

ANDRÉ MAURÍCIO CONCEIÇÃO DE SOUZA

CRITICALIDADE DE MODELOS MAGNÉTICOS  
DISCRETOS EM REDES HIERÁRQUICAS

TESE

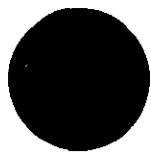
DE

MESTRADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro-1992

538.3  
S/M



**a minha querida família.**

## Agradecimentos

A Constantino Tsallis pela orientação e atenção a mim dedicados.

A José A. Redinz, Francisco Tamarit, Aglaé Magalhães, Evaldo Curado, Ladário da Silva, Daniel Stariolo e Fortunato Menezes pelo apoio, bom ambiente de trabalho e valiosas discussões.

Aos amigos Pedro e Rozangela Pinto pelo convívio e apoio desde a minha chegada ao Rio de Janeiro e a Luiz Cláudio Vilar pela amizade, apoio e entusiasmo que foram importantes durante todo o desenvolvimento do mestrado.

A Vanda, Myrian, Almério e funcionários do CBPF pela atenção a mim dispensados

Ao Departamento de Física da UFSE pela confiança depositada em mim. Ao CBPF pela oportunidade de desenvolver meus estudos e à CAPES pelo auxílio financeiro.

## Resumo

O comportamento crítico do modelo cúbico ferromagnético com mistura de ligações e do modelo de Heisenberg anisotrópico, em redes hierárquicas planares e autoduais, são investigados dentro do grupo de renormalização no espaço real. Nós obtivemos o diagrama de fases completo para os sistemas. Esses diagramas de fases são aproximadamente exatos para as redeshierárquicas e acreditamos ser de alta precisão para a rede quadrada. Também são calculados os expoentes críticos de comprimento de correlação e as classes de universalidade.

# Abstract

The critical behavior of the quenched bond-mixed ferromagnetic cubic model and of the spin- $\frac{1}{2}$  anisotropic Heisenberg model, on planar self-dual hierarchical lattices, are investigated within a simple real renormalization group. We obtain the complete phase diagram of both systems. These phase diagrams are nearly exact for the hierarchical lattices, and believed to be of high precision for the square lattice. The correlation-length critical exponents and the universality classes are determined as well.

# Sumário

Dedicatória .....	i
Agradecimentos .....	ii
Resumo .....	iii
Abstract .....	iv
Sumário .....	v
Lista de figuras .....	viii
Lista de tabelas .....	x
Introdução .....	1
Capítulo 1: O Modelo Cúbico Discreto .....	6
1.1. Histórico do Surgimento do Modelo .....	6
1.2. O Hamiltoniano .....	7
1.3. Fatos Experimentais .....	10

1.4. Alguns Limites .....	13
1.5. Solução a Uma Dimensão( $d=1$ ) .....	14
1.6. Solução a $d \neq 1$ .....	18
Capítulo 2: Grupo de Renormalização e Redes Hierárquicas .....	21
2.1.O Grupo de Renormalização .....	21
2.1.1. Introdução .....	21
2.1.2. O GR no Espaço Real .....	22
2.2. Redes Hierárquicas .....	30
2.2.1. A Rede Hierárquica da Ponte de Wheatstone .....	32
2.3. Variáveis Transmissividade .....	34
2.4. O Corte-colapso .....	37
Capítulo 3: Mistura de Ligações .....	42
3.1. Introdução .....	42
3.2. O Modelo de Mistura de Ligações .....	43
3.3. O GR no Modelo Cúbico com Mistura de Ligações .....	44
3.3.1. O Caso Puro( $p=1$ ) .....	48
3.3.2. Subespaços Invariantes .....	51
3.3.2.1. O Modelo de Potts de $2N$ -estados, Um Subespaço Invariante .	52
3.3.3. Outros Resultados .....	53
Capítulo 4: O Modelo de Heisenberg .....	60
4.1. Introdução .....	60
4.2. O Hamiltoniano Anisotrópico .....	63
4.3. A Rede Hierárquica e o GR .....	64

4.4. Resultados .....	69
Capítulo 5: Conclusões .....	73
Apêndice A .....	76
Referências Seleccionadas .....	79



# Lista de figuras

FIGURA	PÁGINA
Figura 1.1: Processo que relaciona modelos discretos e sistemas físicos. ....	11
Figura 1.2: (a) Estrutura das fases $\alpha - O_2$ e $\beta - O_2$ . ....	12
Figura 1.3: Pontos fixos e linhas de fluxos para $N=3$ obtido por [33]. ....	19
Figura 1.4: Diagrama de fases obtido por [45] para o modelo cúbico discreto para valores típicos de $N$ . ....	20
Figura 2.1: Transformação de “blocos de spins” ....	24
Figura 2.2: Diagrama de fluxos para $N=2$ . ....	26
Figura 2.3: Diagrama de fluxos para $N=1$ . ....	29
Figura 2.4: Família de redes hierárquicas em que $l=2$ e $R=1,2$ e3. ....	30
Figura 2.5: A ponte de Wheatstone ....	33
Figura 2.6: Diagramas de ordens superiores da ponte de Wheatstone ....	34
Figura 2.7: Probabilidade equivalente numa ligação em série e em paralelo. ...	34

Figura 2.8: O corte-colapso na ponte de Wheatstone. ....	38
Figura 2.9: Iteração associada com o GR na ponte de Wheatstone. ....	40
Figura 3.1: Diagrama de fases do modelo cúbico discreto para o caso puro ( $p=1$ ). ....	50
Figura 3.2: Diagrama de fases para o modelo de Potts de 4-estados. ....	53
Figura 3.3: Diagrama de fases para o modelo de Potts de 6-estados. ....	54
Figura 3.4: $N=2, J_1/J_2 = 1, 2NL_1 = J_1$ . ....	55
Figura 3.5: $N=2, J_1/J_2 = 1, 2NL_1 = J_1$ . ....	55
Figura 3.6: $N=2, J_1 = L_1 = 0$ . ....	56
Figura 3.7: $N=1, J_1/J_2 = 1, 2NL_1 = J_1$ . ....	56
Figura 3.8: $N=3, J_1/J_2 = 1, 2NL_1 = J_1$ . ....	57
Figura 3.9: $N=3, J_1 = L_1 = 0$ . ....	58
Figura 4.1: A rede hierárquica autodual. ....	65
Figura 4.2: Diagrama de fases do modelo de Heisenberg anisotrópico para o caso ferromagnético ....	70
Figura 4.3: Diagrama de fases do modelo de Heisenberg anisotrópico para o caso antiferromagnético ....	71

# Lista de tabelas

TABELA	PÁGINA
Tabela 2.1: Comparação dos pontos e expoentes críticos entre as redes quadrada ( Bravais) e ponte de Wheatstone( Hierárquica) .....	33
Tabela 3.1: Valores via GR para alguns pontos fixos( resultados exatos), expoentes de comprimento de correlação e “crossover” e derivadas. ....	59

# Introdução

Observamos na natureza trocas abruptas em certas quantidades físicas, como por exemplo a susceptibilidade em magnetos. Esse fato é um delicado e fundamental objeto de estudo da mecânica estatística; ele aparentemente cria um paradoxo pois sistemas com muitos (porém finitos) graus de liberdade têm todas as variáveis extensivas tipicamente reais e analíticas. Contudo essas trocas abruptas são na verdade apenas aproximadamente abruptas, sendo verdadeiras descontinuidades somente no limite de sistemas infinitos.

Fenômenos associados a descontinuidade em comportamentos físicos ocorrem quando um sistema está sob uma transição de fases tal como uma transição líquido-vapor, ferromagnetismo-paramagnetismo.

As primeiras teorias que tentaram resolver o problema das transições de fases mostraram-se falhas a partir da solução feita por Onsager[1] das transições de fases para o modelo de Ising[2] numa rede quadrada. A partir dessa solução surgiram novas teorias

para estudar o verdadeiro comportamento das transições de fases . Essas novas teorias passaram a compreender a importância dos efeitos das flutuações de longo alcance; todavia, a partir de uma certa dimensão do espaço essas flutuações seriam pouco relevantes, por exemplo  $d=4$  pela teoria de Landau[3] para muitos materiais magnéticos. Esses efeitos foram considerados na teoria de escala. Na hipótese de escala, o espaço de parâmetros é invariante na vizinhança de um ponto crítico sob uma transformação de escala. Essa hipótese leva a obter expressões universais que relacionam os expoentes críticos juntamente com a dimensão do espaço[4]. Da constatação que muitos sistemas com forças interatômicas de curto alcance apresentavam os mesmos expoentes críticos, principalmente quando possuíam as mesmas dimensões do espaço e do parâmetro de ordem, surgiu o conceito de classes de universalidade que permite relacionar diferentes sistemas aparentemente sem relação entre si.

Uma das grandes transformações na teoria dos fenômenos críticos surgiu nos últimos anos com o desenvolvimento do conjunto de idéias do grupo de renormalização [5]. A teoria de renormalização foi primeiro desenvolvida por físicos de campos que tiveram que remover certas divergências de suas teorias[6]. Na teoria dos fenômenos críticos o grupo de renormalização foi introduzido por Kadanoff através da idéia dos “ blocos de spin” [7] que serviu de ponto de partida para a definição formal dada por Wilson[5]. Esses conceitos foram então aplicados com sucesso para diferentes áreas da física, além de diversas técnicas dentro do grupo de renormalização terem sido desenvolvidas [8].

Uma importante observação sobre o grupo de renormalização foi feita recentemente e está associada a sua aplicação a sistemas de spins em redes hierárquicas[9]. Constatou-se que várias técnicas do grupo de renormalização no espaço real que seriam aproximações para sistemas de spins em redes de Bravais são exatas nas redes hierárquicas[10,11].

Redes hierárquicas são por definição invariantes por escala e por conseqüência são

fractais[12]. Fractais que recentemente têm sido objeto de grande atenção por parte dos físicos teóricos, com uma vasta quantidade de aplicações tecnológicas[13,14,15,16]. Portanto, o estudo das transições de fases nas redes hierárquicas são por si só um campo de estudo interessante que poderá trazer novas descobertas aos fenômenos críticos além de um melhor entendimento das propriedades desses fractais.

Hoje, acredita-se que o formalismo usual da mecânica estatística do equilíbrio é estruturalmente rico o suficiente para prever transições de fases e dar informações concernentes a sua natureza. Inclusive já existem relações entre fenômenos estáticos e dinâmicos em sistemas estatísticos. Por exemplo, a propagação de danos e propriedades estatísticas do equilíbrio em diversos sistemas físicos[17,18,19], além de estudos de modelos para sistemas dinâmicos com estrutura crítica auto-organizada[20].

Uma das grandes aplicações dos fenômenos críticos está na teoria do magnetismo. A descoberta que as propriedades magnéticas dos materiais seriam funções dos seus estados microscópicos, mais precisamente das interações entre spins, fez surgir vários modelos que serviriam de laboratório e ferramenta para trabalhos teóricos em todos os ramos da ciência.

O modelo de Ising inicialmente aplicado ao magnetismo[2] é hoje aplicado a áreas como a biologia e a economia; ele tem um papel de destaque no estudo das transições de fases . O modelo de Heisenberg [21,22] que introduziu os efeitos quânticos no magnetismo, já é aplicado em áreas como teoria de campos e física das partículas e também é um dos principais modelos em que se estudam os fenômenos críticos.

Nesse contexto, o objetivo deste trabalho é estudar transições de fases em modelos magnéticos discretos dentro do método do grupo de renormalização no espaço real em redes hierárquicas.

No primeiro capítulo introduziremos o modelo cúbico discreto que foi proposto

inicialmente para explicar o comportamento magnético de certos compostos de terras raras[23]. Daremos uma visão do seu surgimento, alguns exemplos experimentais e derivaremos seu Hamiltoniano. Mostraremos que modelos como os de Ising, de Potts [24],  $Z(4)$  [25] são limites seus, e o resolveremos exatamente para uma dimensão. Também é feita uma breve revisão de soluções aproximadas para o caso de dimensões diferentes de um.

O capítulo 2 trata do método do grupo de renormalização e do conceito de redes hierárquicas. Daremos uma idéia do conceito de grupo de renormalização através dos “ blocos de spins” introduzido por Kadanoff[7]. Aplicaremos ao modelo cúbico discreto e novamente resolveremos este modelo para uma dimensão, agora com essa nova técnica. Sobre as redes hierárquicas discutiremos como pode ser feita uma boa escolha ao aproximarmos esse tipo de rede a uma rede de Bravais. No nosso caso introduziremos a rede hierárquica da ponte de Wheatstone que dá uma boa aproximação da rede quadrada, onde escolhemos a simetria de autodualidade como essencial para ser conservada. Introduziremos as variáveis transmissividades[26,27] que facilitam bastante o processo de grupo de renormalização , como também o método do corte-colapso[26] que torna possível calcular variáveis transmissividades equivalentes de diagramas originais para o renormalizado através de operações topológicas e um simples algoritmo não necessitando de todas as configurações do sistema.

No capítulo 3 trataremos do modelo cúbico discreto com mistura de ligações na rede hierárquica da ponte de Wheatstone[28]. Associamos a cada ligação da rede uma distribuição de probabilidades binária que simula uma mistura de magnetos do tipo desordem temperada(“quenched”). Utilizaremos o método do grupo de renormalização para obter os diagramas de fases, os expoentes críticos de comprimento de correlação e as classes de universalidade.

O capítulo 4 baseia-se no modelo de Heisenberg anisotrópico quântico. Inicialmente daremos uma idéia do seu surgimento e citaremos algumas soluções encontradas. Uma das recentes motivações desse modelo no caso antiferromagnético é sua aplicação na teoria de supercondutividade a altas temperaturas[29,72]. Aplicaremos o método do grupo de renormalização introduzido nas referências[30,31] numa rede hierárquica autodual que preserva o estado fundamental antiferromagnético desse modelo. Encontramos seu diagrama de fases, expoentes críticos de comprimento de correlação como também suas classes de universalidade[32].

Finalmente faremos nossas conclusões no capítulo 5.



## Capítulo 1

# O Modelo Cúbico Discreto

### 1.1 Histórico do Surgimento do Modelo

Compostos de terras raras com estruturas cristalinas cúbicas apresentam transições de fase estruturais e magnéticas a temperaturas que vão de 5 a  $25^{\circ}K$ , como também a possibilidade de exibir transições de fases de primeira ou de segunda ordem. O comportamento não usual de um desses compostos, o antimoneto de holmio (HoSb), de possuir largos expoentes críticos( por exemplo,  $\alpha = 0.85 \pm 0.1$  para seu calor específico), levou a associar esses compostos a sistemas tricríticos.

Estes estudos foram feitos por D.Kim, P.Levi e E.L.Uffer [23] que introduziram um modelo de spins para explicar o comportamento das transições de fases do com-

posto HoSb. O modelo(chamado modelo cúbico) mostrou ter um comportamento tipo tricrítico, em particular expoentes  $\alpha=1/2$ ,  $\beta=1/4$  e  $\gamma=1$ , para cálculos baseados na aproximação de campo médio. A aplicação dos resultados não se limitou ao HoSb, mas a todos os compostos cúbicos de terras raras que apresentavam um estado fundamental seis vezes degenerado, pois este fato foi o ponto de partida para a derivação do modelo.

Para aumentar, além disso, a visão do comportamento crítico do modelo cúbico e a natureza de suas transições de fases, consideraram uma classe de modelos chamados de modelos cúbicos de N-componentes em que o modelo cúbico seria um caso particular.

Veremos na secção seguinte que o modelo cúbico de N-componentes restringirá os spins a  $2N$  direções fixas pré-definidas, ou seja, o spin é discreto. Como estamos tratando de sistemas cúbicos, e usualmente tais sistemas eram investigados através do modelo LGW ( Landau-Ginzburg-Wilson) [3] de spins contínuos, seria importante relacionarmos ambos os modelos. Isso foi feito por A.Aharony[33] e também será visto na secção seguinte.

Vale ressaltar que o modelo cúbico de N-componentes passou a ser chamado de diversas maneiras, como por exemplo: modelo N-vetorial discreto, modelo cubico discreto, modelo cúbico, modelo N-vetor discreto. Portanto, para evitar confusões, de agora em diante convencionaremos chamá-lo de modelo cúbico discreto.

## 1.2 O Hamiltoniano

O Hamiltoniano cúbico discreto pode ser derivado de várias maneiras. Primeiro iremos considerar a derivação feita D.Kim e outros[23].

Partindo de que sempre existe um valor da razão dos parâmetros do campo cristalino cúbico para que possamos encontrar um estado fundamental seis vezes degenerado [34] e

como nas terras raras encontramos largo momento angular(J), D.Kim, P.Levy e L.Uffer mostraram que se temos um Hamiltoniano dado por

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J'_{ij} \vec{J}_i \cdot \vec{J}_j + V_{CC} \quad (1.1)$$

onde  $J'_{ij} = J_{ij}/J^2$ ,  $V_{CC}$  é o campo cristalino e  $\langle ij \rangle$  soma sobre os primeiros vizinhos, os estados que representam os seis níveis são caracterizados por momentos angulares que estão quantizados ao longo dos eixos de um cubo. Dentro desses estados os operadores momento angular  $J_x$ ,  $J_y$  e  $J_z$  têm a particularidade de comutarem e serem representados por matrizes diagonais. Portanto o Hamiltoniano efetivo seria:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sum_{\alpha} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} \quad (1.2)$$

onde  $S_i^{\alpha} = J_i^{\alpha}/J$  seriam spins unitários onde  $\alpha = x, y$  e  $z$ . O termo do campo cristalino do Hamiltoniano original foi considerado constante nessa aproximação e redefinido como zero.

Um Hamiltoniano do tipo acima, porém teoricamente diferente, foi introduzido por H.E.Stanley [35], em 1968. Ele usou um modelo que generalizava os modelos de Ising, Planar, Heisenberg e esférico introduzindo o spin  $S_i^{\nu}$  de um sítio como um vetor  $\nu$ -dimensional. Stanley ressaltou que a razão da introdução do novo Hamiltoniano, conceitualmente, foi o aparecimento de certas propriedades críticas como dependentes de  $\nu$ , contrariamente a crença que “detalhar propriedades do Hamiltoniano torna-se não importante em região crítica”, mas que essa dependência de  $\nu$  era suave e monotônica. Dentro do modelo derivado acima temos um spin  $S_i^{\alpha}$  e também podemos observar a sua influência dentro desse modelo.

