

EDSON DE PINHO DA SILVA

APLICACAO DO METODO DO GRUPO DE RENORMALIZACAO NO ESPACO REAL AO
ESTUDO DA CRITICALIDADE DE SISTEMAS MAGNETICOS DISCRETOS EM REDES
HIERARQUICAS.

TESE DE DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FISICAS

RIO DE JANEIRO-1992

538.3
S 586

à meus pais,

à Graça, Carolina e Clara.

AGRADECIMENTOS

A Constantino Tsallis, meu orientador e amigo, que, com paciência e maestria, me conduziu, como a um "aprendiz de feiticeiro", ao encantado reino da ciência.

Aos amigos Evaldo Curado, Anna Chame, Marcelo Lobato, Sergio Cannas, Francisco Tamariti e Welles Morgado, pelo incentivo e pelas inúmeras discussões em que muito aprendi.

Aos amigos Aglae Magalhães, Helio Verona, Fortunato Menezes, Ladario da Silva, Daniel Stariolo e Sebastião Dias, pelo apoio e valiosas discussões.

Ao meu querido amigo Luiz Carlos Botelho, pelo constante apoio ao longo dos tempos e, também, por ter me introduzido na área de difusão em meios aleatórios. Ao meu querido amigo Francisco Araújo, pelo constante incentivo e apoio.

Ao Dr. Paulo Tavares, que muito me ajudou a obter a tão necessária concentração de esforços.

A Vanda Wood, Myriam Coutinho e Almerio de Castro, pela atenção e gentileza a mim dedicadas.

Ao CBPF, pela oportunidade de participar de sua estrutura acadêmico-científica. À UFRRJ, especificamente aos professores e amigos Lucio Ianarella e Jorge Mello, pelo incentivo e apoio às minhas atividades de doutoramento.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro na fase inicial da tese e à Capes, através do programa Capes/PICD, pelo apoio financeiro no final da tese.

À Nadia de Pinho da Silva, pelo excelente trabalho de revisão.

R E S U M O

Dentro de uma abordagem pelo método do grupo de renormalização no espaço real, estudamos o comportamento crítico dos seguintes modelos estatísticos, em redes hierárquicas planares auto-duais: modelo de Potts na presença de campo magnético externo, modelo n-vetorial discreto puro e diluído.

Para estudar a criticalidade do modelo de Potts, nós estendemos uma formulação proposta por Caride e Tsallis, de modo a incluir a presença de campo magnético externo. Tal método de grupo de renormalização no espaço real, permite-nos, de maneira simples, encontrar a equação de estado e a partir dela a susceptibilidade e seu expoente crítico. No que diz respeito as equações de estado, vale a pena ressaltar que nós as obtivemos para quaisquer valores do campo magnético e da temperatura, e não apenas nas vizinhanças do ponto crítico.

Para o estudo de propriedades críticas do modelo n-vetorial discreto (modelo cúbico), foi desenvolvido um método, o método do corte-colapso, que simplifica bastante a obtenção das equações do grupo de renormalização. Nós estudamos aqui o modelo em questão para todas as regiões do espaço de parâmetros. Obtivemos, como função do número de estados do modelo, os diagramas de fase, e os expoentes críticos térmicos.

Na obtenção da superfície crítica do modelo cúbico diluído temperado, nós usamos uma abordagem simples, que nos permite obter resultados satisfatórios para a superfície crítica em questão. Nossa formulação, baseada na igualdade dos primeiros momentos da

distribuição renormalizada e não renormalizada, permite-nos obter exatamente a superfície crítica em alguns pontos fixos.

Finalmente, na segunda parte da tese, nós estudamos alguns aspectos gerais e outros particulares de uma estatística generalizada recentemente proposta. De fato, a partir de propriedades básicas desta estatística, nós calculamos a dependência térmica do calor específico associado a uma partícula livre ($c_n = An^2 + B$; $A > 0$). Além disso, nós calculamos o limite clássico para uma família de sistemas, cujo espectro é mais geral que o da partícula livre ($c_n = An^r + B$; $A > 0$, $r > 0$).

ABSTRACT

Whithin a real space renormalization group, we studied the critical behaviour of the following statistical models in a planar self-dual hierarchical lattices: The Potts model on an external magnetic field, the pure and diluted discrete n -vector model.

In order to study the criticality of the Potts model, we extended the formulation of Caride and Tsallis, in order to include an external magnetic field. Such a real space renormalization group method enable us, in an easy way, to find the state equation as well as the susceptibility and its related critical exponent. It worthwhile to stress, that here is the first time the state equation is obtained for all values of the temperature and of the magnetic field, and not only for those values near the critical point.

In order to study the critical behaviour of the discrete n -vector model (the cubic model), we developed a method, the break-collapse method, that simplifies the establishment of the renormalization group equations. We have studied here such a model in all regions of the parameter space. We find, as a function of the number of the state of the model, the phase diagram as well as the thermal critical exponents.

In order to find the critical surface of the quenched diluted cubic model, we used a simple approach that enable us to obtain good results for such a critical surface. In our formulation we assume that the first moment is preserved through renormalization, this enable us to obtain exactly some points of the critical

surface as well as the inclination of the surface at these points.

Finally, in the second part of this thesis, we studied some general and other particular aspects of a recently proposed generalized statistics. In fact, from the basic properties of this statistics, we evaluated the thermal dependence of the specific heat associated with a free particle ($\varepsilon_n = An^2 + B$; $A > 0$). Besides that, we evaluated the classical limit for a family of systems whose spectra is general than that of a free particle ($\varepsilon_n = An^r + B$; $A > 0, r > 0$).

INDICE

Introdução Geral-----	9
Primeira parte	
Capítulo I: Susceptibilidade do modelo de Potts ferromagnético numa rede hierárquica planar auto-dual-----	21
Capítulo II: Comportamento crítico do modelo n-vetorial discreto em todas as regiões do espaço dos parâmetros numa rede hierárquica planar auto-dual-----	39
Capítulo III: Superfície crítica do modelo n-vetorial discreto ferromagnético diluído temperado numa rede hierárquica planar auto-dual-----	56
Capítulo IV: Conclusão da primeira parte-----	63
Segunda parte	
Capítulo I: Calor específico de uma partícula livre numa estatística de Boltzmann-Gibbs generalizada----	66
Capítulo II: Conclusão da segunda parte-----	85
Referências (por ordem de aparição nos capítulos):-----	86

I N T R O D U C A O G E R A L

O tratamento de sistemas com um número muito grande de partículas interagentes, constitui assunto de grande complexidade. Apesar do grande número de partículas constituintes, muitas vezes o número de graus de liberdade de um sistema macroscópico pode ser reduzido enormemente. O caráter intensivo ou extensivo de grandezas relevantes, (por exemplo a energia é extensiva, a temperatura é intensiva), permite reconstruir as propriedades de um sistema macroscópico, bastando para isso dar uma amostra microscópica dele. Assim, um líquido de apenas 1000 átomos, terá aproximadamente a mesma energia por unidade de volume e densidade que o mesmo líquido (a mesma temperatura e pressão) com 10^{23} átomos.

Conseqüentemente, uma pergunta interessante que se coloca é: de quanto pode ser reduzido o tamanho de um gás, sem que isso altere qualitativamente suas propriedades? Chama-se comprimento de correlação ao tamanho linear mínimo que se pode alcançar sem que haja tais alterações. O comprimento de correlação ξ depende do estado do sistema (por exemplo, para um gás, ξ depende da pressão e da temperatura). Grande parte dos métodos teóricos disponíveis, funcionam bem quando ξ é pequeno, (tipicamente da ordem de um ou dois espaçamentos atômicos); é o caso da expansão virial, expansão perturbativa, dos métodos de Hartree-Fock entre outros. Embora com suas características próprias, todos esses métodos possuem em comum, o fato de assumirem que as propriedades de um pedaço macroscópico de matéria possam ser relacionadas com as propriedades de um pequeno conjunto de átomos. Um outro exemplo de

sistema onde ξ é pequeno, é a eletrodinâmica quântica (QED) à baixas energias. O comprimento de correlação de um campo quântico é, em geral, o comprimento de onda Compton da partícula de menor massa. Na QED à baixas energias, o comprimento de correlação é dado pelo comprimento de onda Compton do elétron (10^{-11} cm), ou seja, podemos relacionar a QED numa caixa de dimensão linear $> 10^{-11}$ cm, com a QED em todo o espaço. Volumes com dimensões lineares menores que $h/4mc$, onde m é a massa de repouso do elétron, fariam com que a energia da partícula $\bar{p}^2/2m$, em virtude das relações de Heisenberg, fosse maior que $2mc^2$, o que seria suficiente para termos um processo de produção de pares de partículas, causando forte distorção nas interações dos elétrons e fótons.

Contudo, existe uma classe de problemas, incluindo fenômenos críticos, para a qual ξ é muito grande. Devemos observar que ξ grande, significa que o conjunto de átomos que devemos usar para relacionar suas propriedades com as do problema macroscópico original, é de tamanho comparável ao sistema original. Assim sendo, tais problemas possuem muitos graus de liberdade numa região de dimensão linear da ordem do comprimento de correlação. Precisamente no ponto crítico, ξ é infinito; próximo ao ponto crítico, ξ é muito grande. No que diz respeito a QED, para altas energias, é o comprimento de onda Compton do fóton (∞), quem faz o papel do comprimento de correlação.

Assim, além da complicação natural no fato de termos um sistema com grande número de graus de liberdade, tal sistema pode apresentar uma complicação adicional ligada ao fato de possuir grande comprimento de correlação. Nestes casos, teremos que tratar um grande número, (a rigor, infinito), de graus de liberdade corre-

lacionados. Devemos observar que as dificuldades relativas a problemas com grandes comprimentos de correlação, não se limitam àquelas relacionadas a cálculos de grandezas, mas envolvem, também problemas de formulação, pois que, para um dado sistema que é definido por uma certa Hamiltoniana, seria natural esperar que o seu comportamento pudesse ser determinado essencialmente pelas interações presentes na Hamiltoniana, bem como as intensidades das respectivas constantes de acoplamento. Entretanto, isso só é verdade enquanto o comprimento de correlação do sistema é pequeno, à medida que ele aumenta e se torna muito grande, graus de liberdade contidos em grandes regiões do espaço, passam a atuar cooperativamente, de forma a produzir um comportamento no sistema que depende somente de um número pequeno de características gerais dessas Hamiltonianas (i.é, dimensão do parâmetro de ordem, dimensão do espaço, alcance das interações e simetrias da Hamiltoniana) e não dos valores dos vários parâmetros envolvidos. Assim, quando o comprimento de correlação é muito grande, certos aspectos da Hamiltoniana de interação, tem um papel secundário na caracterização do sistema.

Uma consêquência natural de tal papel secundário, é que sistemas com Hamiltonianas diferentes, poderão apresentar o mesmo comportamento cooperativo expressando assim um certo comportamento universal.

No que diz respeito aos fenômenos críticos, o comportamento dos sistemas apresenta basicamente três características fundamentais: (a) Não unicidade no parâmetro de ordem abaixo do ponto crítico, isto é, acima do ponto crítico ele vale zero e por baixo dele seu valor não é único. (b) Comportamento singular de

várias grandezas termodinâmicas. (c) Universalidade dos expoentes críticos, isto é, eles são os mesmos para muitos materiais (Hamiltonianas) diferentes.

O fato que certos aspectos microscópicos parecerem ter pouca importância nos fenômenos críticos, sugere fortemente que o comportamento geral observado, pode ser interpretado como propriedade de simetria, embora não seja claro, a priori, qual deve ser a transformação de simetria em questão.

O método do grupo de renormalização de Wilson^[1], é essencialmente o conjunto de tais transformações. Inspirado nas idéias de Kadanoff^[2], Wilson propôs um método para a abordagem de tais problemas. Essencialmente, o método do grupo de renormalização tem dois objetivos: o primeiro, é o de resolver um problema com muitos graus de liberdade contidos dentro de um comprimento de correlação. O segundo deles, é o de explicar as razões qualitativas dos comportamentos cooperativos.

A formulação do grupo de renormalização, baseia-se principalmente em dois ingredientes: uma operação de redução dos graus de liberdade e uma operação de mudança de escala. A operação de redução de graus de liberdade, conhecida como transformação de Kadanoff, consiste em repetidamente definir spins efetivos, cada um representando um bloco de spins, e a partir daí, construir Hamiltonianas efetivas que representem as interações entre os spins efetivos. Assim, se para um dado sistema o espaçamento entre os seus graus de liberdade é a , e o seu comprimento de correlação é ξ , no primeiro passo do procedimento descrito acima a nova distância entre os graus de liberdade será, por exemplo, $2a$ e construímos uma nova Hamiltoniana, \mathcal{H}_1 . No segundo passo, o

espaçamento será $4a$ e a nova Hamiltoniana, \mathcal{H}_2 , e assim por diante.

Repetindo o procedimento acima um certo número de vezes, alcançaremos uma situação na qual, os novos graus de liberdade efetivos estarão separados entre si de uma distância comparável ao comprimento de correlação. Uma questão importante, é quanto ao alcance das interações efetivas. Entretanto, se a Hamiltoniana original representa interações locais entre os spins, é razoável supor que a Hamiltoniana efetiva represente interações de curto alcance também. Se não for assim, de nada servirá o procedimento de redução de graus de liberdade pois, por exemplo, poderia ocorrer ao construir \mathcal{H}_1 , que o alcance de suas interações fosse da ordem de ξ .

Contudo, se as interações efetivas forem de curto alcance, ao final de n passos teremos uma Hamiltoniana efetiva \mathcal{H}_n com graus de liberdade separados entre si de $2^n a \sim \xi$, isto é, teremos neste estágio, um problema com muito poucos graus de liberdade numa região de um comprimento de correlação. Tal situação é aquela para qual existem vários métodos disponíveis (por exemplo a expansão perturbativa). De fato, o método do grupo de renormalização não reduz o problema, àquele com um único grau de liberdade. Assim sendo, para cálculos práticos devemos quase que invariavelmente, ou resolver o problema em circunstâncias especiais, por exemplo em $4-\epsilon$ dimensões, ou então, usar aproximações grosseiras, isto é, fórmulas de recorrência aproximadas. Só então estaremos diante de um problema com um único grau de liberdade por comprimento de correlação.

Quanto ao segundo objetivo do método do grupo de renormalização, pode-se dizer que as características qualitativas

do comportamento cooperativo, surgem como consequência natural do comportamento iterativo do grupo de renormalização. Visto sobre um ponto de vista mais abstrato, o grupo de renormalização é uma transformação τ , atuando no espaço das Hamiltonianas e que leva \mathcal{H}_0 em $\mathcal{H}_1 = \tau(\mathcal{H}_0)$, \mathcal{H}_1 em $\mathcal{H}_2 = \tau(\mathcal{H}_1)$, etc.... A transformação é a mesma se estamos construindo \mathcal{H}_1 de \mathcal{H}_0 , ou \mathcal{H}_2 de \mathcal{H}_1 ; em cada caso, estamos reduzindo os graus de liberdade por um mesmo fator (por exemplo 2). A iteração deve proceder n vezes até que tenhamos $2^n a \sim \xi$. Note que se ξ fôr grande, o número de iterações será grande.

Uma possibilidade para transformações como estas, é que exista ponto fixo, isto é, \mathcal{H}^* tal que $\tau(\mathcal{H}^*) = \mathcal{H}^*$. A existência de pontos fixos de uma transformação de grupo de renormalização, é uma propriedade da transformação e deve ser verificada para cada transformação resolvendo-se a equação acima para o ponto fixo. Deve-se notar que a equação $\tau(\mathcal{H}^*) = \mathcal{H}^*$, não faz menção alguma a Hamiltoniana original \mathcal{H}_0 . Assim, se \mathcal{H}_A^* , \mathcal{H}_B^* e \mathcal{H}_C^* são três pontos fixos e se um sistema particular tem uma interação inicial \mathcal{H}_0 , nós deveremos construir a sequência $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots$, para descobrir qual dentre \mathcal{H}_A^* , \mathcal{H}_B^* e \mathcal{H}_C^* é o limite da sequência.

Se o limite fôr \mathcal{H}_A^* , então o comportamento cooperativo que resulta de \mathcal{H}_0 será o comportamento cooperativo determinado por \mathcal{H}_A^* . Assim, como \mathcal{H}_A^* é uma propriedade de τ e não de \mathcal{H}_0 , o conjunto de todas as interações iniciais \mathcal{H}_0 que tem \mathcal{H}_A^* como limite da sequência pela transformação do grupo de renormalização, possui o mesmo comportamento crítico, o que expressa a universalidade. Nesse quadro do grupo de renormalização, vemos que os diferentes tipos de comportamentos cooperativos, são determinados pelos pontos fixos da transformação τ .

Resumindo, podemos dizer que o método do grupo de renormalização, criado por Wilson, para resolver problemas envolvendo muitos graus de liberdade correlacionados, em primeiro lugar, gera uma sequência de interações locais efetivas \mathcal{H}_n . Isto é, se a distância entre os graus de liberdade em \mathcal{H}_n é a_n , então as interações devem ter um alcance da ordem de a_n , e escolhendo, por exemplo, $a_{n+1} = 2a_n$, constroem-se \mathcal{H}_{n+1} a partir de \mathcal{H}_n considerando-se regiões do tamanho de a_{n+1} . Em segundo lugar, a existência de uma transformação τ , que deve ser iterada varias vezes para se construir \mathcal{H}_n de \mathcal{H}_0 , sugere que a natureza de \mathcal{H}_n para grandes valores de n , é fundamentalmente determinada por τ ao invés de \mathcal{H}_0 , o que conduz ao conceito de universalidade.

Um ponto importante a ressaltar, sobre o grupo de renormalização, é que τ é simplesmente uma transformação de simetria, como a rotação e a translação o são. Ele representa uma mudança de rótulo ou referência, e não uma mudança no conteúdo físico. A distribuição de probabilidades P_1 associada a $\mathcal{H}_1 = \tau(\mathcal{H}_0)$ é equivalente à P associada a \mathcal{H}_0 , desde que levemos em conta apenas os graus de liberdade provenientes da operação de redução do número de graus de liberdade. Dessa forma os valores médios calculados com P_1 estão relacionados de maneira simples àqueles calculados com P .

No que diz respeito as teorias quânticas de campos, a formulação do grupo de renormalização é um pouco diferente^[3,4]. Entretanto, todas as formulações mantêm em comum o aspecto de transformação de simetria, para a qual as grandezas renormalizadas se relacionam com as não renormalizadas de maneira simples. Como consequência dessas idéias, são deduzidas as equações de

Callan-Zymansik^[5]. Essas equações, são um poderoso instrumento para a análise do comportamento ultravioleta (comportamento a pequenas distâncias) dos gráficos de Feynman das teorias quânticas de campos^[6,7].

Uma outra área onde o método do grupo de renormalização tem sido aplicado com sucesso, é a dos fenômenos críticos dinâmicos. Como exemplos de fenômenos dinâmicos temos: modelos de crescimento, problemas de difusão, problemas de propagação de ondas, problemas que envolvem amortecimento, espalhamento inelástico de neutrons ou luz entre outros. A dinâmica e a evolução de muitos graus de liberdade correlacionados, interagindo através de equações diferenciais (locais) não lineares, costumam resultar em comportamentos cooperativos muito complexos.

Mais uma vez, partindo-se das idéias básicas do grupo de renormalização, pode-se formula-lo de maneira conveniente aos fenômenos dinâmicos^[8,9]. Os seus ingredientes básicos continuam em essência os mesmos. Aqui entretanto quem faz o papel da Hamiltoniana de interação, são as equações cinéticas. Estas são em geral, equações fenomenológicas construídas sobre a imposição de restrições gerais e argumentos de plausabilidade.

Nos fenômenos estáticos, a transformação de Kadanoff é, essencialmente, a eliminação de graus de liberdade de grandes momenta presentes na Hamiltoniana. Nos fenômenos dinâmicos, tal procedimento é realizado ao se resolver as equações cinéticas para grandes momenta. O segundo ingrediente do grupo de renormalização continua sendo aquele de uma simples mudança de escala. O grupo de renormalização dinâmico, tem sido aplicado com sucesso em vários problemas atuais muito complicados, como, por exemplo, modelos

analíticos que descrevem interfaces de crescimento^[10]. Abordagens alternativas baseadas em teorias de campo, tem sido aplicadas com sucesso a esses e a outros problemas dinâmicos^[11].

Voltando aos fenômenos críticos estáticos, um ponto importante a ser resgatado aqui, é aquele que diz respeito aos cálculos práticos. Como foi dito anteriormente, na quase totalidade dos problemas interessantes, há que resolvê-los em dimensões infinitesimalmente próximas da dimensão crítica superior (d_{cs}) do modelo, isto é, $d_{cs} - \epsilon$ ou usar de aproximações grosseiras, caso contrário, teremos ainda um grande número de graus de liberdade correlacionados para manipular. A despeito de todo sucesso, as aproximações não deixam de nos causar um certo desconforto.

