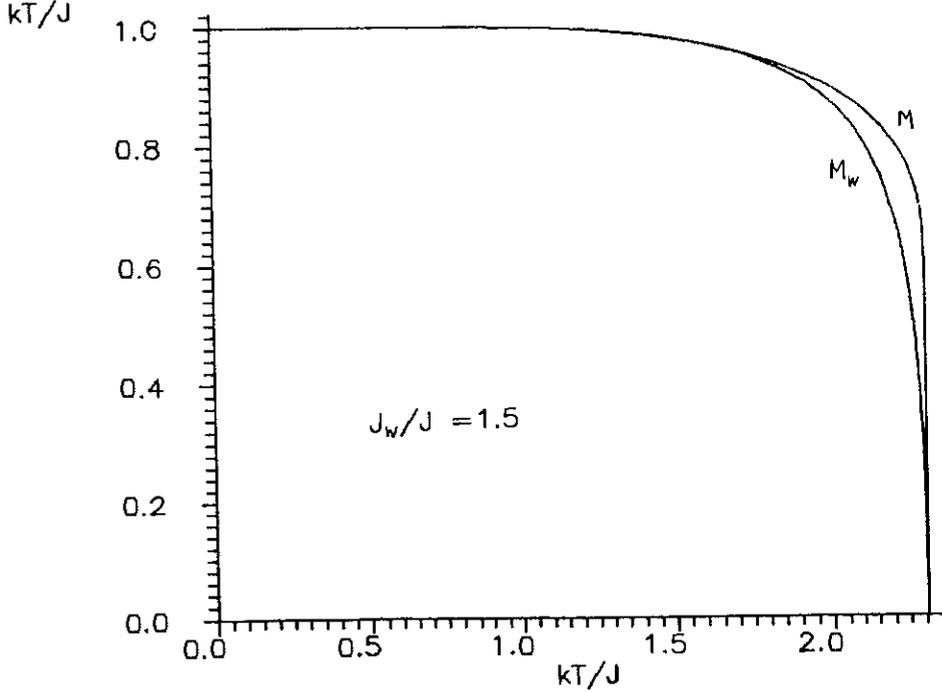
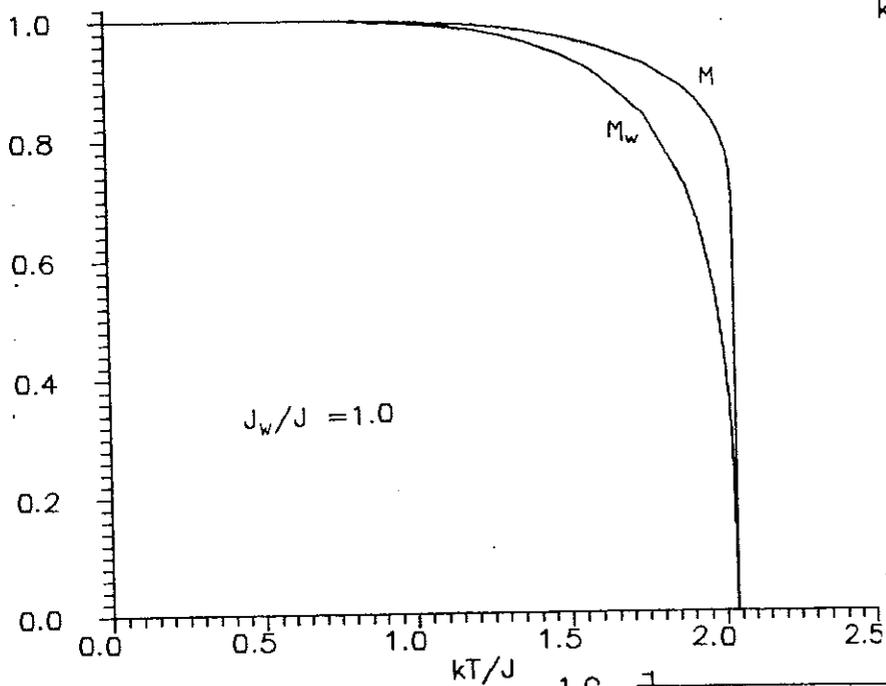
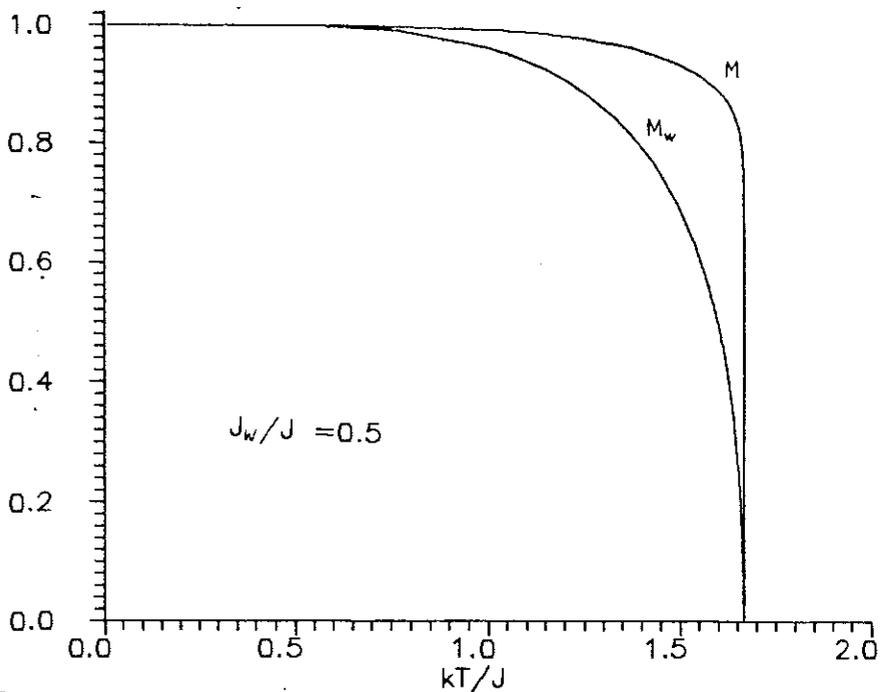
$$\mu'_w = h(t, t_w)\mu_w \quad (a) \quad (5.2.6)$$