Assumindo que os operadores do momento angular estão quantizados ao longo dos eixos de um hipercubo N-dimensional, podemos escrever um Hamiltoniano que generaliza o da eq. ( 1.2) onde  $\alpha = 1, 2, \dots, N$ . Sendo  $S_i^{\alpha}$  uma componente de um vetor

unitário  $\vec{S}_i = (\pm 1, 0, \dots, 0)$  ou  $(0, \pm 1, \dots, 0)$  ou ... ou  $(0, 0, \dots, \pm 1)$ , podemos escrever

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (1.3)$$

Este é o Hamiltoniano do modelo cúbico discreto. O Hamiltoniano da eq. ( 1.2) é o caso  $N=3$ .

Uma outra maneira de derivar o Hamiltoniano cúbico discreto foi feita por Aharony [33] que partiu do Hamiltoniano LGW, aplicado a sistemas cúbicos, considerando o modelo de spins contínuos com N-componentes escrito da seguinte forma:

$$- \beta \mathcal{H} = \int dx^d \left( \frac{1}{2} [r |\vec{S}(x)|^2 + (\vec{\nabla} \cdot \vec{S}(x))^2 + u |\vec{S}(x)|^4 + v \sum_{\alpha=1}^N (S_{\alpha}(x))^4 + \dots \right) \quad (1.4)$$

onde  $\vec{S}$  é um spin contínuo de N-componentes. O parâmetro  $v$  mede o tamanho da anisotropia cúbica, favorecendo a orientação dos spins em direção as diagonais de um hipercubo N-dimensional para  $v > 0$  e ao longo dos eixos do hipercubo para  $v < 0$ .

Para os limites  $u \rightarrow \infty$  e  $v \rightarrow -\infty$  obtemos a versão discreta do Hamiltoniano ( 1.4),

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j; \quad (1.5)$$

onde o spin  $\vec{S}_i$  de um dado sítio  $i$  é um vetor com N componentes que seguem apenas ao longo de 2N direções ( positivas e negativas) que são os eixos de um hipercubo 2N-dimensional, isto é,  $\vec{S}_i = (\pm 1, 0, 0, \dots, 0)$  ou  $(0, \pm 1, 0, \dots, 0)$  ou ... ou  $(0, 0, 0, \dots, \pm 1)$ . O Hamiltoniano ( 1.5) é igual ao ( 1.3) e é o Hamiltoniano cúbico discreto.

De forma similar também foi considerada uma interação quadripolar entre os spins e portanto o Hamiltoniano se generaliza para,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - L \sum_{\langle ij \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)^2. \quad (1.6)$$

Se representarmos a componente  $\alpha$  do spin  $\vec{S}$  como:

$$S_{\alpha} = \sigma \delta_{l\alpha} \quad (1.7)$$

onde  $\sigma = \pm 1$  e  $\delta_{l\alpha}$  é uma delta de Kronecker de  $l$  e  $\alpha = x, y, z$ ; podemos escrever que:

$$(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) = \sigma_i \sigma_j \delta_{\alpha_i \alpha_j} \quad (1.8)$$

e assim, uma outra forma de escrever o Hamiltoniano é:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \delta_{\alpha_i \alpha_j} - L \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\alpha_i \alpha_j} \quad (1.9)$$

onde  $\sigma_i$  assume os valores  $\pm 1$  e  $\alpha_i$  os valores  $1, 2, 3, \dots, N$ .

Uma hipótese que tem sido testada é que os modelos de spin discreto, de spin contínuo com anisotropia e o sistema experimental são descritos pelo mesmo Hamiltoniano LGW e em consequência pertencem a mesma classe de universalidades[36]. Resultados obtidos com o modelo discreto mostram que estão de acordo qualitativo com os obtidos com o modelo contínuo com anisotropia e isso pode ser visto na secção seguinte.

### 1.3 Fatos Experimentais

Além dos compostos de terras raras, inúmeras outras aplicações do ponto de vista experimental foram encontradas para o modelo de N-componentes, por exemplo, as transições de fases magnética em oxigênio molecular ( $O_2$ ) adsorvido em grafite [37] e transições de ordem-desordem em oxigênio atômico em tungstênio [38].

Para analisarmos a hipótese da mesma classe de universalidades para o modelo de spins discretos e o sistema experimental, se ambos são descritos pelo mesmo Hamiltoniano LGW, daremos uma breve explanação do estudo feito na referência [36] sobre as transições de fases em camadas de  $O_2$  no plano basal do grafite.

Esse sistema comporta-se essencialmente como um sistema bi-dimensional e a hipótese será baseada na consideração que as características das transições de fases



Figura 1.1: Processo que relaciona modelos discretos e sistemas físicos

em duas dimensões são determinadas pela dimensionalidade do parâmetro de ordem e pela simetria do sistema. Também consideraremos que derivado o Hamiltoniano LGW apropriado, através de argumentos de simetria, pode-se usá-lo para estabelecer a conexão entre o sistema físico e o modelo discreto apropriado. Esse processo pode ser visto esquematicamente na figura 1.1.

O sistema  $O_2$  adsorvido em grafite apresenta uma transição de fase magnética e distorsiva a aproximadamente  $10-12^\circ\text{K}$ . Experimentos de espalhamento de neutrons revelaram uma estrutura de fases tendo uma fase ordenada, antiferromagnética, ( $\alpha$ ) e uma desordenada, paramagnética ( $\beta$ ). Os eixos moleculares do oxigênio e os momentos magnéticos, são, respectivamente, normais e confinados ao plano do substrato. As fases  $\alpha$  e  $\beta$  não são fortemente relacionadas à rede do substrato, podendo assumir que os efeitos do substrato são negligenciados. Na figura 1.2 pode-se ver a estrutura de fases  $\alpha - O_2$  e  $\beta - O_2$  como também a direção dos momentos magnéticos das moléculas de  $O_2$  nos planos ordenados na fase  $\alpha$ .

O Hamiltoniano LGW para a transição  $\alpha - \beta$  do  $O_2$  no grafite foi proposto por E.Domany e E.K.Riedel [36] que levaram em consideração os efeitos dos graus de liberdade magnéticos e distorsivos. Levando em consideração argumentos de simetria o

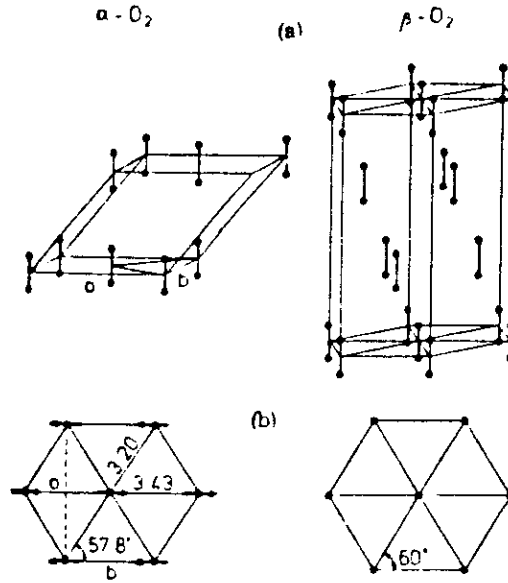


Figura 1.2: (a) Estrutura das fases  $\alpha-O_2$  e  $\beta-O_2$ . (b) Estrutura dos planos  $\alpha-O_2$  e  $\beta-O_2$ . Os vetores indicam a direção dos momentos magnéticos. Os eixos moleculares são perpendiculares ao plano. A fase  $\beta$  não tem longa-ordem magnética.

Hamiltoniano LGW foi escrito da forma,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{mag.} + \mathcal{H}_{dist.} + \mathcal{H}_{acop.} \quad (1.10)$$

onde  $\mathcal{H}_{mag.}$ ,  $\mathcal{H}_{dist.}$  e  $\mathcal{H}_{acop.}$  identificam os termos que consideram, respectivamente, os graus de liberdade magnéticos, distorsivos e o acoplamento entre os graus de liberdade magnéticos e distorsivos.

Finalmente, fazendo uma transformação que mapeia o modelo discreto no Hamiltoniano LGW (transformação de Hubbard[39]), foi encontrado que o modelo cúbico discreto para  $N=3$  mapeava um Hamiltoniano LGW idêntico ao (1.4).

## 1.4 Alguns Limites

O Hamiltoniano ( 1.9) também pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = -JN \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \delta_{\alpha_i \alpha_j} - LN^2 \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\alpha_i \alpha_j}. \quad (1.11)$$

A partir desse Hamiltoniano veremos alguns casos limites que podemos facilmente verificar.

1- Podemos notar que o segundo termo do hamiltoniano é o modelo de Potts de N-estados [24] com constante de acoplamento  $-N^2L$ ; assim para  $J = 0$  o modelo recai ao Potts de N-estados.

2- Para  $N = 1$  temos  $\sigma_i = \pm 1$  e  $\alpha_i = 1$ , o Hamiltoniano torna-se,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - L \quad (1.12)$$

e se reduz, a menos de uma constante(  $-L$  ), ao Hamiltoniano do modelo de Ising de spin 1/2 com acoplamento igual a  $-4J$ .

3- Se  $NL=K$ , temos,

$$\mathcal{H} = -JN \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j + 1) \delta_{\alpha_i \alpha_j} \quad (1.13)$$

usando a identidade  $(1 + \sigma_i \sigma_j) = 2\delta_{\sigma_i \sigma_j}$  temos,

$$\mathcal{H} = -2JN \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \delta_{\alpha_i \alpha_j} \quad (1.14)$$

que é o modelo de Potts de  $2N$ -estados com constante de acoplamento  $2NJ$ .

4- Para  $NL/J \rightarrow \infty$  notamos que todos os sítios tendem a ter os mesmos valores de  $\alpha_i$  por ser o termo dominante. Assim o problema volta a se reduzir ao modelo de Ising ao longo de um eixo com constante de acoplamento  $NL$ .



5- No limite  $N \rightarrow 0$  e  $NL = 0$  o modelo corresponde a estatística grande-canônica de uma caminhada aleatória (“self-avoiding walk”)[41].

6- E finalmente para  $N=2$  temos,

$$\delta_{\sigma_i, \sigma_j} = (1 + \mu_i \mu_j \sigma_i \sigma_j) / 2 \quad (1.15)$$

assim, a menos de uma constante,

$$\mathcal{H} = \frac{-JN}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j) - \frac{LN^2}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j \sigma_i \sigma_j \quad (1.16)$$

esse é o modelo de Ashkin e Teller simétrico, ou modelo  $Z(4)$  [25].

Essa grande quantidade de casos particulares importantes, além do grande interesse experimental, fazem do modelo cúbico discreto um modelo estatístico de grande motivação teórica, e suas soluções esclarecerão várias dúvidas existentes no estudo das transições de fases bem como novos tipos de pontos multicríticos e novas classes de universalidade.

## 1.5 Solução a Uma Dimensão(d=1)

Para resolvermos exatamente o modelo cúbico discreto em uma dimensão usaremos o método da matriz transferência que é um poderoso instrumento para calcular a função de partição . Como exemplo de sua eficácia, esse método foi usado por Onsager para resolver rigorosamente o modelo de Ising em duas dimensões [1].

Vejamos então como resolver o modelo cúbico discreto para  $n$  vetores de spins  $\vec{S}_i$  a uma dimensão. Seja o Hamiltoniano em uma dimensão,

$$\mathcal{H} = -JN \sum_i^n \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - LN^2 \sum_i^n (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2 \quad (1.17)$$

onde assumimos a condição cíclica  $\vec{S}_1 = \vec{S}_{n+1}$ . A função de partição tem a forma,

$$Z(N, J, L) = \sum_{\vec{S}_1} \sum_{\vec{S}_2} \dots \sum_{\vec{S}_n} \exp\{\beta N \sum_i^n [J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + LN(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2]\}. \quad (1.18)$$

Seja a matriz  $2N \times 2N$  expressa como,

$$P_{2N \times 2N} = \langle \vec{S} | P | \vec{S}' \rangle = e^{(\beta N [J \vec{S} \cdot \vec{S}' + LN(\vec{S} \cdot \vec{S}')^2])}. \quad (1.19)$$

onde  $\vec{S}$  e  $\vec{S}'$  podem assumir independentemente os valores  $(\pm 1, 0, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, \pm 1)$ .

É fácil ver que,

$$Z(N, J, L) = \sum_{\vec{S}_1} \sum_{\vec{S}_2} \dots \sum_{\vec{S}_n} \langle \vec{S}_1 | P | \vec{S}_2 \rangle \langle \vec{S}_2 | P | \vec{S}_3 \rangle \dots \langle \vec{S}_n | P | \vec{S}_1 \rangle \quad (1.20)$$

ou ainda

$$Z(N, J, L) = \sum_{\vec{S}_1} \langle \vec{S}_1 | P^n | \vec{S}_1 \rangle = \text{Tr} P^n = \sum_i \lambda_i^n \quad (1.21)$$

onde  $\lambda_i$  são os autovalores de P. Portanto para encontrarmos a função de partição

$Z(N, J, L)$  basta calcularmos os autovalores da matriz P e assim escrever que:

$$\det \begin{pmatrix} \frac{1}{uv} - \lambda & \frac{u}{v} & 1 & 1 & \dots & \dots & 1 \\ \frac{u}{v} & \frac{1}{uv} - \lambda & 1 & 1 & \dots & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \frac{1}{uv} - \lambda & \frac{u}{v} & \dots & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \frac{u}{v} & \frac{1}{uv} - \lambda & \dots & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \frac{u}{v} \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & \frac{u}{v} \frac{1}{uv} - \lambda \end{pmatrix} = 0.$$

onde,  $u = \exp(-\beta N J)$  e  $v = \exp(-\beta N^2 L)$ . Após um pouco de álgebra encontramos

que essa equação tem três autovalores que são:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 2[e^{(\beta L N^2)} \cosh(\beta N J) + N - 1] \\ \lambda_2 &= 2[e^{(\beta L N^2)} \cosh(\beta N J) - 1] \\ \lambda_3 &= 2e^{(\beta L N^2)} \sinh(\beta N J) \end{aligned} \quad (1.22)$$

respectivamente, 1 vez, (N-1) vezes e N vezes degenerados. Assim a função de partição para uma cadeia de n spins é:

$$Z(N, J, L) = \lambda_1^n + (N - 1)\lambda_2^n + N\lambda_3^n. \quad (1.23)$$

Para  $T > 0$  e  $N > 0$  nós temos  $\lambda_1 > \lambda_2$ , e se  $N > 1$  também temos  $\lambda_1 > \lambda_3$ . Assim, a energia livre por spin é:

$$F = -\frac{1}{\beta n} \ln Z = -\frac{k_B T}{n} \ln[\lambda_1^n + (N - 1)\lambda_2^n + N\lambda_3^n] \quad (1.24)$$

ou ainda,

$$F = -\frac{k_B T}{n} \ln\left\{\lambda_1^n \left[1 + (N - 1)\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^n + N\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^n\right]\right\}. \quad (1.25)$$

Assim no limite termodinâmico ( $n \rightarrow \infty$ ) para  $N > 1$  e  $T > 0$ , temos,

$$F = -k_B T \ln(\lambda_1) = -k_B T \ln[2e^{(\beta L N^2)} \cosh(\beta N J) + N - 1] \quad (1.26)$$

para  $T \rightarrow 0$ , isto é,  $\beta \rightarrow \infty$ , encontramos,

$$\lambda_1 \approx \lambda_2 \approx \lambda_3 \approx e^{N\beta(J+|L|N)} \rightarrow \infty \quad (1.27)$$

portanto todos os autovalores tornam-se degenerados para  $J + N|L| > 0$ , e poderemos ter pontos críticos, a temperatura zero, como por exemplo,  $J=0$  (Potts N-estados),  $J=NL$  (Potts 2N-estados) e  $L=0$  (novo cúbico).

A função correlação spin-spin é,

$$\begin{aligned} \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r} \rangle &= \frac{1}{Z(N, J, L)} \sum_{\vec{s}_1} \sum_{\vec{s}_2} \dots \sum_{\vec{s}_n} \langle \vec{S}_1 | P | \vec{S}_2 \rangle \dots \vec{S}_i \langle \vec{S}_i | P | \vec{S}_{i+1} \rangle \dots \vec{S}_{i+r} \\ &\quad \cdot \langle \vec{S}_{i+r} | P | \vec{S}_{i+r+1} \rangle \dots \end{aligned} \quad (1.28)$$

ou ainda,

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z(N, J, L)} \sum_{\vec{s}_i} \sum_{\vec{s}_{i+r}} \langle \vec{S}_i | P^{n-r} | \vec{S}_{i+r} \rangle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r} \langle \vec{S}_{i+r} | P^r | \vec{S}_i \rangle. \quad (1.29)$$

Escrevendo a matriz transferência  $P$  da forma,

$$\langle \vec{S} | P | \vec{S}' \rangle = \frac{\lambda_1}{2n} + \frac{\lambda_2}{2} [(\vec{S} \cdot \vec{S}')^2 - \frac{1}{N}] + \frac{\lambda_3}{2} (\vec{S} \cdot \vec{S}') \quad (1.30)$$

como as matrizes dos operadores  $(\vec{S} \cdot \vec{S}') \cdot (1/2N) = 0$  e  $(\vec{S} \cdot \vec{S}') \cdot (\vec{S} \cdot \vec{S}')^2 = 0$  é fácil ver que no limite termodinâmico ( $n \rightarrow \infty$ ) temos

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r} \rangle = \left( \frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right)^r \quad (1.31)$$

e portanto o comprimento de correlação  $\xi$  definido como,

$$\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r} \rangle = e^{-r/\xi} \quad (1.32)$$

é

$$\xi = 1/\ln(\lambda_1/\lambda_3). \quad (1.33)$$

Uma segunda função correlação, tipo quadrupolar, pode ser escrita como,

$$\langle (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r})^2 \rangle = \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^r = e^{-r/\xi'} \quad (1.34)$$

onde

$$\xi' = 1/\ln(\lambda_1/\lambda_2). \quad (1.35)$$

Para  $T = 0$ , (1.27) implica

$$\xi = \xi' \rightarrow \infty \quad (1.36)$$

No caso  $0 < N < 1$  podemos ter  $\lambda_1 = \lambda_3$  e portanto há possibilidade, à temperatura finita, de termos  $\xi \rightarrow \infty$  e assim,

$$k_B T_c = \frac{N(LN - J)}{\ln(1 - N)} \quad (1.37)$$

com a prevenção de que  $LN < J$ . Esse resultado é bastante peculiar e pode ser encontrado nas referências[33,65].