Um caminho alternativo, é o de atacar os modelos estatísticos em redes hierárquicas^[12]. As redes hierárquicas, são redes construídas em etapas, a partir de uma unidade fundamental conhecida como célula básica da rede. Em cada etapa da construção da rede, cada ligação da célula básica, é substituída pela própria célula. Ao final de um número infinito de etapas, e somente aí, diz-se que temos uma rede hierárquica.

Embora as redes hierárquicas possuam propriedades métricas e topológicas muito diferentes das redes de Bravais, o que pode implicar que modelos baseados nelas possam fornecer resultados sem sentido nas redes de Bravais, elas constituem um excelente "laboratório" teórico de estudo de modelos estatísticos, visto que, as equações do grupo de renormalização estabelecidas aí para sistemas de spins clássicos, são exatas.

Num leque imenso de sistemas em equilíbrio termodinâmico,

exibindo transições de fase de segunda ordem, nesta tese estarei principalmente interessado, na aplicação do método do grupo de renormalização no espaço real (isto é, operações desenvolvidas no espaço das configurações) ao estudo do comportamento crítico de sistemas magnéticos discretos em redes hierárquicas. Secundariamente, discutirei o calor específico de uma partícula livre, numa estatística generalizada recentemente proposta^[13].

Este trabalho é constituído de duas partes, sendo, a primeira com quatro e a segunda com dois capítulos cujos conteúdos estão condensados aqui abaixo.

PRIMEIRA PARTE

No primeiro capítulo desenvolvemos^[14] um novo procedimento de grupo de renormalização que permite o cálculo direto da equação de estado (isto é, que não necessita calcular a energia livre do sistema) na presença de campos magnéticos externos. Nós aplicamos esse formalismo ao estudo do modelo de Potts de q -estados em redes hierárquicas planares auto-duais do tipo ponte de Wheatstone. Calculamos a susceptibilidade, bem como seu respectivo expoente crítico γ , para os casos ferromagnético (para valores arbitrários de q) e antiferromagnético (para $q = 2$). Estudamos também, o diagrama de fases correspondendo ao caso antiferromagnético $q = 2$. Neste caso, discutimos o papel dos pesos associados aos campos magnéticos no diagrama de fases.

No segundo capítulo, dentro do contexto específico do modelo n -vetorial, nós desenvolvemos um procedimento, (conhecido como método do corte-colapso^[15]), que simplifica, consideravelmente, o cálculo exato da função de correlação associada aos grafos de dois

terminais. A partir daí, nós estudamos a criticalidade^[16] de uma versão estendida de tal modelo, para todos os valores e sinais das constantes de acoplamento. Todos os resultados são exatos para a rede hierárquica planar auto-dual associada. O diagrama de fases, tipicamente, exibe cinco fases diferentes. Nós determinamos também a evolução dos expoentes críticos térmico e de crossover com o número de estados n .

No terceiro capítulo, nós propomos^[17] um grupo de renormalização muito simples, mas, que nos permite calcular, (até onde sabemos pela primeira vez e presumivelmente com alta precisão), a superfície crítica do modelo n -vetorial ferromagnético diluído temperado, na rede hierárquica ponte de Wheatstone.

SEGUNDA PARTE

Nós discutimos aqui algumas propriedades relevantes de uma estatística generalizada proposta recentemente. A partir daí, nós aplicamos esse formalismo ao cálculo do calor específico de uma partícula livre^[18] ($\epsilon_n = An^2 + B$; $A > 0$). Além disso, nós calculamos o limite clássico para uma família mais ampla de sistemas ($\epsilon_n = An^r + B$; $A > 0$, $r > 0$).

REFERENCIAS

- [1] K.G. Wilson, Phys. Rev. D2 (1970), 1438
- [2] L.P. Kadanoff, Physics 2 (1965), 263
- [3] E.C.G. Stueckelberg e A. Petermann, Helv. Phys. Acta 26 (1953) 499
- [4] M. Gell-Mann e F.E. Low, Phys. Rev. 95 (1954) 1300
- [5] C.G. Callan, Phys. Rev. D2 (1970) 1541; K. Symanzik, Commun. Math. Phys. 18 (1970) 227
- [6] D. Politzer, Phys. Rev. D8 (1973) 3633
- [7] E.P. da Silva, Tese de Mestrado UFRJ (1985)
- [8] B.I. Halperin, P.C. Hohenberg e S.K. Ma, Phys. Rev. Lett. 29 (1972), 1548; Phys. Rev. 10 (1974), 139
- [9] S.K. Ma e F. Mazenko, Phys. Rev. Lett. 33 (1974), 1384; Phys. Rev. 11 (1975), 4077
- [10] M. Kardar, G. Parisi e Y-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. 56 (1986), 889
- [11] L.C.L. Botelho e E.P. da Silva, J. Phys. A 23 (1990), 1829
- [12] R.B. Griffiths e M. Kaufman, Phys. Rev. B26 (1982), 5022
- [13] C. Tsallis, J. Stat. Phys. 52 (1988) 479
- [14] E.P. da Silva e C. Tsallis, Physica A 167 (1990), 347
- [15] C. Tsallis e S.V.F. Levy, Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 950
- [16] E.P. da Silva, A.M. Mariz e C. Tsallis, J. Phys. A 24 (1991) 2835
- [17] E.P. da Silva e C. Tsallis, Submetido ao "N. Cim. D"
- [18] E.P. da Silva, C. Tsallis e E.M.F. Curado, Submetido ao J. Phys. A

PRIMEIRA PARTE

CAPITULO I: Susceptibilidade do modelo de Potts ferromagnético, numa rede hierárquica planar auto-dual.

1. INTRODUCAO

O método do grupo de renormalização (RG) no espaço real, tem sido amplamente utilizado para estudar as propriedades críticas, (diagramas de fase e expoentes críticos entre outros), de vários sistemas. Em particular, alguns formalismos de RG [1,2], permitem-nos calcular a energia termodinâmica relevante para valores arbitrários dos parâmetros externos, tais como: temperatura e campo magnético. Através de derivadas apropriadas desta energia livre, nós podemos obter as equações de estado, calor específico, susceptibilidade, etc. Recentemente, foi introduzido [3,4] um novo procedimento, que permite-nos o cálculo direto das equações de estado na ausência de campos externos.

Prosseguindo na abordagem desenvolvida por Caride e Tsallis [4], nós estendemos aqui tal procedimento direto, de forma a incluir o caso onde campos externos estejam presentes. Nós aplicamos este formalismo para estudar o modelo de Potts de q -estados em redes hierárquicas auto-duais do tipo ponte de Wheatstone. Em particular, nós estudamos a susceptibilidade (e seu

respectivo expoente crítico γ) associada a ambos os casos, ferro (valores arbitrários de q) e antiferromagnético ($q = 2$), bem como, o diagrama de fases correspondente ao caso $q=2$, com ênfase especial dada ao papel jogado pelos pesos com os quais o campo externo é levado em conta.

Na seção 2, nós apresentamos o formalismo do grupo de renormalização e suas aplicações ao modelo de Potts; na seção 3, nós apresentamos os resultados, e finalmente, concluímos na seção 4.

2. MODELO E FORMALISMO

Inicialmente, consideremos uma rede hipercúbica D -dimensional de tamanho linear L , cujos sítios primeiros vizinhos interagem, digamos ferromagneticamente, através de uma constante de acoplamento adimensional $K \equiv J/k_B T$. O parâmetro de ordem M , pode ser definido no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$ como $M = N_L(K)/L^D$. $N_L(K)$ é a média térmica canônica do número de sítios, cujos spins estão apontando na direção de fácil magnetização (por exemplo, uma dentre os q -estados do modelo de Potts, digamos o estado $\sigma_i = 0$) menos aqueles, cujos spins estão apontando em qualquer outra direção possível.

Seguindo as idéias de Kadanoff, nós dividimos o sistema de L^D sítios num sistema de L'^D células de tamanho linear $B=L/L' > 1$. Através de um rescalamento, o momento magnético total do sistema deve ser preservado, pois, ele é uma grandeza extensiva. Então, associando um magneton elementar adimensional μ com cada sítio da rede, nós temos:

$$N_{L'}(K') \mu' = N_L(K) \mu \quad (1)$$

ao qual K' e μ' denotam variáveis renormalizadas. Dividindo agora

ambos os lados da eq.(1) por L^D e realizando n iterações nós obtemos, no limite $n \rightarrow \infty$,

$$M(K^{(0)}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{M(K^{(\infty)}) \mu^{(n)}}{B^{nd}} \quad (2)$$

para o qual nós escolhemos arbitrariamente $\mu^{(0)}=1$. Esta fórmula deve ser usada juntamente com as equações de recorrência (padrão) do RG para as constantes de acoplamento, a saber:

$$K' = f(K) \quad (3)$$

Esta relação recursiva normalmente admite três pontos fixos, que são:

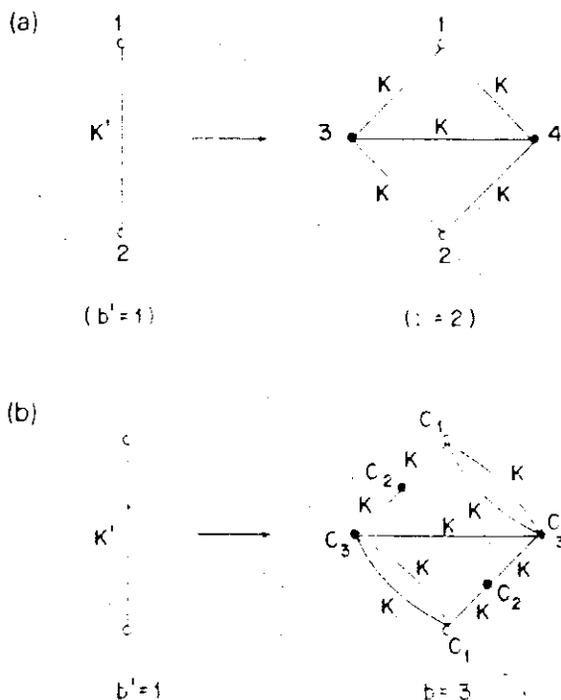
- (i) $K = 0$, que caracteriza a fase paramagnética;
- (ii) $K = \infty$, que caracteriza a fase ferromagnética;
- (iii) $K = K_c$, ponto fixo instável indicando o ponto crítico.

Em geral, quando $K < K_c$, $K^{(\infty)}$ vale zero, assim $M(K^{(\infty)})=0$. Isto leva, através da eq.(2), a que $M(K^{(0)})=0$ como desejado. Por outro lado, quando $K > K_c$, $K^{(\infty)}$ diverge, assim $M(K^{(\infty)})=1$ (um valor convencional para $T = 0$), e conseqüentemente

$$M(K^{(0)}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu^{(n)}}{B^{nd}} \quad (4)$$

Esta fórmula nos dá a dependência térmica do parâmetro de ordem numa região não trivial, (isto é, $T < T_c$), tão logo nós tenhamos

estabelecido uma relação recursiva para μ . No que segue, nós descreveremos como obter tal relação usando, como ilustração, as transformações indicadas na fig.1a (que gera a rede hierárquica ponte de Wheatstone).



Transformações de RC usadas para calcular: (a) a susceptibilidade do ferromagneto de Potts; (b) a susceptibilidade da fase paramagnética do antiferromagneto de Ising bem como diagramas de fases.

O procedimento segue ao longo de dois passos, a saber:

(i) Com o objetivo de estabelecer a equação para o parâmetro de ordem, nós devemos quebrar a simetria. Para fazer isso, nós impomos que o spin do terminal 1, digamos, (dos grafos pequeno e grande da fig.1a) esteja ao longo da direção de fácil magnetização, enquanto que o resto dos spins, (todos os spins internos assim como aquele do terminal 2), estão livres para "escolher" qualquer orientação possível (q estados para o modelo de Potts);

(ii) Como a rede hierárquica não é invariante por translação, as propriedades estatísticas locais do modelos de Potts em tais redes são em geral não homogêneas [5]. Assim sendo nos parece bastante razoável que o parâmetro de ordem seja inomogêneo também [4]. De fato, tal não-homogeneidade foi recentemente exibida [6] neste tipo de redes hierárquicas. Aqui, nós assumiremos que o parâmetro de ordem é proporcional ao número de coordenação em qualquer sítio dado. Embora isto não seja estritamente verdadeiro [6], parece uma boa aproximação, (de fato, isso possivelmente seja estritamente verdadeiro na média). Nós deveremos consistentemente assumir que o campo externo relevante, (não-homogêneo), é também proporcional ao número de coordenação.

Para implementar o cálculo, cada configuração do cluster é pesada com o correspondente fator de Boltzmann. Associamos também a essa configuração um valor para o momento magnético, (cada spin contribui, para m , proporcionalmente ao seu número de coordenação). Nós então impomos (analogamente ao que fizemos na eq.(1))

$$\langle m \rangle_{\text{cluster pequeno}} = \langle m \rangle_{\text{cluster grande}} \quad (5)$$

para onde $\langle \dots \rangle$ denota média térmica canônica. Esta equação tem a forma:

$$u(K') \mu' = v(K) \mu \quad (6)$$

ao qual $u(K')$ e $v(K)$ são funções explícitas que aparecem quando nós impomos a eq.(5).

A relação de recorrência entre K e K' é encontrada da maneira padrão, a saber, preservando a função de correlação entre as raízes, (terminais 1 e 2 da fig.1), de ambos os grafos. Em outras palavras

nós impomos que, (digamos para a fig.1a),

$$\exp(-\beta \mathcal{H}'_{12}) = \text{Tr}_{\sigma_3, \sigma_4} \exp(-\beta \mathcal{H}_{1234}) \quad (7)$$

onde \mathcal{H}_{12} e \mathcal{H}_{1234} são respectivamente as Hamiltonianas associadas com os clusters pequeno e grande. Esta equação fornece a recorrência que nós estávamos procurando, a saber, a eq.(3). Resumindo, eqs.(6) e (3) dão a renormalização no espaço (K, μ) , que por sua vez nos permite calcular a magnetização através da eq.(4).

Por uma questão de clareza, ilustramos na fig.(1a) várias quantidades relevantes aparecendo no cálculo. As distâncias químicas entre os terminais dos grafos pequeno e grande são respectivamente $b = 2$ e $b' = 1$, assim, o fator de escala vale $B = b/b' = 2$. A dimensionalidade fractal intrínseca da rede hierárquica é dada, (veja ref.[7] e referências que se seguem), por $d_f = \ln 5 / \ln 2$; conseqüentemente o denominador aparecendo na eq.(4) é dado por $B^{d_f} = 5$.

A extensão do procedimento acima para uma situação de campo não nulo é simples. A eq.(6) é generalizada para:

$$u(K', H') \mu' = v(K, H) \mu \quad (8)$$

e eq.(3) é generalizada para:

$$K' = f(K, H) \quad (9)$$

$$H' = g(K, H) \quad (10)$$

onde o campo adimensional H é dado por $H \equiv \beta h$ (h é o campo externo). Nós podemos evidentemente verificar que $u(K', 0) = u(K')$,

$v(K,0)=v(K)$, $f(K,0)=f(K)$ e $g(K,0)=0$. Eqs. (8)-(10) juntamente com a eq. (4) fornecem a equação de estados $M(K,H)$. Através de derivação com respeito a H , nós facilmente obtemos a susceptibilidade isotérmica κ .

Vamos agora retornar a fig.1a. As Hamiltonianas adimensionais são dadas por:

$$-\beta\mathcal{H}'_{12} = qK \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} + K' \sum_{i=1}^2 \frac{q^{\delta_{\sigma_i}} - 1}{q - 1} + K'_0 \quad (11)$$

$$-\beta\mathcal{H}'_{1234} = qK \sum_{i=1}^5 \delta_{\sigma_i, \sigma_j} + H \sum_{i=1}^4 C_i \frac{q^{\delta_{\sigma_i}} - 1}{q - 1} \quad (12)$$

onde: $\sigma_i = 0, 1, \dots, q-1$, K'_0 é uma constante aditiva, (necessária para satisfazer a eq.(7)) e $\{C_i\}$ são os números de coordenação ($C_1=C_2=2$, $C_3=C_4=3$). Nós introduzimos nas eqs.(11) e (12), as variáveis aleatórias que conduzem ao parâmetro de ordem do modelo de Potts $(q^{\langle \delta_{\sigma,0} \rangle} - 1)/(q-1)$. As funções $u(K',H')$ e $v(K,H)$ são determinadas pela tabela I. Eqs.(9) e (10) tornam-se:

$$K' = \frac{1}{q} \cdot \left[\ln \left(\frac{\sqrt{R_{00} R_{11}}}{R_{01}} \right) \right] \quad (13)$$

e

$$H' = \frac{q-1}{2q} \cdot \ln \left(\frac{R_{00}}{R_{11}} \right) \quad (14)$$

onde:

$$R_{00} \equiv \exp[5qK+2(C_1 + C_3)H] + 2(q-1)\exp[2qK+(2C_1 + C_3 - \frac{C_3}{q-1})H] \\ + (q-1)(\exp[qK]+q-2)\exp[2(C_1 - \frac{C_3}{q-1})H] \quad (15a)$$

$$R_{01} \equiv \exp[3qK+(C_1+2C_3 - \frac{C_1}{q-1})H] \\ + 2(\exp[2qK]+(q-2)\exp[qK])\exp[(C_1+C_3 - \frac{C_1}{q-1} - \frac{C_3}{q-1})H] \\ + (\exp[3qK]+3(q-2)\exp[qK]+(q-2)(q-3)) \\ \times \exp[h(C_1 - \frac{C_1}{q-1} - 2\frac{C_3}{q-1})] \quad (15b)$$

$$R_{11} \equiv \exp[qK+H(-2\frac{C_1}{q-1} + 2C_3)] \\ + 2(\exp[2qK]+q-2)\exp[H(-2\frac{C_1}{q-1} - \frac{C_3}{q-1} + C_3)] \\ + (\exp[5qK]+2(q-2)\exp[2qK]+(q-2)\exp[qK]+(q-2)(q-3)) \\ \times \exp[-2\frac{H}{q-1}(C_1+C_3)] \quad (15c)$$

Antes de terminar essa seção, voltemos ao caso geral e

estabeleçamos uma fórmula útil para o cálculo do expoente crítico γ . Usando as eqs. (4) e (8) nós obtemos:

$$\frac{M(K', H')}{M(K, H)} = \frac{B^d}{l(K, H)} \quad (16)$$

onde,

$$l(K, H) \equiv \frac{v(K, H)}{u(l(K, H), g(K, H))} \quad (17)$$

TABELA 1- Estabelecimento da eq. (17) para o ferromagneto de Potts

$$q_i = q-1, \quad i = 1, 2, 3$$

$$(a) \langle m \rangle_{\text{grafo pequeno}} = \frac{1}{1} \frac{(2m' \exp[qK' + 2H'] + m' (1 - \frac{1}{q-1}) (q-1))}{\exp[H' (1 - \frac{1}{q-1})]} \frac{1}{\exp[qK' + 2H']} + (q-1) \exp[H' (1 - \frac{1}{q-1})]$$

$$\langle m \rangle_{\text{grafo grande}} = \frac{2(C_1 + C_3) m (q-1) \exp[5qK + 2(C_1 + C_3)H]}{C_3} + \frac{2(C_1 + C_3 - \frac{C_3}{q-1}) m^2 (q-1) \exp[2qK + (2C_1 + C_3 - \frac{C_3}{q-1})H] + \dots}{C_3} / (\exp[5qK + 2(C_1 + C_3)H] + 2(q-1) \exp[2qK + (2C_1 + C_3 - \frac{C_3}{q-1})H] + \dots)$$

(a) Configurações do grafo pequeno

Pesos

μ

t_0
 t_c
 t_c
 t_c

$$\exp[qK - 2H']$$

$$2\mu'$$

$$q_i \exp\left[H' - \frac{H}{q_i}\right]$$

$$\mu' - \frac{H}{q_i}$$

TABELA I (CONT.)

(a) Configurações do grafo pequeno

Pesos

μ



$$\exp[5qK + 2(C_1 + C_2)H]$$

$$2(C_1 + C_2)\mu$$



$$2q_1 \exp\left[2qK + \left(2C_1 + C_2 - \frac{C_1}{q_1}\right)H\right]$$

$$\left(2C_1 + C_2 - \frac{C_1}{q_1}\right)\mu$$



$$(q_1 \exp[q_1K] + q_1 q_2) \exp\left[2\left(C_1 - \frac{C_1}{q_1}\right)H\right]$$

$$2\left(C_1 - \frac{C_1}{q_1}\right)\mu$$



$$\exp\left[3qK - \left(C_1 - \frac{C_1}{q_1} + 2C_2\right)H\right]$$

$$\left(C_1 - \frac{C_1}{q_1} + 2C_2\right)\mu$$



$$2(\exp[2qK] + q_1 \exp[q_1K]) \times \exp\left[\left(C_1 - C_2 - (C_1 - C_2) \frac{q_1}{q}\right)H\right]$$

$$\left(C_1 - C_2 - \frac{C_1 - C_2}{q} \frac{q_1}{q}\right)\mu$$



$$(3 \exp[3qK] + 3q_1 \exp[q_1K] + q_1 q_2) \times \exp\left[\left(C_1 - \frac{C_1}{q_1} - \frac{2C_2}{q}\right)H\right]$$

$$\left(C_1 - \frac{C_1}{q_1} - \frac{2C_2}{q}\right)\mu$$



$$\exp\left[q_1K - \left(-\frac{2C_2}{q_1} - 2C_1\right)H\right]$$

$$\left(-\frac{2C_2}{q_1} - 2C_1\right)\mu$$



$$2(\exp[2qK] + q_1) \exp\left[\left(-\frac{2C_2}{q_1} - \frac{C_1}{q_1} - C_1\right)H\right]$$

$$\left(-\frac{2C_2}{q_1} - \frac{C_1}{q_1} - C_1\right)\mu$$



$$(3 \exp[5qK] + 2q_1 \exp[2qK] + q_1 \exp[q_1K] + q_1 q_2) \times \exp\left[-2\left(C_1 + C_2\right) \frac{H}{q}\right]$$

$$\frac{-2}{q} (C_1 + C_2)\mu$$

O símbolo * significa todos os (q-2) estados possíveis diferente dos " " e " " .