$$\mu' = l(t, t_w)\mu \quad (b)$$

respectivamente associadas às transformações da fig. 5.2.2 (f) e da fig. 5.2.2 (c).

Usando as eqs. (5.2.3), (5.2.5) e (5.2.6) obtemos M_w e M como funções da temperatura, para alguns valores de K_w/K . As curvas obtidas estão na fig. 5.2.3. Obtivemos os expoentes críticos correspondentes a M_w e M , respectivamente $\beta_w = 0.59$ e $\beta = 0.034$, associados ao ponto fixo F ($F = (t^*, t_w^*) = (0.77, 0.033)$). Estes expoentes foram obtidos através das curvas de M_w e M e mostraram ser independentes do valor de K_w/K , como esperado. Também foram calculados analiticamente, usando expressões similares a eq. (2.1.25). Como neste caso K' e K'_w estão relacionados a K e K_w através de duas funções diferentes, é necessário calcular o Jacobiano da transformação e seus autovalores no ponto fixo crítico em questão. No caso do parâmetro de ordem M , por exemplo, mostramos que

170



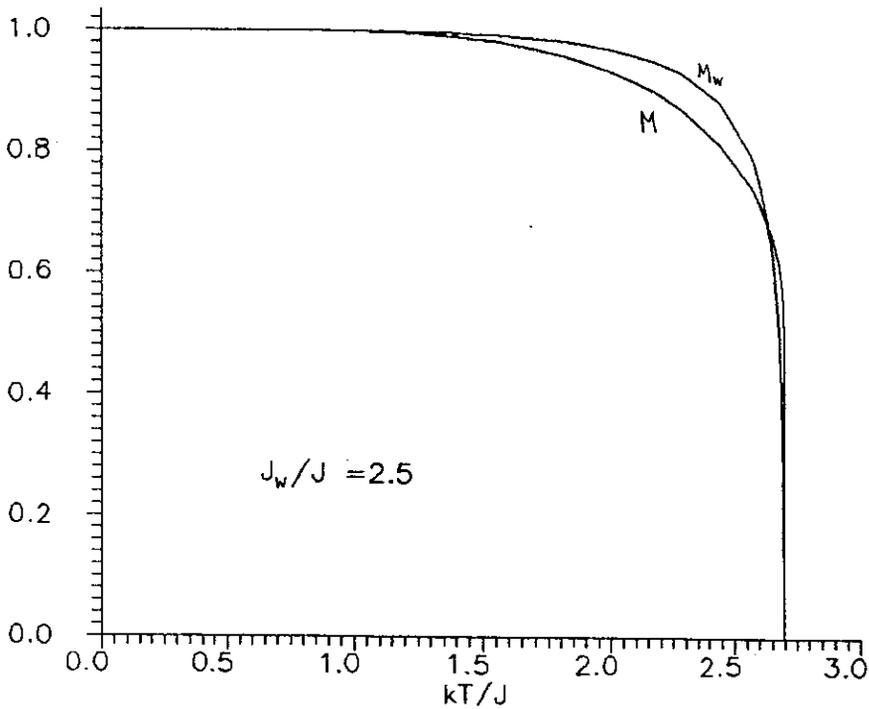
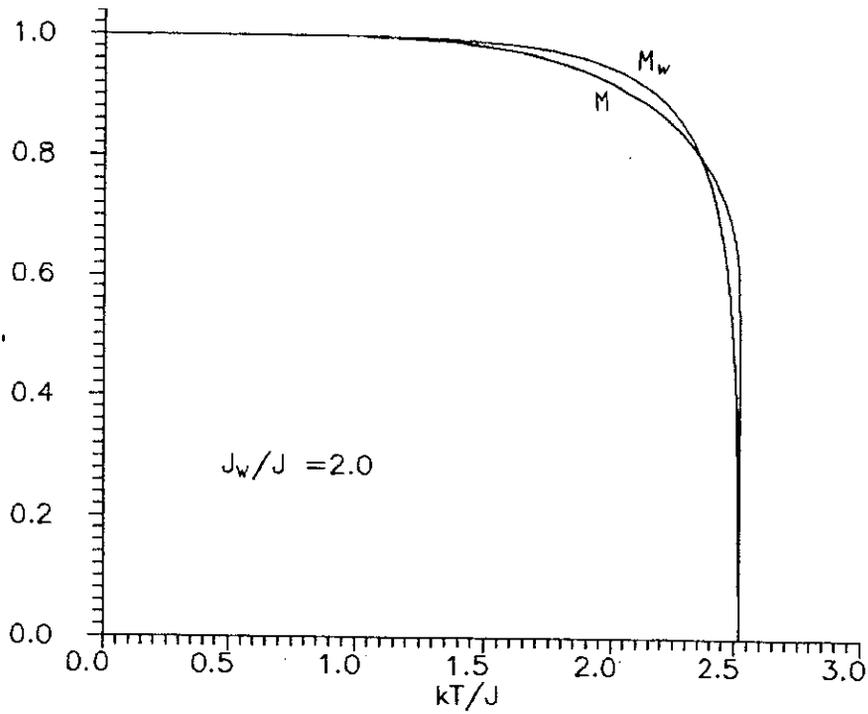