Concluimos então a solução do caso unidimensional ( $d=1$ ). A seguir estudaremos os casos em que a dimensão do sistema é diferente de 1.

## 1.6 Solução a $d \neq 1$

Não existe solução exata para  $T_c$  no modelo cúbico discreto para dimensões diferentes de  $d=1$ , a não ser para certos limites, como por exemplo  $N=1$ , pois assim temos o modelo de Ising de spin  $1/2$  que tem solução exata para  $d=2$  [1].

Uma outra importante propriedade do Hamiltoniano (1.6) é ser fechado sob certo grupo de renormalização, que veremos mais adiante, não gerando novos termos espúrios.

Portanto essa é a técnica mais usada no tratamento desse modelo. Contudo, o primeiro tratamento para esse modelo feito por D. Kim e outros [23] foi a aproximação de campo médio para o caso tridimensional ( $d=3$ ) para estudar o seu comportamento termodinâmico. Eles encontraram que para  $N > 3$  a transição é de primeira ordem e para  $N = 3$  a transição é contínua com expoentes do tipo tricrítico.

O primeiro tratamento via grupo de renormalização foi feito por Aharony [33] para o caso  $d=2$ , considerando uma rede quadrada. Foram encontrados três pontos fixos para valores finitos de  $\beta J$  e  $\beta NL$ : um ponto fixo que descrevia o comportamento crítico do modelo de Potts de  $N$ -estados [  $P(N)$  ], um outro que descrevia o comportamento crítico do modelo de Potts de  $2N$ -estados [  $P(2N)$  ] e um novo ponto fixo descrevendo o comportamento do modelo cúbico [  $C$  ]. Para  $0 \leq N < 8$  o ponto fixo  $P(2N)$  seria duplamente instável enquanto que o ponto  $C$  seria duplamente estável e se  $N > 8$  aconteceria uma troca de comportamentos. No limite  $N = 8$  os dois pontos coincidiriam. Na figura 1.3 podemos ver o diagrama de fases para o caso  $N = 3$ . Seguiram outros tratamentos via grupo de renormalização feitos por H.Hilhorst [41], E.Domany e E.K.Riedel [36], B.Nienhuis e outros [42] .

Tornou-se claro notar que o comportamento crítico do modelo cúbico discreto seria sempre uma competição entre os comportamentos críticos dos modelos de Ising,

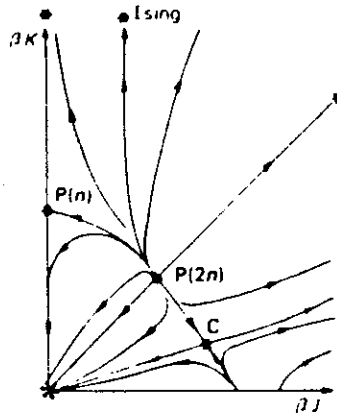


Figura 1.3: Pontos fixos e linhas de fluxos para  $N=3$  obtido na referência [33].  $P(N)$  é o ponto fixo do modelo de Potts de  $N$ -estados e  $C$  é o ponto fixo cúbico.

do Potts de  $N$ -estados, do Potts de  $2N$ -estados e dos novos pontos fixos do tipo cúbico. Ainda foram feitos outros tratamentos no modelo cúbico discreto como por exemplo a invariância conforme, feita na referência [43], o método de Monte-Carlo, feito na referência [44].

Recentemente, um completo estudo sobre a criticalidade do modelo cúbico discreto ferromagnético foi feito por C. Tsallis e outros [45] através do grupo de renormalização no espaço real que preserva a função correlação de 2 sítios para uma rede planar autodual hierárquica (ponte de Wheatstone) [ver capítulo 2]. Todos os resultados são exatos para a rede hierárquica e constituem uma excelente aproximação para a rede quadrada, como poderemos constatar nos capítulos seguintes.

Os diagramas de fases para valores típicos de  $N$  são apresentados na figura 1.4. Para um dado valor de  $N$ , o diagrama apresenta 3 fases: paramagnética, ferromagnética e intermediária. Como no tratamento de Aharony [33] foram encontrados 3 pontos

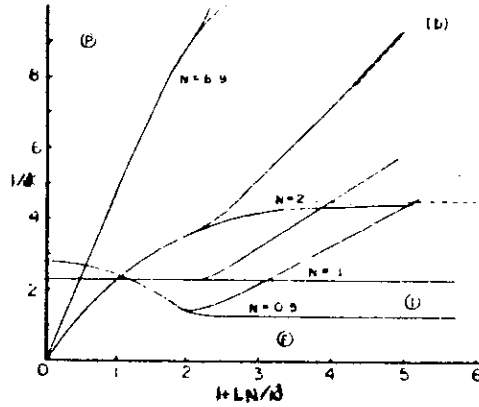


Figura 1.4: Diagrama de fases obtido na referência [45] para o modelo cúbico discreto para valores típicos de  $N$ .

fixos semi-estáveis e um ponto completamente estável (ponto multicrítico), que têm um comportamento crítico tipo Ising, Potts de  $N$ -estados, Potts de  $2N$ -estados e o cúbico. Para a transição na qual os pontos tipo Potts  $2N$ -estados e cúbico trocam de comportamento (troca de estabilidade) foi encontrado  $N^* \approx 6.9$ .

Também são calculados os expoentes críticos térmicos e crossover. Suas definições e comportamentos podem ser vistos no capítulo 3 como um caso limite encontrado por nós. Para o caso antiferromagnético podemos citar o trabalho de E.P.da Silva, A.Mariz e C.Tsallis[46]. Eles generalizaram o trabalho de Tsallis e outros[45] usando o mesmo método mas em outra rede hierárquica autodual.

## Capítulo 2

# Grupo de Renormalização e Redes

## Hierárquicas

### 2.1 O Grupo de Renormalização

#### 2.1.1 Introdução

No estudo dos fenômenos críticos encontramos o problema de ter que tratar com um grande número de graus de liberdade. Isso torna, em geral, o problema insolúvel por métodos tradicionais, tais como o cálculo direto da função de partição em problemas termodinâmicos.



Até podemos reduzir o tamanho do sistema, mas até um mínimo que é o comprimento de correlação  $\xi$ , sendo que perto de uma transição de fases contínua  $\xi$  torna-se muito grande e em um ponto crítico torna-se infinito. Nesses casos há um comportamento cooperativo entre os muitos graus de liberdade e novamente métodos tradicionais não resolvem o problema dos fenômenos críticos.

O grupo de renormalização (GR) é um método que tem como um dos seus objetivos substituir os graus de liberdade microscópicos originais de um sistema fazendo uma mudança de escala e eliminando flutuações microscópicas de modo tal que o conjunto final de graus de liberdade seja menor que o original.

Quando tratamos diretamente com o Hamiltoniano microscópico do sistema, o GR é chamado de GR no espaço real. Diversas técnicas foram desenvolvidas para esse tipo de GR. podemos citar entre elas, o GR diferencial, o GR fenomenológico, o GR Monte-Carlo, o GR de Migdal-Kadanoff.

Um outro tipo de GR é feito no espaço recíproco e nesse caso o Hamiltoniano é um funcional do parâmetro de ordem.

### 2.1.2 O GR no Espaço Real

Daremos uma idéia desse método através do “bloco de spins” introduzido por Kadanoff [7]. Consideremos um sistema de  $n$  spins  $S$ ,  $d$ -dimensional, de comprimento  $L$ , com Hamiltoniano  $\mathcal{H}\{S\}$  e função partição  $Z_n\{J\}$ , onde  $\{S\}$  especifica a configuração de spins e  $\{J\}$  o conjunto de acoplamentos. Agora dividiremos o sistema em blocos de tamanho  $b^d$  e definiremos o spin  $S'$ , de um dado bloco, como algum tipo de média dos spins contidos no bloco. O número de spins do novo sistema se reduz a  $n' = b^{-d}n$  e o novo espaçamento da rede aumenta  $b$  vezes. Pode-se ver esse processo na figura 2.1 para blocos de 2 spins em uma dimensão. Assumindo que suficientemente próximos

de um ponto crítico o sistema poderia ser descrito em termos de um Hamiltoniano efetivo  $\mathcal{H}\{S'\}$  envolvendo apenas “ blocos de spins” e que contenham um conjunto de acoplamentos do mesmo tipo que o original( exceto seus valores), teríamos uma nova função de partição  $Z_{n'}\{J'\}$ .

Se considerarmos que o sistema de “ blocos de spins” é apenas uma outra forma de descrever o sistema original, ou como referimos acima, uma forma de negligenciarmos os detalhes, seria como se estivéssemos olhando o sistema por meio de um microscópio de grande ampliação . Portanto, podemos escrever,

$$Z_{n'}\{J'\} = Z_n\{J\} \quad (2.1)$$

e ainda, sendo  $f\{J\} = F\{J\}/nk_B T$ , onde  $F\{J\}$  é a energia livre do sistema, temos,

$$f\{J\} = b^{-d} f\{J'\}. \quad (2.2)$$

Essa equação nos permite então resolver o sistema original através de um conjunto efetivo de graus de liberdade tratável por métodos tradicionais.

A imposição da igualdade entre as funções de partição original e renormalizada não é a única escolha que pode ser feita. Na verdade a conexão entre os sistemas original e renormalizado é definida como,

$$\exp[-\beta G - \beta \mathcal{H}'(S')] = \sum_{\{S\}} P(S, S') \exp[-\beta \mathcal{H}(S)] \quad (2.3)$$

onde  $\sum_{\{S\}}$  soma sobre todas as configurações iniciais,  $G$  é uma constante de renormalização que leva em consideração uma possível diferença entre as energias dos estados fundamentais de  $\mathcal{H}$  e  $\mathcal{H}'$ , e  $P(S, S')$  é uma função peso que depende das redes original e renormalizada, tal que,

$$P(S, S') \geq 0 \quad \forall S, S' \quad e \quad \sum_{\{S'\}} P(S, S') = 1. \quad (2.4)$$

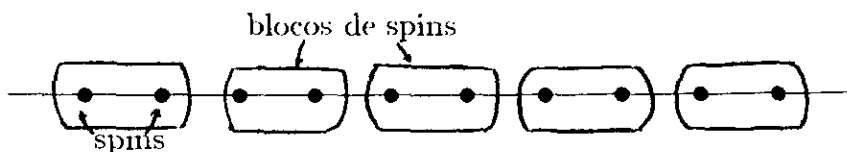


Figura 2.1: Transformação de "bloco de spins".

Um exemplo de transformação de renormalização será dado a seguir. Consideramos o modelo cúbico discreto a uma dimensão, discutido na secção 1.5. Seja a transformação de "bloco de spins" em uma dimensão em que descrevemos o sistema em termos de bloco de 2-spins, vejamos a figura 2.1. A equação ( 1.21) nos define a função de partição para uma cadeia de  $n$  spins que poderemos escrever como,

$$Z_n = Tr P^n = Tr [(P^2)^{n/2}] \quad (2.5)$$

assim a matriz transferência  $P' = P^2$  é a matriz para o bloco de spins. Como a matriz  $P$  é:

$$\begin{aligned} P_{ij} &= \frac{1}{uv} , \text{ se } i = j \\ &\frac{u}{v} , \text{ se } |i - j| = 1 \\ &1 , \text{ de outro modo} \end{aligned} \quad (2.6)$$

é fácil encontrar que a matriz  $P'$  é:

$$\begin{aligned} P'_{ij} &= \frac{1}{(uv)^2 + (\frac{u}{v})^2 + 2N - 2} , \text{ se } i = j \\ &\frac{2}{v^2 + 2N - 2} , \text{ se } |i - j| = 1 \\ &\frac{2}{\frac{2}{uv} + 2\frac{u}{v} + 2N - 4} , \text{ de outro modo} \end{aligned} \quad (2.7)$$

escrevendo a matriz  $P'$  da mesma forma que  $P$ , temos,

$$\begin{aligned} P'_{ij} &= \frac{z}{u'v'} \quad , \text{ se } i = j \\ &\frac{zu'}{v'} \quad , \text{ se } |i - j| = 1 \\ &z \quad , \text{ de outro modo} \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde  $u'$  e  $v'$  serão os parâmetros no sistema de bloco de spins e  $z$  é um novo parâmetro, introduzido pois de ( 2.6) e ( 2.7) precisamos calcular 3 diferentes elementos de matriz e só temos 2 variáveis(  $u$  e  $v$ ). Assim,

$$u' = u \sqrt{\frac{2 + v^2(2N - 2)}{(u^4 + 1) + u^2v^2(2N - 2)}} \quad (2.9)$$

$$v' = v \frac{2[(u^2 + 1) + uv(N - 2)]}{\sqrt{[2 + v^2(2N - 2)][(u^4 + 1) + u^2v^2(2N - 2)]}} \quad (2.10)$$

e

$$z = \frac{2}{uv} [(u^2 + 1) + uv(2N - 4)]. \quad (2.11)$$

Estas são as equações de renormalização do problema em questão.

Para o caso particular  $N=2$ , de ( 2.9) e ( 2.10),

$$u' = u \sqrt{\frac{2(1 + v^2)}{(u^4 + 1) + 2u^2v^2}} \quad (2.12)$$

$$v' = v \frac{2(u^2 + 1)}{\sqrt{2(1 + v^2)[(u^4 + 1) + 2u^2v^2]}}. \quad (2.13)$$

Fazendo um mapeamento da transformação  $(u, v) \rightarrow (u', v')$  no espaço de parâmetros, e partindo de diversos pontos iniciais  $(u, v)$ , geramos uma sequência de pontos conectados que nos darão um diagrama de fluxo no espaço de parâmetros como podemos ver na figura 2.2 . Das equações ( 2.12) e ( 2.13) podemos observar que para o caso em que o estado fundamental é ferromagnético à temperatura  $T=0$ , ou seja,  $J \geq 0$  e  $L \geq 0$ , temos, para  $T \geq 0$ , o espaço de parâmetros compreendido entre:

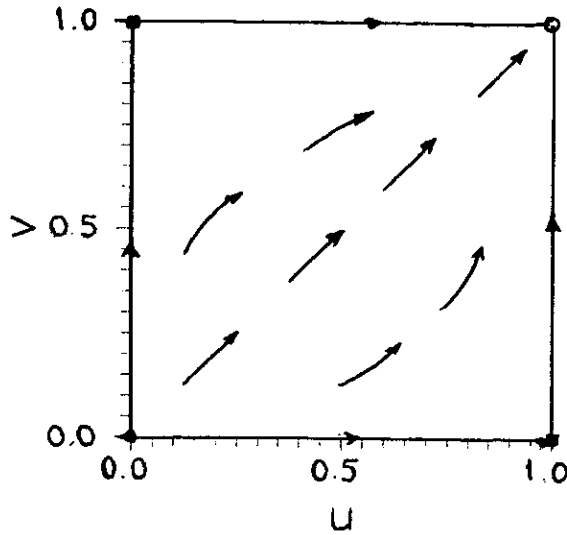


Figura 2.2: Diagrama de Fluxo para  $N=2$ .

$$0 \leq u \leq 1$$

$$0 \leq v \leq 1$$

Os pontos  $(u, v)$  que permanecem inalterados sob a transformação são chamados de pontos fixos. Se na vizinhança de um ponto fixo o diagrama de fluxos tende a se afastar dele, o ponto fixo é chamado de instável, caso contrário, temos um ponto fixo estável.

Como os comprimentos reescalam com  $a' = a/b$ , os comprimentos de correlação reescalam com  $\xi\{J'\} = \xi\{J\}/b$ , onde  $a$  e  $a'$  são os parâmetros da rede e  $\{J\}$  o conjunto de acoplamentos. Pode-se ver facilmente que para pontos fixos temos  $\xi = 0$  ou  $\xi = \infty$ . Pontos para os quais  $\xi = 0$  (corresponde a  $T=0$  ou  $T=\infty$ ) são chamados de pontos fixos triviais e caracterizam as diferentes fases. Pontos para os quais  $\xi = \infty$  são os pontos críticos e caracterizam as transições entre as diferentes fases.

No caso das transformações ( 2.12) e ( 2.13) encontramos como pontos fixos,

$$u = 0 \quad , \quad v = 0 \quad \text{(ponto fixo instável)}$$

$$\quad \quad \quad , \quad v = 1 \quad \text{(ponto fixo semi-estável)}$$

$$u = 1 \quad , \quad v = 0 \quad \text{(ponto fixo semi-estável)}$$

$$\quad \quad \quad , \quad v = 1 \quad \text{(ponto fixo completamente estável)}$$

A linha  $u = 0$  corresponde a  $T = 0$ . O ponto fixo dessa linha  $(0,0)$  é instável, portanto é um ponto inacessível. Para  $u = 1$  temos  $T = \infty$ , e o ponto fixo  $(1,1)$  é estável, mas com comprimento de correlação  $\xi = 0$ . Podemos concluir então que o sistema não tem ponto crítico, como já era de se esperar da solução feita no capítulo anterior.

Para o caso geral obtivemos os pontos fixos,

$$\begin{array}{lll}
 u = 0 & , v = 0 & \text{(ponto fixo instável)} \\
 & v = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \quad N \geq 2 & \text{(ponto fixo semi-estável)} \\
 u = 1 & , v = 0 & \text{(ponto fixo semi-estável)} \\
 & v = 1 & \text{(ponto fixo estável)} \\
 u = \sqrt{\frac{1-N}{1+N}} & v = \frac{1}{\sqrt{1-N^2}} \quad 0 < N < 1 & \text{(ponto crítico)}
 \end{array}$$

Fazendo a mesma análise do caso anterior concluímos que também não há ponto crítico para  $N > 1$  e que há ponto crítico para  $0 < N < 1$ .

Um problema que encontramos durante o uso do GR para o modelo cúbico discreto no caso limite  $N=1$  ( modelo de Ising), e que já foi citado em outros trabalhos, é o aparecimento de uma fase espúria para o caso de uma rede hierárquica autodual [45,46]. Nenhum argumento convincente foi encontrado como solução , sendo citado que um “ artefato matemático” do método seria o responsável pela fase espúria, mas sem nenhum aprofundamento.