Diferenciando a eq. (16) com respeito a H e então tomando H= 0 nós obtemos

$$\frac{\chi(K')}{\chi(K)} = \frac{B^d}{l(K, 0) \partial g / \partial H |_{H=0}} \quad (18)$$

Na vizinhança do ponto crítico K_c nós temos:

$$\frac{\chi(K')}{\chi(K)} \approx \left(\frac{K' - K_c}{K - K_c} \right)^{-\gamma} \quad (19)$$

como $(K' - K) / (K - K_c) = [\partial f(K, 0) / \partial K]_c$ tem-se:

$$\left[\frac{\partial f(K, 0)}{\partial K} \right]_{K_c}^{-\gamma} = \frac{B^d}{l(K_c, 0) \partial g / \partial H |_{\substack{K=K_c \\ H=0}}} \quad (20)$$

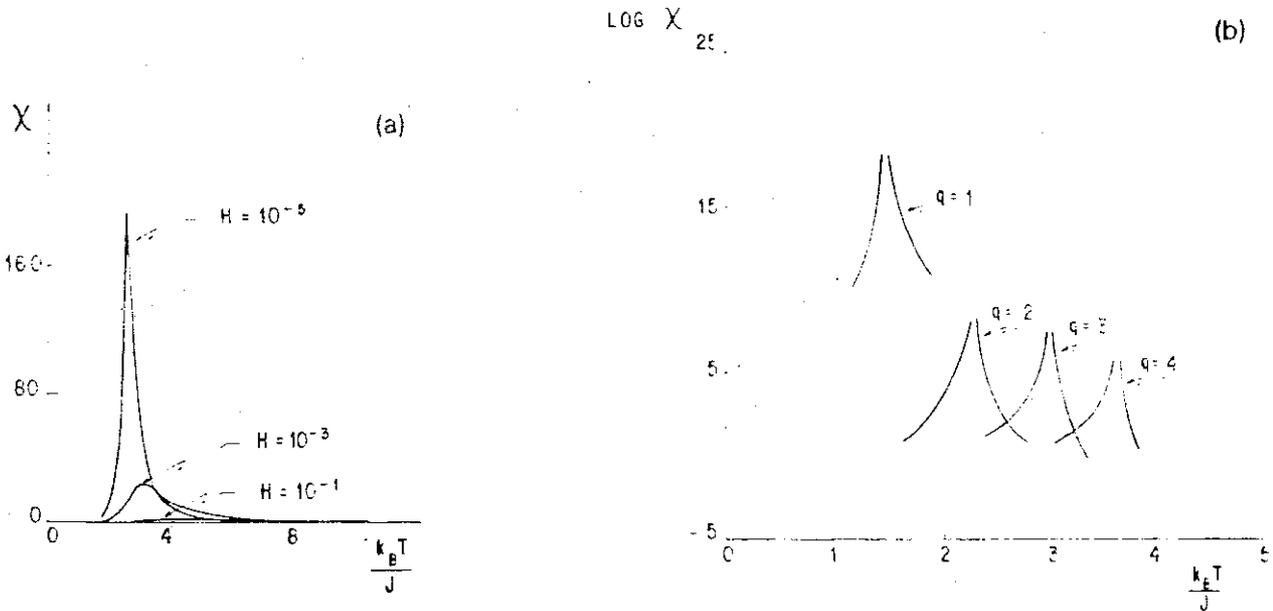
assim:

$$\gamma = \frac{\ln \left(\frac{l(K_c, 0) \partial g / \partial H |_{\substack{K=K_c \\ H=0}}}{B^d} \right)}{\ln \left(\partial f(K, 0) / \partial K |_{K=K_c} \right)} \quad (21)$$

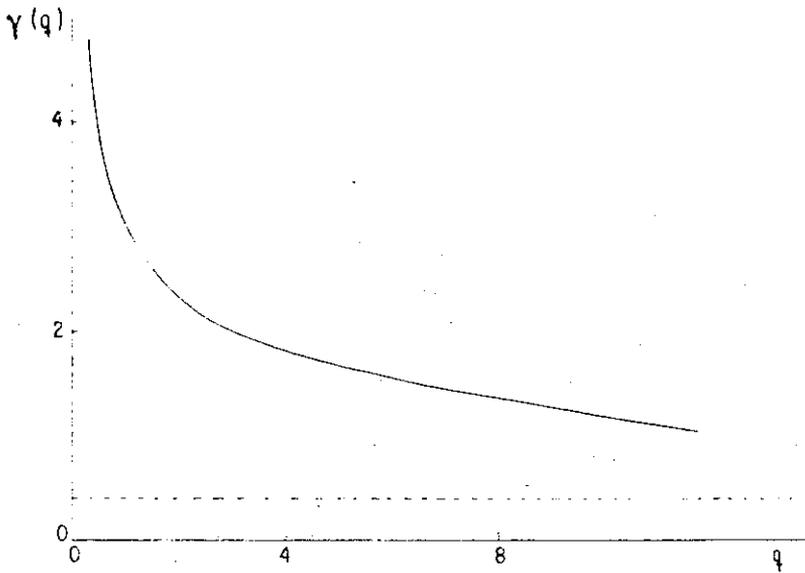
3. RESULTADOS

3.1 O ferromagneto de Potts

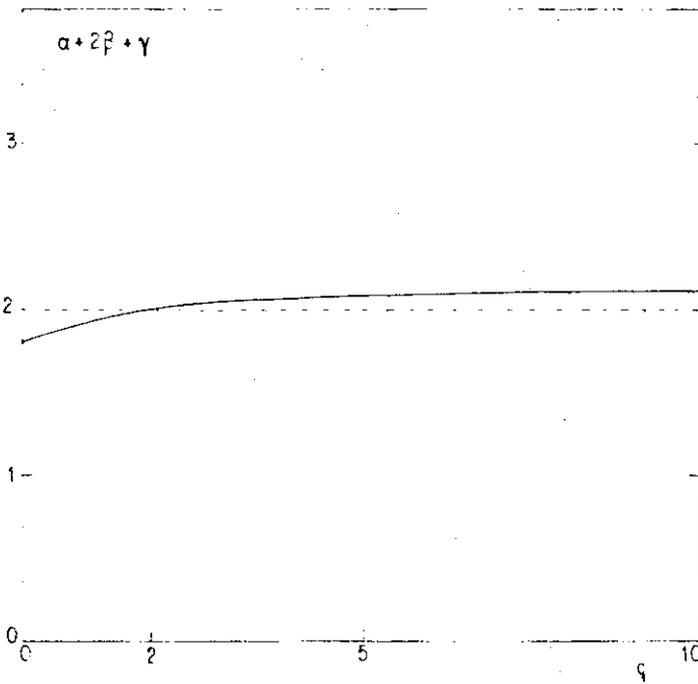
Para calcular a susceptibilidade do ferromagneto de Potts, nós usamos as transformações do RG indicadas na fig.1a, e assumimos que, os campos externos são proporcionais aos números de coordenação [2,8,9]. Nós apresentamos na fig.2a, o resultado para $q = 2$, (para ambas as fases ordenada e desordenada), para valores típicos de H , e, na fig.2b, o resultado para $H = 0$ e valores típicos de q . Nós apresentamos, na fig.3, a dependência em q , de γ . Em particular, para $q = 2$, nós obtemos $\gamma = 2.31$, que reproduz o valor associado por Melrose [8], a rede hierárquica ponte de Wheatstone.



(a) Comportamento da susceptibilidade como função da temperatura, para valores decrescentes do campo; (b) logaritmo da susceptibilidade a campo nulo, como função da temperatura.



O expoente crítico γ como função do número de estados do modelo de Potts. No limite $q \rightarrow \infty$, γ tende para $\gamma_{\infty} \cong 0.4$ (linha tracejada).



O teste da relação de escala de Rushbrooke para vários valores do modelo de Potts de q -estados.

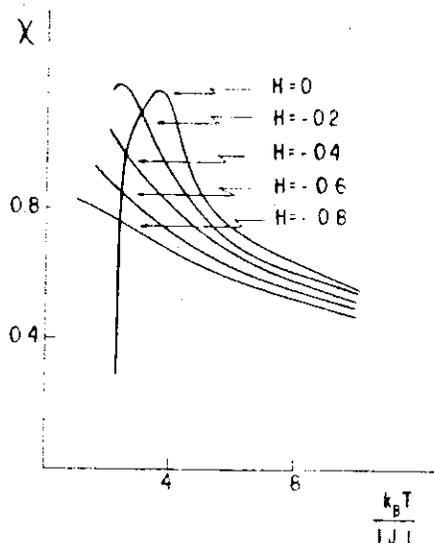
Vamos agora considerar a lei de escala de Rushbrooke, a saber $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, onde α e β são os expoentes críticos, associados ao



calor específico e a magnetização respectivamente. Nós queremos checar se o cálculo presente satisfaz esta relação de escala. Nós obtemos $\alpha(q)$ da relação $2 - \alpha(q) = d_f \nu(q)$ onde $d_f = \ln 5 / \ln 2$ e $\nu(q)$ foi calculado na ref. [4], e referências que se seguem. Nós usamos aqui o $\beta(q)$ obtido também na ref. [4], e $\gamma(q)$ do presente cálculo. Os resultados estão apresentados na fig.4. Nós notamos, para valores de $q \neq 2$, uma pequena violação da igualdade de Rushbrooke. A razão para isso não é de todo clara, mas supomos, estar relacionada à hipótese, (estritamente não verdadeira), que nós fizemos ao qual as magnetizações locais são proporcionais aos números de coordenação.

3.2. Antiferromagneto de Ising

Para discutir o antiferromagneto no caso $q = 2$ nós usamos a transformação do RG indicada na fig.1b [10]. De fato, a fig.1a não preserva o estado fundamental de um antiferromagneto, a distância química entre os terminais da fig.1a é um número par, enquanto que a da fig.1b é um número ímpar. Nós apresentamos na fig.5 a susceptibilidade na fase paramagnética para valores típicos de H . Para realizar os cálculos, nós usamos o diagrama de fases T vs. H , indicado na fig.6 [11]. Para calcular a susceptibilidade na fase ordenada, nós devemos conhecer as equações de estados associadas, às quais não foram calculadas até o momento. Se nós denotamos por T_m , a temperatura para qual um máximo ocorre para a susceptibilidade a campo nulo, nossos resultados fornecem $T_m/T_c \cong 1.5$, que aproximadamente coincide com o resultado de expansão em série para a rede quadrada, calculado por Fisher e Sykes [12].



A susceptibilidade na fase paramagnética para valores típicos do campo, para o antiferromagneto de Ising.

Nós queremos agora exibir, a influência dos pesos locais dentro do presente procedimento do RG. Para fazer isso, nós estudaremos o diagrama de fases T vs. H . Nós atribuiremos os pesos (C_1, C_2, C_3) , aos sítios do cluster como indicado na fig.1b. O diagrama de fases correspondendo a hipótese de proporcionalidade dos campos externos locais com os números de coordenação, (isto é, $(C_1, C_2, C_3) = (3, 2, 4)$), é mostrada na fig.6, e os diagramas de fases correspondentes a outras escolhas típicas, estão mostrados na fig.7 juntamente com seus fluxos.

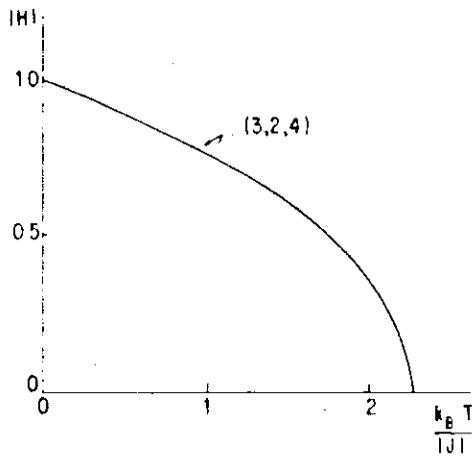


Diagrama de fases para o antiferromagneto de Ising, ^[11] correspondendo a escolha $(c_1, c_2, c_3) = (3, 2, 4)$.

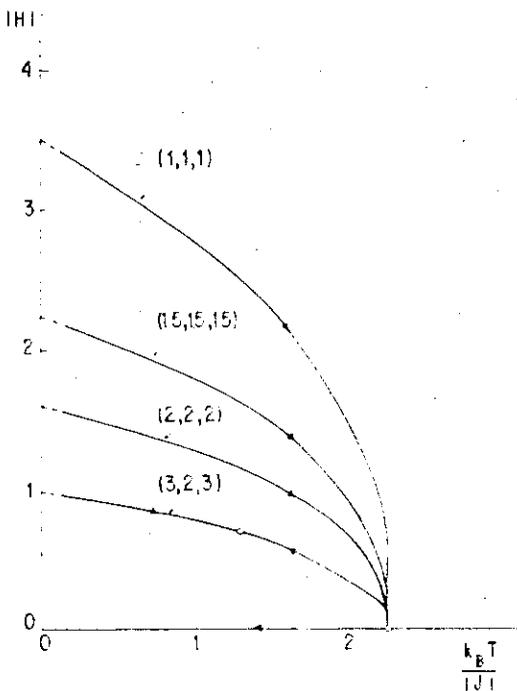


Diagrama de fases correspondendo a outras escolhas típicas de pesos, juntamente com os fluxos. O diagrama correspondente aos pesos $(3, 2, 3)$ apresenta além do ponto fixo trivial $(2.26, 0)$, o ponto fixo $(1.33, 0.68)$.

O ponto $T = 0$ da linha crítica no plano T vs. H pode ser obtido ou por uma extrapolação numérica ($T \rightarrow 0$) da linha $T \neq 0$, ou por cálculo direto através de considerações de energia dos possíveis estados fundamentais. Esses dois procedimentos devem resultar no mesmo valor. Entretanto, dentro do presente RG, isso só

ocorre unicamente para os valores $(C_1, C_2, C_3) = (3, 2, 4)$, que está consistente com a hipótese análoga de proporcionalidade que nós fizemos para as magnetizações locais.

4. CONCLUSOES

Formulamos um grupo de renormalização no espaço real que, pela primeira vez, evitando o cálculo da energia livre, permite-nos um estudo simples da susceptibilidade magnética e seu expoente crítico γ . O método é baseado na inspeção das configurações microscópicas de pequenos grafos. Operacionalmente falando, o cálculo é tão simples quanto aquele de campo médio. Entretanto, ele nos fornece para temperaturas e campos arbitrários, resultados não triviais que podem ser sistematicamente melhorados (basta aumentar o cluster).

Nós aplicamos o procedimento para calcular a susceptibilidade e γ da rede hierárquica ponte de Wheatstone assumindo interações tipo Potts de q -estados ferromagnéticas. Diferentemente do caso da rede hierárquica Diamante [13], no nosso caso a divergência da susceptibilidade ocorre somente na temperatura crítica. A validade da igualdade de Rushbrooke foi enfocada. Para $q = 2$ nós recuperamos o valor para γ disponível na literatura, que é considerado ser exato para redes hierárquicas.

Além disso, nós calculamos a susceptibilidade associada com a fase paramagnética do antiferromagneto de Ising ($q = 2$), bem como, a linha crítica correspondente no plano (T, H) . A influência dos pesos dos campos locais foi também exibida.

REFERENCIAS

- [1]Th.Niemeijer and J.M.J. van Leeuwen,em:Phase Transitions and Critical Phenomena,vol.6,C.Domb and M.S.Green,eds. (Academic Press,New York,1976) p.425.
- [2]H.O.Martin and C.Tsallis,J.Phys.C14 (1981),5645;
Z.Phys.B44 (1981) 325; J.Phys.C16 (1983) 2787.
- [3]C.Tsallis,A.Coniglio and G.Schwachheim, Phys.Rev.B32 (1985) 3322.
- [4]A.O.Caride and C.Tsallis, J.Phys.A:Math.Gen.20 (1987) L665.
- [5]R.B.Griffiths and M.Kaufman,Phys.Rev.B26 (1982) 5022.
- [6]W.A.Morgado,S.Coutinho and E.M.F.Curado, J.Stat.Phys (1990)
L.da Silva Master Thesis at Brazilizn Center for Theoretical Physics (1991)
- [7]C.Tsallis,J.Phys.C18 (1985) 6581.
- [8]J.R.Melrose,J.Phys.A16 (1983) L407,1041,3077.
- [9]J.M.Yeomans and M.E.Fisher,Phys.Rev.B24 (1981)2825.
- [10]A.C.N.Magalhães,C.Tsallis and G.Schwachheim,J.Phys.14 (1981)
1393. P.M.C.de Oliveira, Phys.Rev.B25 (1982) 2034.P.M.C. de
Oliveira and C.Tsallis J.Phys.A15 (1982) 2865.
- [11]R.R. dos Santos,J.Phys.C18 (1985) L1067.
- [12]C.Domb em: Phase Transitions and Critical Phenomena,vol.3,
C.Domb and M.S.Green,eds. (Academic Press,New York,1974)
p.454.
- [13]M.Kaufman and R.B.Griffiths,J.Phys.A15 (1982) L239.
P.M.Bleher and E.Zalys,Commun.Math.Phys.120 (1989) 409.

CAPITULO II: Comportamento Crítico do modelo n-vetorial discreto, em todas as regiões do espaço de parâmetros numa rede hierárquica planar auto-dual

1. INTRODUCAO

O modelo cúbico, tem sido usado [1] para descrever transições de fase estrutural e magnética, que ocorrem em alguns compostos de terras raras. Aharony, propôs [2] uma versão estendida desse modelo, daqui para frente chamado por simplicidade de modelo cúbico, que apresenta vários casos limites interessantes, (como serão vistos na seção II). Esses modelos tem sido estudados usando muitas técnicas diferentes, como teorias de campo médio [1], RG de decoração [2], RG Niemeijer e van Leeuwen [3], RG Migdal-Kadanoff [4], RG variacional [5], invariância conforme [6], RG Monte Carlo [7] e RG que preserva a função de correlação [8].

Em todas essas abordagens, somente uma região restrita do espaço de parâmetros tem sido estudada, a saber, a região com parâmetros positivos. Neste trabalho, nós iremos estabelecer, usando técnicas de grupo de renormalização no espaço real, o diagrama de fases e alguns expoentes críticos do modelo para todas as regiões do espaço dos parâmetros. Para tal, nós usaremos uma rede hierárquica conveniente.

Para estabelecer as equações do RG, nós desenvolveremos para

o modelo cúbico, um método operacionalmente fácil, (referido como o método do corte colapso (BCM)), que substitui a operação de traço por operações topológicas simples em alguns grafos. Este tipo de procedimento, tem sido muito útil numa variedade de problemas, (modelo de Potts [9], rede de resistores [10], percolação direcionada [11], modelo Z(4) [12], modelo Z(n) [13] entre outros). Aqui, nós apresentaremos o BCM e o aplicaremos ao nosso problema.

2. MODELO E FORMALISMO

O modelo cúbico é definido pela seguinte Hamiltoniana de interação adimensional entre os spins i e j :

$$\beta \mathcal{H}_{ij} = -nK \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (1)$$

onde $\beta \equiv 1/K_B T$, $K \in \mathbb{R}$ e o spin s_i em qualquer sítio é um vetor unitário de n -componentes que pode apontar ao longo somente das seguintes $2n$ -direções ortogonais $(\pm 1, 0, \dots, 0)$ ou $(0, \pm 1, 0, \dots, 0)$ ou...ou $(0, \dots, 0, \pm 1)$. Esta interação é uma versão discreta do modelo n -vetorial clássico. O modelo que nós iremos considerar aqui, é uma versão generalizada de (1), que contém uma interação quadrupolar além da interação dipolar (veja por exemplo [2]).

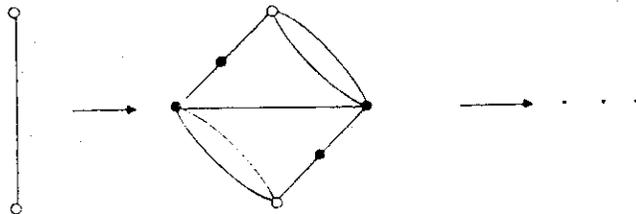
$$\beta \mathcal{H}_{ij} = -nK \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - n^2 L (\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j)^2 \quad (2)$$

Uma motivação direta para se estudar (2), ao invés de (1), é que o termo de interação quadrupolar é gerado sobre as transformações do grupo de renormalização, mesmo se partimos da

Hamiltoniana (1), enquanto que a Hamiltoniana (2) é fechada sobre RG.