Fig. 5.2.3 - M e M_w como funções de $k_B T/J$ para razões de $J_w/J = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0$ e 2.5 , com $k_B T_c/J \cong 1.67, 2.03, 2.30, 2.52$ e 2.69 , respectivamente.

$$\frac{M(t', t'_w)}{M(t, t_w)} = \frac{B^d}{l(t, t_w)} \quad (5.2.7)$$

e se (t, t_w) está próximo do ponto fixo crítico (t^*, t_w^*) ,

$$\frac{M(t', t'_w)}{M(t, t_w)} = \lambda_{>}^{\beta} \quad (5.2.8)$$

onde $\lambda_{>}$ é o maior autovalor do Jacobiano. Assim,

$$\beta = \frac{\ln(B^d/l(t^*, t_w^*))}{\ln \lambda_{>} \Big|_{(t^*, t_w^*)}} \quad (5.2.9)$$

Considerando o parâmetro de ordem M_w obtemos, analogamente

$$\beta_w = \frac{\ln(B_w^d/h(t^*, t_w^*))}{\ln \lambda_{>} \Big|_{(t^*, t_w^*)}} \quad (5.2.10)$$

No caso $(t, t_w) = (0, 1)$, correspondendo a $(K, K_w) = (0, \infty)$, obtivemos que tanto M como M_w são nulos, mostrando que mesmo que a interação entre os sítios nas bordas das áreas eliminadas seja infinita, se estas bordas não estão conectadas através das outras ligações não existe ordem de longo alcance. No caso $t_w = 1$, para que M_w e M sejam não nulos é necessário que t seja maior que um certo valor (correspondendo ao ponto E no diagrama de fases). No caso

$t = 1$ ($K = \infty$), M e M_w possuem valores finitos para qualquer t_w ($t_w \neq 0$).

Quando K_w/K está abaixo de um certo valor, para qualquer valor da temperatura, M_w é menor que M . Quando K_w/K aumenta (ver o caso $K_w/K = 2$ na fig. 5.2.3), para baixas temperaturas M_w está acima de M e para uma dada temperatura observamos uma intersecção entre estas curvas. Desse modo, a curva de M_w sempre aproxima-se de zero na temperatura crítica por baixo da curva de M (isto porque, para qualquer J_w/J , $\beta_w > \beta$).

M_w pode ser vista como a magnetização média para as bordas das áreas eliminadas no tapete, região que acreditamos deve desempenhar papel análogo à fronteira de um sistema semi-infinito bidimensional, por exemplo. Assim, é interessante comparar o comportamento de M_w com o comportamento da magnetização da fronteira em uma rede quadrada semi-infinita, para um ferromagneto de Ising. Este último problema foi estudado inicialmente por McCoy e Wu⁽⁹⁷⁾, considerando interações diferentes se horizontais ou verticais. O caso mais interessante para comparar aqui foi estudado por Au-Yang⁽⁹⁸⁾, que considerou interações na fronteira, digamos J_w , diferente das demais interações, J . Encontra-se que a magnetização espontânea da fronteira, M_w , cresce quando J_w cresce, e a curva de M_w aproxima-se da correspondente ao interior do plano, M , quando $J_w/J \approx 2$ (ver fig. 5.2.4, onde comparamos as curvas de Au-Yang com os resultados de Onsager para a magnetização em um plano infinito).