Na tentativa de aumentar o entendimento do problema, seguimos numa primeira abordagem o procedimento do “bloco de spins” para o caso uni-dimensional somente para o caso particular  $N=1$ . Encontramos:

$$P = \frac{1}{v} \begin{pmatrix} \frac{1}{u} & u \\ u & \frac{1}{u} \end{pmatrix}$$

$$P' = \frac{1}{v^2} \begin{pmatrix} \frac{u^4+1}{u^2} & 2 \\ 2 & \frac{u^4+1}{u^2} \end{pmatrix} = \frac{1}{v'} \begin{pmatrix} \frac{1}{u'} & u' \\ u' & \frac{1}{u'} \end{pmatrix}$$

assim,

$$u' = u \sqrt{\frac{2}{u^4 + 1}} \quad (2.14)$$

$$v' = \frac{uv^2}{\sqrt{2(u^4 + 1)}}. \quad (2.15)$$

Num segundo momento fizemos o limite  $N=1$  do caso geral ( equações ( 2.9) e ( 2.10) ) e encontramos:

$$u' = u \sqrt{\frac{2}{u^4 + 1}} \quad (2.16)$$

$$v' = \frac{2[(u^2 + 1) - uv]}{\sqrt{2(u^4 + 1)}} \quad (2.17)$$

portanto os dois casos de transformação não são iguais. Apenas a transformação  $u' \equiv u'(u)$  coincidiu. Podemos ver nas figuras 2.3(a) e 2.3(b) o diagrama de fluxos para os dois casos.

Na secção 1.4 vimos que o limite  $N=1$  do modelo cúbico discreto recai no modelo de Ising mais uma constante. O termo de Ising puro está representado pela variável  $u$ , que como observamos teve a sua transformação coincidente nos dois casos tratados ( equações ( 2.14) e ( 2.16)), como também desacoplada da variável  $v$ . O problema surge da transformação da variável  $v$  que acopla a constante  $L$  com a temperatura, e podemos concluir que isso deve-se ao fato que no caso geral definimos um novo parâmetro  $z$  que traz um vínculo às variáveis  $u$ ,  $v$  e  $N$ , não necessário para o caso  $N=1$ .

Voltando ao problema do GR, quando renormalizamos um sistema qualquer, podem surgir novos tipos de acoplamento que não estavam presentes no

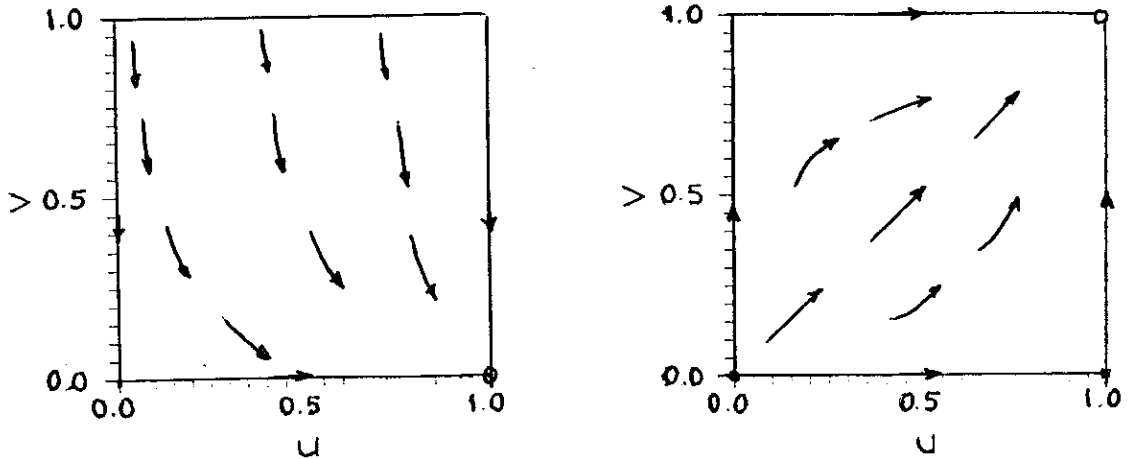


Figura 2.3: Diagrama de fluxos para  $N=1$ . (a) obtido de ( 2.14) e ( 2.15). (b) obtido de ( 2.16) e ( 2.17).

Hamiltoniano original. Se reconsiderarmos o problema incorporando os novos acoplamentos e o sistema permanecer fechado sob o GR, podemos resolver o problema, mas se ainda houver proliferação de parâmetros será necessário fazer um truncamento em algum ponto. Tal aproximação dependerá da rede de Bravais em questão , pois a topologia da rede e o modelo usado serão importantes na escolha da aproximação .

Uma outra aproximação que pode ser feita é usar uma rede hierárquica( invariância de escala) ao invés da rede de Bravais( invariância de translação ). A escolha será feita preservando as simetrias mais relevantes da rede original. A seguir daremos a definição de rede hierárquica, o GR nessas redes e a rede hierárquica tipo “ponte de Wheatstone” que veremos ser uma boa aproximação para a rede quadrada.



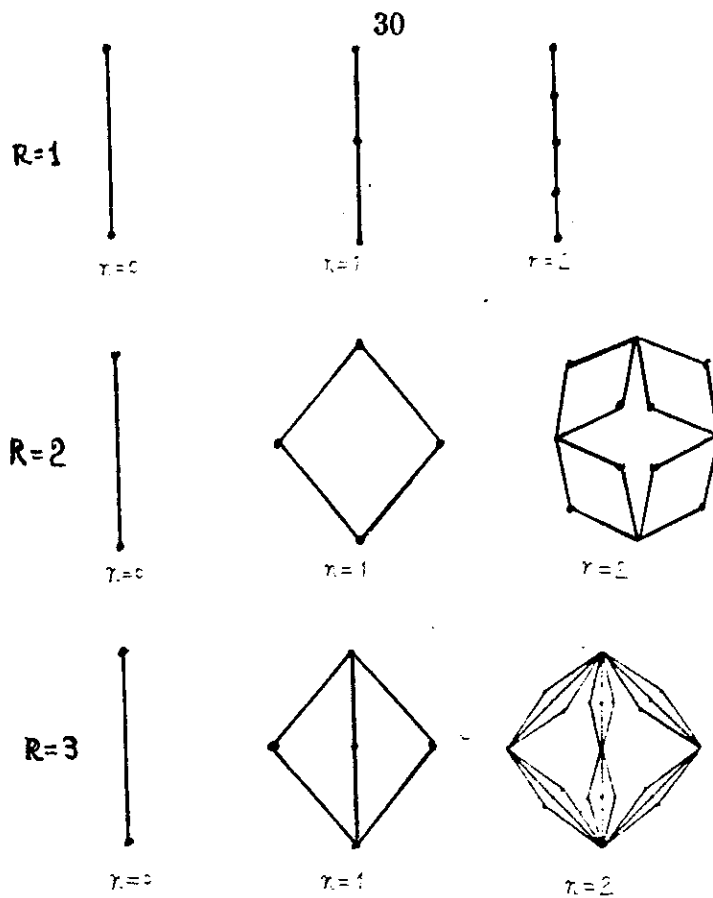


Figura 2.4: família de redes hierárquicas em que  $l=2$  e  $R=1, 2$  e  $3$ .

## 2.2 Redes Hierárquicas

Uma rede hierárquica[9] é gerada partindo de uma rede de dois pontos unidos por uma ligação simples. Então de maneira iterativa usamos uma operação de substituição de uma ligação por  $R$  ramos de  $l$  ligações e após  $n$  iterações, para  $n \rightarrow \infty$ , obtemos a rede. Podemos ver na figura 2.4 uma família de redes até a segunda iteração em que  $l = 2$  e  $R = 1, 2$  e  $3$ .

É bom enfatizar que redes hierárquicas têm propriedades diferentes das redes de Bravais, significando que resultados obtidos para modelos solúveis numa rede hierárquica podem ser enganosos na rede de Bravais, mas, uma boa escolha ao aproximarmos uma rede de Bravais por uma hierárquica pode nos dar um conjunto de resultados que em parte serão exatos ou uma boa aproximação dos exatos. Na secção 2.2.1 poderemos ver como pode ser feita tal escolha e faremos uma análise de seus resultados para o modelo

de Ising em duas dimensões.

Explorar as diferenças entre as redes hierárquicas e as de Bravais poderá dar um maior entendimento das bases das transições de fases em mecânica estatística.

Uma outra coisa que vale ressaltar é que da forma que são geradas, as redes hierárquicas têm a propriedade de serem invariantes por escala e portanto são fractais [12]. Fractais que nos últimos anos têm sido objeto de grande interesse de estudos [13,14,15,16], levando o estudo das redes hierárquicas, por si só, a uma grande importância. Pode-se definir a dimensão fractal de uma rede hierárquica como[12,47]:

$$d_f = \frac{\ln(b)}{\ln(B)} \quad (2.18)$$

onde  $b$  é o número de subunidades aglomeradas em cada estágio de construção da rede hierárquica, mais comumente chamado de número de agregação, que no nosso caso como temos apenas 2 raízes é igual ao número ligações da rede.  $B$  é definido como o comprimento do menor caminho que conecta as raízes, ou seja, o menor número de ligações que conecta as raízes e é chamado de distância química ou fator de escala. Para certos tipos de redes hierárquicas, como por exemplo os da figura 2.4, temos que a dimensão fractal da rede hierárquica é igual à sua dimensão euclidiana.

Como vimos na equação ( 2.1) poderemos impor que um funcional permaneça invariante sob a transformação preservando assim os aspectos físicos mais relevantes. Uma condição mais forte que a condição de função de partição seja preservada é impor que a função de correlação entre as raízes da rede original e renormalizada seja preservada, ou seja, manteremos os graus de liberdade externos fixos em qualquer configuração e somaremos os graus de liberdade internos. Temos então

$$e^{-\beta\mathcal{H}'} = \text{Tr}_{\text{sitios internos}} e^{-\beta\mathcal{H}} \quad (2.19)$$

onde  $\mathcal{H}$  e  $\mathcal{H}'$  são respectivamente os Hamiltonianos associados com o menor e o maior

diagrama.

O processo de fazer a soma de todas as configurações internas inicialmente é fácil, mas se usarmos diagramas um pouco maiores teremos grandes dificuldades pois teremos muitos graus de liberdade. O método introduzido na referência [26], chamado de “corte-colapso” veio facilitar enormemente este processo, pois permite realizar traços parciais sobre os sítios internos sem a necessidade de efetuar a soma direta das configurações desses sítios.

Veremos o procedimento de tal método exemplificado pela construção do traço parcial da rede hierárquica da “ponte de Wheatstone” que veremos a seguir ser uma boa aproximação da rede quadrada.

### 2.2.1 A Rede Hierárquica da Ponte de Wheatstone

Ao aproximar uma rede de Bravais em uma rede hierárquica devemos escolher o diagrama que contenha as propriedades de simetrias essenciais de tal modo que ao fazermos o GR tenhamos resultados bem próximos do real. Mas na escolha de simetrias essenciais teremos que sacrificar outras simetrias, e, no caso, como garantir que escolheremos as essenciais?

No nosso caso, queremos uma rede hierárquica que se aproxime de uma rede quadrada, portanto que possua simetrias de reflexão, centros de inversão, autodualidade, etc. A simetria de autodualidade significa a invariância por dualidade, ou seja, a rede dual da quadrada é ela mesma. A rede dual é a rede que se forma com pontos colocados no centro de cada célula elementar e esses pontos se unem tal que cada ligação da rede original é cortada por uma só ligação da nova rede.

A autodualidade é importante de ser conservada nesse problema, pois conserva, nos pequenos diagramas, a maneira como flue a informação nos grandes diagramas. Isso

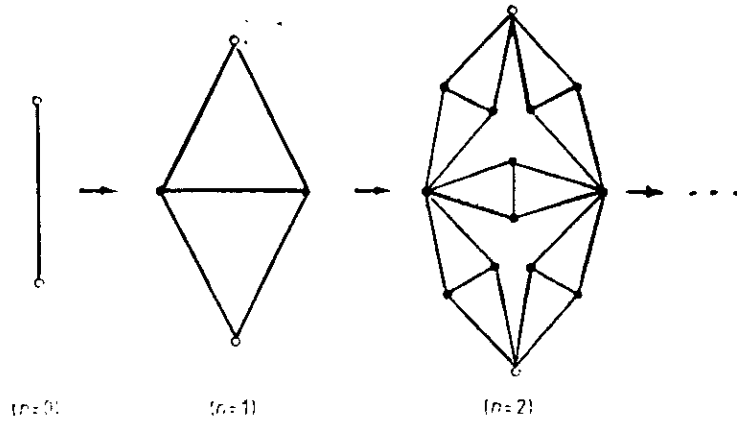


Figura 2.5: A ponte de Wheatstone.

nos permite ter pontos críticos exatos.

Uma rede hierárquica que é autodual é a chamada ponte de Wheatstone. Podemos ver na figura 2.5 a ponte de Wheatstone usual; na figura seguinte vemos como são geradas as suas ordens superiores. Chamando a ponte de Wheatstone de diagrama de ordem 1 e assim sucessivamente, podemos ver que por esse caminho chegaremos, em certo sentido, à rede quadrada. Fazendo uma análise dos resultados obtidos para o modelo de Ising em duas dimensões na rede quadrada e na rede ponte de Wheatstone (ordem 1)[48,50], podemos ver na tabela 2.1 que há uma concordância entre os pontos críticos, como indicamos acima, e uma boa aproximação entre os expoentes críticos, resultados que nos levam a aumentar nossa segurança na aproximação da rede quadrada (de Bravais) pela rede ponte de Wheatstone (hierárquica).

	rede quadrada(exato)	rede hierárquica(RG)
$t_c$	$\sqrt{2}-1$	$\sqrt{2}-1$
$\nu_t$	1	1.149

Tabela 2.1: Comparação dos pontos e expoentes críticos entre as redes quadrada (Bravais) e ponte de Wheatstone (hierárquica).



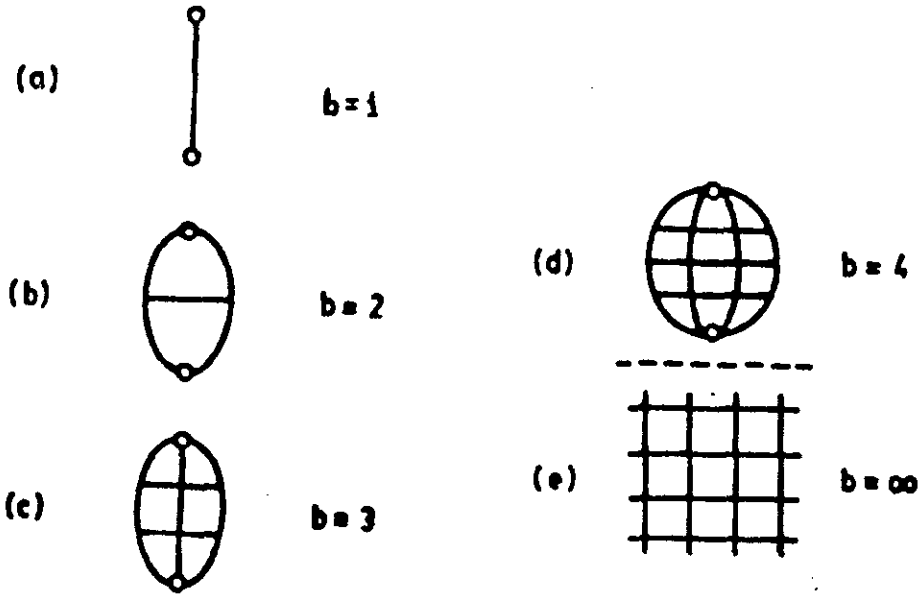


Figura 2.6: Diagramas de ordens superiores da ponte de Wheatstone.

### 2.3 Variáveis Transmissividades

As variáveis transmissividades têm como uma das vantagens possuir algoritmos semelhantes ao de combinações de probabilidades em ligações em série e em paralelo. No caso de probabilidades, os fluxos de informação de uma ligação em série e em paralelo terão, respectivamente, como ligação equivalente as representadas na figura 2.7.

Também nesse caso podemos definir uma transformação que dá um p-dual e que

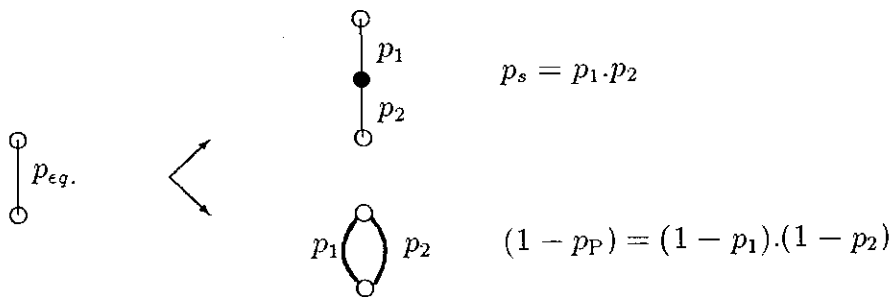


Figura 2.7: Probabilidade equivalente numa ligação em série e em paralelo.

transforma presença em ausência, fazendo o fluxo em série da mesma forma que o fluxo em paralelo; nesse caso,  $p^D = 1 - p$ .

Para modelos de spin temos as variáveis de interação  $\{J\}$  que representam todo o conjunto de acoplamento entre os spins de forma adimensional ( $J'/k_B T$ ), e que também podem ter correspondências do tipo  $J_S = f(\{J\})$  e  $J_P = g(\{J\})$ . As variáveis transmissividades, que dependem do modelo aplicado, serão obtidas fazendo a mudança de variável  $t = h(\{J\})$ , tal que,

$$t_S = t_1.t_2 \quad (2.20)$$

como já dissemos semelhante ao de combinações de probabilidades. Um exemplo dessa transmissividade é a do modelo de Ising[49]

$$t_K = \tanh\left(\frac{J_K}{k_B T}\right) \quad K = 1, 2, S \quad (2.21)$$

onde  $J_K$  é a variável de interação,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura. Ela é para  $J > 0$  um número entre 0 e 1, e como no exemplo acima podemos ver que quando  $T = \infty$  temos  $t_K = 0$ , ou seja, o spin não envia nenhum sinal ao outro, não podendo haver fenômenos cooperativos. Agora se  $T = 0$  temos  $t_K = 1$  e portanto pode haver fenômenos cooperativos.

No nosso exemplo a interação equivalente ( $J_{Eq}$ ) de uma ligação paralela é facilmente obtida da soma de cada interação ( $J$ ) inicial, que nos dá em forma de transmissividade

$$t_P = \frac{t_1 + t_2}{1 + t_1 t_2}. \quad (2.22)$$

Essa é uma transformação tipo soma de velocidades em relatividade especial, onde somando duas transmissividades iguais a 1 teremos a equivalente igual a 1. Essa relação não é de estranhar, pois como vimos as transmissividades estão compreendidas entre 0 e 1 para  $J > 0$ .