O modelo descrito pela Hamiltoniana (2), daqui para frente designado como modelo cúbico, contém como caso particular, muitos modelos interessantes: (i) no limite $n \rightarrow 0$ ([3]), ele reproduz a estatística grand-canônica de um self-avoiding walk (SAW) com fugacidade K ; (ii) para $n = 1$ nós temos o modelo de Ising de spin $1/2$; (iii) o caso $n = 2$ é o modelo simétrico de Ashkin-Teller (ou equivalentemente o modelo $Z(4)$); (iv) se $nL = K$, nós recuperamos o modelo de Potts de $2n$ -estados com constante de acoplamento adimensional $2nK$; (v) se $K = 0$ nós temos o modelo de Potts de n -estados com constante de acoplamento adimensional n^2L ; finalmente (vi) o limite $nL/|K| \rightarrow \infty$ (com K finito) recupera, para todos os valores de n , o modelo de Ising de spin $1/2$ com constante de acoplamento adimensional nK .

Nós estudamos o modelo cúbico na rede hierárquica gerada na forma padrão, (veja fig 1), onde cada ligação do cluster é substituída, na próxima hierarquia, por todo o cluster. Esta célula particular, é uma excelente aproximação para a rede quadrada ([14]) por causa da sua auto-dualidade e também porque ela, corretamente, preserva, sobre RG, o estado fundamental antiferromagnético.



Iteração que gera a rede hierárquica (• e o respectivamente denotam sítios interno e terminal dos grafos).

Agora, com o objetivo de estabelecer as equações de recorrência do RG no espaço ($K < L$), nós imporemos a preservação da função de correlação entre as raízes do grafos mostrados na fig.1, isto é:

$$\exp(-\beta\mathcal{H}') = \text{Tr}_{\substack{\text{sítios} \\ \text{internos}}} \exp(-\beta\mathcal{H}) \quad (3)$$

onde \mathcal{H}' e \mathcal{H} são, respectivamente, as Hamiltonianas associadas com os grafos pequeno e grande, (de fato deve ser incluído uma constante aditiva em \mathcal{H}').

Embora fácil, em princípio, a operação de traço indicada na eq.3 é muito tediosa e nós não a realizaremos aqui. Ao invés

disso, nós usaremos o BCM que passamos agora a descrever.

O estabelecimento do BCM segue dois passos: 1) definição de variáveis convenientes, (transmissividades), relacionadas com as constantes de acoplamento do Hamiltoniano; 2) um conjunto de algoritmos a serem aplicados no grafo particular que nós estamos interessados.

Vamos primeiro introduzir uma variável de ligação conveniente (a transmissividade [8]) para o modelo cúbico, a saber $t = (t_1, t_2)$ onde,

$$t_1 = \frac{1 - \exp(-2nK)}{1 + 2(n-1)\exp[-n(K+nL)] + \exp(-2nK)} \quad (4a)$$

$$t_2 = \frac{1 - 2\exp[-n(K+nL)] + \exp(-2nK)}{1 - 2(n-1)\exp[-n(K+nL)] + \exp(-2nK)} \quad (4b)$$

Agora, considere um grafo de duas raízes, (dois sítios terminais), arbitrário, cuja, transmissividade equivalente nós denotamos por: $t^{(G)} \equiv (t_1^{(G)}, t_2^{(G)})$ com $t_\ell^{(G)}(\{t^{(i)}\}) \equiv N_\ell(\{t^{(i)}\})/N_0(\{t^{(i)}\})$, ($\ell=1,2$) onde $\{t^{(i)}\}$ denota o conjunto de transmissividades respectivamente associados com as ligações do grafo e $N_\ell(\{t^{(i)}\})$ e $N_0(\{t^{(i)}\})$ são polinômios multilineares da forma $A - Bt^{(i)} + Ct^{(i)}$ para a dada ligação j escolhida arbitrariamente; A , B , e C dependem do conjunto de transmissividades, (denotado por $\{t^{(i)}\}'$), das ligações restantes (isto é, o conjunto $\{t^{(i)}\}$ excetuando $t^{(j)}$). A realização de três

$$N_0^{(p)} = N_0^{(1)} N_0^{(2)} + n N_1^{(1)} N_1^{(2)} + (n-1) N_2^{(1)} N_2^{(2)} \quad (8a)$$

$$N_1^{(p)} = N_0^{(1)} N_1^{(2)} + N_0^{(2)} N_1^{(1)} + (n-1) [N_2^{(1)} N_1^{(2)} + N_1^{(1)} N_2^{(2)}] \quad (8b)$$

$$N_2^{(p)} = N_0^{(1)} N_2^{(2)} + N_0^{(2)} N_2^{(1)} + n N_1^{(1)} N_1^{(2)} + (n-2) N_2^{(1)} N_2^{(2)} \quad (8c)$$

como exemplo, considere duas ligações com as respectivas transmissividades;

$$\vec{t}^{(1)} = \left(\frac{N_1^{(1)}}{N_0^{(1)}}, \frac{N_2^{(1)}}{N_0^{(1)}} \right) \text{ and } \vec{t}^{(2)} = \left(\frac{N_1^{(2)}}{N_0^{(2)}}, \frac{N_2^{(2)}}{N_0^{(2)}} \right)$$

Se elas são arranjadas em série, usando (5) e (7) a transmissividade equivalente é dada por:

$$\vec{t}^{(s)} = (t_1^{(1)} \cdot t_1^{(2)}, t_2^{(1)} \cdot t_2^{(2)})$$

Por outro lado, se elas são arranjadas em paralelo, usando (5) e (8) a transmissividade equivalente é dada por $\vec{t}^{(p)} \equiv (t_1^{(p)}, t_2^{(p)})$ onde:

$$t_1^{(p)} = \frac{t_1^{(1)} + t_1^{(2)} + (N-1)t_2^{(1)}t_1^{(2)} + (N-1)t_1^{(1)}t_2^{(2)}}{1 + Nt_1^{(1)}t_1^{(2)} + (N-1)t_2^{(1)}t_2^{(2)}}$$

$$t_2^{(p)} = \frac{t_2^{(1)} + t_2^{(2)} + Nt_1^{(1)}t_1^{(2)} + (N-2)t_2^{(1)}t_2^{(2)}}{1 + Nt_1^{(1)}t_1^{(2)} + (N-1)t_2^{(1)}t_2^{(2)}}$$

Tendo resolvido todos os arranjos, série e paralelo do grafo original, nós escolhemos qualquer ligação, (denotada por $t^{(j)}$), do grafo agora simplificado, (o resultado não depende dessa escolha), e realizamos as operações de corte, de colapso e de pré-colapso. Então, uma vez mais, nós usamos (7) e (8) para as novas ligações em série e paralelo que resultaram das operações acima. Nesse estágio, a transmissividade do grafo é dada pelo conjunto de polinômios:

$$N_\alpha = (1-t_2^{(j)})N_\alpha^B + t_1^{(j)}N_\alpha^C + (t_2^{(j)} - t_1^{(j)})N_\alpha^{PC} \quad (\alpha = 0, 1, 2) \quad (9)$$

onde $\{N_\alpha^B\}$ refere-se a transmissividade do grafo obtido através da operação de corte; similarmente, $\{N_\alpha^C\}$ refere-se a transmissividade do grafo obtida através da operação de colapso e $\{N_\alpha^{BC}\}$ refere-se a transmissividade do grafo resultante da operação de pré-colapso.

O procedimento acima é repetido até que, finalmente, sobre apenas ligações pré-colapsadas. E para resolvê-las, nós usamos,

$$N_0 = n^K ; N_1 = 0 ; N_2 = n^K \quad (10)$$

onde κ é o número ciclomático do grafo, isto é, $\kappa = (\text{número de ligações}) - (\text{número de sítios}) + 1$. Aplicando este procedimento à fig.1 nós obtemos:

$$t_1^{(G)} = N_1^{(G)} / N_0^{(G)} \quad \text{and} \quad t_2^{(G)} = N_2^{(G)} / N_0^{(G)} \quad (11)$$

onde:

$$\begin{aligned} N_1^{(G)} = & 2x_1x_2 + 2(n-1)x_1x_2y_1y_2 + t_1(x_1^2 + x_2^2) + (n-1)^2 t_1 [x_1^2 y_2^2 + x_2^2 y_1^2] \\ & + (n-1)t_1 [2x_1^2 y_2 + 2x_2^2 y_1] + (n-1)t_2 [2x_1x_2y_1 + 2x_1x_2y_2] \\ & + (n-1)(n-2)t_2 (2x_1x_2y_1y_2). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_2^{(G)} = & nx_1^2x_2^2 + 2y_1y_2 + 2nt_1x_1x_2(y_1 + y_2) + n(n-1)t_2x_1^2x_2^2 + t_2(y_1^2 + y_2^2) \\ & + (n-2)y_1^2y_2^2 + n(n-2)t_1(2x_1x_2y_1y_2) + (n-2)(n-3)y_1^2y_2^2t_2 \\ & + (n-2)t_2(2y_1^2y_2 + 2y_2^2y_1). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} N_0^{(G)} = & 1 + nx_1^2x_2^2 + (n-1)y_1^2y_2^2 + 2nt_1x_1x_2 + 2n(n-1)t_1x_1x_2y_1y_2 \\ & + n(n-1)t_2x_1^2x_2^2 + 2(n-1)t_2y_1y_2 + (n-1)(n-2)t_2y_1^2y_2^2. \end{aligned}$$

com,

$$x_1 = t_1^2 ;$$

$$y_1 = t_2^2 ;$$

$$x_2 = \frac{2t_1 + 2(n-1)t_1t_2}{1 + nx_1 + (n-1)y_1} ;$$

$$y_2 = \frac{2t_2 + nx_1 + (n-2)y_1}{1 + nx_1 + (n-1)y_1} .$$

Agora, identificando $t^{(G)}$ com t' , (a transmissividade renormalizada), (11) nos dá as relações recursivas do RG que nós estávamos procurando. Aqui nós enfatizamos que obtivemos as desejadas equações do RG usando, exclusivamente, os algoritmos estabelecidos em (7), (8) e (10), juntamente com as definições (5) e (6). Assim, realizando apenas operações topológicas numa célula elementar da rede hierárquica, nós evitamos realizar a tradicional, porém tediosa, operação de traço indicada em (3). As provas associadas com o BCM foram apresentadas por de Magalhães e Essam na ref. [15]. Para n fixo, o fluxo no espaço (K, L) , (ou equivalentemente no espaço (t_1, t_2)), determinarão o diagrama de fases bem como as classes de universalidades.

Os expoentes críticos (térmico (ν) e de crossover (ϕ)) são obtidos linearizando (11) nas vizinhanças dos pontos fixos instáveis. Denotando os auto-valores da correspondente matriz Jacobiana por λ_1 e λ_2 nós temos:

(i) $\lambda_1 > 1 > \lambda_2$ para pontos fixos críticos (semi-estáveis)

$$\nu = \ln b / \ln \lambda_1 \quad (12)$$

onde b é o fator de expansão linear ($b = 3$ para fig.1);

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

$$\nu_s = \ln b / \ln \lambda_s \quad (s=1,2) \quad (13)$$

e

$$\phi = \ln \lambda_2 / \ln \lambda_1 \quad (14)$$

onde λ_2 denota aquele auto-valor que, a medida que n varia, tende a 1 enquanto λ_1 permanece maior que 1.

3. RESULTADOS

Os diagramas de fase para valores típicos de n , estão mostrados nas fig.2(a)-(d) (respectivamente correspondendo a $n = 1, 2, 3$ e 15).

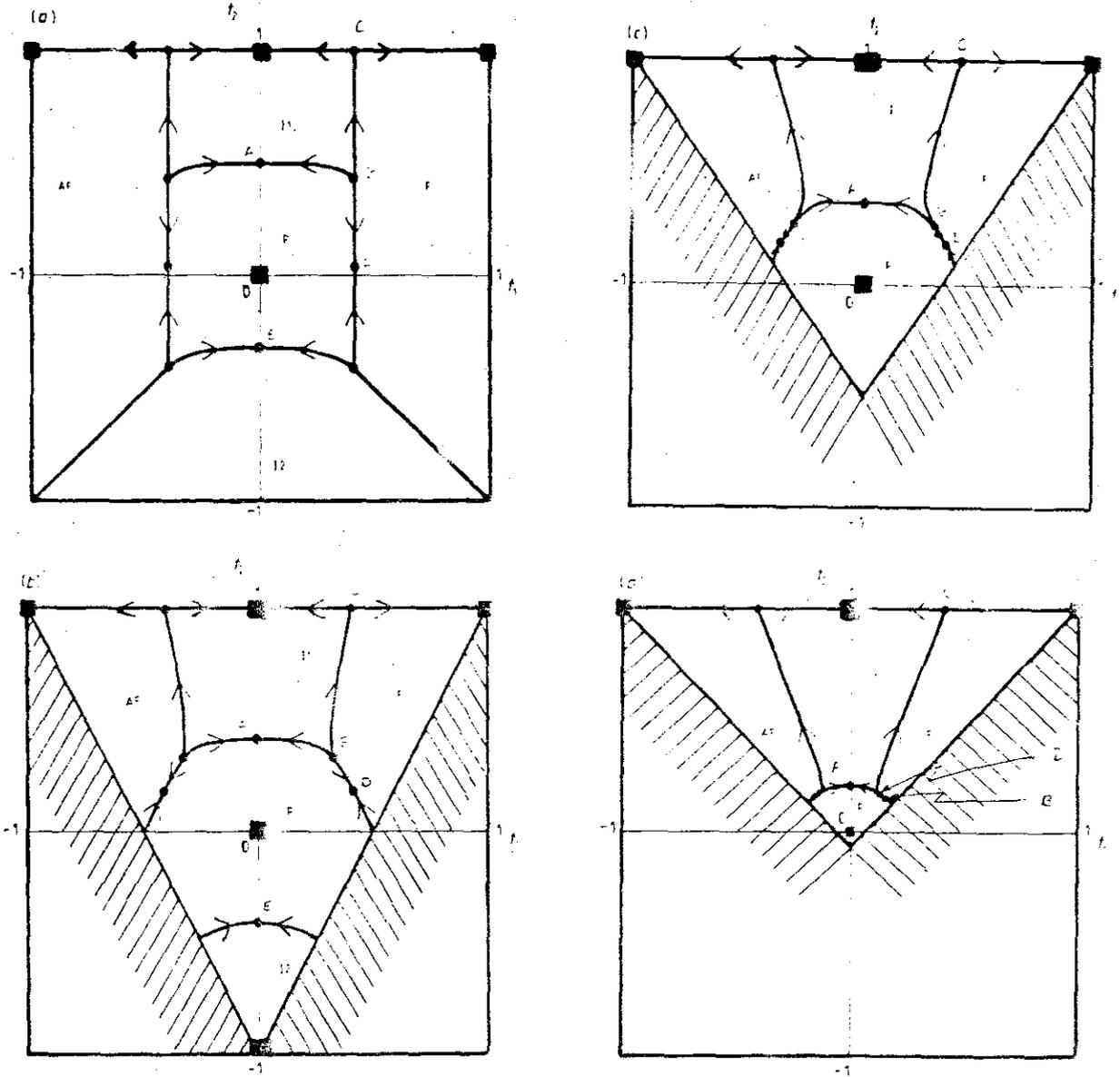


Diagrama de fases no espaço (t_1, t_2) para: (a) $n=1$, (b) $n=2$, (c) $n=3$ e (d) $n=15$. As setas indicam os fluxos do RG. ² e indicam respectivamente os pontos fixos estaveis e intaveis. A linha $t_1 = t_2$ corresponde ao modelo de Potts de $2n$ -estados. A regioã pontilhada denota a regioã não física do espaço de parametros.

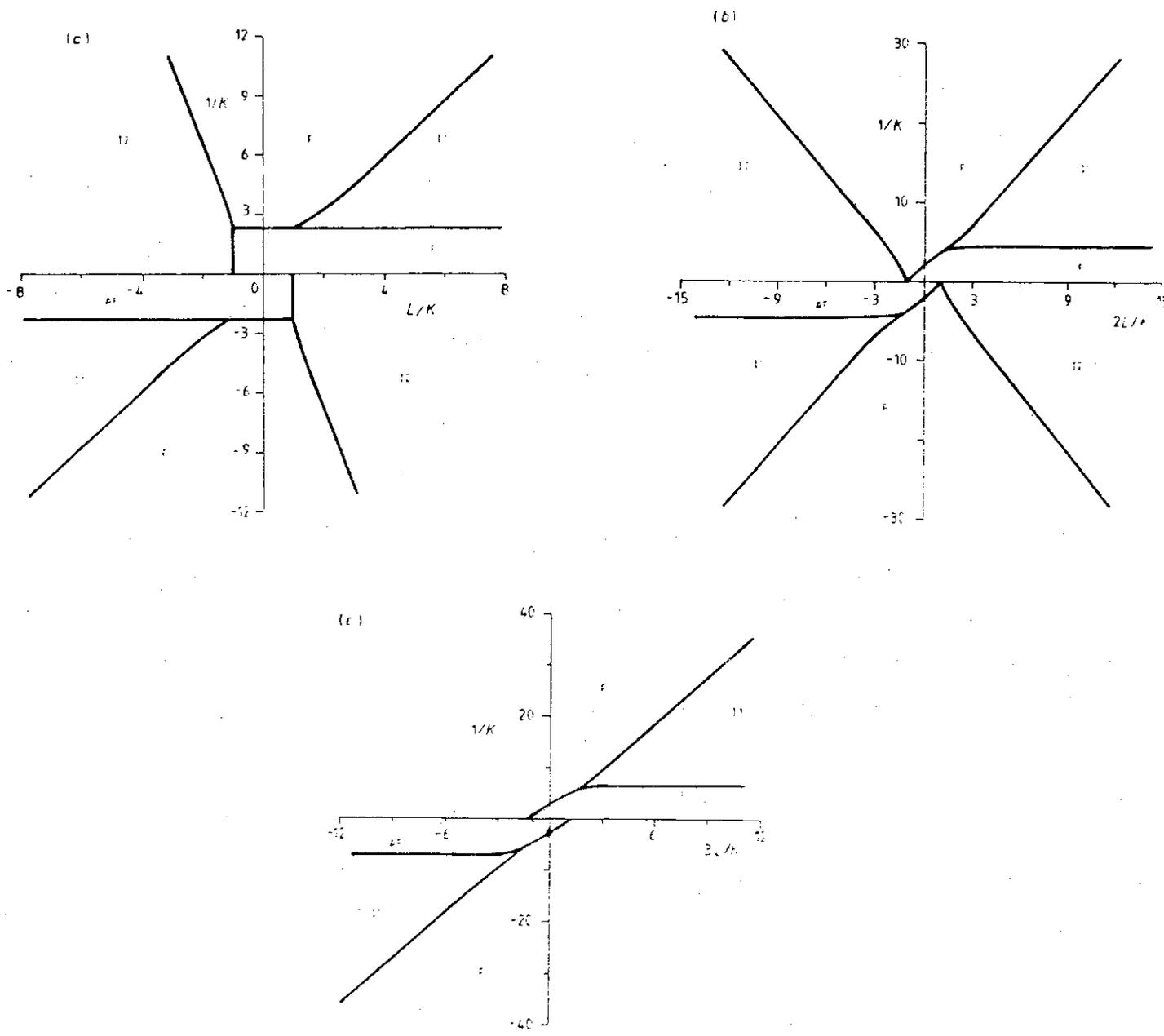


Diagrama de fases no espaço $(1/K, nL/K)$ para: (a) $n=1$, (b) $n=2$ e (c) $n=3$.