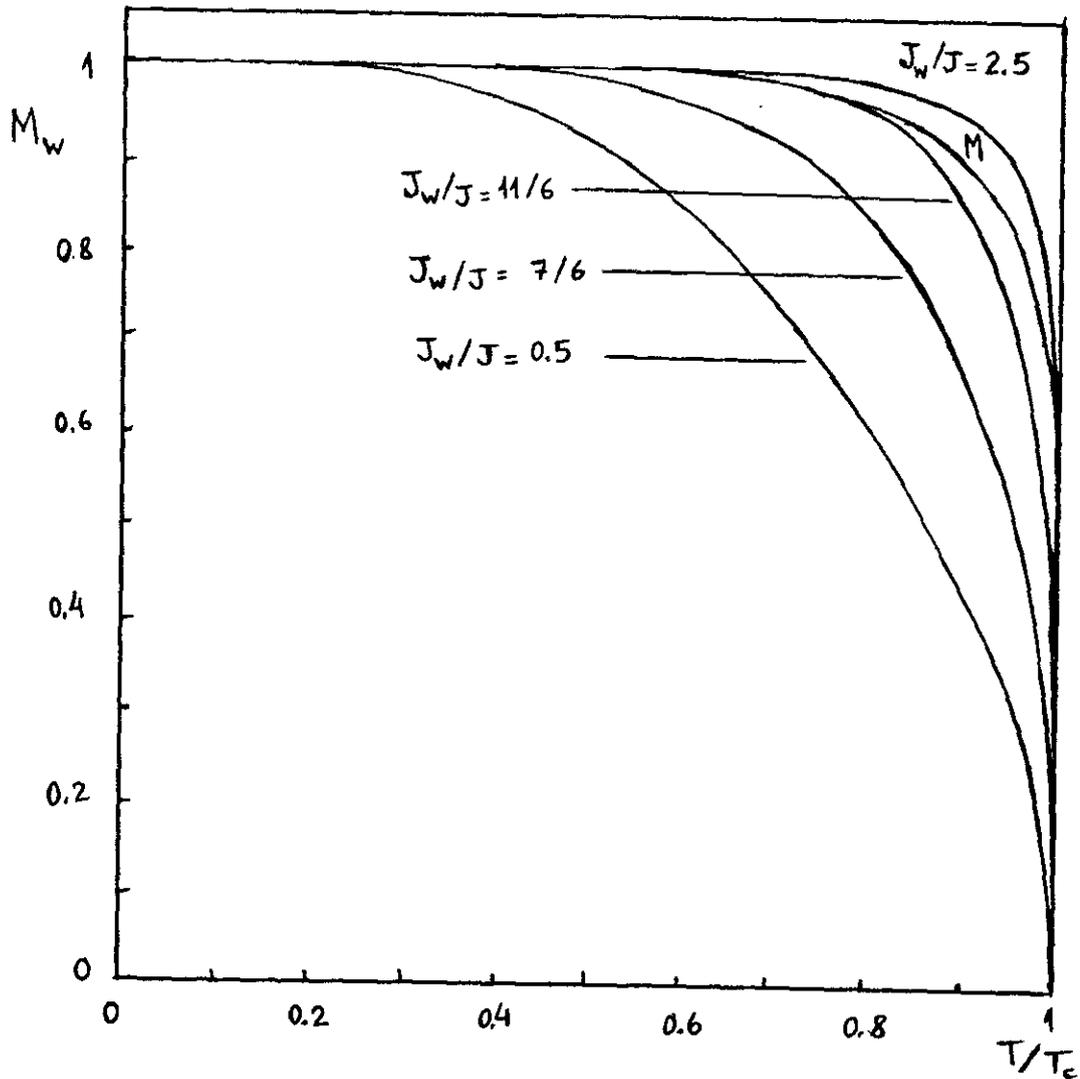


Fig. 5.2.4 - Para um ferromagneto de Ising em rede quadrada semi-infinita, magnetização espontânea da fronteira, M_w , como função da temperatura para algumas razões J_w/J (98). A magnetização para o interior do plano semi-infinito, M , também é mostrada, como referência. Para $J_w/J = 2.5$ a curva de M_w intercepta a de M .

Estes autores^{(97), (98)} encontram que a magnetização da fronteira anula-se em T_c^{2D} como $(1 - T/T_c^{2D})^{1/2}$ ($\beta_w = 1/2$) enquanto que a magnetização do interior do plano semi-infinito anula-se em T_c^{2D} com $\beta = 1/8$ ($\beta_w > \beta$, como no tapete). Vemos que o valor de β_w neste caso está próximo ao valor correspondente encontrado para o tapete, enquanto β é bem maior que o correspondente no tapete. Au-Yang⁽⁹⁸⁾ não apresenta a magnetização M_w para razões $J_w/J > 2$, mas através de suas expressões calculamos M_w para a razão $J_w/J = 2.5$. Observa-se que neste caso, para baixas temperaturas, M_w é maior que M e que para uma dada temperatura, M_w intercepta M de modo a anular-se sempre por baixo da curva de M ($\beta_w > \beta$), analogamente ao que obtivemos para o tapete.

Seria interessante estudar o caso tridimensional, a esponja de Sierpinski^{(95), (99)}, e obter o comportamento da magnetização das superfícies internas que delimitam as áreas eliminadas do fractal, comparando-o com o comportamento da magnetização de superfície em uma rede de Bravais semi-infinita.

CONCLUSÕES

O principal objetivo deste trabalho foi o estudo de propriedades críticas e obtenção de equações de estado para sistemas magnéticos anisotrópicos (no espaço cristalino) e semi-infinitos.

Inicialmente generalizamos para o caso anisotrópico um método de Grupo de Renormalização (no espaço real) introduzido recentemente, que permite obter de modo simples e direto a equação de estado para um sistema magnético. O método é baseado na inspeção de configurações dos spins de células pequenas, é operacionalmente tão simples quanto cálculos de Campo Médio e pode ser utilizado para temperaturas arbitrárias; os resultados são não triviais e podem ser melhorados sistematicamente.

Neste formalismo, a rede de Bravais é aproximada por uma rede hierárquica. Nessa aproximação, para o caso isotrópico, é necessário considerar o parâmetro de ordem localmente proporcional ao número de coordenação em cada sítio. No contexto da extensão para o caso anisotrópico, o número de coordenação é generalizado em uma média "natural" das constantes de acoplamento relacionadas a cada sítio.

Ilustramos este procedimento através do cálculo da magnetização espontânea (como função da temperatura) para o ferromagneto de Potts de q estados em uma rede quadrada anisotrópica, com acoplamentos J_x e J_y . Obtivemos a dependência com q (conhecida exatamente) do expoente crítico β e a

dependência com q e J_y/J_x (ainda não conhecida para $q \neq 2$) para a amplitude crítica A da magnetização. Usamos os resultados para $q = 2$ para testar a qualidade do método, encontrando um acordo satisfatório entre os nossos resultados e estes últimos, especialmente para a amplitude crítica. Nossas curvas para $q = 2$ e várias razões de J_y/J_x concordam com as exatas dentro de um erro máximo de 10%. Como uma restrição, devemos mencionar que o formalismo de GR em questão falha em reproduzir as transições de primeira ordem que ocorrem para valores de q suficientemente altos ($q > 4$) em redes de Bravais em $d = 2$. Para superar esta dificuldade, comum a outros métodos similares, o espaço dos parâmetros do GR teria que ser expandido⁽³⁵⁾.