Para encontrarmos as variáveis transmissividades no caso do modelo cúbico discreto[52, 53] consideramos a eq. ( 2.20), a partir do esquema :

$$\begin{array}{c} \circ \\ | \\ (NJ, N^2L) \\ \bullet \\ | \\ (NJ, N^2L) \\ \circ \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \circ \\ | \\ (NJ', N^2L') \\ \circ \end{array}$$

Como temos 2 acoplamentos em cada ligação é natural que deveremos ter 2 variáveis transmissividades em cada ligação tal que,

$$t_r^{(S)} = t_r^{(1)} \cdot t_r^{(2)} \quad r = 1, 2 \quad (2.23)$$

onde os sub-índices representam as 2 variáveis transmissividades e os super-índices representam as ligações ; portanto esquematicamente,

$$\begin{array}{c} \circ \\ | \\ (t_1^{(2)}, t_2^{(2)}) \\ \bullet \\ | \\ (t_1^{(1)}, t_2^{(1)}) \\ \circ \end{array} \rightarrow \begin{array}{c} \circ \\ | \\ (t_1^{(S)}, t_2^{(S)}) \\ \circ \end{array}$$

Da equação ( 2.19), onde  $\mathcal{H}$  e  $\mathcal{H}'$  são os Hamiltonianos associados respectivamente aos diagramas (a) e (b) dos esquemas acima, encontramos que,

$$t_1 = \frac{1 - e^{-2NJ}}{1 + 2(N-1)e^{-N(J+NL)} + e^{-2NJ}} \quad (2.24)$$

$$t_2 = \frac{1 - 2(N-1)e^{-N(J+NL)} + e^{-2NJ}}{1 + 2(N-1)e^{-N(J+NL)} + e^{-2NJ}} \quad (2.25)$$

Com o mesmo proceso usado acima podemos achar para duas ligações em paralelo a transmissividade equivalente como,

$$t_r^{(P^{(D)})} = t_r^{(1)^{(D)}} \cdot t_r^{(2)^{(D)}} \quad r = 1, 2 \quad (2.26)$$

onde (D) significa dual[54] e

$$t_1^{(D)} = \frac{1 - Nt_1 + (N - 1)t_2}{1 + Nt_1 + (N - 1)t_2} \quad (2.27)$$

$$t_2^{(D)} = \frac{1 - t_2}{1 + Nt_1 + (N - 1)t_2}. \quad (2.28)$$

Para modelos de spins clássicos, os operadores do tipo Hamiltoniano têm seus comutadores iguais a zero. A transmissividade equivalente de um diagrama original para um diagrama renormalizado pode ser facilmente encontrada reduzindo-os a uma sequência de ligações série-paralelo. Contudo, existem diagramas que não são completamente redutíveis, por exemplo a rede da ponte de Wheatstone, nos quais usaremos o método do corte-colapso.

As relações de recorrência do GR neste formalismo consistem em encontrar a transmissividade equivalente do diagrama original para o diagrama renormalizado.

O uso das variáveis transmissividades é essencial no método do corte-colapso que como dissemos facilita bastante o procedimento de obter as relações de recorrência do GR. A seguir veremos em que se baseia o método do corte-colapso, em particular fazendo o cálculo da transmissividade equivalente na transformação do diagrama da figura 2.5 para o modelo cúbico discreto.

## 2.4 O Corte-colapso

O corte-colapso[26] simplifica consideravelmente o cálculo do traço sobre os graus de liberdade internos de um diagrama pois torna possível calcular a sua transmissividade equivalente, seja esse diagrama redutível ou não a sequências série-paralelo, através de um simples algoritmo e operações topológicas que mencionaremos a seguir.

Vamos considerar o diagrama ponte de Wheatstone com ligações associadas a transmissividades  $\{t_i\}$  e fazer a transformação representada na figura 2.5, com transmissivi-



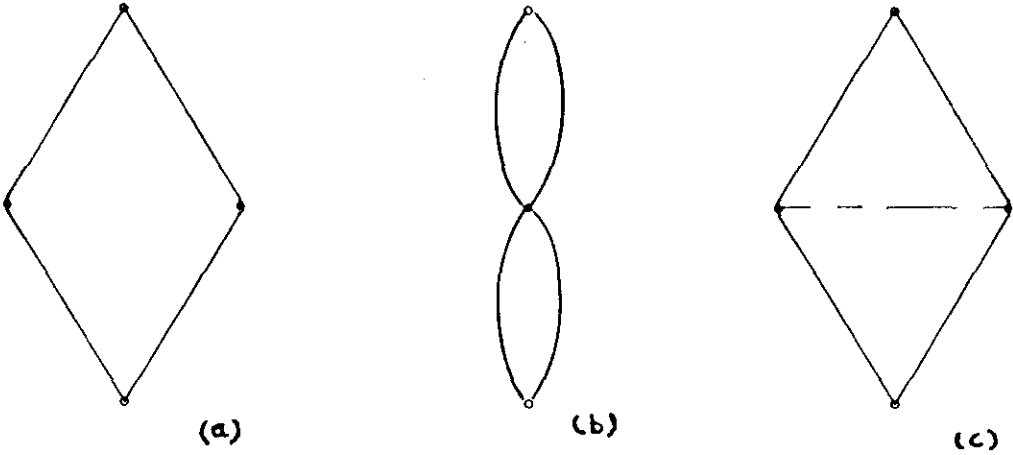


Figura 2.8: O corte-colapso na ponte de Wheatstone. (a) Corte. (b) Colapso. (c) Pré-colapso

dade equivalente  $G\{t_i\}$  onde  $G\{t_i\} = N\{t_i\}/D\{t_i\}$  e onde  $N\{t_i\}$  e  $D\{t_i\}$  são polinômios multilineares. Podemos escolher uma ligação  $j$  e fazer dois novos diagramas, tal que em um fazemos uma operação de corte em que tiramos a ligação  $j$  ( $t_j = 0$ ) e na outra operação de colapso onde contrainos os dois sítios da ligação no sítio simples ( $t_j = 1$ ). Na figura 2.8(a,b) temos representados os dois diagramas.

Ambos diagramas se reduziram a puras ligações em série-paralelo que são fáceis de obter e conhecendo  $N^{corte}\{t_i\}$ ,  $D^{corte}\{t_i\}$ ,  $N^{colapso}\{t_i\}$  e  $D^{colapso}\{t_i\}$ , podemos calcular  $N\{t_i\}$  e  $D\{t_i\}$ , como:

$$N\{t_i\} = (1 - t_j)N^{corte}\{t_i\} + t_jN^{colapso}\{t_i\} \quad (2.29)$$

$$D\{t_i\} = (1 - t_j)D^{corte}\{t_i\} + t_jD^{colapso}\{t_i\} \quad (2.30)$$

Para o caso do modelo cúbico discreto o método do corte-colapso será um pouco diferente do caso visto acima[46], pois temos associado a cada ligação duas variáveis transmissividades e portanto no processo de colapso teremos ( $t_1^{(j)} = t_2^{(j)} = 1$ ) e do corte ( $t_1^{(j)} = t_2^{(j)} = 0$ ) e ainda teremos uma outra possibilidade de operação que é o chamado pré-colapso em que ( $t_1^{(j)} = 0$  e  $t_2^{(j)} = 1$ ). Também teríamos o caso ( $t_1^{(j)} = 1$  e  $t_2^{(j)} = 0$ ), mas o descartamos por corresponder a exponenciais negativas( J e L não

têm significado físico). A variável transmissividade equivalente é  $t^{(e)} = (t_1^{(e)}, t_2^{(e)})$  e os polinômios multilineares serão da forma  $A + Bt_1^{(j)} + Ct_2^{(j)}$ , onde A, B e C dependem do conjunto  $\{t^{(i)}\}$  das outras ligações exetutando  $t^{(j)}$ .

Se associarmos a cada ligação três números

$$N_0^{(i)} = 1 \quad N_1^{(i)} = t_1^{(i)} \quad N_2^{(i)} = t_2^{(i)} \quad (2.31)$$

teremos o  $N_\alpha^{(eq)}$  para duas ligações em série dada pelo algoritmo,

$$N_\alpha^{(S)} = N_\alpha^{(1)} N_\alpha^{(2)} \quad (\alpha = 0, 1, 2) \quad (2.32)$$

e em paralelo,

$$\begin{aligned} N_0^{(P)} &= N_0^{(1)} N_0^{(2)} + N N_1^{(1)} N_1^{(2)} + (N - 1) N_2^{(1)} N_2^{(2)} \\ N_1^{(P)} &= N_0^{(1)} N_1^{(2)} + N_0^{(2)} N_1^{(1)} + (N - 1) [N_2^{(1)} N_1^{(2)} + N_1^{(1)} N_2^{(2)}] \\ N_2^{(P)} &= N_0^{(1)} N_2^{(2)} + N_0^{(2)} N_2^{(1)} + N N_1^{(1)} N_1^{(2)} + (N - 2) N_2^{(1)} N_2^{(2)}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Com relação as transmissividades teremos,

$$t^{(1)} = \left( \frac{N_1^{(1)}}{N_0^{(1)}}, \frac{N_2^{(1)}}{N_0^{(1)}} \right) \quad t^{(2)} = \left( \frac{N_1^{(2)}}{N_0^{(2)}}, \frac{N_2^{(2)}}{N_0^{(2)}} \right) \quad (2.34)$$

e assim,

$$t^{(S)} = (t_1^{(1)} t_1^{(2)}, t_2^{(1)} t_2^{(2)}) \quad e \quad t^{(P)} = (t_1^{(P)}, t_2^{(P)}) \quad (2.35)$$

onde

$$\begin{aligned} t_1^{(P)} &= \frac{t_1^{(1)} + t_1^{(2)} + (N - 1) t_2^{(1)} t_1^{(2)} + (N - 1) t_1^{(1)} t_2^{(2)}}{1 + N t_1^{(1)} t_1^{(2)} + (N - 1) t_2^{(1)} t_2^{(2)}} \\ t_2^{(P)} &= \frac{t_2^{(1)} + t_2^{(2)} + N t_1^{(1)} t_1^{(2)} + (N - 2) t_2^{(1)} t_2^{(2)}}{1 + N t_1^{(1)} t_1^{(2)} + (N - 1) t_2^{(1)} t_2^{(2)}}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Para a ponte de Wheatstone teremos como na eq. ( 2.29) um conjunto de polinômios, com a inclusão agora do termo de pré-colapso,

$$N_\alpha = (1 - t_2^{(j)}) N_\alpha^{corte} + t_1^{(j)} N_\alpha^{colapso} + (t_2^{(j)} - t_1^{(j)}) N_\alpha^{pre-colapso} \quad (2.37)$$

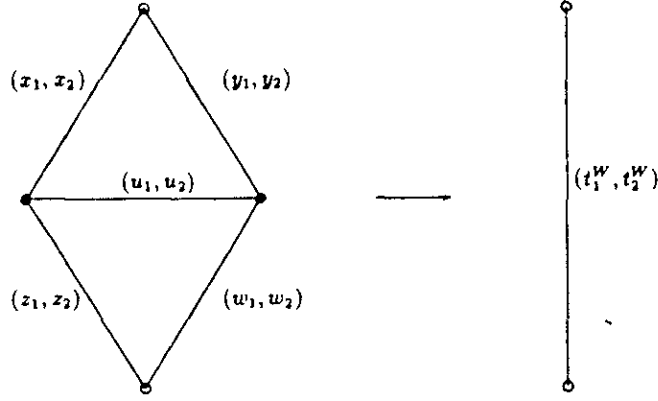


Figura 2.9: A Iteração associada com a ponte de Wheatstone

com  $\alpha = 0, 1, 2$ . Aplicando esse processo para a ponte de Wheatstone com as 5 ligações diferentes representadas na figura 2.9, nós obtemos, após chegarmos a apenas ligações pré-colapsadas resolvidas usando  $N_0 = N^k, N_1 = 0$  e  $N_2 = N^k$ , onde  $k$  é o número ciclomático do diagrama ( $k = \text{número de ligações} - \text{número de sítios} + 1$ ),

$$\begin{aligned}
 N_1^{(w)} &= y_1 w_1 + x_1 z_1 + u_1 y_1 z_1 + u_1 w_1 x_1 + (N-1)^2 (u_1 x_2 y_1 z_1 w_2 + u_1 x_1 y_2 z_2 w_1) \\
 &+ (N-1) (x_2 y_1 z_2 w_1 + x_1 z_1 y_2 w_2 + u_1 y_1 z_1 w_2 + u_1 x_1 z_2 w_1 \\
 &+ u_1 w_1 x_1 y_2 + u_1 z_1 x_2 y_1 + u_2 w_2 z_1 x_1 + u_2 x_1 y_2 z_1 + u_2 w_1 z_2 y_1 + u_2 w_1 x_2 y_1) \\
 &+ (N-1)(N-2) (u_2 w_2 x_1 y_2 z_1 + x_2 y_1 z_2 w_1 u_2) \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 N_2^{(w)} &= y_2 w_2 + x_2 z_2 + u_2 y_2 z_2 + u_2 w_2 x_2 + N(N-1) x_1 y_1 z_1 w_1 u_2 \\
 &+ (N-2)(N-3) x_2 y_2 z_2 w_2 u_2 + N(N-2) (x_1 y_1 z_2 w_2 u_1 + x_2 y_2 z_1 w_1 u_1) \\
 &+ (N-2) (x_2 y_2 z_2 w_2 + x_2 y_2 z_2 u_2 + y_2 z_2 w_2 u_2 + x_2 z_2 w_2 u_2 + x_2 y_2 w_2 u_2) \\
 &+ N (x_1 y_1 z_1 w_1 + y_2 z_1 w_1 u_1 + x_2 z_1 w_1 u_1 + x_1 y_1 w_2 u_1 + x_1 y_1 z_2 u_1) \quad (2.39)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D^{(w)} &= 1 + N (u_1 z_1 w_1 + u_1 y_1 x_1) + (N-1) (u_2 y_2 x_2 + u_2 w_2 z_2) + N x_1 z_1 w_1 y_1 \\
 &+ (N-1) x_2 y_2 z_2 w_2 + N(N-1) u_2 y_1 z_1 w_1 x_1
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&+(N-1)(N-2)x_2z_2w_2u_2y_2 \\
&+N(N-1)(u_1x_1y_1z_2w_2+u_1x_2y_2z_1w_1).
\end{aligned} \tag{2.40}$$

E as transmissividades equivalentes serão dadas substituindo a eq. ( 2.38) na eq. ( 2.34).

Usando o GR estas transmissividades serão as renormalizadas e sua relação com as transmissividades originais nos darão as equações recursivas para a renormalização .

Mais uma vez gostaríamos de observar que, no método do corte-colapso, como vimos acima, não pensamos em todas configurações e sim em operações topológicas que nos possibilitam resolver nosso problema considerando apenas algumas dessas configurações .

## Capítulo 3

# Mistura de Ligações

### 3.1 Introdução

Estudos teóricos de efeitos de impurezas em fenômenos críticos começaram a muitos anos. A percolação, o movimento de elétrons em sólidos desordenados, modelos de spins magnéticos distribuídos aleatoriamente em sítios ou com ligações aleatórias são exemplos de sistemas em desordem explorados teoricamente, de grande interesse e importância.

Sistemas magneticamente inhomogêneos, por exemplo, um cristal ferromagnético com uma fração de sítios ocupados por átomos que não produzem momento magnético (impureza), têm atraído atenção pelos efeitos produzidos pela fração de impurezas e sua dependência com a temperatura crítica  $T_c$  da fase ferromagnética.

Se a impureza for não magnética, como no caso acima, diremos que o sistema é um *magnéto diluído*, mas caso a impureza tenha característica magnética, embora diferente dos átomos do cristal, chamaremos o sistema de *magnéto misto*.

O problema da desordem foi dividido em dois tipos básicos por Brout[56] em 1959 que apontou a existência da desordem recozida( conhecida como “ annealed”) e temperada ( conhecida como “ quenched”). Na primeira a temperatura e demais parâmetros externos variam lentamente durante a preparação da amostra, de forma que sempre há equilíbrio termodinâmico. Na desordem do tipo temperada, a temperatura é aumentada e logo depois resfriada subitamente para que não haja tempo dos átomos portadores dos spins correlacionarem; assim a distribuição aleatória dos átomos fica congelada e suas posições são consideradas independentes.

A diferença teórica entre os tipos de desordem é que a energia livre da recozida é

$$F_{rec.} = -k_B T \ln \langle Z_S \rangle_C \quad (3.1)$$

e da temperada é

$$F_{tem.} = -k_B T \langle \ln Z_S \rangle_C \quad (3.2)$$

onde os sufixos S e C correspondem, respectivamente, às médias no spin e configuracional e  $Z_S$  à função de partição do sistema.

### 3.2 O Modelo de Mistura de Ligações

Iremos estudar a seguir o caso de ligações aleatórias para desordem do tipo temperada no modelo cúbico discreto. Podemos imaginar que cada ligação possa ter um acoplamento aleatório  $(NJ_1, N^2L_1)$  ou  $(NJ_2, N^2L_2)$ , onde o primeiro acoplamento terá uma probabilidade de acontecer de  $(1-p)$  e o segundo acoplamento de  $p$ , onde  $p$  é então a concentração de ligações  $(NJ_2, N^2L_2)$ . Podemos caracterizar cada ligação por uma

distribuição de probabilidades dada por:

$$P(J, L) = (1 - p)\delta(J - J_1)\delta(L - L_1) + p\delta(J - J_2)\delta(L - L_2). \quad (3.3)$$

Da mesma maneira podemos pensar utilizando as variáveis transmissividades  $(t_1, t_2)$ .

Neste caso temos para cada ligação uma distribuição de probabilidades do tipo,

$$P(t_1, t_2) = (1 - p)\delta(t_1 - t_1^{(1)})\delta(t_2 - t_2^{(1)}) + p\delta(t_1 - t_1^{(2)})\delta(t_2 - t_2^{(2)}). \quad (3.4)$$

Se  $p=1$ ,  $p=0$  ou,  $t_1^{(1)} = t_2^{(1)}$  e  $t_1^{(2)} = t_2^{(2)}$ , não teremos o caso aleatório e sim o puro. Para  $t_2^{(1)} = t_2^{(2)} = 0$  podemos dizer que estamos tratando de um modelo com diluição .