As simetrias que nós observamos na figura 2 e 3 vem do fato que , para os grafos da figura 1 com a Hamiltoniana (2), os casos $K > 0$ e $K < 0$ são isomorfos. Desde que K e L são quantidades reais, a região física no espaço (t_1, t_2) satisfazem simultâneamente

$$1+nt_1 + (n-1)t_2 \geq 0 ; 1-nt_1 + (n-1)t_2 \geq 0 ; 1-t_2 \geq 0 \quad (15)$$

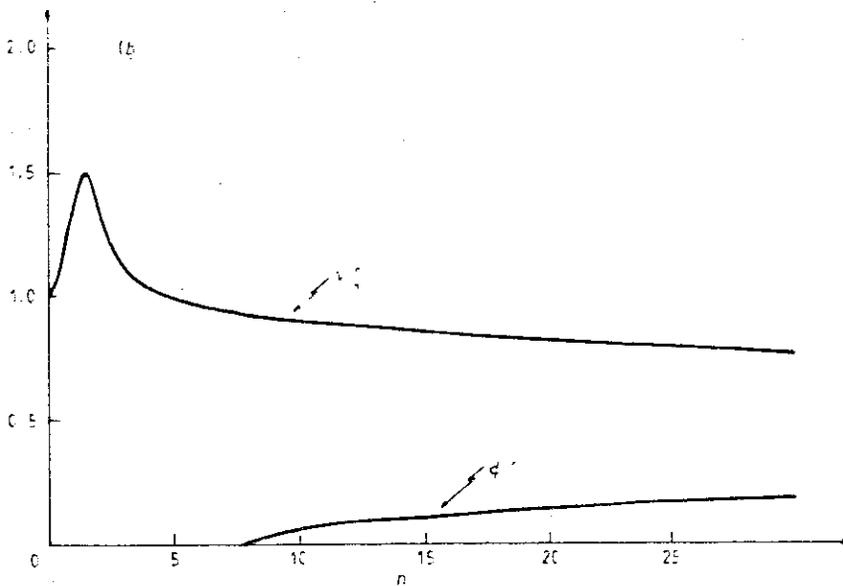
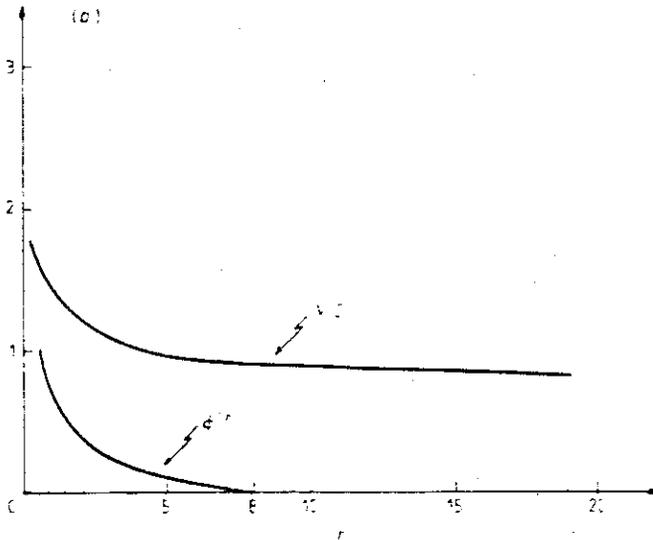
Nossos resultados para $n = 2$ recuperam precisamente aqueles

de [16]; eles são consistentes com os resultados de Monte Carlo disponíveis [17]. O diagrama de fases exibe as cinco fases seguintes: (i) fase ferromagnética, denotada por F ($\langle S_1^z \rangle \neq 0$ e $\langle (S_1^z)^2 \rangle \neq 0$); (ii) fase antiferromagnética, denotada por AF ($\langle S_A^z \rangle = -\langle S_B^z \rangle \neq 0$ e $\langle (S_A^z)^2 \rangle = \langle (S_B^z)^2 \rangle \neq 0$, onde A e B são as sub-redes vizinhas mais próximas); (iii) fase paramagnética, denotada por P ($\langle S_1^z \rangle = \langle (S_1^z)^2 \rangle = 0$); (iv) fase intermediária-1, denotada por I_1 . Nela o sistema escolheu um dentre os n-eixos (i.e, uma dada direção), mas não um sentido dentro dele; (v) fase intermediária-2, denotada por I_2 . Nela também, cada spin escolheu uma dada direção (mas não um sentido nela), entretanto aqui, cada vizinho de um dado spin, escolhe uma direção ortogonal a ele.

Para $n > n^* \cong 2.4$ a fase I_2 desaparece. O diagrama de fases para $n = 1$ (modelo de Ising) exibe uma linha crítica não física, a saber aquela P-I, que deve ser considerada como um resultado espúrio do método^[8] que fornece um limite $n \rightarrow 1$ diferente do caso $n=1$.

A situação genérica para as linhas críticas para valores arbitrários de n, exibem cinco pontos fixos fisicamente não equivalentes, a saber o Potts ferromagnético de n-estados $A \equiv ((t_1, t_2) = (0, 1/(n+1)))$, o Potts ferromagnético de 2n-estados $B \equiv (t_1 = t_2 = 1/(2n+1))$, o Ising ferromagnético $C \equiv ((t_1, t_2) = (1/2, 1))$, o cúbico ferromagnético $D \equiv ((t_1, t_2) = (t_1^c, t_2^c))$, onde (t_1^c, t_2^c) varia continuamente com n) e o Potts antiferromagnético de n-estados $E \equiv ((t_1, t_2) = (0, t_2^{AF}))$, onde t_2^{AF} varia continuamente com n. Na tabela-I, estão representados, para vários valores de n, os expoentes térmicos dos pontos fixos Potts de 2n-estados e cúbico de n-estados.

Outro fato a ser mencionado é que para $n = n^{**} \approx 8$, o ponto fixo do ferromagneto de Potts de $2n$ -estados e o ponto fixo cúbico ferromagnético colapsam e mudam de estabilidade. Os expoentes críticos térmicos e de crossover, (ν e ϕ respectivamente), são mostrados na fig.4 para o Potts de $2n$ -estados e o cúbico estendido ferromagnético. Em particular, no limite $n \rightarrow 0$ (SAW), nós temos que $\nu_T = \ln 3 / \ln(69-16\sqrt{17}) \approx 0.99$.



Dependencia com n do expoente crítico termico ν e de crossover ϕ : (a) modelo de Potts de $2n$ -estados; (b) modelo cúbico estendido.

TABELA-1

n	Potts(2n)	Cúbico(n)
0.1	1.264	1.011
0.5	1.650	1.123
1.0	1.369	1.369
1.6	1.226	1.497
2.0	1.169	1.369
3.0	1.080	1.135
4.0	1.027	1.046
8.0	0.926	0.926
15.0	0.860	0.863
20.0	0.824	0.819

Exponentes críticos térmicos para os pontos fixos Potts 2n-estados e Cúbico n-estados, para alguns valores de n.

4. CONCLUSÃO

Nós consideramos, dentro do esquema do RG no espaço real, a criticalidade do modelo cúbico estendido numa rede hierárquica planar, auto-dual, para todos os valores das constantes de acoplamento. A renormalização deixa o modelo cúbico estendido invariante, assim, todos os resultados presentes, são exatos para a rede hierárquica, e acreditamos ser uma boa aproximação para a rede quadrada, (desde que transições de fase de primeira ordem não estejam envolvidas). Para $n = 2$ nossos resultados são consistentes com a abordagem de Monte Carlo.

Também verificamos duas propriedades interessantes do modelo a medida que o número de estados varia, a saber:

(i) O ponto fixo Potts antiferromagnético de n-estados varia continuamente com n, desaparecendo para valores de $n > n^* \approx 2.4$; em outras palavras, a fase I2 desaparece,

(ii) Os pontos fixos de Potts 2n-estados e cúbico movem-se em direção um ao outro, finalmente colapsando para $n = n^* \approx 8$ e

intercambiando estabilidade daí para frente.

Vale a pena ressaltar aqui, a semelhança numérica entre os expoentes críticos dos pontos fixos Potts de $2n$ -estados e cúbico de n -estados, para valores de n superiores à n^{**} . No presente momento, não podemos excluir a possibilidade que, tais pontos, para tais valores de n , pertençam a mesma classe de universalidade. Este é sem dúvida, um ponto interessante a ser verificado noutra oportunidade.

Além disso, nós estabelecemos um novo método, mais simples do que a operação de traço, para calcular a transmissividade equivalente para um grafo arbitrário de dois terminais. Usando este método baseado em operações topológicas em grafos, tornam-se tratáveis os RG's baseados em clusters relativamente grandes.

REFERENCIAS

- [1]Kim D.,Peter M.L.and Uffer L.F. 1975 Phys Rev B 12 989
- [2]Aharony A. 1977 J.Phys A:Math.Gen.10 389
- [3]Hilhorst H.J. 1977 Phys Rev B 16 1253
- [4]Domany E.and Riedel E.K. 1979 Phys Rev B 19 5817
- [5]Nienhuis B.,Riedel E.K.and Schick M. 1983 Phys Rev B27 5625
- [6]von Gehlen G. and Rittenberg V. 1986 J.Phys A19 2439
- [7]Badke R. 1987 Phys Lett. A119 365
- [8]Tsallis C.,Mariz A.M.,Stella A.and da Silva L.R. 1990 J.Phys A23 329;Chame A.M.N. and Tsallis C. 1990 Physica A165 41
- [9]Tsallis C. and Levy S.V.F. 1981 Phys Rev Lett 47 950
- [10]Tsallis C.,Coniglio A. and Redner S. 1983 J.Phys C16 4339
- [11]Tsallis C. and Redner S. 1983 Phys Rev B28 6603
- [12]Mariz A.M.,Tsallis C. and Fulco P. 1985 Phys Rev B32 6055
- [13]Oliveira P.M.C. 1982 Phys Rev B25 2034;Oliveira P.M.C. and Tsallis C. 1982 J.Phys A15 2865;Oliveira P.M.C.,Tsallis C and Schwachheim 1984 Phys Rev B29 2755
- [14]de Magalhães A.C.N.and Essam J.W.1990 J.Stat.Phys 58 1059
- [15]Souza E.S. 1988 Master Thesis (Universidade Federal do Rio Grande do Norte,Brazil)
- [16]Baltar V.L.,Carneiro G.M.,Pol M.E. and Zagury N. 1984 J.Phys A17 2119

CAPITULO III: Superfície crítica do modelo cúbico ferromagnético diluído temperado numa rede hierárquica planar auto-dual

O modelo cúbico estendido ferromagnético, (ou ferromagneto discreto n-vetorial), temperado com diluição de sítios foi estudado em detalhes [1] no que concerne a sua criticalidade (diagrama de fases, classes de universalidade, expoentes críticos). A técnica utilizada foi o grupo de renormalização variacional, e permitiu a exibição de um rico diagrama de fases bem como de uma linha fixa não trivial associada com o modelo de Ashkin-Teller. Contudo, a precisão dos resultados numéricos (particularmente aqueles correspondendo a superfície crítica) tendem a ser um tanto grosseiros.

No presente trabalho nós focalizaremos nossa atenção na determinação da superfície crítica do problema ainda temperado porém agora com diluição de ligações para o mesmo sistema. Como verificaremos adiante, o cálculo fornece resultados cuja precisão é presumivelmente bastante boa, a despeito da simplicidade do método.

O modelo cúbico estendido, temperado com diluição de ligações é definido pela Hamiltoniana adimensional

$$-\beta\mathcal{H} = NK \sum_{\langle i, j \rangle} S_i \cdot S_j + N^2 L \sum_{\langle i, j \rangle} (S_i \cdot S_j)^2 \quad (1)$$

onde $\beta \equiv 1/K_B T$, $\langle i,j \rangle$ percorre todos os pares de sítios primeiros-vizinhos, o spin S_i em qualquer sítio, é um vetor unitário de n componentes que pode apontar ao longo de $2n$ direções ortogonais como definido no capítulo III; K e L são variáveis aleatórias acopladas satisfazendo a seguinte lei de distribuição

$$\mathcal{P}(K, L) = (1-p)\delta(K) \delta(L) + p\delta(K - K_0) \delta(L - L_0) \quad (2)$$

com $K_0 > 0$ e $K_0 + nL_0 > 0$ para garantir que o estado fundamental seja ferromagnético. Usando a variável transmissividade do modelo cúbico, podemos reescrever a eq.(2) como:

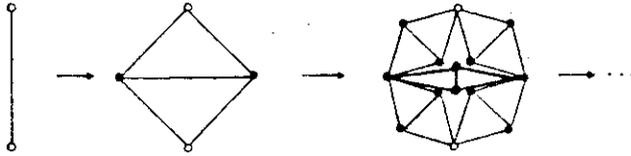
$$\mathcal{P}(t_1, t_2) = (1-p)\delta(t_1) \delta(t_2) + p\delta(t_1 - t_1^0) \delta(t_2 - t_2^0) \quad (4).$$

Para discutir a criticalidade deste sistema, nós devemos agora construir as equações do RG no espaço real seguindo ao longo das linhas estabelecidas na ref.[3]. Este tipo de abordagem tem se mostrado útil para uma série de sistemas similares. A aproximação consiste em trocar a rede quadrada (nosso interesse primeiro) por uma rede hierárquica auto-dual ponte de Wheatstone (veja fig.1). É exatamente esta dualidade que, juntamente com outros ingredientes do procedimento, garantirão alta precisão aos resultados do diagrama de fases.

Se nós associarmos com cada uma das cinco ligações do grafo da fig.1 a distribuição dada pela eq.(4), nós obteremos uma distribuição global que denotaremos por $P_w(t_1, t_2)$. Esta distribuição é mais complexa do que aquela binária. Nesse momento introduziremos uma segunda aproximação, a saber, nós usaremos ao

invés de $P_w(t_1, t_2)$, a seguinte distribuição binária renormalizada:

$$\mathcal{P}'(t_1, t_2) = (1-p')\delta(t_1)\delta(t_2) + p'\delta(t_1-t_1^0')\delta(t_2-t_2^0') \quad (5)$$



Iteração associada com a ponte de Wheatstone (* e o denotam respectivamente os sítios internos e terminais dos grafos).

Para obter $(p', t_1^{0'}, t_2^{0'})$ como função de (p, t_1^0, t_2^0) nós impomos o seguinte conjunto de equações:

$$p' = 2p^5 - 5p^4 + 2p^3 + 2p^2 \quad (6a)$$

$$\langle t_1 \rangle_{\mathcal{P}'} = \langle t_1 \rangle_{\mathcal{P}_w} \quad (6b)$$

$$\langle t_2 \rangle_{\mathcal{P}'} = \langle t_2 \rangle_{\mathcal{P}_w} \quad (6c)$$

onde $\langle \dots \rangle$ denota o valor médio usual. Notemos que a eq.(6a) nada mais é do que a relação de recorrência usual para a percolação de ligações, associada com o grafo ponte de Wheatstone. Eq.(6b) e (6c) podem ser explicitamente resolvidas resultando,

$$t_1^{0'} = F_1(p, t_1^0, t_2^0) \quad (7a).$$

$$t_2^{0'} = F_2(p, t_1^0, t_2^0) \quad (7b).$$

onde F_1 e F_2 são funções relativamente simples.

Através do uso recursivo das equações (6a), (7a) e (7b), nós

obtemos o fluxo de RG no espaço (p, t_1^0, t_2^0) . Nós verificamos a existência de quatro pontos fixos relevantes, completamente estáveis, a saber para $(p, t_1^0, t_2^0) = (1, 0, 0)$ e $(0, 0, 0)$ que caracteriza a fase paramagnética (P), bem como $(1, 1, 1)$ e $(1, 0, 1)$ respectivamente caracterizando as fases ferromagnética (F) e intermediária (I). Relembramos aqui que na fase intermediária o sistema escolheu um dentre os n eixos, mas não uma direção dentro deste eixo. Os pontos fixos instáveis (t_1, t_2) no plano $p = 1$ são: Ising $(2^{-1}, 1)$, Potts de n estados $(0, (n+1)^{-1})$, Potts $2n$ estados $(t_1 = t_2 = (2n+1)^{-1})$ e cúbico de n estados (que para $n = 1$ é $(0.41, 0.03)$, para $n = 2$ é $(0.41, 0.17)$, e para $n = 3$ é $(0.34, 0.21)$). As superfícies críticas para valores típicos de n estão indicadas nas figs. 2 e 3.

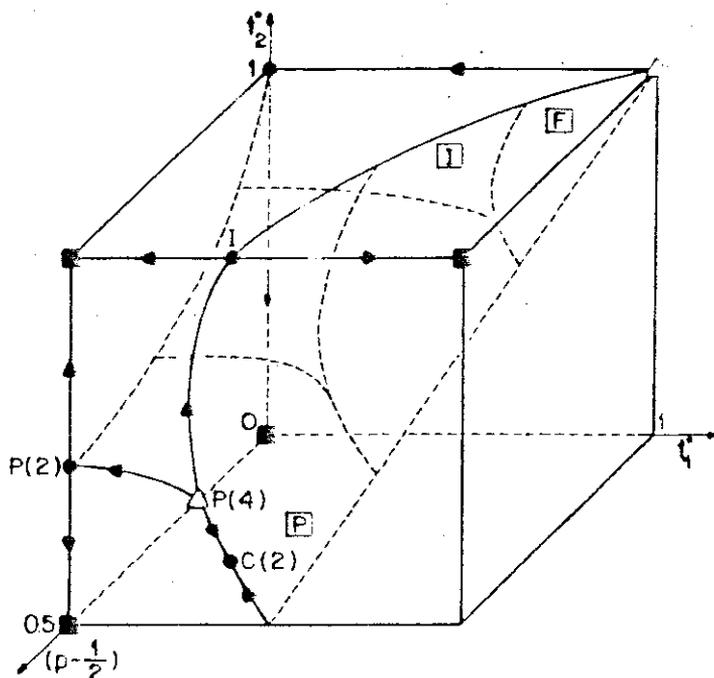


FIGURE 2

Diagrama de fases do modelo cúbico $n=2$ com diluição de ligações. P, F, I, denotam respectivamente as fases para, ferro e intermediária. $O, C, P(2), P(4)$ denotam respectivamente os pontos fixos instáveis, semi-estáveis e completamente estáveis. A região abaixo do plano determinado pelo ponto $(p, t_1, t_2) = (1, 1, 1)$ e a reta que une os pontos $(1, 1/2, 0)$ e $(1/2, 1, 1)$, é proibida pois aí os acoplamentos K e L tornam-se imaginários.

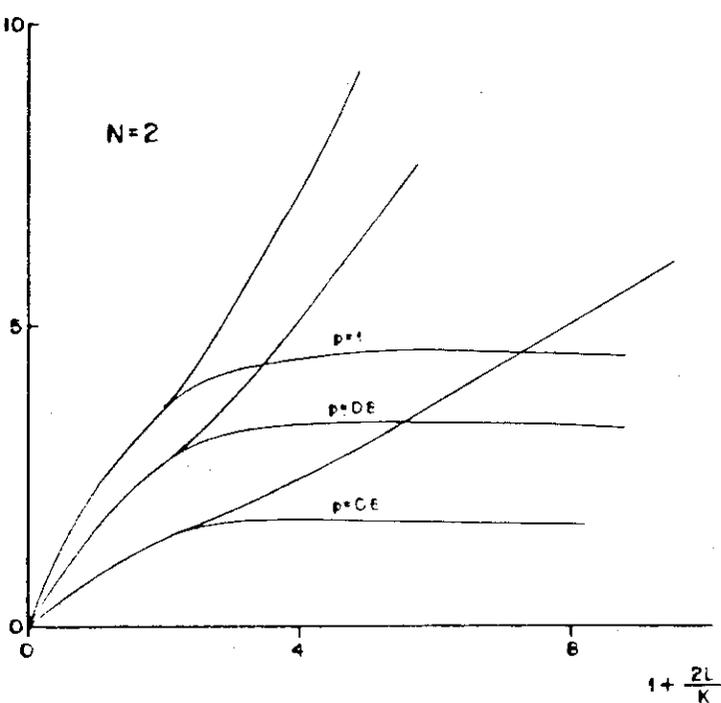


FIGURE 3a

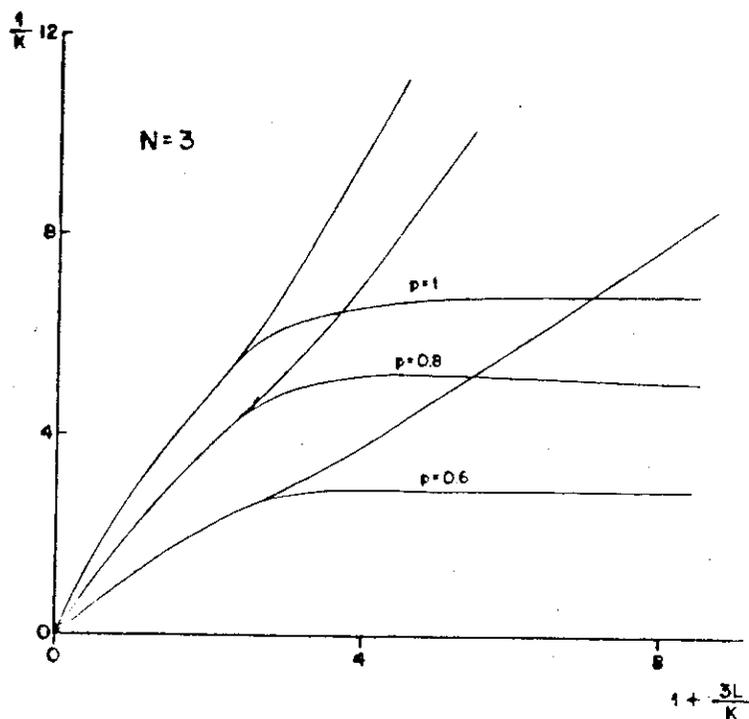


FIGURE 3b

Tipicos planos p : (a) para $n=2$, (b) para $n=3$.

Da linearização das equações do RG nas vizinhanças dos pontos fixos, resulta a matriz Jacobiana que tipicamente permite-nos o cálculo das inclinações indicadas na tabela 1.