Aplicamos o método de GR mencionado acima ao ferromagneto de Ising em uma rede cúbica semi-infinita com acoplamento J_s (na superfície) e J_B (no volume), de modo a obter as equações de estado para este sistema. As magnetizações espontâneas de volume e superfície como funções da temperatura apresentam o comportamento qualitativo esperado para $\Delta < \Delta_c$, $\Delta = \Delta_c$ e $\Delta > \Delta_c$. Encontramos para a transição extraordinária ($\Delta > \Delta_c$) o expoente crítico $\beta_1^{\text{ex}} = 1$ e uma *descontinuidade na primeira derivada da magnetização de superfície em relação a temperatura*. Este último resultado difere da previsão de Campo Médio (continuidade na primeira derivada). Efeitos da suscetibilidade de volume na superfície em T_c^B poderiam explicar esta discrepância já que as teorias de Campo Médio não consideram apropriadamente as flutuações. Através dos nossos resultados de GR para um ferromagneto de Ising vemos que o resultado $A_+/A_- = 1$ experimentalmente obtido

por Rau e Robert para o Gd ou é devido ao fato de que o Gd estaria mais próximo de um ferromagneto de Heisenberg do que de Ising ou esta não deve ser considerada a situação genérica, sua compreensão estando ligada a outros fatores (por ex, o Gd estaria associado a um comportamento mais complexo, devido à interações dipolares especialmente fortes).

Obtivemos através do nosso formalismo de GR os valores de T_c^B , $T_c^S(\Delta)$, o expoente β para cada transição (de acordo com o esperado com base nos argumentos de universalidade) e a amplitude A correspondente em razoável acordo com outras estimativas quando disponíveis.

Outro sistema estudado foi o ferromagneto N-vetorial discreto em uma rede cúbica semi-infinita, com acoplamentos K_B e L_B no volume e K_s e L_s na superfície livre. Usando um procedimento simples de GR no espaço real, estudamos a evolução com N do diagrama de fases, incluindo os limites $N \rightarrow 0$ e $N \rightarrow \infty$. O diagrama de fases apresenta seis fases: a paramagnética (P), a ferromagnética de volume (BF), a intermediária de volume (BI), a ferromagnética desuperfície/intermediária de volume (SFBI), a ferromagnética de superfície (SF) e a intermediária de superfície (SI). Em todos os casos verificamos que a superfície está igualmente ou mais ordenada que o volume. Encontramos vários subespaços invariantes, os quais analisamos em detalhe. Obtivemos a evolução do expoente crítico térmico quando N varia para as várias transições que podem ocorrer. Estas estimativas indicam que as transições SI-SF e SFBI-BI pertencem, para todo N , à mesma classe de universalidade, a de uma superfície de Ising, bem como as transições BF-BI e BF-SFBI, que pertencem à

classe de universalidade correspondente a um volume de Ising. Além disso, para um dado N , as transições SF-SFBI, BI-SI e BI-P pertencem à mesma classe de universalidade, a de um volume de Potts de N estados, bem como as transições BF-SF e P-BF, que pertencem a classe de universalidade correspondente ao modelo Cúbico(N) em um volume.

Estimativas para Δ_c , os expoentes críticos térmicos (ν^{2D} e ν^{3D}) e o expoente de crossover (ϕ) nos vários pontos críticos e multicríticos foram obtidas. Comparamos nossos resultados com outras estimativas nos limites $L_B, L_S \rightarrow \infty$ (onde recupera-se o ferromagneto de Ising semi-infinito) e $K_B = K_S = 0$ (onde recupera-se o ferromagneto semi-infinito de Potts de N estados). Através de resultados de expansões em série e Monte Carlo disponíveis em alguns casos particulares, concluímos que nossas estimativas para os expoentes estão qualitativamente corretas (em particular no que concerne à evolução das várias quantidades relevantes quando N varia). As características gerais dos diagramas de fase obtidos reproduzem resultados conhecidos (quando disponíveis) e são consistentes com o que poderia esperar-se para este problema, que foi aqui estudado pela primeira vez. Mencionamos, em particular, que a estrutura do plano invariante gerado pelo ponto fixo Cúbico de volume muda se N é maior ou menor que 3 (na nossa aproximação). Nossos resultados são exatos, para qualquer N , para a rede hierárquica associada à transformação de GR e são aproximações, para $N < N_c$, para os resultados na rede de Bravais (onde, para $N > 2$ ocorrem transições de primeira ordem)).

Finalmente estudamos o comportamento da magnetização

espontânea para um ferromagneto de Ising em uma estrutura fractal, o tapete de Sierpinski, utilizando o método de GR desenvolvido anteriormente. Consideramos acoplamentos J_w entre sítios nas bordas das áreas eliminadas e J em qualquer outra situação. Como este sistema apresenta uma magnetização não uniforme, consideramos, como uma aproximação, os parâmetros de ordem M_w e M para dois subconjuntos de sítios da rede fractal os sítios que pertencem às bordas das áreas eliminadas e os sítios restantes. Obtivemos a dependência destes parâmetros de ordem com a temperatura, e os expoentes críticos β_w e β correspondentes (independentes de J_w/J). Para valores suficientemente altos de J_w/J observamos que, para temperaturas baixas, M_w é maior que M , e que para uma dada temperatura, a curva de M_w intercepta a curva de M , de modo a anular-se na temperatura crítica por baixo da curva de M , já que $\beta_w > \beta$. Observamos também que M e M_w são nulas quando $J = 0$ e $J_w \rightarrow \infty$, mostrando que só existe ordem nas bordas das áreas eliminadas devido a existência dos acoplamentos J .