Impondo que o estado fundamental seja ferromagnético, temos,  $J_1 > 0$ ,  $J_2 > 0$ ,  $J_1 + NL_1 > 0$  e  $J_2 + NL_2 > 0$ . Essa imposição implica que não trataremos o caso antiferromagnético. A rede ponte de Wheatstone é uma rede frustrada, portanto não seria oportuno estudar o caso antiferromagnético nela. Para isso usaremos outro tipo de rede, contudo não neste capítulo. Voltaremos a abordar esse assunto no próximo capítulo.

### 3.3 O GR no Modelo Cúbico com Mistura de Ligações

Queremos agora usar o GR para a rede ponte de Wheatstone em que cada braço da ponte vai estar caracterizado por uma distribuição de probabilidades do tipo da equação (3.4). Ao fazer a renormalização estaremos buscando, em particular, a superfície crítica que estará num espaço penta-dimensional caracterizado pelas variáveis  $(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)})$  que são funções dos parâmetros do problema. Esse procedimento é idêntico ao que vimos no capítulo 2 para o caso do “bloco de spins” a uma dimensão. Para isso gostaríamos que o espaço de parâmetros não se amplie ao fazermos a renormalização . Mas, seguindo o método do corte-colapso e usando as equações (2.34) e

(2.38), o que encontramos são 14 possibilidades de novas transmissividades e nossa nova distribuição tem a forma,

$$P_H = \sum_{i=1}^{14} W_i (1-p)^{n_i} p^{(5-n_i)} \delta(t_1 - t_1^{(m_i)}) \delta(t_2 - t_2^{(m_i)}) \quad (3.5)$$

onde os valores das novas transmissividades  $(t_1^{(m_i)}, t_2^{(m_i)})$ , do grau do polinômio  $n_i$  e do peso  $W_i$  podem ser vistos no apêndice A.

Se entrarmos agora na renormalização com as 14 deltas sairíamos com cerca de 200 e assim sucessivamente haverá um grande acréscimo do número de deltas em cada processo de renormalização .

Para não haver ampliação no espaço de parâmetros teríamos que obter como resultado de cada renormalização sempre o mesmo tipo de distribuição , ou seja, se antes tínhamos a distribuição da equação (3.4) teríamos agora,

$$P'(t_1, t_2) = (1-p') \delta(t_1 - t_1^{(1)'}) \delta(t_2 - t_2^{(1)'}) + p' \delta(t_1 - t_1^{(2)'}) \delta(t_2 - t_2^{(2)'}) . \quad (3.6)$$

Portanto, teremos que fazer uma aproximação que de alguma forma faça que só precisemos trabalhar com equações tipo (3.4).

Para isso igualaremos as médias das 14 deltas às médias das 2 deltas, como também igualaremos a largura ao redor da média( momento de segunda ordem) e a dissimetria ao redor da largura( momento de terceira ordem). Como no nosso problema temos cinco variáveis temos a liberdade de escolher 5 equações que nos darão a transformação de renormalização . No nosso problema foram escolhidas as seguintes,

$$\langle t_1 \rangle_{P'} = \langle t_1 \rangle_{P_H} \quad (3.7)$$

$$\langle t_2 \rangle_{P'} = \langle t_2 \rangle_{P_H} \quad (3.8)$$

$$\langle t_1 t_2 \rangle_{P'} = \langle t_1 t_2 \rangle_{P_H} \quad (3.9)$$



$$\langle (t_1)^2 t_2 \rangle_{p'} = \langle (t_1)^2 t_2 \rangle_{P_H} \quad (3.10)$$

$$\langle t_1 (t_2)^2 \rangle_{p'} = \langle t_1 (t_2)^2 \rangle_{P_H} \quad (3.11)$$

onde as médias são feitas da seguinte maneira:

$$\langle (t_r)^n \rangle_{p'} = (1 - p')(t_r^{(1)})^n + p'(t_r^{(2)})^n \quad (3.12)$$

e

$$\langle (t_r)^n \rangle_{P_H} = \sum_{i=1}^{14} W_i (1 - p)^{n_i} p^{(5-n_i)} (t_r^{(m_i)})^n \quad (3.13)$$

onde  $r=1,2$ .  $W_i$ ,  $n_i$  e  $m_i$  são calculados no apêndice A.

Esse processo tem sido usado em diversos problemas[50,51] e nossa escolha foi feita de tal modo que o conjunto de equações já testadas nos modelos de Potts e Ising ( preservação dos três primeiros momentos) fossem reobtidos como casos particulares dentro do presente GR.

Com essa aproximação sempre obteremos a partir das cinco variáveis  $(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)})$ , cinco novas variáveis  $(p', t_1^{(1)'}, t_2^{(1)'}, t_1^{(2)'}, t_2^{(2)'})$  e assim sucessivamente, tal que em cada passo da renormalização teremos um ponto no espaço penta-dimensional dos parâmetros que viajará até parar em um ponto fixo estável.

Como na seção 2.1.2, escolhendo sucessivos valores para o ponto inicial, estes poderão viajar para outros pontos fixos estáveis e com esse procedimento poderemos encontrar a superfície crítica de separação das fases. Fases que se caracterizam por pontos no espaço de parâmetros que são atraídas por um único ponto fixo( atrator).

Os expoentes críticos são então obtidos através da linearização da superfície crítica ao redor dos pontos críticos que são pontos fixos que têm comprimento de correlação  $\xi \rightarrow \infty$ . Para isso, como

$$(p', t_1^{(1)'}, t_2^{(1)'}, t_1^{(2)'}, t_2^{(2)'}) = F(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}) \quad (3.14)$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
 p' &= p'(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}) \\
 t_1^{(1)'} &= t_1^{(1)'}(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}) \\
 t_2^{(1)'} &= t_2^{(1)'}(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}) \\
 t_1^{(2)'} &= t_1^{(2)'}(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}) \\
 t_2^{(2)'} &= t_2^{(2)'}(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)})
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

usando a série de Taylor ao redor do ponto fixo  $(p^*, t_1^{(1)*}, t_2^{(1)*}, t_1^{(2)*}, t_2^{(2)*})$  até termos de primeira ordem, temos:

$$\begin{pmatrix} t_1^{(1)'} - t_1^{(1)*} \\ t_1^{(2)'} - t_1^{(2)*} \\ t_1^{(2)'} - t_1^{(2)*} \\ t_1^{(2)'} - t_1^{(2)*} \\ p' - p^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial t_1^{(1)'} / \partial t_1^{(1)} & \partial t_1^{(1)'} / \partial t_1^{(2)} & \partial t_1^{(1)'} / \partial t_2^{(1)} & \partial t_1^{(1)'} / \partial t_2^{(2)} & \partial t_1^{(1)'} / \partial p \\ \partial t_1^{(2)'} / \partial t_1^{(1)} & \partial t_1^{(2)'} / \partial t_1^{(2)} & \partial t_1^{(2)'} / \partial t_2^{(1)} & \partial t_1^{(2)'} / \partial t_2^{(2)} & \partial t_1^{(2)'} / \partial p \\ \partial t_2^{(1)'} / \partial t_1^{(1)} & \partial t_2^{(1)'} / \partial t_1^{(2)} & \partial t_2^{(1)'} / \partial t_2^{(1)} & \partial t_2^{(1)'} / \partial t_2^{(2)} & \partial t_2^{(1)'} / \partial p \\ \partial t_2^{(2)'} / \partial t_1^{(1)} & \partial t_2^{(2)'} / \partial t_1^{(2)} & \partial t_2^{(2)'} / \partial t_2^{(1)} & \partial t_2^{(2)'} / \partial t_2^{(2)} & \partial t_2^{(2)'} / \partial p \\ \partial p' / \partial t_1^{(1)} & \partial p' / \partial t_1^{(2)} & \partial p' / \partial t_2^{(1)} & \partial p' / \partial t_2^{(2)} & \partial p' / \partial p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1^{(1)} - t_1^{(1)*} \\ t_1^{(2)} - t_1^{(2)*} \\ t_2^{(1)} - t_2^{(1)*} \\ t_2^{(2)} - t_2^{(2)*} \\ p - p^* \end{pmatrix}$$

Com a matriz do Jacobiano nos vários pontos fixos, calculamos seus autovalores( $\lambda$ ) e os expoentes críticos são dados por:

$$\nu_s = \frac{\ln B}{\ln \lambda_s} \quad s = 1, \dots, 5 \tag{3.16}$$

para os autovalores  $\lambda > 1$ , que são pontos fixos não estáveis com respeito às perturbações na direção dos autovetores correspondentes. B é a expansão linear da renormalização, vista na secção 2.2, que no nosso caso é igual a 2.

Se existir mais de um  $\nu$  associado a um ponto crítico definimos o expoente de “crossover”

$$\Phi_{ij} = \frac{\nu_j}{\nu_i}. \quad (3.17)$$

### 3.3.1 O Caso Puro ( $p=1$ )

Das equações (3.7-11) e (A.2), fazendo  $p=1$ , teremos,

$$t_1^{(2)} = \frac{N_1}{D} \quad (3.18)$$

$$t_2^{(2)} = \frac{N_2}{D} \quad (3.19)$$

onde,

$$\begin{aligned} N_1 &= 2t_1^2 + 2(N-1)t_1^2t_2^2 + 2t_1^3 + 2(N-1)^2t_1^3t_2^2 \\ &\quad + 4(N-1)(t_1^3t_2 + t_1^2t_2^2) + 2(N-1)(N-2)t_1^2t_2^3 \\ N_2 &= 2t_2^2 + Nt_1^4 + 4Nt_1^3t_2 + N(N-1)t_1^4t_2 + (N-2)t_2^4 \\ &\quad + 2N(N-2)t_1^3t_2^2 + (N-2)(N-3)t_2^5 + 4(N-2)t_2^4 \\ D &= 1 + Nt_1^4 + (N-1)t_2^4 + 2Nt_1^3 + 2N(N-1)t_1^3t_2^2 + N(N-1)t_1^4t_2 \\ &\quad + 2(N-1)t_2^3 + (N-1)(N-2)t_2^5. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Utilizando as equações (2.24-25) e (3.17-19) podemos escrever a transformação do GR, para um dado  $N$ , como função dos parâmetros  $J$  e  $L$  do Hamiltoniano do modelo cúbico discreto. Dessa forma,

$$J' = \frac{1}{2N} \ln(W_1/W_2) \quad (3.21)$$

$$L' = \frac{1}{2N^2} \ln(W_1W_2/(W_3)^2) \quad (3.22)$$

onde,

$$W_1 = \exp(5N^2L)[\exp(5NJ) + \exp(-3NJ) + 2\exp(-NJ)]$$

$$\begin{aligned}
& +2(N-1)\{2\exp(2N^2L)[\exp(2NJ) + \exp(-2NJ)] \\
& +\exp(N^2L)[\exp(NJ) + \exp(-NJ)] + 2N - 4\}, \tag{3.23}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_2 & = 2\exp(5N^2L)[\exp(NJ) + \exp(-NJ)] \\
& +2(N-1)\{4\exp(2N^2L) + \exp(N^2L)[\exp(NJ) + \exp(-NJ)] \\
& +2N - 4\}, \tag{3.24}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_3 & = 2\exp(3N^2L)[\exp(3NJ) + 3\exp(-NJ)] \\
& +2\exp(2N^2L)[\exp(2NJ) + \exp(-2NJ) + 2] \\
& +(N-2)\{10\exp(N^2L)[\exp(NJ) + \exp(-NJ)] + 4N - 12\}. \tag{3.25}
\end{aligned}$$

Essas equações foram obtidas anteriormente por Tsallis e outros[45].

Os diagramas de fases para valores típicos de  $N$  foram apresentados na figura 1.4. Na figura 3.1 apresentamos os diagramas de fases no espaço das variáveis transmissividades por serem mais fáceis de análise. Para um dado valor de  $N$ , foram encontradas três fases, que são:

paramagnética(P), caracterizada pelo ponto fixo estável  $t_1 = t_2 = 0$ ;

ferromagnética(F), caracterizada pelo ponto fixo estável  $t_1 = t_2 = 1$ ;

intermediária(I), caracterizada pelo ponto fixo estável  $t_1 = 0$  e  $t_2 = 1$ .

As fases são caracterizadas pelos seguintes parâmetros de ordem:

i) Fase paramagnética:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{S}_i \rangle & \equiv \langle (S_i^1, S_i^1, \dots, S_i^N) \rangle = 0 \\
\langle (S_i^\alpha)^2 \rangle & - 1/N = 0 \quad \forall \alpha \in \{1, 2, \dots, N\}
\end{aligned}$$

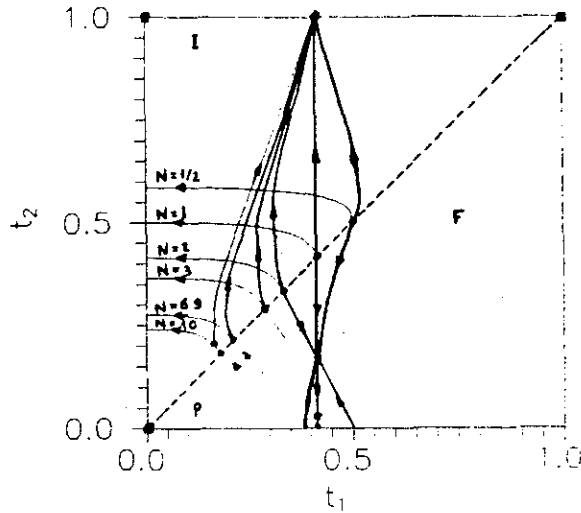


Figura 3.1: Diagrama de fases do modelo cúbico discreto para o caso puro ( $p=1$ ).

ii) Fase intermediária

$$\begin{aligned} \langle \vec{S}_i \rangle &= 0 \\ \langle (S_i^\alpha)^2 \rangle &> -1/N > 0 \quad \forall \alpha = \alpha_0 \in \{1, 2, \dots, N\} \\ &< 0 \quad \forall \alpha \neq \alpha_0 \end{aligned}$$

iii) Fase ferromagnética:

$$\begin{aligned} \langle \vec{S}_i \rangle &\neq 0 \\ \langle (S_i^\alpha)^2 \rangle &> -1/N > 0 \quad \forall \alpha = \alpha_0 \in \{1, 2, \dots, N\} \\ &< 0 \quad \forall \alpha \neq \alpha_0 \end{aligned}$$

Como já dissemos no capítulo 1, a fronteira crítica correspondente a um dado valor de  $N$  contém: um ponto multicrítico, que para  $N < N^* \approx 6.9$  corresponde ao modelo de Potts de  $2N$ -estados e para  $N > N^*$  corresponde ao novo ponto crítico cúbico; três pontos críticos, um tipo Ising, outro tipo Potts de  $N$ -estados e outro tipo Potts de  $2N$ -estados ( $N > N^*$ ) ou cúbico ( $N < N^*$ ).

Observemos que no caso  $N=1$  (modelo de Ising) encontramos três fases, mas sabemos que só existem apenas duas fases distintas [1], o que nos leva a concluir que a fronteira entre as fases (P)-(I) deve ser considerada espúria [45,46]. Da análise feita na secção 2.1.2 podemos conjecturar que essa fronteira espúria se deve ao fato de algum vínculo ter sido imposto sobre as variáveis  $J$  e  $L$  para o caso geral de  $N$ , que não é necessário para o caso  $N=1$ .

### 3.3.2 Subespaços Invariantes

Como nosso espaço de parâmetros, para um dado valor fixo de  $N$ , é penta-dimensional  $(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)})$ , é impossível uma única representação gráfica desse espaço. Consequentemente teremos que representar cortes do espaço completo.

Uma primeira busca foi encontrar subespaços que fossem invariantes, ou seja, partindo de pontos nesses subespaços, todo fluxo de pontos representando as transformações que renormalizam os parâmetros, estariam contidos sempre nesses subespaços.

Os primeiros subespaços encontrados foram os casos em que  $p = 1$  e  $p = 0$  (casos puros), que foram tratados na secção anterior. Na verdade foi analisado o caso  $p = 1$ , mas o caso  $p = 0$  é equivalente ao caso analisado se fizermos uma transformação do tipo  $(p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}) \rightarrow (1 - p, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}, t_1^{(1)}, t_2^{(1)})$ .

Além dos dois subespaços anteriores somente mais um subespaço foi achado, caracterizado por,

$$\begin{aligned} t_1^{(1)} &= t_2^{(1)} \\ t_1^{(2)} &= t_2^{(2)}. \end{aligned} \tag{3.26}$$

Das equações (2.22) e (2.23) encontramos que isso equivale a:

$$J_{(1)} = NL_{(1)} \quad (3.27)$$

$$J_{(2)} = NL_{(2)}$$

e da secção 1.4 podemos ver que esse é o caso limite em que o modelo cúbico discreto recai no modelo de Potts de  $2N$ -estados.

### 3.3.2.1 O Modelo de Potts de $2N$ -estados, um Subespaço Invariante

Introduzido como uma generalização do modelo de Ising, o modelo de Potts[24,40], pode ser considerado como um sistema de spins com  $q$  componentes. O seu Hamiltoniano para  $q=2N$  foi escrito na eq. (1.23). Aplicando a equação (3.23) nas equações de renormalização, encontramos:

$$\langle t_1 \rangle_{P'} = \langle t_1 \rangle_{P_H} \quad (3.28)$$

$$\langle (t_1)^2 \rangle_{P'} = \langle (t_1)^2 \rangle_{P_H} \quad (3.29)$$

$$\langle (t_1)^3 \rangle_{P'} = \langle (t_1)^3 \rangle_{P_H} . \quad (3.30)$$

Esse conjunto de equações já foi usado para o modelo de Ising[50] e para o próprio modelo de Potts[51] (com uma mudança na variável  $t$ ) com resultados bastante satisfatórios. Como consequência do uso das equações acima, o nosso caso  $N=1$  (modelo de Ising) reproduz a solução obtida na referência [50].