O fato de que, dentro do presente esquema de aproximação, a equação de recorrência para p é desacoplada de (t_1^0, t_2^0) , torna nosso procedimento não apropriado para a discussão das classes de universalidades, (para a discussão desse ponto para $p = 1$ veja capítulo III, ref. [2] e [4]). Além disso tal procedimento dá origem a um salto artificial no diagrama de fases, próximo ao ponto de percolação $p = 1/2$, (este tipo de dificuldade já foi encontrado em abordagens semelhantes [5]).

TABLE 1

SLOPE	PRESENT RG	EXACT
$-\frac{\partial t_1}{\partial p} \Big _{\substack{t_1 = \sqrt{2} - 1 \\ t_2 = 1}}$	0.45	$6\sqrt{2} - 8$ ≈ 0.48
$-\frac{\partial t_1}{\partial p} \Big _{\substack{t_1 = 0.41 \\ t_2 = 0.17}}$	0.50	1/2
$-\frac{\partial t_1}{\partial p} \Big _{\substack{t_1 = 0.34 \\ t_2 = 0.21}}$	0.30	?
$-\frac{\partial t_1}{\partial p} \Big _{\substack{t_1 = t_2 = \\ (1+\sqrt{2})^{-1}}}$	0.45	$2\sqrt{2} / (1+\sqrt{2})^2$ ≈ 0.48
$-\frac{\partial t_1}{\partial p} \Big _{\substack{t_1 = t_2 = \\ 1/3}}$	0.39	4/9

Valores para alguns pontos fixos e respectivas derivadas no plano $p=1$.

Podemos concluir este trabalho dizendo que, a despeito da simplicidade matemática, o presente tratamento fornece superfícies críticas que acreditamos serem boas aproximações para a rede quadrada, desde que a transição seja de segunda ordem, e a rede hierárquica ponte de Wheatstone, para a qual a transição parece ser sempre de segunda ordem.

REFERENCIAS

- [1] Nienhuis B., Riedel E.K., Schick M., Phys Rev B 27, 5625 (1983)
- [2] Tsallis C., Mariz A.M., Stella A., da Silva L.R., J. Phys A: Math. Gen. 23 329 (1990)
- [3] Yeomans J.M. and Stichcombe R.B., J. Phys C 12, L169 (1979);
Yeomans J.M. and Stichcombe R.B., J. Phys C 12, 347 (1980);
Tsallis C., Levy S.V.F., J. Phys. C: Solid St. Phys. 13, 465 (1980); Levy
S.V.F., Tsallis C., Curado E.M.F., Phys Rev B 21, 2991 (1980); Mariz
A.M., Nobre F.D. and de Souza E.S. to appear in Physica A (1991)
- [4] Aharony A., J. Phys A: Math. Gen. 10, 389 (1977); da Silva E.P., Mariz
A.M. and Tsallis C., to appear in J. Phys. A: Math. Gen. (1991)
- [5] Tsallis C., Stichcombe R.B., Buck B., J. Phys C: Solid St. Phys. 17, 301
(1984)

CONCLUSAO DA PRIMEIRA PARTE

Nós estudamos de maneira unificada, através do formalismo do grupo de renormalização no espaço real, a criticalidade de alguns sistemas magnéticos discretos em redes hierárquicas planares auto-duais.

A definição de nossos modelos clássicos em redes hierárquicas possibilitou-nos a obtenção de resultados exatos em tais redes hierárquicas. Além disso, na escolha que fizemos das redes planares auto-duais procuramos tanto quanto possível manter as propriedades fundamentais de simetria presentes em redes de Bravais.

Para o modelo de Potts q -estados ferromagnético na presença de campo magnético externo numa rede hierárquica tipo ponte de Wheatstone, fomos capazes de calcular, usando grupo de renormalização, a susceptibilidade magnética e seu expoente crítico γ . Até onde sabemos esta foi a primeira vez em que se obteve a susceptibilidade do modelo de Potts a partir do grupo de renormalização. De fato tal método possibilitou-nos encontrar a equação de estado para valores arbitrários da temperatura e do campo magnético e não apenas aqueles nas vizinhanças do ponto crítico.

A partir do cálculo do expoente crítico $\gamma(q)$ (que aliás para $q=2$ recupera o valor disponível na literatura e que é considerado exato para as redes hierárquicas) pudemos testar a validade da relação de Rushbrooke, que é verificada para $q=2$, mas que apresenta pequenos desvios (não superiores a 10%) para os demais valores de q . Além disso calculamos também com sucesso a fase

paramagnética do antiferromagneto de Ising ($q=2$) bem como a correspondente linha crítica no plano (T,H) . Para este caso, o estudo das influência dos pesos no diagrama de fases nos sugere que os pesos corretos são aqueles numericamente iguais aos números de coordenação da rede.

Nós estudamos também, no quadro do grupo de renormalização no espaço real, o comportamento crítico em todas as regiões do espaço de parâmetros de uma versão estendida do modelo n -vetorial discreto. De fato obtivemos para o número de estados (n), a evolução do diagrama de fases bem como a dos expoentes críticos térmicos e de crossovers.

Para formular as equações do grupo de renormalização no espaço real, desenvolvemos aqui um método topológico mais simples que a operação de traço e que permite calcular a transmissividade equivalente para um grafo arbitrário de dois terminais. Nossos resultados foram comparados com aqueles obtidos por outros métodos (Monte Carlo, por exemplo) e se mostraram bastante consistentes. Além do mais vale a pena ressaltar que até onde sabemos esta foi a primeira vez que se abordou todas as regiões do espaço do diagrama de fases (incluindo a fase antiferromagnética entre outras). Novamente aqui a nossa escolha de rede hierárquica auto-dual preserva as simetrias da rede quadrada, portanto acreditamos serem os nossos resultados boas aproximações para tal rede de Bravais.

O método de corte-colapso desenvolvido para o modelo cúbico, nos possibilita encontrar de maneira simples as equações do grupo de renormalização, o que facilita a discussão do caso de diluição temperada de ligações. Uma escolha muito simples adotada por nós é

a da preservação por renormalização, do primeiro momento da distribuição de probabilidades. Esta escolha, de fato a mais simples possível, permite-nos encontrar a superfície crítica do modelo cúbico com diluição de ligações com uma precisão presumivelmente bastante boa, a despeito da simplicidade do método. Entretanto exatamente por causa desta simplicidade, toda a criticalidade fica governada pelo plano $p=1$. Mas aqui também vale a pena ressaltar ser esta a primeira vez em que se calcula o diagrama de fases do modelo cúbico com diluição de ligações usando o método do grupo de renormalização no espaço real.

SEGUNDA PARTE

CAPITULO IV: Calor específico de uma partícula livre numa estatística de Boltzmann-Gibbs generalizada

I INTRODUCAO E CONSIDERACOES GERAIS.

Recentemente C.Tsallis^[1] propôs uma possível generalização para a estatística de Boltzmann-Gibbs. Esta generalização foi baseada na seguinte expressão para a entropia:

$$S_q = k \frac{1 - \sum_n p_n^q}{q-1} \quad (1)$$

onde n percorre todos os microestados do sistema, $\{p_n\}$ são as respectivas probabilidades e q um número real que identifica diferentes estatísticas; o limite $q \rightarrow 1$ fornece a entropia de Shannon $S_1 = -k \sum_n p_n \ln(p_n)$. A entropia dada pela Eq.(1) está relacionada com a entropia de Renyi^[2] dada por

$$S_q^R = k \frac{\ln(\sum_n p_n^q)}{q-1} \quad (2)$$

como segue:

$$S_q^R / k = \frac{\ln[1 + (1-q) S_q / k]}{1-q} \quad (3)$$

Tanto S_q quanto S_q^R recuperam a entropia de Shannon no limite $q \rightarrow 1$.

Nós podemos verificar^[3] imediatamente que S_q^R , é uma função monótona de S_q para todos os valores de q . Entretanto, suas concavidades podem ser diferentes (este comportamento está ilustrado na fig.1 para uma variável binária, isto é, aquela cujo número de microestados é igual a 2). A concavidade em questão, é relevante para o sinal do calor específico, para valores arbitrários de q , como veremos adiante.

FIG 1a

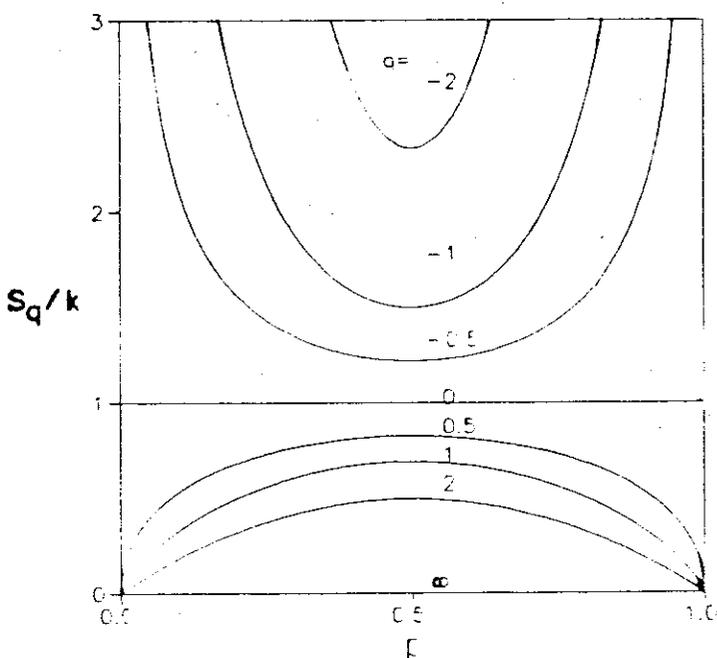
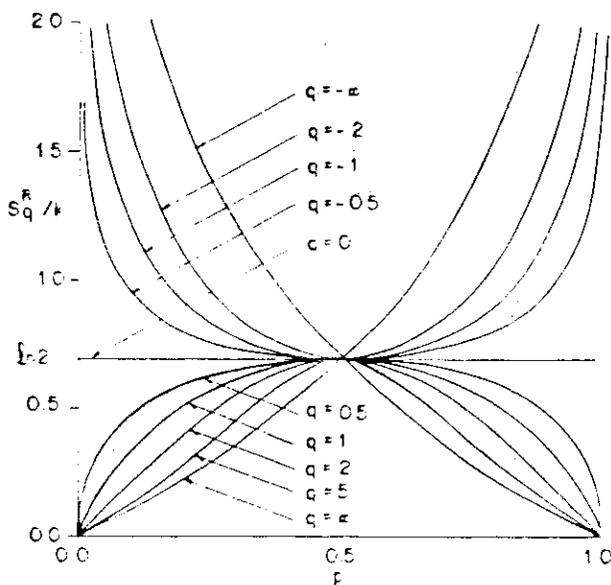


FIG 1b



Comportamento em função de p de S_q (a) e S_q^R (b) para o número de microestados igual a 2 e valores típicos de q .

Para obter a distribuição de equilíbrio, foi adotado na Ref.[1] o procedimento variacional padrão com a entropia dada pela Eq.(1) e assumindo $\sum_n p_n \epsilon_n$ como energia interna (generalizada),

onde $\{\varepsilon_n\}$ é o espectro do sistema. Consequentemente, a distribuição canônica à temperatura $T \equiv 1/k\beta$ é dada^[1] por $p_n \propto [1-\beta(q-1)\varepsilon_n]^{1/(q-1)}$. Se alternativamente assumirmos que a energia interna generalizada é dada^[3] por

$$U_q = \sum_n p_n^q \varepsilon_n \quad (4)$$

a distribuição canônica será dada por

$$p_n = \frac{[1-\beta(1-q)\varepsilon_n]^{1/(1-q)}}{Z_q} \quad (5)$$

com,

$$Z_q \equiv \sum_n [1-\beta(1-q)\varepsilon_n]^{1/(1-q)} \quad (6)$$

Esta distribuição é representada na fig.2 para valores típicos de q . Nós verificamos que a distribuição dada pela Eq.(5) coincide, através da transformação $1-q \leftrightarrow q-1$, com aquela associada com a energia interna $\sum_n p_n \varepsilon_n$.

Além disso, Curado e Tsallis^[3] mostraram que a estrutura matemática global de conexão da mecânica estatística usual e a termodinâmica, é preservada através da presente generalização. Para ser mais específico, eles provaram que

$$\partial S_q / \partial U_q = 1/T, \quad (7)$$

que

$$U_q = -(\partial/\partial\beta) [(Z_q^{1-q}-1)/(1-q)] \quad (8)$$

e que

$$F_q \equiv U_q - TS_q \quad (9)$$

$$= -kT(Z_q^{1-q}-1)/(1-q) \quad (10)$$

Vamos definir o calor específico generalizado como segue

$$C_q \equiv T \partial S_q / \partial T \quad (11)$$

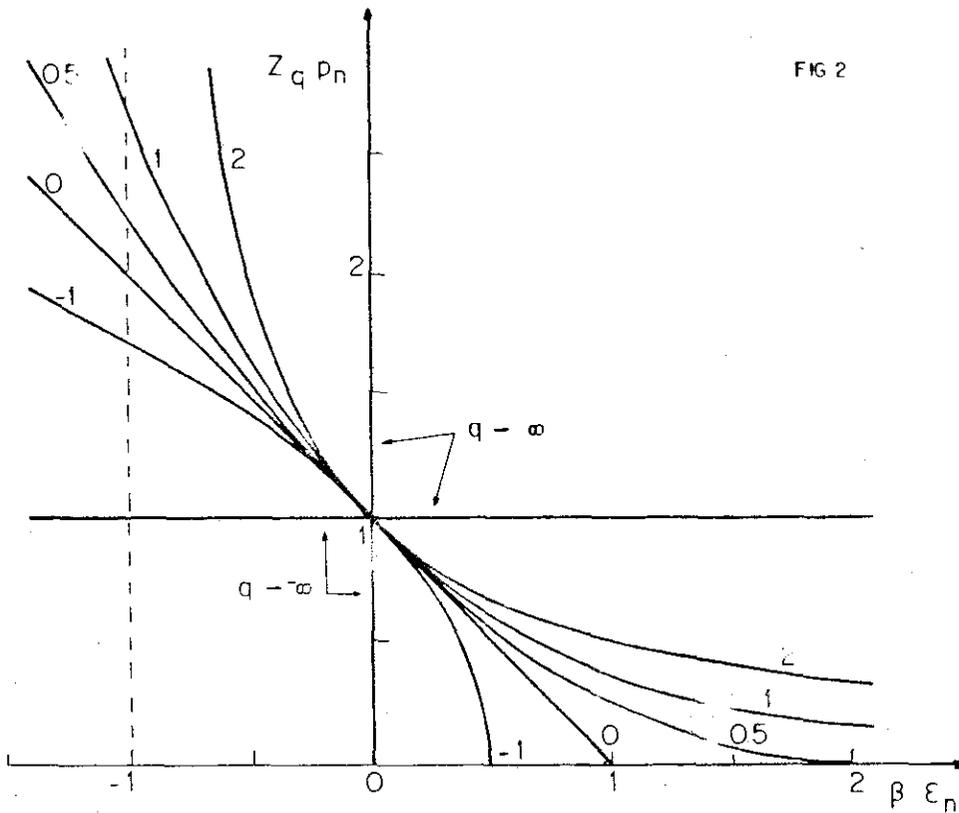


FIG 2

Comportamento em funcao de $\beta \epsilon_n$ de $Z_q P_n$ para valores típicos de q (esta figura foi adaptada da correspondente figura da ref. [1]); a linha pontilhada vertical representa a assintota $q=2$.

Como T não é a variável natural de U_q e S_q , a Eq.(9) implica $\partial F_q / \partial T = -S_q$. Derivando uma vez mais temos $\partial^2 F_q / \partial T^2 = -\partial S_q / \partial T$, então, usando a definição dada pela Eq.(11) segue que,

$$C_q = -T \partial^2 F_q / \partial T^2. \quad (12)$$

Também é fácil mostrar que

$$C_q = \partial U_q / \partial T. \quad (13)$$

Usando as Eqs.(4), (5) e (6) nós obtemos

$$C_q / k = \frac{q}{(kT)^2} \left\{ \sum_n \left[p_n^q \frac{\epsilon_n^2}{1 - \beta(1-q)\epsilon_n} \right] - \left[\sum_n p_n^q \epsilon_n \right] \left[\sum_n p_n \frac{\epsilon_n}{1 - \beta(1-q)\epsilon_n} \right] \right\} \quad (14)$$

Onde segue de maneira simples que

$$C_q/k = qZ^{1-q} \langle (E_n - \langle E_n \rangle)^2 \rangle / (kT)^2 \quad (15)$$

com

$$E_n \equiv \varepsilon_n / [1 - \beta(1-q)\varepsilon_n] \quad (16)$$

e onde $\langle f(\varepsilon_n) \rangle$ significa $\sum_n p_n f(\varepsilon_n)$, f sendo uma função arbitrária. Nota-se que para o calor específico, a forma de flutuação é preservada através da presente generalização. Além do mais, nota-se que C_q tem o sinal de q (isto é, $C_q \geq 0$ para $q > 0$ e $C_q \leq 0$ para $q < 0$).

Como o caso $q=1$ corresponde à bem conhecida estatística de Boltzmann-Gibbs, nós analizaremos aqui apenas os casos correspondentes à $q \neq 1$. Ilustraremos uma situação típica, discutindo o sistema (degenerado) de dois níveis (se o número de níveis N for maior que 2 então a discussão é levemente mais complicada, mas segue essencialmente na mesma linha). Vamos denotar por ε_0 (ε_1) e g_0 (g_1), o nível de energia fundamental (excitado) e sua degenerescência associada.

Se $q < 1$, podemos distinguir três situações fundamentais, a saber:

(i) Se $\varepsilon_1 > \varepsilon_0 > 0$ segue que: para $T \in [0, (1-q)\varepsilon_0/k]$ temos uma região termicamente proibida (físicamente inacessível) porque pelo menos um nível deve estar povoado (lembramos que $\sum_n p_n = 1$); para $T \in [(1-q)\varepsilon_0/k, (1-q)\varepsilon_1/k]$ temos uma região termicamente congelada pois $p_0 = 1/g_0$ e $p_1 = 0$; para $T > (1-q)\varepsilon_1/k$ temos uma região termicamente ativa; finalmente para todos os valores negativos da temperatura, o sistema é termicamente ativo. De fato, o sistema é termicamente ativo mesmo para $T=0$ e para este valor da temperatura as populações dos estados fundamental e excitado são:

$$p_0 = g_0 \varepsilon_0^{1/(1-q)} / (g_0 \varepsilon_0^{1/(1-q)} + g_1 \varepsilon_1^{1/(1-q)}) \quad e$$

$$p_1 = g_1 \varepsilon_1^{1/(1-q)} / (g_0 \varepsilon_0^{1/(1-q)} + g_1 \varepsilon_1^{1/(1-q)})$$

(ii) Se $\varepsilon_1 > 0 > \varepsilon_0$ segue que: para $T \in [0, (1-q)\varepsilon_1/k]$ temos uma região termicamente congelada pois $p_0 = 1/g_0$ e $p_1 = 0$; para $T > (1-q)\varepsilon_1/k$ temos uma região termicamente ativa; para $T \in [(1-q)\varepsilon_0/k, 0]$ temos uma outra região termicamente congelada (agora com $p_1 = 1/g_1$ e $p_0 = 0$), e para $T < (1-q)\varepsilon_0/k$ temos outra região termicamente ativa;

(iii) Se $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < 0$ segue que: o sistema é termicamente ativo para todos os valores positivos da temperatura. De fato, o sistema é termicamente ativo mesmo para $T=0$ e para este valor da temperatura, as populações dos estados fundamental e excitado são:

$$p_0 = g_0 |\varepsilon_0|^{1/(1-q)} / (g_0 |\varepsilon_0|^{1/(1-q)} + g_1 |\varepsilon_1|^{1/(1-q)}) \quad e$$

$$p_1 = g_1 |\varepsilon_1|^{1/(1-q)} / (g_0 |\varepsilon_0|^{1/(1-q)} + g_1 |\varepsilon_1|^{1/(1-q)}) \quad ; \quad \text{para valores de } T \in ((1-q)\varepsilon_1/k, 0] \text{ temos uma região } \underline{\text{termicamente proibida}}; \text{ para } T \in [(1-q)\varepsilon_0/k, (1-q)\varepsilon_1/k] \text{ temos uma região } \underline{\text{termicamente congelada}} \text{ pois } p_1 = 1/g_1 \text{ e } p_0 = 0 \text{ e finalmente para } T < (1-q)\varepsilon_0/k \text{ temos uma outra região } \underline{\text{termicamente ativa}}.$$

Se $q > 1$, podemos novamente distinguir três situações diferentes, a saber:

(i) Se $\varepsilon_1 > \varepsilon_0 > 0$ segue que: o sistema é termicamente ativo para todos os valores positivos da temperatura. De fato o sistema é termicamente ativo mesmo para $T=0$ e para este valor da temperatura, as populações dos estados fundamental e excitado são:

$$p_0 = g_0 \varepsilon_0^{1/(1-q)} / (g_0 \varepsilon_0^{1/(1-q)} + g_1 \varepsilon_1^{1/(1-q)}) \quad e$$

$$p_1 = g_1 \varepsilon_1^{1/(1-q)} / (g_0 \varepsilon_0^{1/(1-q)} + g_1 \varepsilon_1^{1/(1-q)}) \quad . \quad \text{Para } T \in (0, (1-q)\varepsilon_0/k) \text{ temos uma região } \underline{\text{termicamente proibida}}, \text{ para } T \in [(1-q)\varepsilon_1/k, (1-q)\varepsilon_0/k] \text{ temos uma região } \underline{\text{termicamente congelada}}, \text{ e para } T < (1-q)\varepsilon_1/k \text{ temos uma outra região } \underline{\text{termicamente ativa}}.$$

(ii) Se $\varepsilon_1 > 0 > \varepsilon_0$ segue que: para $T \in [(1-q)\varepsilon_0/k, 0]$ temos uma região

termicamente congelada pois $p_0=1/g_0$ e $p_1=0$, para $T > (q-1)\epsilon_0/k$ o sistema é termicamente ativo. Para $T \in [(1-q)\epsilon_1/k, 0]$ temos uma outra região termicamente congelada com $p_1=1/g_1$ e $p_0=0$, e para $T < (1-q)\epsilon_1/k$ o sistema é uma vez mais termicamente ativo.