Mencionamos a seguir possíveis extensões do presente trabalho (algumas já em andamento).

(a) A generalização para o caso quântico do método de GR para calcular o parâmetro de ordem de sistemas magnéticos, com o objetivo de aplicá-lo, por exemplo,

(i) ao ferromagneto de Heisenberg anisotrópico em duas

dimensões (que tem se mostrado relevante para o estudo da magnetização de filmes finos de ^3He em grafite).

- (ii) ao modelo de Heisenberg em rede semi-infinita, para o qual pode-se calcular os parâmetros de ordem superficial e de volume (seria interessante para comparar com os resultados das experiências recentes em Gd).
- (b) O estudo da magnetização para um ferromagneto de Potts em um tapete de Sierpinski, generalizando os resultados obtidos para o modelo de Ising neste fractal.
- (c) O estudo da magnetização de um ferromagneto de Ising em uma esponja de Sierpinski, com $2 < D < 3$ (que pode simular um meio poroso), generalizando a transformação usada para o tapete de Sierpinski. Este sistema possui um diagrama de fases em que estão presentes a fase desordenada, a ordenada de volume e uma terceira fase que corresponde a ter ordem apenas no conjunto de superfícies internas (que delimitam as áreas eliminadas) da esponja. Neste caso, o parâmetro de ordem superficial deve apresentar um comportamento crítico diferente do correspondente ao parâmetro de ordem do volume. No caso da esponja o conjunto de superfícies internas deve desempenhar papel análogo ao da superfície em um sistema semi-infinito.

BIBLIOGRAFIA

- (1) Mattis D.C., "The Theory of Magnetism", Springer Series in Solid-State Sciences, Springer-Verlag, New York, vol. 17 (1981).
- (2) Ising E., Z. Physik 31 (1925) 253.
- (3) Onsager L., Phys. Rev. 65 (1944) 117.
- (4) Kadanoff L.P., Physics 2 (1966) 263.
- (5) Wilson K.G., Phys. Rev. B4 (1971) 3174.
- (6) Allan G., "Magnetic Properties of Low-Dimensional Systems", ed. L.M. Falicov e J.L. Morán-López, Springer-Verlag, Berlin (1986); Freeman A.J. e Fu C.L., ibid; Fisher M.E., Int. J. Quantum Chem. Quantum. Chem. Symp. 16 (1982) 671.
- (7) Cellotta R.J. e Pierce D.T., Science 234 (1986) 333.
- (8) Mermin N.D. e Wagner H, Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 1133.
- (9) Stanley H.E. e Kaplan T., Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 913.
- (10) Kosterlitz J.M. e Thouless D.J., J. Phys. C6 (1973) 1181.
- (11) Frölich J. e Lieb E.H., Phys. Rev. Lett. 38 (1977) 440; Commun. Math. Phys. 60 (1978) 233.
- (12) Liebermann L.N., Fredkin D.R. e Shore H.B., Phys. Rev. Lett. 22 (1969) 539; Liebermann L.N., Clinton J., Edwards D.M. e Mathon J., Phys. Rev. Lett. 25 (1970) 232.

- (13) Alvarado S., Campagna M. e Hopster H., Phys. Rev. Lett. 48 (1982) 51.
- (14) Eib W. e Alvarado S., Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 444.
- (15) Stanley H.E., "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Clarendon Press, Oxford (1971).
- (16) Guggenheim E.A., J. Chem. Phys. 13 (1945) 253.
- (17) Widom B., J. Chem. Phys. 43 (1965) 3898.
- (18) Domb C. e Hunter D.L., Proc. Phys. Soc. 86 (1965) 1147.
- (19) Griffiths R.B., Phys. Rev. 158 (1967) 176.
- (20) Wilson K.G. e Kogut J., Phys. Rep. C12 (1974) 75.
- (21) Niemeijer Th e Van Leeuwen J.M.S. em "Phase Transitions and Critical Phenomena" ed. C. Domb e M.S. Green, vol. 6, cap. 7, Academic Press, London.
- (22) Toulouse G. e Pfeuty P. em "Introduction au Groupe de Renormalisation et a ses applications" (Presses Universitaires de Grenoble - 1975).
- (23) Nienhuis B. e Nauemberg M., Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 1598; Phys. Rev. B11 (1975) 4152.
- (24) Martin H.O. e Tsallis C., J. Phys. C14 (1981) 5645.
- (25) Tsallis C., J. Phys. C18 (1985) 6581.
- (26) Caride A.O. e Tsallis C., J. Phys. A20 (1987) L665.