Apresentamos na figura 3.2 o diagrama de fases para  $N=2$ . Foram encontradas duas fases, paramagnética(P) e ferromagnética(F). A superfície crítica tem a forma de um hexágono torto. Os pontos marcados com a letra A na figura são completamente instáveis e representam os pontos de percolação. São eles:  $p = 1/2, t_1^{(1)} = 0, t_1^{(2)} = 1$  e  $p = 1/2, t_1^{(1)} = 1, t_1^{(2)} = 0$ . As linhas  $C'CC'$  e  $CBC$  correspondem ao ponto de Potts

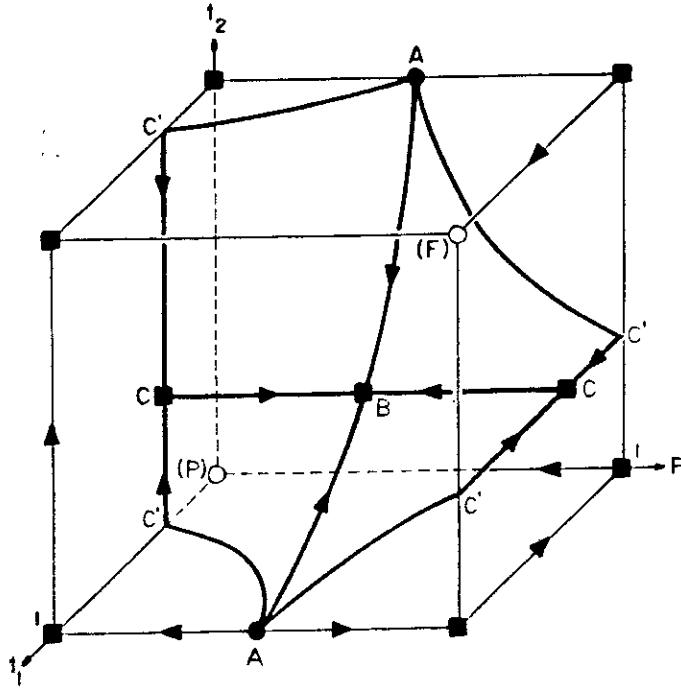


Figura 3.2: Diagrama de fases do modelo de Potts de 4-estados no subespaço  $(p, t_1, t_1, t_2, t_2)$ .

de  $2N$ -estados ( $t_1^{(1)} = t_1^{(2)} = \sqrt{2} - 1$ ). O ponto B é instável fora da superfície crítica e completamente estável dentro dela, mas torna-se semi-estável para  $N > N^*$  ( $N^* \approx 2.6$ ) e bifurca-se em 2 novos pontos fixos[51]. Na figura 3.3 apresentamos o diagrama de fases para  $N=3$  onde já podemos ver os pontos de bifurcação .

### 3.3.3 Outros Resultados

Após a exposição e análise da criticalidade nos subespaços invariantes iremos agora abordar o espaço completo de parâmetros. Para isso, como já dissemos, é impossível uma única representação já que o espaço é penta-dimensional.

A seguir apresentaremos cortes do diagrama de fases do espaço completo tal que seja possível caracterizar toda a criticalidade do modelo.

Nas figuras 3.4, 3.5 e 3.6 apresentamos cortes para  $N=2$  do diagrama de fases no



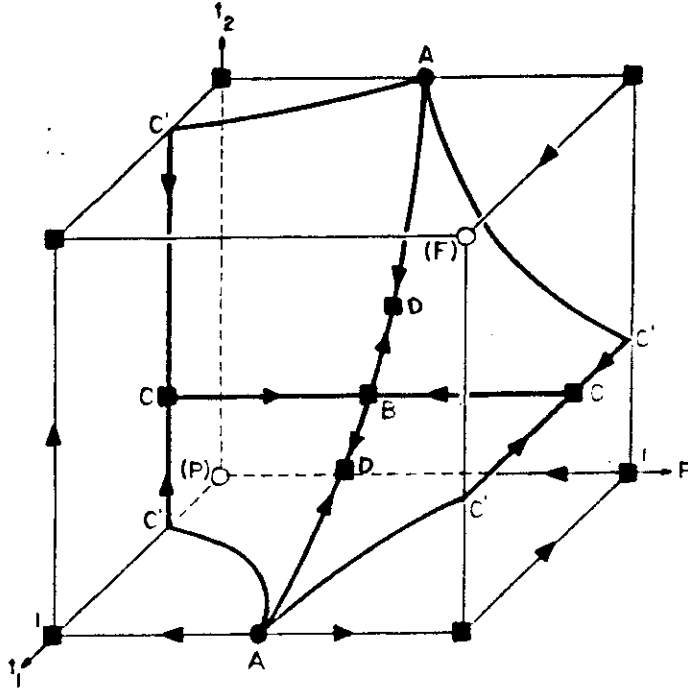


Figura 3.3: Diagrama de fases do modelo de Potts de 6-estados no subespaço  $(p, t_1, t_1, t_2, t_2)$ .

espaço  $(p, 1/J_2, L_2/J_2, J_1/J_2, L_1/J_1)$ .

Observamos que os diagramas têm um comportamento semelhante ao caso puro ( $p=1$ ), possuindo três fases. Contudo, quando o valor de  $p$  diminui a fase intermediária encolhe-se. O caso  $J_1/J_2 = 0$  (figura 3.6) corresponde ao modelo diluído e constatamos que para  $p < p_c = 0.5$  a fase ferromagnética desaparece. Este ponto corresponde á probabilidade crítica de percolação e como podemos ver é um resultado exato para a rede quadrada[57].

As figuras 3.7 e 3.8 representam cortes para  $N=1$ , correspondentes ao modelo de Ising. Novamente podemos ver a presença da fronteira espúria entre as fases (I) e (P). Essa fronteira desaparece no limite  $p \rightarrow 0$  para o nosso corte. Portanto também na mistura de ligações o vínculo imposto sobre as variáveis  $J$  e  $L$  para o caso de  $N$  geral continua não necessário e danificando o caso  $N=1$ .

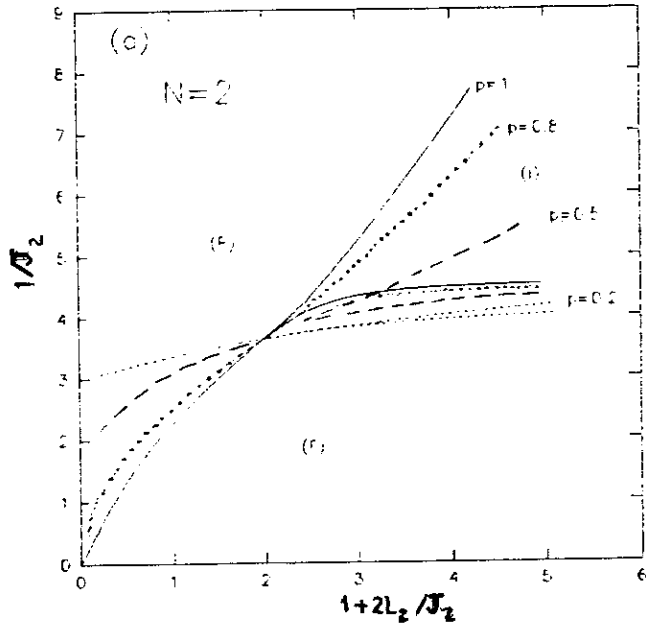


Figura 3.4:  $N=2, J_1 = 2L_1, J_1/J_2 = 1$

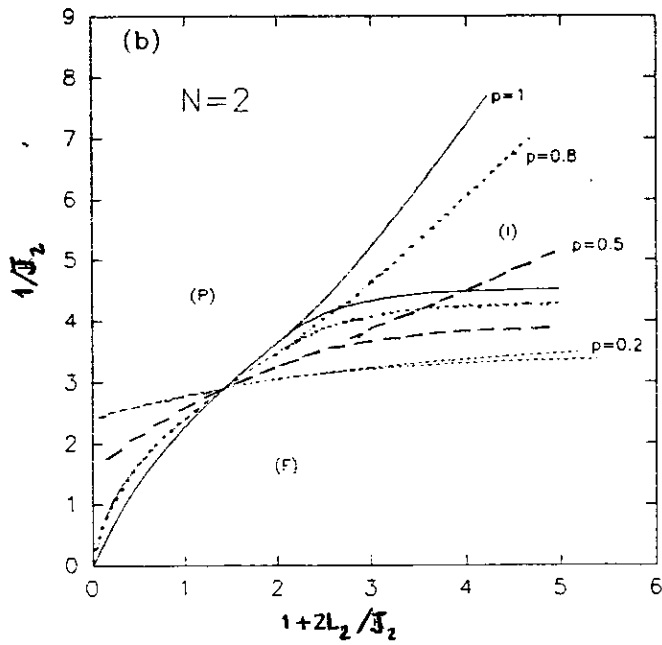


Figura 3.5:  $N=2, J_1 = 2L_1, J_1/J_2 = 0.8$

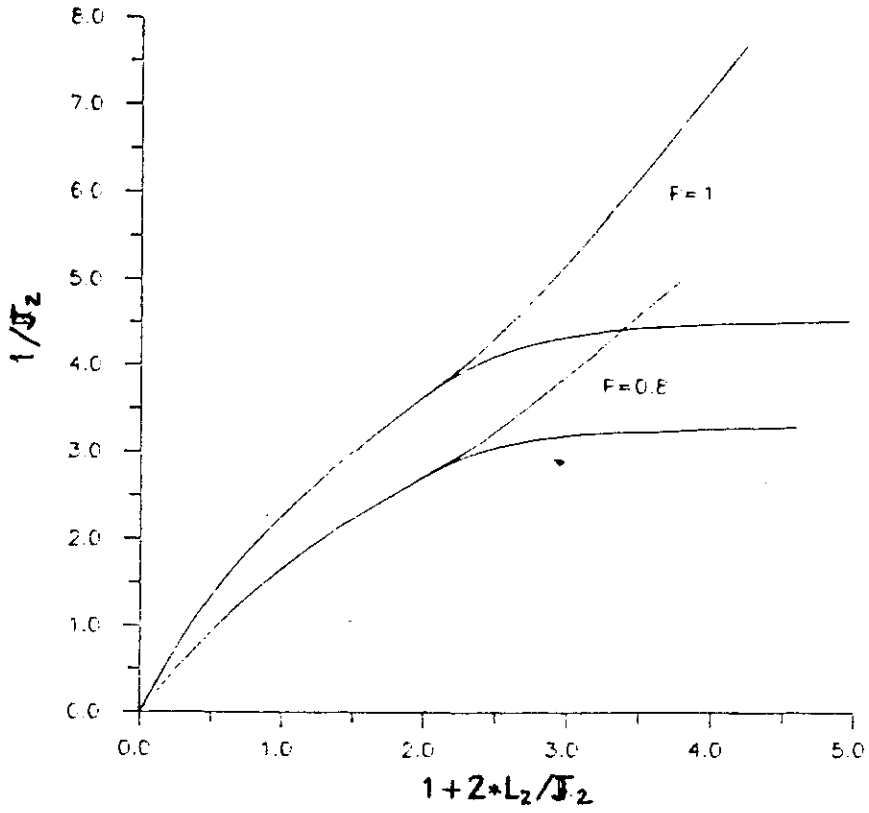


Figura 3.6:  $N=2, J_1 = L_1 = 0$

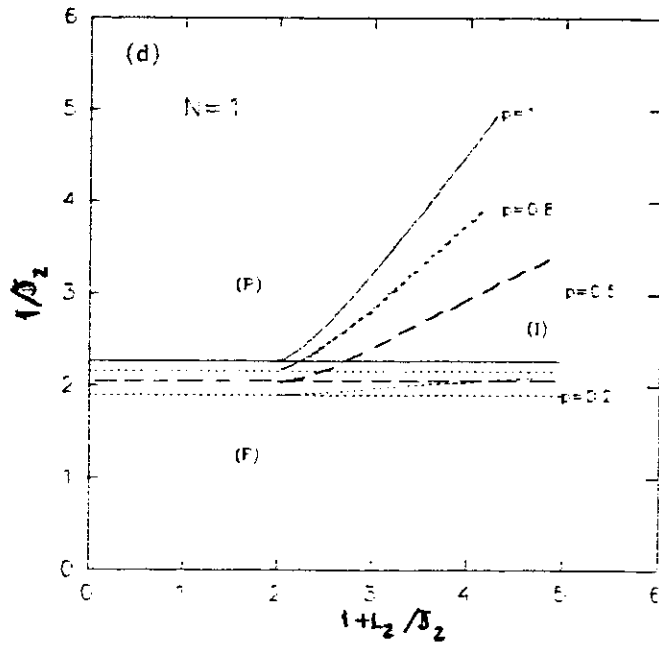


Figura 3.7:  $N=1, J_1 = L_1, J_1/J_2 = 0.8$

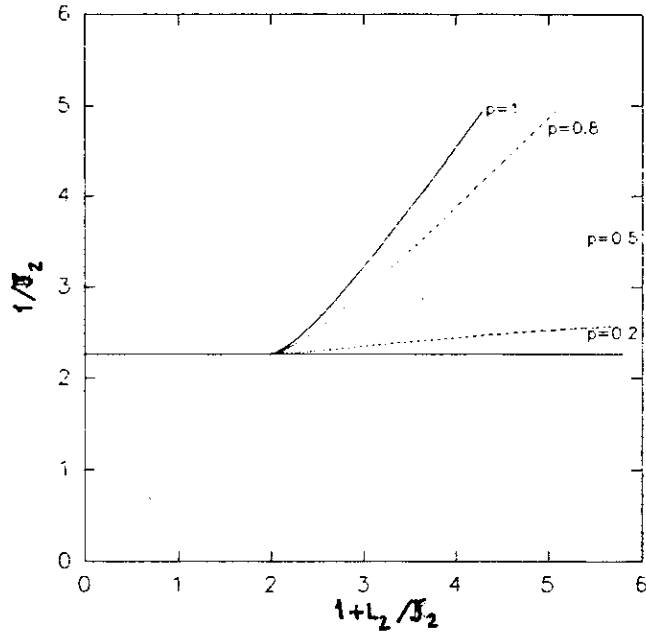


Figura 3.8:  $N=1, J_1 = L_1, J_1/J_2 = 1$

Na figura 3.9 vemos um corte para  $N=3$ . A estrutura é semelhante aos casos  $N=1$  e  $N=2$ .

Analisando todos valores de  $N$ , inclusive  $N > 3$  e  $N < 1$ , concluímos que o comportamento observado nas figuras anteriores também é característico de todos valores de  $N$ .

Na tabela a seguir mostraremos diversos pontos fixos encontrados observando que todos são exatos para a rede quadrada. Também mostramos os expoentes críticos de comprimento de correlação e os expoentes de “crossover” bem como uma comparação com resultados exatos para a rede quadrada já encontrados na literatura. Podemos observar que todos os nossos resultados têm boa concordância com a literatura. Ainda podemos ver na tabela algumas derivadas parciais entre os parâmetros da superfície e sua comparação com resultados exatos da literatura para a rede quadrada.

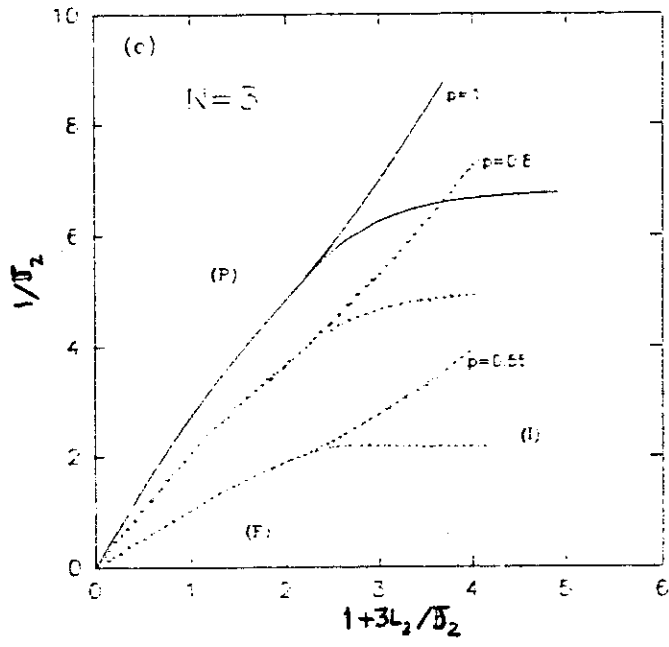


Figura 3.9:  $N=3, J_1 = L_1 = 0$

	pontos críticos ( $p, t_1^{(1)}, t_2^{(1)}, t_1^{(2)}, t_2^{(2)}$ )	expoente crítico		derivadas	
		presente GR	rede quadrada(exato)	presente GR	rede quadrada(exato)
N=1	(1,0.414,0.414,0.414,0.414)	$\nu_t = 1.15$	1 [59]	$-dt_1/dp=0.45$	$6\sqrt{2} - 8 \approx 0.48$ [58]
		$\Phi_{tp} = 1.56$	?		
	(1,0.414,0.414,0.414,1)	$\nu_t = 1.15$	1 [59]	$-dt_1/dp=0.45$	$6\sqrt{2} - 8 \approx 0.48$ [58]
	(1,0.414,0.414,0.414,0.036)	$\nu_t = 1.15$	1 [59]	$-dt_1/dp=0.45$	$6\sqrt{2} - 8 \approx 0.48$ [58]
N=2	(1,0.414,0.414,0.333,0.333)	$\nu_t = 0.95$	2/3 [60]	$-dt_1/dp=0.44$	$4/9 \approx 0.44$ [64]
		$\Phi_{tp} = 2.72$	?		
	(1,0.414,0.414,0.414,0.172)	$\nu_t = 1.15$	1 [59]	$-dt_1/dp=0.55$	1/2
				$-dt_1/dt_2=0.5$	1/2 [62]
N=3	(1,0.34,0.34,0.34,0.21)	$\nu_t = 0.92$	1° ordem ?		
$\forall N$	(0.5,0,0,1,1)	$\nu_t = 1.43$	4/3 [61]	$-dt_1/dp=3.04$	$4 \ln 2 \approx 2.77$ [63]
		$\nu_p = 1.43$	4/3 [61]		
		$\Phi_{tp} = 1$	1 [61]		

Tabela 3.1: Valores via GR para alguns pontos fixos (resultados exatos), expoentes de comprimento de correlação e “crossover” e derivadas.

## Capítulo 4

# O Modelo de Heisenberg

### 4.1 Introdução

O modelo de Heisenberg foi proposto simultaneamente por Dirac[22] e Heisenberg[21]. O modelo estava fundamentado na mecânica quântica e tinha sua origem no princípio de exclusão de Pauli, associado ao fenômeno de interação de troca( mais conhecido como “ exchange”) que reduz a energia de repulsão Coulombiana entre spins paralelos.

A energia de interação de troca é definida como a diferença entre a energia da configuração de spins paralelos e a energia da configuração de spins antiparalelos,

podendo ser apresentada como autovalores do operador de troca de spin[66]:

$$V_{troca} = -\frac{J}{2}(1 + 4\hat{S}_1\hat{S}_2) \quad (4.1)$$

onde  $\hat{S}_1$  e  $\hat{S}_2$  são operadores de spin e  $J$  o parâmetro que mede a intensidade da interação de troca.