(iii) Se $\epsilon_0 < \epsilon_1 < 0$ segue que: para $T \in [0, (1-q)\epsilon_1/k]$ temos uma região termicamente proibida, para $T \in [(1-q)\epsilon_1/k, (1-q)\epsilon_0/k]$ temos uma região termicamente congelada pois $p_0=1/g_0$ e $p_1=0$, para $T > (1-q)\epsilon_0/k$ o sistema é termicamente ativo, e para todos os valores negativos da temperatura o sistema é, uma vez mais, termicamente ativo. De fato o sistema é termicamente ativo mesmo para $T=0$ e para este valor da temperatura, as populações dos estados fundamental e excitado são:

$$p_0 = g_0 |\epsilon_0|^{1/(1-q)} / (g_0 |\epsilon_0|^{1/(1-q)} + g_1 |\epsilon_1|^{1/(1-q)}) \quad \text{e}$$

$$p_1 = g_1 |\epsilon_1|^{1/(1-q)} / (g_0 |\epsilon_0|^{1/(1-q)} + g_1 |\epsilon_1|^{1/(1-q)})$$

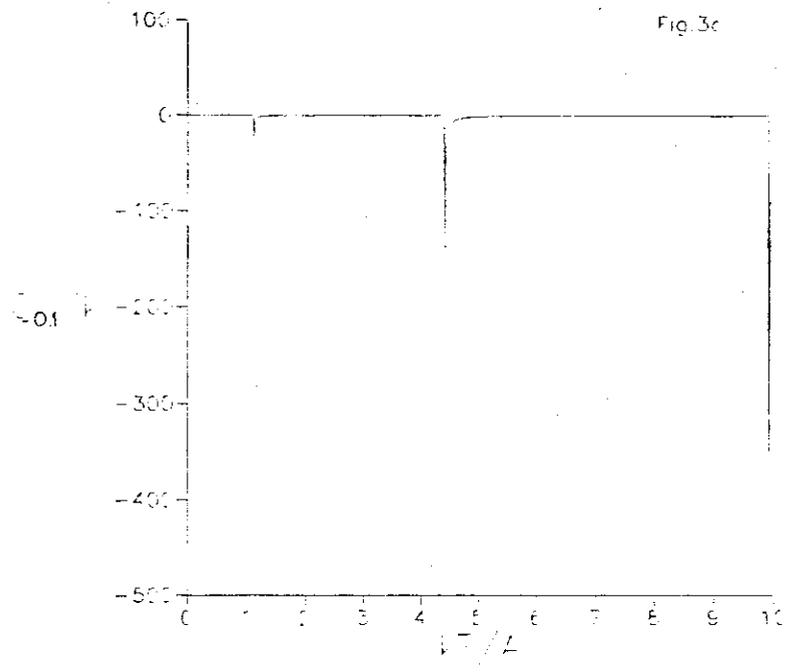
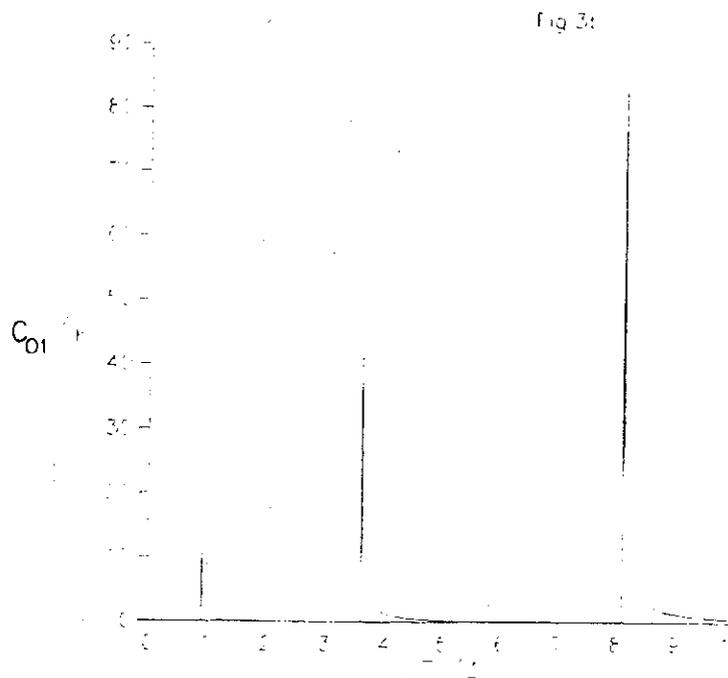
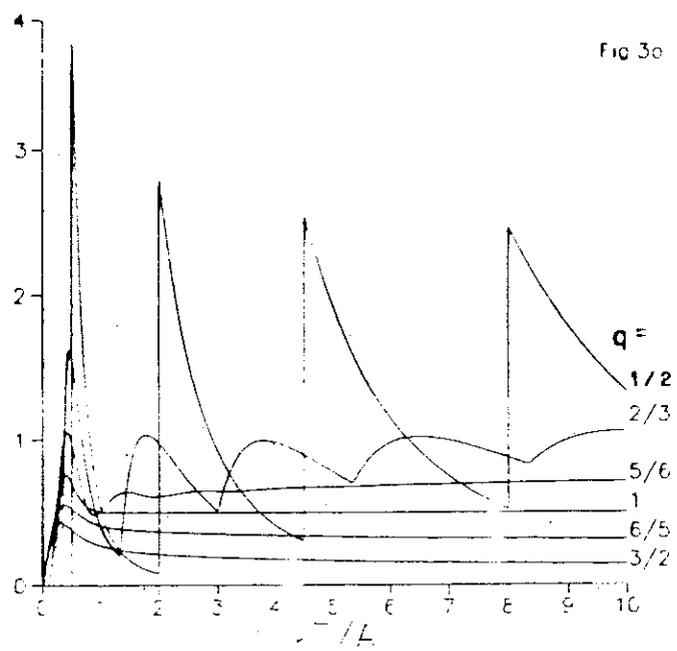
Se $q \neq 1$, o valor absoluto de ϵ_0 é fisicamente relevante, conseqüentemente, uma constante aditiva no espectro produzirá efeitos físicos (contrariamente ao que acontece para $q=1$, em cujo caso uma constante aditiva no espectro não produz efeito algum).

II PARTICULA LIVRE: CASO QUANTICO

Assumindo como energia interna generalizada a expressão $\sum_n p_n \epsilon_n$, foi calculado^[1,4] o calor específico para um sistema de dois níveis, para o oscilador harmônico^[4] e para o modelo de Ising unidimensional^[5]. Aqui nós discutiremos (prossequindo na linha desenvolvida na ref.[3], isto é, assumindo a Eq.(4)) o calor específico de uma partícula livre unidimensional caracterizada por

$$\epsilon_n = An^2 + B \quad (n=0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (17)$$

onde $A > 0$ e B é qualquer número real. A substituição desse espectro



Evolução térmica de C_0/K para $B/A=0$ e valores típicos de q :
 (a) $q \geq 1/2$; (b) $0 < q < 1/2$; (c) $q < 0$.

na Eq. (14) permite-nos, em princípio, o cálculo do calor específico C_q/k como uma função de $(kT/A, B/A, q)$. Nós não conseguimos calcular essa função analiticamente para o caso geral. Contudo, em todos os casos, o tratamento numérico é sempre possível. Além disso, o cálculo analítico é possível em alguns casos especiais, tais como $q=(m+1)/m$ ($m=1,2,3,\dots$) e valor de B arbitrário. Vamos ilustrar este fato apresentando o caso $(q,B)=(2,0)$:

$$C_2/k = \frac{1}{4} \left(\tanh^2 x + \frac{1+2x^2}{x} \tanh x - 2x \tanh^3 x - 1 \right) \quad (18)$$

com $x = \pi \sqrt{kT/A}$.

Nós apresentamos na Fig.3 a evolução térmica de C_q/k para $B=0$ e valores típicos de q . Nós observamos que:

(i) Para $q \geq 1$, C_q é positivo em toda região, exceto em $T=0$ onde ele vale zero; tanto $C_q(T)$ quanto dC_q/dT , são funções contínuas para qualquer temperatura finita;

(ii) Para $1/2 < q < 1$, C_q é positivo para todos os valores da temperatura acima do valor $(1-q)A/k$, e vale zero no intervalo $T \in [0, (1-q)A/k]$; $C_q(T)$ é uma função contínua em toda região, mas não dC_q/dT , que apresenta discontinuidades para $T_\nu = (1-q)A\nu^2/k$, ($\nu=1,2,3,\dots$);

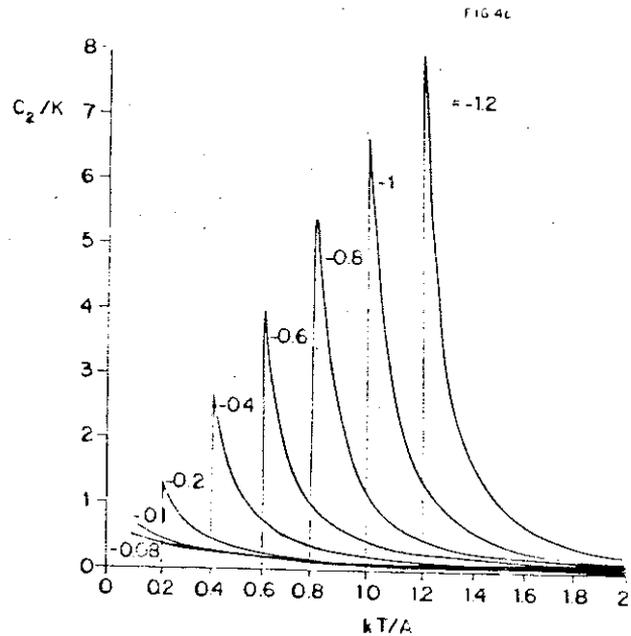
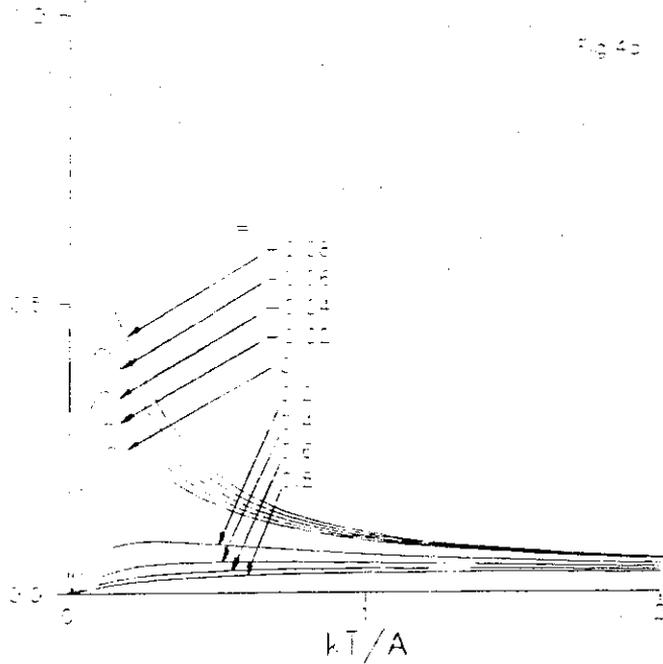
(iii) Para $0 \leq q \leq 1/2$, C_q é positivo para quase todas as temperaturas acima do valor $(1-q)A/k$, e vale zero no intervalo $T \in [0, (1-q)A/k]$; agora o próprio $C_q(T)$ apresenta discontinuidades para $T_\nu = (1-q)A\nu^2/k$, ($\nu=1,2,3,\dots$) ($C_q(T)$ vale zero também para $T \rightarrow T_\nu - 0$)

(iv) Para $q \rightarrow 0$, $C_q(T)$ vale zero em toda região exceto em $T_\nu = A\nu^2/k$ ($\nu=1,2,3,\dots$) onde ele toma valores positivos que crescem

monotonamente com ν ;

(v) Para $q \rightarrow 0$, $C_q(T)$ vale zero em toda região, exceto para $T_\nu = A\nu^2/k$ ($\nu=1,2,3,\dots$) onde ele toma grandes valores negativos que tornam-se cada vez maiores a medida que ν aumenta;

(vi) Para $q < 0$, C_q é negativo para quase toda a região de temperaturas acima de $(1-q)A/k$, e vale zero no intervalo $T \in [0, (1-q)A/k]$; aqui o próprio $C_q(T)$ apresenta discontinuidades para $T_\nu = (1-q)A\nu^2/k$, ($\nu=1,2,3,\dots$) ($C_q(T)$ vale zero também para $T \rightarrow T_\nu - 0$).

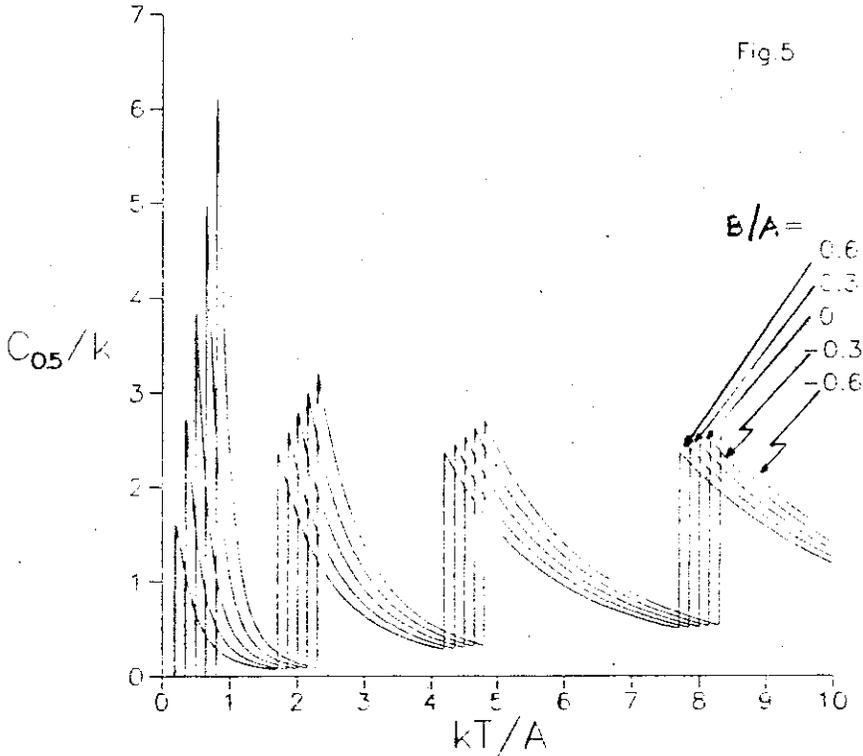


Evolução térmica de C_q/K para $q=2$ e valores típicos de B/A :

(a) $B/A \geq -0.08$; (b) $B/A \leq -0.08$.

Vamos discutir agora a influência de B que, observamos, é irrelevante somente para $q=1$. Nós apresentamos na Fig.(4) um exemplo para $q > 1$, e na Fig.(5) um exemplo para $q < 1$. Observa-se na

Fig.(4), (que ilustra o caso $q > 1$), que para $B \geq 0$, $C_q(T)$ é uma função contínua em toda a região, positiva para todos os valores finitos de temperatura e vale zero para $T=0$, enquanto que, para $B < 0$, $C_q(T)/k$ vale zero no intervalo $T \in [0, (q-1)|B|/k]$, apresenta uma discontinuidade para $T=(q-1)|B|/k$ onde ele assume (para $T \rightarrow (q-1)|B|/k+0$) o valor $(2\pi^2/3)(q-1)k|B|/A$, e a partir daí varia continuamente.



Evolução térmica de C_q/K para $q=1/2$ e valores típicos de B/A .

No que diz respeito a Fig.(5) (que ilustra o caso $0 < q < 1$) nós podemos distinguir tres situações, a saber: (i) Para $B > 0$, a região $T \in (0, (1-q)B/k)$ é termicamente proibida, a região $T \in [(1-q)B/k, (1-q)(A+B)/k]$ é termicamente congelada, e finalmente, para $T > (1-q)(A+B)/k$, C_q é positivo em toda a região e apresenta discontinuidades para $T_\nu = (1-q)(A\nu^2 + B)/k$ ($\nu=2, 3, 4, \dots$);

(ii) Para $B < 0$ e $A+B > 0$, o sistema está congelado no intervalo T e $[0, (1-q)(A-|B|)/k]$, C_q é positivo para valores maiores da temperatura e apresenta discontinuidades para $T_\nu = (1-q)(A\nu^2 - |B|)/k$ ($\nu=1, 2, 3, \dots$);

(iii) Para $B < 0$ e $A+B \leq 0$, o sistema está congelado somente para $T=0$, está ativo para todos os valores temperatura finita e C_q é positivo e apresenta discontinuidades para $T_\nu = (1-q)(A\nu^2 - |B|)/k$ para todos os valores inteiros de ν acima de um valor ν^* que aumenta com o aumento de $|B|$.

A influência de $B \neq 0$ para o caso $q < 0$ repousa principalmente no fato que a discontinuidade de C_q (que satisfaz a condição $C_q \neq 0$, em toda a região) ocorre para temperaturas que dependem de B , mais precisamente para temperaturas $T_\nu = (1-q)(A\nu^2 + B)/k$.

O comportamento assintótico $T \rightarrow \infty$ de C_q (daqui para frente referido como o limite clássico) apresenta interesse particular e nós o discutiremos na próxima seção.

III PARTICULA LIVRE: CASO CLASSICO

O comportamento clássico do calor específico (denotado por C_q^{class}) é obtido, para $q=1$, truncando-se, na Eq.(14), as somas por integrais. Nós seguiremos esta linha para um q genérico. Para $1 < q < 3$, nós obtemos

$$\frac{C_q}{k} = \frac{(3-q)(q-1)^{(q-1)/2}}{4} \left\{ \sqrt{\pi} \frac{\Gamma[(3-q)/(2q-2)]}{\Gamma[1/(q-1)]} \right\}^{1-q} \cdot \frac{kT/A}{\left[kT/A + (q-1)B/A \right]^{(q+1)/2}} \quad (19)$$

Para $q \rightarrow 1$ nós recuperamos, para todos os valores finitos de T , o bem conhecido resultado $C_1/k=1/2$. Embora algumas das integrais possam divergir, o calor específico parece anular-se para todos os valores finitos de T para $q \geq 3$.

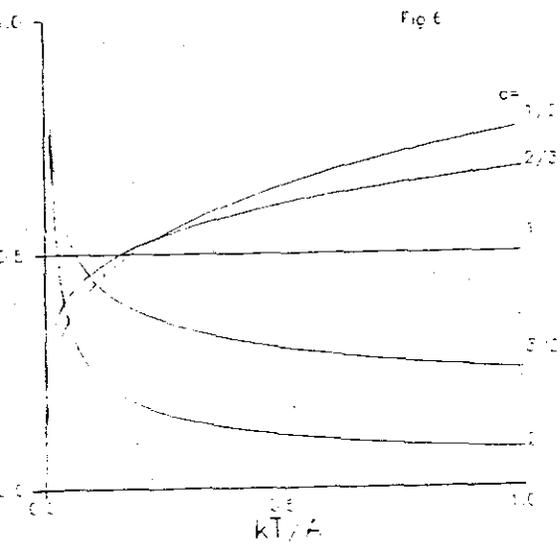
Para $1/2 \leq q < 1$, nós obtemos

$$\frac{C_q}{k} = \frac{(3-q)(1-q)^{(q-1)/2}}{4} \left\{ \sqrt{\pi} \frac{\Gamma[(2-q)/(1-q)]}{\Gamma[(5-3q)/(2-2q)]} \right\}^{1-q} \cdot \frac{kT/A}{\left[kT/A + (q-1)B/A \right]^{(q+1)/2}} \quad (20)$$

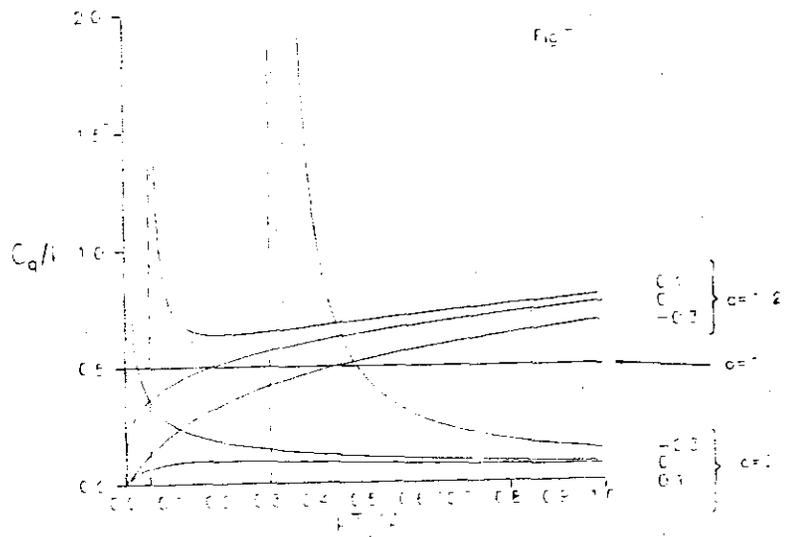
Também aqui, para $q \rightarrow 1$, nós recuperamos para todos os valores finitos da temperatura, o resultado $C_1/k=1/2$.