- (27) Berker A.N. e Ostlund S., J. Phys. C12 (1979) 4961; Melrose J.R., J. Phys. A16 (1983a) 3077, 16 (1983b) L407; Griffiths R.B. e Kaufman M., Phys. Rev. B26 (1982) 5022; Kaufman M. e Griffiths R.B., Phys. Rev. B30 (1984) 241.
- (28) Tsallis C. e Levy S.V.F., Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 950.
- (29) Magalhães A.C.N. e Essam J.W., J. Phys. A22 (1989) 2549; Tsallis C., aparecerá em Phys. Rep. (1990).
- (30) Tsallis C. e Levy S.V.F., J. Phys. C13 (1980) 465; Levy S.V.F., Tsallis C. e Curado E.M.F., Phys. Rev. B21 (1980) 2991; Curado E.M.F., Tsallis C., Levy S.V.F. e Oliveira M.J., Phys. Rev. B23 (1981) 1419.
- (31) Essam J.W. e Tsallis C., J. Phys. A19 (1986) 409.
- (32) Chame A., Tsallis C. e Costa U.M.S., Phys. Rev. B37 (1988) 7549.
- (33) Tsallis C., Coniglio A. e Schwachheim G., Phys. Rev. B32 (1985) 3322; Silva L.R., Almeida N.S. e Tsallis C., Phys. Rev. B32 (1985), 4725.
- (34) Yeomans J.M. e Fisher M.E. Phys. Rev. B24 (1981) 2825.
- (35) Nienhuis B., Berker A.N., Riedel E.K. e Schick M., Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 737; Swendsen R.H., Andelman D. e Berker A.N., Phys. Rev. B24 (1981) 6732.
- (36) Wu F.Y., Rev. Mod. Phys. 54 (1982) 235.
- (37) Oliveira P.M.C., Phys. Rev. B25 (1982) 2034; Oliveira P.M.C. e Tsallis C., J. Phys. A15 (1982), 2865.
- (38) Ver, p or exemplo, McCoy B.M. e Wu T.T., "The Two Dimensional Ising Model", Harvard University, Cambridge (1973), p. 245.

- (39) Chame A. e Tsallis C., J. Phys.: Condensed Matter 1 (1989).
- (40) Binder K, em "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e J.L. Lebowitz, Academic Press, vol. 8 (1983).
- (41) Cerri A., Mauri D. e Landolt M., Phys. Rev. B27 (1983), 6526.
- (42) a) Alvarado S.F., Campagna M., Ciccacci F. e Hopster H., J. Appl. Phys. 53 (1982) 7920; b)Weller D., Alvarado S.F., Gudat W., Schröder K. e Campagna M., Phys. Rev. Lett. 54 (1985), 1555.
- (43) Rau C. e Eichner S. em "Nuclear Methods in Materials Research", ed. K. Bethge, H. Bauman, H. Jex e F. Rauch, Vieweg. Braunschweig (1980); Rau C. e Eichner S., Phys. Rev. B34 (1986) 6347; Rau C. e Robert M., Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 2714; Rau C., Jin C. e Robert M., J. Appl. Phys. 63 (1988) 3667; Rau C., Lin C., Schmalzbauer A. e Xing G., Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 2311.
- (44) Mills D.L., Phys. Rev. B3 (1971) 3887; Lubensky T.C. e Rubin M.H., Phys. Rev. B12 (1975) 3885.
- (45) Bray A.J. e Moore M.A., J. Phys. A: Math. Gen. 10 (1977) 1927.
- (46) Tamura I., Sarmiento E.F., Fittipaldi I.P. e Kaneyoshi T., Phys. Stat. Sol. B118 (1983) 409; Sarmiento E.F., Tamura I. e Kaneyoshi T., Z. Phys. B54 (1984) 241; Kaneyoshi T, preprint.

- (47) Sánchez J.M. e Morán-López J.L., em "Magnetic Properties of Low-Dimensional Systems", ed. L.M. Falicov e J.L. Morán-López, Springer-Verlag (1986); Sanchez J.M. e Morán-López J.L., Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 1120.
- (48) Bennemann K.H., em "Magnetic Properties of Low-Dimensional Systems", ed. L.M. Falicov e J.L. Morán-López, Springer-Verlag (1986).
- (49) Selzer S. e Majlis N., Phys. Rev. B27 (1983) 544.
- (50) Binder K. e Hohenberg P.C., Phys. Rev. B9 (1974) 2194; Binder K. e Landau D.P., Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 318.
- (51) Svrakic N.M. e Wortis M., Phys. Rev. B15 (1977) 396; Burkhardt T.W. e Eisenriegler E., Phys. Rev. B17 (1978) 318; Diehl H.W. e Dietrich S., Phys. Lett. 80A (1980) 408.
- (52) Diehl W., em "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e J.L. Lebowitz, Academic Press, vol. 10 (1986).
- (53) Tsallis C., em "Magnetic Properties of Low-Dimensional Systems", ed. L.M. Falicov e J.L. Morán-López, Springer-Verlag (1986).
- (54) Barber M.N., em "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e J.L. Lebowitz, Academic Press, vol. 8 (1983).
- (55) Binder K. e Hohenberg P.C., Phys. Rev. B6 (1972) 3461.
- (56) Wolfram T, de Wames R.E., Hall W.F. e Palmberg P.W., Surf. Sci. 28 (1971) 45.
- (57) Fisher M.E., J. Vac. Sci. Technol. 10 (1973) 665.
- (58) Lipowsky R. e Wagner H., Z. Phys. B42 (1981) 355.