Para $q < 1/2$ existem algumas sutilezas matemáticas relacionadas ao fato de que, para $T=T_v \equiv (1-q)(Av^2+B)/k$, existem discontinuidades no calor específico. Mais precisamente, para $T=T_v$, tres valores diferentes podem ser calculados para o calor específico, a saber: $C_q^- \equiv \lim_{T \rightarrow T_v^-} C_q(T)$, $C_q^+ \equiv \lim_{T \rightarrow T_v^+} C_q(T)$, e finalmente C_q^{class} . Nós

verificamos para $0 < q < 1/2$ que $C_q^- < C_q^{class} < C_q^+$; no limite $q \rightarrow 1/2$ nós obtemos $C_{1/2}^- = C_{1/2}^{class} = C_{1/2}^+$; no limite $q \rightarrow 0$ nós obtemos $C_0^- = 0$, C_0^{class} é finito e $C_0^+ \rightarrow \infty$. Para $q < 0$ nós verificamos que $C_q^{class} > C_q^- = 0 > C_q^+$.



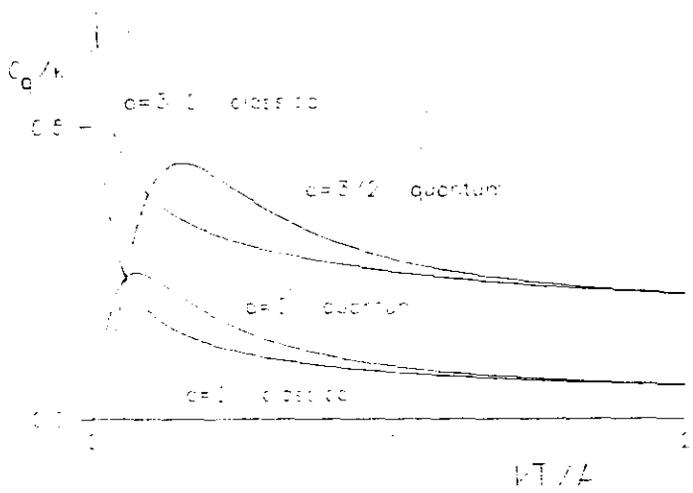
Evolução termica de C_q^{class} / K para $B/A=0$ e valores típicos de q .



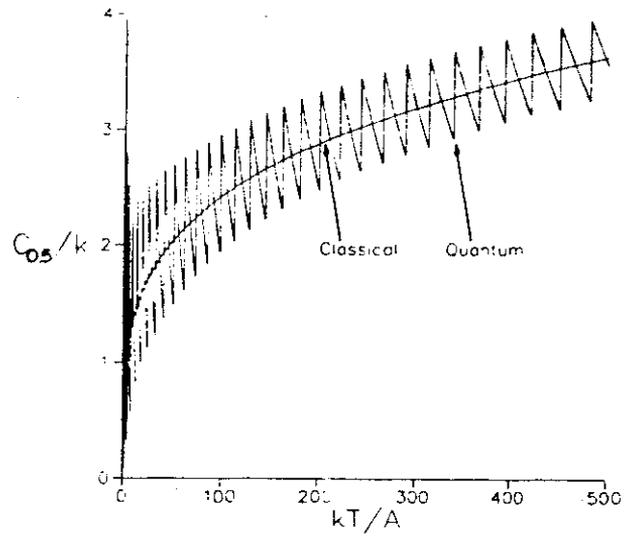
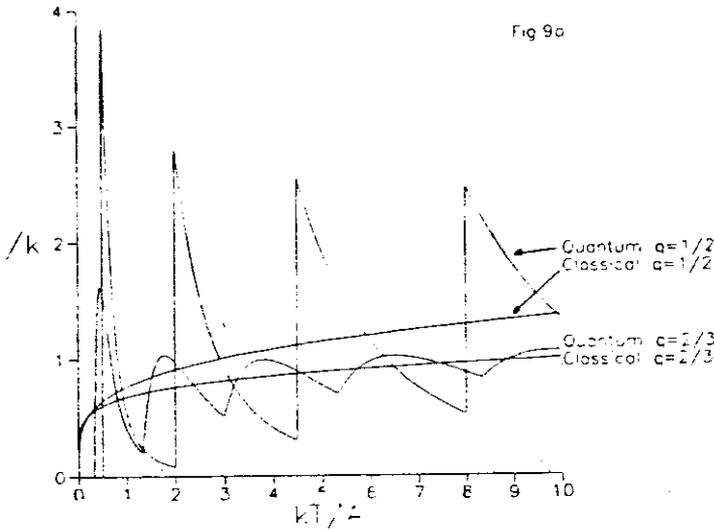
Evolução termica de C_q^{class} para valores típicos de q e B/A .

Eqs.(19) e (20) resultam, para $B=0$, $C_q \propto T^{(1-q)/2}$, consequentemente: (i)no limite $T \rightarrow 0$, C_q^{class} diverge (anula-se) para $q > 1$ ($1/2 \leq q < 1$); (ii)no limite $T \rightarrow \infty$, C_q^{class} diverge (anula-se) para $1/2 \leq q < 1$ ($q > 1$). Esses fatos são exibidos na Fig.(6). Na Fig.(7) nós representamos, para valores finitos e típicos de B , a evolução de C_q . Nós observamos alguns pontos: i)O comportamento dominante para $T \rightarrow \infty$ ainda satisfaz $C_q \propto T^{(1-q)/2}$ para todos os valores finitos de B ; (ii)Na região de baixas temperaturas, C_q anula-se quando $T \rightarrow 0$ (diverge como $[T - |(q-1)B|]^{-(q+1)/2}$ quando $T \rightarrow |(q-1)B| + 0$ e anula-se quando $T < |(q-1)B|$ para $1/2 \leq q < 1$ e $B \leq 0$ bem como para $q > 1$ e $B > 0$ (para $1/2 \leq q < 1$ e $B > 0$ bem como para $q > 1$ e $B \leq 0$). No limite $T \rightarrow \infty$, a substituição (na Eq.(14)) de somas por integrais torna-se inócua, assim, nós esperamos que $C_q(T) \sim C_q^{class}(T)$.

Fig 8

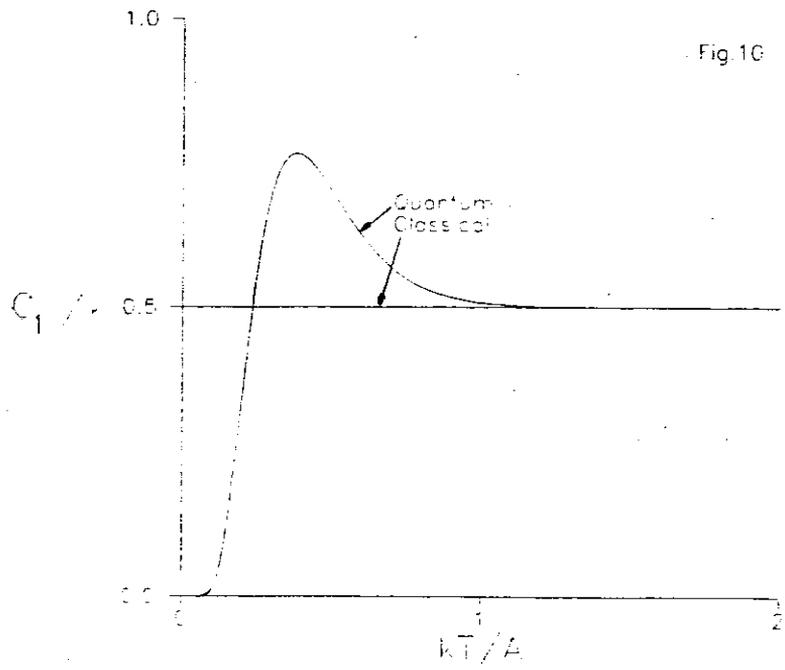


Comparacao, para valores típicos de $q > 1$ e $B/A=0$, dos calores específicos classico e quantico.



comparacao, para B/A=0, dos calores especificos classico e quântico: (a) escala padrao de temperaturas e valores típicos de $q < 1$; (b) escala de grandes temperaturas e $q = 1/2$.

Este fato é mostrado para $q > 1$ na Fig. (8), $1/2 \leq q < 1$ na Fig. (9) e $q = 1$ na Fig. (10).



Comparacao, para $q = 1$ (estatística de Boltzmann-Gibbs) e B/A arbitrário, dos calores especificos classico e quântico.

A Fig. (10) merece um comentário. De fato, em qualquer livro texto de mecânica estatística encontramos o resultado classico $C_1/k = 1/2$, mas —surpreendentemente!— em nenhum lugar nós

encontramos o resultado quântico (essa ausência curiosa é devida provavelmente ao fato de que, para todos os sistemas físicos típicos, a região quântica do calor específico de uma partícula livre aparece para temperaturas tremendamente pequenas). Vale a pena ressaltar que o resultado quântico para o calor específico de uma partícula livre apresenta, como função de T, um máximo, similarmente ao que acontece com o rotor rígido quântico e diferentemente do que acontece com o oscilador harmônico (para o qual C_1 cresce monotonamente com T).

Finalmente, nós calculamos C_q^{class} correspondente ao espectro $\epsilon_n = An^r + B$ $n=0, 1, 2, \dots$) para $A > 0$, $r > 0$ e B qualquer número real. Nós obtivemos, para $1 < q < r+1$

$$C_q/k = r^{q-1} (r+1-q) (q-1)^{(q-1)/r} \left[\frac{\Gamma(1/r) \Gamma(1/(q-1) - 1/r)}{\Gamma(1/(q-1))} \right]^{1-q} \cdot \frac{kT/A}{\left[kT/A + (q-1)B/A \right]^{(r+q-1)/2}} \quad (21)$$

e para $q < 1$

$$C_q/k = r^{q-3} (r+1-q) (1-q)^{(q-1)/r} \left[\frac{\Gamma(1/r) \Gamma[(2-q)/(1-q)]}{\Gamma[(r+(r+1)(1-q))/(r(1-q))]} \right]^{1-q} \cdot \frac{kT/A}{\left[kT/A + (q-1)B/A \right]^{(r+q-1)/2}} \quad (22)$$

Eqs.(21) e (22) resultam, no limite $q \rightarrow 1$, $C_1/k=1/r$ para todos os valores finitos da temperatura, estendendo assim o resultado obtido na Ref.[6]. Vale a pena mencionar também que Eqs.(21) e (22) nao reproduzem, para $r=2$, o calor específico clássico dado pelas Eqs.(19) e (20) (mas ao invés disso 2^{q-1} vezes ele); a razão para isso é bastante simples, a saber está relacionada com o fato de que nesta última parte nós usamos $n=0,1,2,\dots$, ao invés de $n=0,\pm 1,\pm 2,\dots$.

Referencias

- [1] Tsallis C. 1988 J.Stat.Phys.52, 479
- [2] Renyi A., Probability Theory (North Holland, 1970)
- [3] Curado E.M.F. and Tsallis C. 1991 J.Phys.A24, L69 (Errata to appear in J.Phys A)
- [4] Ito N. and Tsallis C. 1989 Nuovo Cimento 11D, 907
- [5] Andrade R.F.S. 1991 Physica A175, 285
- [6] da Silva L.R. and Tsallis C. 1979 Rev.Bras.Fis.9, 619; Tsallis C. and da Silva L.R. 1982 Phys.Rev.A26, 1095
- [7] Paulus M.P., Geyer M.A. and Mandell A.J. 1991 Physica A 174, 567

CONCLUSÃO DA SEGUNDA PARTE

Apesar de não se ter notícias de uma violação, por menor que seja, das hipóteses que levaria à estatística de Boltzmann-Gibbs, nós estudamos aqui uma aplicação de uma possível generalização de tal estatística. Nosso estudo, apesar de meramente acadêmico, ilustra consequências muito interessantes de tal generalização. Nós observamos um comportamento "sui generis" para o calor específico de uma partícula livre 1-dimensional, para a qual, em alguns casos, não são respeitados clássicos resultados, como por exemplo, a terceira lei da termodinâmica (estritamente falando, para alguns casos o calor específico não tende para zero quando a temperatura se anula). Mesmo no limite clássico da mecânica estatística (onde se faz a substituição da soma por integral na função de partição), os resultados encontrados para o calor específico, violam outros resultados estabelecidos, como por exemplo o princípio da equipartição da energia. Entretanto, na presente generalização, tanto o cálculo quântico como o cálculo clássico do calor específico, se aproximam assintoticamente no regime de altas temperaturas. Além do mais os resultados por nós encontrados sugerem que aqueles onde $q=1$ são resultados de uma convergência não uniforme com aqueles de $q \neq 1$. Embora não tenha sido constatada no mundo físico nenhuma violação na estatística de Boltzmann-Gibbs, vale a pena observar dois pontos:

(i) não se conhecem os limites experimentais da estatística de Boltzmann-Gibbs;

(ii) pode ser que alguns processos, por exemplo biológicos (ver por exemplo Ref. [7]), necessitem para sua descrição de uma fórmula de entropia diferente da de Shannon.

REFERENCIAS (Por ordem de aparição nos capitulos)

- K.G.Wilson, Phys.Rev.D2 (1970), 1438
- L.P.Kadanoff, Physics 2 (1965), 263
- E.C.G.Stueckelberg e A.Petermann, Helv.Phys.Acta 26 (1953) 499
- M.Gell-Mann e F.E.Low, Phys.Rev.95 (1954) 1300
- C.G.Callan, Phys.Rev.D2 (1970) 1541; K.Symanzik,
Commun.Math.Phys. 18 (1970) 227
- D.Politzer, Phys.Rev.D8 (1973) 3633
- E.P.da Silva, Tese de Mestrado UFRJ (1985)
- B.I.Halperin, P.C.Hohenberg e S.K.Ma, PRL 29(1972), 1548;
Phys.Rev.B10 (1974), 139
- S.K.Ma e F.Mazenko, PRL 33 (1974), 1384; Phys.Rev.11 (1975), 4077
- M.Kardar, G.Parisi e Y-C.Zhang, PRL 56 (1986), 889
- L.C.L.Botelho e E.P.da Silva, J.Phys.A23 (1990), 1829
- R.B.Griffiths e M.Kaufman, Phys.Rev B26 (1982), 5022
- C.Tsallis, J.Stat.Phys.52 (1988) 479
- E.P.da Silva e C.Tsallis, PhysicaA 167 (1990), 347
- C.Tsallis e S.V.F.Levy, Phys Rev Letts 47 (1981) 950
- E.P.da Silva, A.M.Mariz e C.Tsallis, J.Phys A 24 (1991) 2835
- E.P.da Silva e C.Tsallis, Submetido ao "N Cim D"
- E.P.da Silva, C.Tsallis e E.M.F.Curado, Submetido ao J.Phys A
- H.O.Martin e C.Tsallis, J.Phys.C14 (1981), 5645;
Z.Phys.B44 (1981) 325; J.Phys.C16 (1983) 2787.
- C.Tsallis, A.Coniglio e G.Schwachheim, Phys.Rev.B32 (1985) 3322.
- A.O.Caride e C.Tsallis, J.Phys.A:Math.Gen.20 (1987) L665.
- W.A.Morgado, S.Coutinho e E.M.F.Curado, J.Stat.Phys (1990)
- L.da Silva Tese de Mestrado CBPF (1991)
- C.Tsallis, J.Phys.C18 (1985) 6581.

J.R.Melrose, J.Phys.A16 (1983) L407,1041,3077.

J.M.Yeomans e M.E.Fisher, Phys.Rev.B24 (1981)2825.

A.C.N.Magalhães, C.Tsallis e G.Schwachheim, J.Phys.14 (1981)
 1393. P.M.C.de Oliveira, Phys.Rev.B25 (1982) 2034. P.M.C. de
 Oliveira e C.Tsallis J.Phys.A15 (1982) 2865.

R.R. dos Santos, J.Phys.C18 (1985) L1067.

M.Kaufman e R.B.Griffiths, J.Phys.A15 (1982) L239.
 P.M.Bleher e E.Zalys, Commun.Math.Phys.120 (1989) 409.

D.Kim ,M.L.Peter e L.F.Uffer 1975 Phys Rev B 12 989

A.Aharony 1977 J.Phys A:Math.Gen.10 389

H.J.Hilhorst 1977 Phys Rev B 16 1253

E.Domany e E.K.Riedel 1979 Phys Rev B 19 5817

B.Nienhuis ,E.K.Riedel e M.Schick 1983 Phys Rev B27 5625

G.von Gehlen e V.Rittenberg 1986 J.Phys A19 2439

R.Badke 1987 Phys Lett. A119 365

C.Tsallis ,A.M.Mariz ,A.Stella e L.R.da Silva 1990 J.Phys
A23 329; A.M.N.Chame e C.Tsallis 1990 Physica A165 41

C.Tsallis ,A.Coniglio e S.Redner 1983 J.Phys C16 4339

C.Tsallis e S.Redner 1983 Phys Rev B28 6603

A.M.Mariz ,C.Tsallis e P.Fulco 1985 Phys Rev B32 6055

P.M.C.Oliveira 1982 Phys Rev B25 2034; P.M.C.Oliveira e
 C.Tsallis 1982 J.Phys A15 2865; P.M.C.Oliveira ,C.Tsallis
 e G.Schwachheim 1984 Phys Rev B29 2755

A.C.N.de Magalhães e J.W.Essam 1990 J.Stat.Phys 58 1059

E.S.Souza Tese de Mestrado UFRN (1988)

V.L.Baltar ,G.M.Carneiro ,M.E.Pol e N.Zagury 1984 J.Phys
A17 2119

J.M.Yeomans e R.B.Stichcombe ,J. Phys C 12,L169 (1979);

- J.M.Yeomans e R.B.Stichcombe ,J. Phys C 12,347 (1980);
- C.Tsallis ,S.V.F.Levy ,J.Phys.C:Solid St.Phys.13,465 (1980);
- S.V.F.Levy ,C.Tsallis ,E.M.F.Curado ,Phys Rev B 21 ,2991
(1980);
- A.M.Mariz , F.D.Nobre e E.S.de Souza to appear in
Physica A (1991)
- C.Tsallis ,R.B.Stinchcombe ,B.Buck ,J.Phys C: Solid
St.Phys.17,301 (1984)
- C.Tsallis 1988 J.Stat.Phys.52, 479
- A.Renyi , Probability Theory (North Holland, 1970)
- E.M.F.Curado e C.Tsallis 1991 J.Phys.A24, L69 (Errata to
appear in J.Phys A)
- N.Ito e C.Tsallis 1989 Nuovo Cimento 11D, 907
- R.F.S.Andrade 1991 Physica A175, 285
- L.R.da Silva e C.Tsallis 1979 Rev.Bras.Fis.9, 619; C.Tsallis
e L.R.da Silva 1982 Phys.Rev.A26, 1095
- M.P.Paulus ,M.A.Geyer e A.J.Mandell 1991 Physica A 174,

"APLICAÇÃO DO MÉTODO DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO NO ESPAÇO REAL AO
ESTUDO DA CRITICALIDADE DE SISTEMAS MAGNÉTICOS DISCRETOS EM
REDES HIERÁRQUICAS"

EDSON DE PINHO DA SILVA

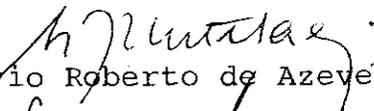
Tese de Doutorado apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da banca examinadora os seguintes professores:



Constantino Tsallis - Presidente



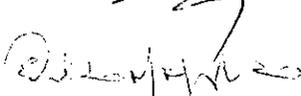
Raimundo Rocha dos Santos



Silvio Roberto de Azevedo Salinas



Anibal Omar Caride



Evaldo Mendonça Fleury Curado