- (59) Tsallis C. e Sarmiento E.F., J. Phys. C18 (1985) 2777.
- (60) Svrakic N.M., Pandit R. e Wortis M., Phys. Rev. B22 (1980) 1286.
- (61) Magerlein J.H. e Sanders T.M., Phys. Rev. Lett. 36 (1976), 258.
- (62) Griffiths R.B., em "Phase Transitions and Critical Phenomena", ed. C. Domb e M.S. Green, Academic Press, vol. 1 (1972).
- (63) Morán-López J.L. e Sanchez J.M., Phys. Rev. B39 (1989).
- (64) Ohno K. e Okabe Y., Phys. Rev. B39 (1989) 9764.
- (65) Geldart D.J.W., Hargraves P., Fujiki N.M. e Dunlap R.A., Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 2728.
- (66) Mariz A.M., Costa U.M.S. e Tsallis C., Europhys. Lett. 3 (1987) 27; Tsallis C. e Chame A., Journal de Phys. 49 (Colloque C8) (1988) 1619; Tsallis C. e Chame A., em "Thin Films and Small Particles", ed. M. Cardona e J. Giraldo, CIF series, World Scientific (1989).
- (67) Chame A. e Tsallis C., submetido à publicação.
- (68) Bruce A.D. e Aharony A., Phys. Rev. B11 (1975) 478.
- (69) Aharony A. and Bruce A.D., Proc. 20th A. Conf. on Magnetism and Magnetic Materials, San Francisco, AIP Conf. Press, No. 24 (1974) p. 296.
- (70) Kim D., Levy P.M. and Uffer L.F., Phys. Rev. B12 (1975) 989.
- (71) Schick M., Surf. Sci. 125 (1983) 94.

- (72) Harris A.B. e Berlinsky A.J., Can. J. Phys. 57 (1979) 1852.
- (73) Chung T.T. e Dash J.G., Surf. Sci. 66 (1977) 559; Eckert J, Ellenson W.D., Hastings e Passel L.L., Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1329; Diehl R.D., Toney M.F. e Fain Jr. S.C., Surf. Sci. 125 (1983) 116.
- (74) a) Hilhorst H.J., Phys. Rev. B16 (1977) 1253.
b) Queiroz S.L. e Chaves C.M., Z. Phys. B 40 (1980) 99.
- (75) Domany E. e Riedel E.K., Phys. Rev. B19 (1979) 5817.
- (76) Nienhuis B., Riedel E.K. e Schick M., Phys. Rev. B27 (1983) 5625.
- (77) Badke R., Reinick P. e Rittenberg V., J. Phys. A: Math. Gen. 18 (1985) 653.
- (78) von Gehlen G. e Rittenberg V., J. Phys. A: Math. Gen. 19 (1986) 2439.
- (79) Badke R., Phys. Lett. A119 (1987) 365.
- (80) Tsallis C., Mariz A.M., Stella A. e da Silva L.R., aparecerá em J. Phys. A: Math. Gen. 22 (1989).
- (81) Mariz A.M., Tsallis C. e Fulco P., Phys. Rev. B32 (1985) 6055.
- (82) Kim D. e Levy P.M., Phys. Rev. B12 (1975) 5105.
- (83) Aharony A., J. Phys. A: Math. Gen. 10 (1977) 389.
- (84) Costa U.M.S., Tsallis C. e Sarmiento E.F., J. Phys. C18 (1985) 5749.
- (85) Heerman D.W. e Stauffer D., Z. Phys. B44 (1981) 339.

- (86) Le Guillou J.C. e Zinn-Justin J., Phys. Rev. B21 (1980) 397.
- (87) den Nijs M.P.M., Physica 95A (1979) 449.
- (88) Chame A. e Costa U.M.S., Comunicação na STATPHYS 17 (Rio de Janeiro, 31 julho a 4 de agosto, 1989).
- (89) Gefen Y., Mandelbrot B.B. e Aharony A., Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 855.
- (90) Gefen Y., Aharony A., Mandelbrot B.B. e Kirkpatrick S., Phys. Rev. Lett. 47 (1981), 1771.
- (91) Gefen Y., Aharony A. e Mandelbrot B.B., J. Phys. A: Math. Gen. 16 (1983a) 1267; J. Phys. A: Math. Gen. 17 (1984) 1277.
- (92) Havlin S., Ben-Havraham e Movshovits D., Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 2347.
- (93) Suzuki M., Prog. Theor. Phys. 69 (1983) 65.
- (94) Bhanot G., Neuberger H. e Shapiro J., Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 2277; Bhanot G., Duke D. e Salvador R., Phys. Lett. 165B (1985) 355.
- (95) Mandelbrot B.B., "Fractals: Form, Chance and Dimension", New York, Oxford: Freeman (1977); "The Fractal Geometry of Nature", San Francisco:Freeman (1982).
- (96) Costa U.M.S., Roditi I. e Curado E.M.F., J. Phys. A: Math. Gen. 20 (1987) 6001.
- (97) McCoy B. e Wu T.T., Phys. Rev. 162 (1967) 436.
- (98) Au-Yang H., J. Math. Phys. 14 (1973) 937.

(99) Riera R. e Chaves C.M., Z. Phys.B62 (1986) 387.

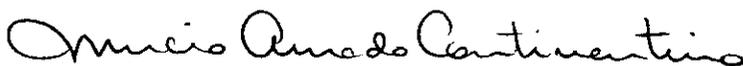
"SISTEMAS MAGNÉTICOS ANISOTRÓPICOS E SEMI-INFINITOS:
PROPRIEDADES CRÍTICAS"

ANNA MARIA NÓBREGA CHAME

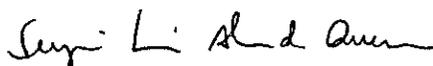
Tese de Doutorado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da banca examinadora os seguintes professores:



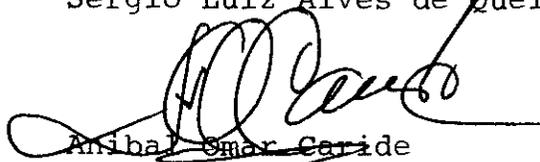
Constantino Tsallis (Presidente)



Mucio Amado Continentino



Sérgio Luiz Alves de Queiroz



Anibal Omar Caride



Jorge Silvio Helman

Rio de Janeiro, 18 de dezembro de 1989