Partindo de interações do tipo da eq. (4.1), Dirac, Heisenberg e principalmente logo depois Van Vleck[67] construíram uma teoria para o magnetismo.

O Hamiltoniano da teoria, conhecido como Hamiltoniano de Heisenberg, é dado por,

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (4.2)$$

onde os sufixos  $i$  e  $j$  referem-se aos sítios de um cristal considerado,  $\langle ij \rangle$  denota os pares de primeiros vizinhos,  $J$  é a energia de troca e  $\vec{S}_i$  é o operador de spin do sítio  $i$  tendo componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  que satisfazem as relações de comutação :

$$[S^y, S^z] = iS^x \quad [S^z, S^x] = iS^y \quad [S^x, S^y] = iS^z. \quad (4.3)$$

Se o operador  $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  é trocado por  $S_i^z S_j^z$  no Hamiltoniano, temos o correspondente modelo de Ising. O máximo autovalor  $S$  de  $S_i^z$  para um dado sítio  $i$  nos dá o tamanho de spin do modelo. Por exemplo, para spins eletrônicos  $S = 1/2$ .

Quando  $J > 0$  o mínimo de energia do Hamiltoniano, ou seja, seu estado fundamental é facilmente obtido como sendo,

$$E_0 = -2JlS^2 \quad (4.4)$$

onde  $l$  é o número de primeiros vizinhos. Nesse caso o autovetor associado a essa energia é formado por todos os spins paralelos. Chamamos esse caso de ferromagnético. A temperatura na qual abaixo dela há ordenamento ferromagnético chamamos de *temperatura de Curie*.



O caso antiferromagnético (AFM) é definido para  $J < 0$  e é bem conhecido para o modelo de Ising, onde para redes que podem ser divididas em subredes interpenetrantes equivalentes ( por exemplo, uma rede bipartida pode ser dividida em duas subredes equivalentes) temos no estado fundamental cada subrede com spins paralelos e entre as subredes os spins antiparalelos. Para esse caso, a temperatura de Curie( i.e.,  $J > 0$ ) tem o mesmo valor da temperatura do ordenamento AFM, chamada de *temperatura de Néel*.

Isso não é verdade para o correspondente modelo de Heisenberg, pois o estado de Néel (spins das subredes antiparalelos) não é autovetor do Hamiltoniano, essencialmente por que  $S_{z_1} + S_{z_2}$  comuta com  $H$  e  $S_{z_1} - S_{z_2}$  não.

A energia do estado fundamental para o modelo de Heisenberg de spin  $\frac{1}{2}$  AFM foi calculada exatamente para cadeias unidimensionais usando o “ansatz” de Bethe[68,69]. Para spins  $S \geq 1$  não existe solução , como também não existe solução para a energia do estado fundamental ou função de onda para dimensões diferentes de 1. Contudo, existem provas rigorosas sobre a natureza do estado fundamental[70,71].

Estudos sobre o modelo de Heisenberg são um desafio para pesquisadores há mais de 60 anos, e seu interesse aumentou recentemente quando em 1987 Anderson[29] sugeriu que um estado com forte correlação AFM, mas sem ordem de Néel, é relevante nos materiais supercondutores a altas temperaturas[73].

Esses materiais têm planos de óxidos de cobre, como por exemplo o  $La_2CuO_4$ , e são AFM nesses planos com spin local  $S = 1/2$ . Acredita-se que o comportamento AFM dos materiais de alta- $T_c$  podem ser modelados pelo modelo de Heisenberg AFM bidimensional com  $S = 1/2$ . Experimentos de espalhamento de neutrons e espalhamento Raman indicam que o parâmetro de troca( $J$ ) para primeiros vizinhos no plano do óxido de cobre é da ordem de 1000 K, enquanto que entre planos o parâmetro de troca é cinco

ordens de magnitude menor.

A partir dessas motivações encontramos interesse pelo modelo de Heisenberg em duas dimensões e dentro do formalismo do GR apresentado nos capítulos anteriores iremos abordar daqui em diante o modelo de Heisenberg com spin 1/2 numa rede hierárquica autodual que mostra-se uma boa aproximação da rede quadrada.

## 4.2 O Hamiltoniano Anisotrópico

Consideramos um Hamiltoniano da forma,

$$H = -4 \sum_{\langle ij \rangle} [J_{xy}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J S_i^z S_j^z] \quad (4.5)$$

onde não necessariamente  $J_{xy}$  é igual a  $J$ . Com isso nós obtemos um modelo mais geral com acoplamento anisotrópico entre as três componentes do operador de spin. Denomina-se esse modelo de Heisenberg anisotrópico ou também chamado de modelo XXZ. Quando  $J_{xy} = J$  o Hamiltoniano (4.5) reduz-se ao modelo de Heisenberg isotrópico dado pela equação (4.2).

Chamando  $J_{xy} = J(1 - \Delta)$ , teremos,

$$H = -4J \sum_{\langle ij \rangle} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z]. \quad (4.6)$$

Os casos particulares  $\Delta = 1, \Delta = 0$  e  $\Delta = -\infty$  correspondem respectivamente aos modelos de Ising, Heisenberg isotrópico e XY. O parâmetro  $\Delta$  mede a anisotropia do modelo.

Provas rigorosas sobre a existência de transições de fases no modelo de Heisenberg anisotrópico foram sumarizadas por Kubo e Kishi[74] para as redes quadrada e cúbica. Na rede quadrada existe ordenamento AFM no estado fundamental para todo  $S \geq 1$  e

arbitrário valor de  $J/J_{xy}$  e para  $S = 1/2$  quando  $0 \leq J/J_{xy} < 0.13$  e  $J/J_{xy} > 1.78$ [74]. Contudo não há prova rigorosa sobre a existência ou não-existência de ordem AFM de longo alcance no estado fundamental para o modelo de Heisenberg isotrópico AFM com  $S = 1/2$  na rede quadrada. Sabe-se porém que esse modelo não pode exibir ordem para qualquer spin a temperatura finita[75].

### 4.3 A Rede Hierárquica e o GR

Nos capítulos anteriores quando escolhemos uma rede hierárquica que pudesse ser uma boa aproximação da rede quadrada escolhemos a simetria de autodualidade para ser conservada. A rede escolhida foi a ponte de Wheatstone.

Novamente desejamos escolher uma rede hierárquica que seja uma boa aproximação da rede quadrada. Contudo, como já frisamos, a rede da ponte de Wheatstone é uma rede frustrada não sendo conveniente para o estudo do caso AFM. Como agora queremos tratar também do caso AFM devemos escolher uma rede não-frustrada mas que seja autodual. Essa rede, que pode ser vista na figura 4.1, já foi usada para outros modelos ( modelo cúbico discreto[46], modelo de Potts[76]) e mostrou-se ser uma boa escolha.

É importante notar que a escolha da rede deve, se possível, ser feita também tal que o Hamiltoniano possa ser renormalizado nele mesmo, não havendo proliferação de parâmetros.

Para obter as equações de transformação do GR entre os conjuntos de parâmetros iniciais e o conjunto de parâmetros renormalizados impomos a condição de preservar a função de correlação entre as raízes da rede original e renormalizada, seguindo a escolha já feita no capítulo 2. Da equação (2.19),

$$e^{-\beta H'_{12} + C} = \text{Tr}_{\text{sítios internos}} e^{-\beta H_{123456}} \quad (4.7)$$

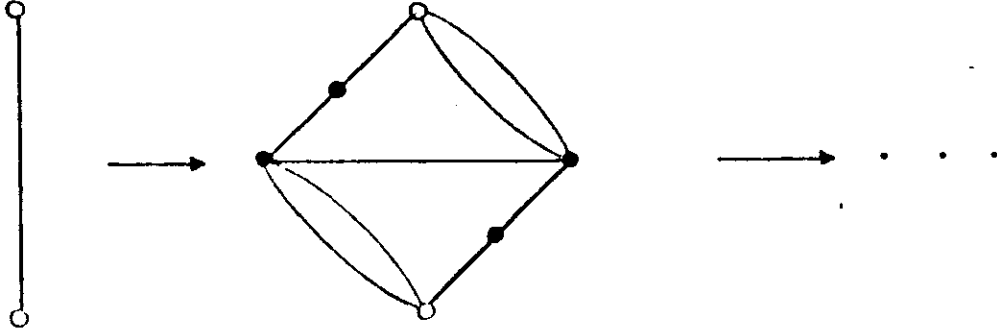


Figura 4.1: A rede hierárquica autodual

onde  $\beta = 1/k_B T$ , T sendo a temperatura;

$$H_{123456} = 4J \sum_{\langle ij \rangle} [(1 - \Delta)(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + S_i^z S_j^z] \quad (4.8)$$

é o Hamiltoniano do diagrama gerador da rede em consideração ( figura 4.1b);

$$H'_{12} = 4J' [(1 - \Delta')(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + S_1^z S_2^z] \quad (4.9)$$

denota o Hamiltoniano do diagrama renormalizado tipo ligação simples( figura 4.1a) e C é uma constante aditiva incluída para ser possível a equação (4.7). A equação (4.7) estabelece a relação entre os parâmetros  $(J/k_B T, \Delta)$  e os parâmetros renormalizados  $(J'/k_B T, \Delta', C)$ .

O Hamiltoniano  $H_{123456}$  não é o Hamiltoniano total da rede hierárquica estudada já que o diagrama estudado é somente o primeiro passo da construção da rede. A rede hierárquica contém um número infinito de diagramas tal qual os da figura 4.1b.

Consequentemente, o Hamiltoniano total pode ser expresso como

$$H_{total} = \sum_i (H_{123456})_i. \quad (4.10)$$

Negligenciando a não-comutatividade entre os Hamiltonianos associados com diagramas vizinhos, temos

$$\exp(\beta H_{total}) \approx \prod_i \exp[\beta (H_{123456})_i] \quad (4.11)$$

sendo assintoticamente exata para altas temperaturas, ou seja, no limite clássico e portanto uma aproximação para todas as temperaturas.

Seguindo o tratamento de Caride, Tsallis e Zanette[30] nós expandimos  $\exp(\mathcal{H}'_{12})$ , onde  $\mathcal{H}'_{12} = \beta H'_{12}$ , como:

$$\exp(\mathcal{H}'_{12}) = a' + 4b'_{12}(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + 4c'_{12} S_1^z S_2^z. \quad (4.12)$$

Essa equação pode ser expressa em forma matricial em termos da base que diagonaliza simultaneamente  $S_1^z$  e  $S_2^z$ , representada por:  $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle$  e  $|--\rangle$ . Nessa base temos,

$$\exp(\mathcal{H}'_{12}) = \begin{pmatrix} a' + c'_{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a' - c'_{12} & 2b'_{12} & 0 \\ 0 & 2b'_{12} & a' + c'_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a' + c'_{12} \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Agora, expressando  $\mathcal{H}'_{12}$  dado pela equação (4.9) nessa mesma base, temos:

$$\mathcal{H}'_{12} = \begin{pmatrix} K' + C & 0 & 0 & 0 \\ 0 & K' - C & 2W' & 0 \\ 0 & 2W' & K' - C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K' + C \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

onde

$$W' \equiv K'(1 - \Delta') \quad e \quad K' \equiv \frac{J'}{k_B T}. \quad (4.15)$$

Os correspondentes autovalores são:

$$\begin{aligned} E_1 &= K' + C \\ E_2 &= -K' + C + 2W' \\ E_3 &= -K' + C - 2W' \\ E_4 &= E_1. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Os correspondentes autovetores, alinhados nas colunas da matriz unitária  $U_{12}$ , nos dão:

$$U_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Se chamarmos de  $\mathcal{H}'_{12}{}^D$  a forma diagonal de  $\mathcal{H}'_{12}$ , então da seguinte relação ,

$$\exp(\mathcal{H}'_{12}) = U_{12}[\exp(\mathcal{H}'_{12}{}^D)]U_{12}^{-1} \quad (4.18)$$

podemos obter,

$$\exp(\mathcal{H}'_{12}) = \begin{pmatrix} e^{E_1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(e^{E_2} + e^{E_3}) & \frac{1}{2}(e^{E_2} - e^{E_3}) & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(e^{E_2} - e^{E_3}) & \frac{1}{2}(e^{E_2} + e^{E_3}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{E_1} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Assim, dessa equação e da (4.13), segue que:

$$\begin{aligned} \exp(4K') &= \frac{(a' + c'_{12})^2}{(a' - c'_{12})^2 - 4(b'_{12})^2} \\ \exp(4K' \Delta') &= \frac{a' - c'_{12} + 2b'_{12}}{a' - c'_{12} - 2b'_{12}} \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\exp(C) = \frac{a' + c'_{12}}{\exp(K')}.$$

Analogamente fazemos para  $\exp(\mathcal{H}_{123456})$ , com  $\mathcal{H}_{123456} = \beta H_{123456}$ ,

$$\begin{aligned} \exp(\mathcal{H}_{123456}) &= a + 4 \sum_{(i<j)} [b_{ij}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + c_{ij} S_i^z S_j^z] \\ &+ 16 \sum_{(i<j) \neq (k<l)} [d_{ij,kl}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) S_k^z S_l^z \\ &+ e_{ij,kl} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)(S_k^x S_l^x + S_k^y S_l^y) + f_{ij,kl} S_i^z S_j^z S_k^z S_l^z] \\ &+ 64 \sum_{(i<j) \neq (k<l) \neq (m<n)} [g_{ij,kl,mn}(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) S_k^z S_l^z S_m^z S_n^z \\ &+ q_{ij,kl,mn} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y)(S_k^x S_l^x + S_k^y S_l^y)(S_m^x S_n^x + S_m^y S_n^y)] \\ &+ 64r S_1^z S_2^z S_3^z S_4^z S_5^z S_6^z \end{aligned} \quad (4.21)$$

onde  $a, b_{ij}, c_{ij}, d_{ij,kl}, \dots$  são funções de  $K \equiv J/k_B T$  e  $\Delta$ , determinadas diagonalizando  $\mathcal{H}_{123456}$ . Para diagonalizar  $\mathcal{H}_{123456}$  nós deveremos diagonalizar uma matriz 64x64. Como podemos ver a componente z do momento angular total,

$$S_{total}^z = \sum_i S_i^z \quad (4.22)$$

comuta com o Hamiltoniano,

$$[\mathcal{H}_{123456}, S_{total}^z] = 0. \quad (4.23)$$

Usando como vetores base os autovetores de  $S^z$  ( correspondendo a autovalores M) a matriz associada com  $\mathcal{H}_{123456}$  pode ser apresentada em estrutura de bloco-diagonal onde o maior bloco é uma matriz 20x20 ( M=0).

Essas diagonalizações foram feitas numericamente.

Das equações (4.7),(4.12) e (4.21), segue que

$$\begin{aligned} a' &= 16a \\ b'_{12} &= 16b_{12} \\ c'_{12} &= 16c_{12} \end{aligned} \quad (4.24)$$

que determina o conjunto de parâmetros  $(K', \Delta')$  como função de  $(K, \Delta)$ .

O fluxo dos pontos  $(K, \Delta)$  no espaço de parâmetros determina o diagrama de fases.

#### 4.4 Resultados

Na figura 4.2 nós apresentamos o diagrama de fases no espaço  $(k_B T/J, \Delta)$  para  $k_B T/J > 0$ , isto é, o caso ferromagnético. Nós verificamos a existência de duas fases, nominalmente, paramagnética(P) e ferromagnética(F) caracterizadas, respectivamente, pelos pontos fixos completamente estáveis  $(k_B T/J, \Delta)$ :

$(\infty, 1)$  -(P) e  $(0, 1)$  -(F).

Esse caso foi tratado por [30,31] na rede da ponte de Wheatstone e nossos resultados concordam bastante com aqueles.

No caso antiferromagnético  $(k_B T/J < 0)$ , apresentado na figura 4.3, nós verificamos a existência de duas fases, nominalmente, paramagnética(P) e antiferromagnética(AF) caracterizadas, respectivamente, pelos pontos fixos completamente estáveis:

$(-\infty, 1)$  -(P) e  $(0, 1)$  -(AF).

Para baixas temperaturas a precisão dos resultados torna-se difícil por erros numéricos, mas da figura 4.3 nossos resultados sugerem a existência de fase ordenada a baixas temperaturas para  $\Delta > \Delta_c \approx 0.399$ , que concorda qualitativamente com a referência [74]. Eles provaram a existência de ordem a longa distância no estado fundamental para  $\Delta > 0.438$  ( a equivalência do parâmetro de anisotropia de [74] $(\Delta^{(2)})$  com  $\Delta$  é dada por  $\Delta = 1 - \frac{1}{\Delta^{(2)}}$ ). Ainda analisando [74], a região  $0 < \Delta < 0.438$  permaneceu não resolvida; contudo, no nosso estudo encontramos a existência de fase ordenada somente para  $\Delta > \Delta_c$ , na região estudada  $\Delta \geq 0$ .

Também encontramos um efeito pouco comum na literatura que chamamos de efeito



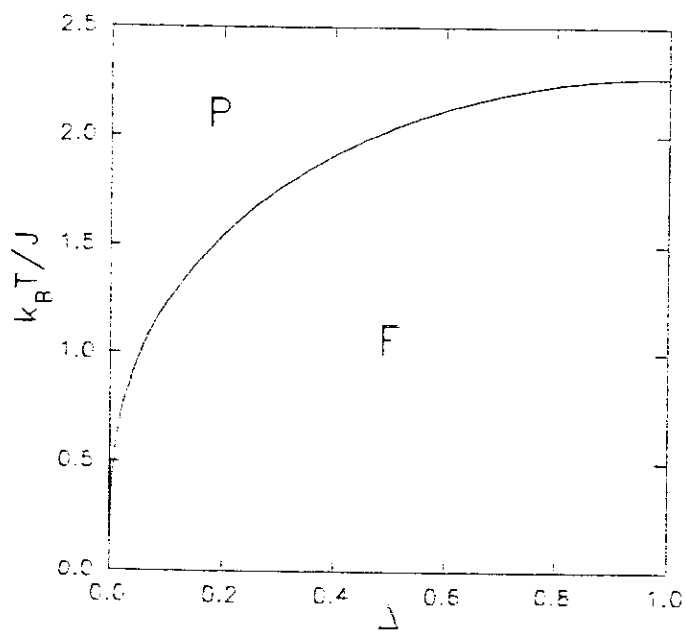


Figura 4.2: Diagrama de fases do modelo de Heisenberg anisotrópico para o caso ferromagnético

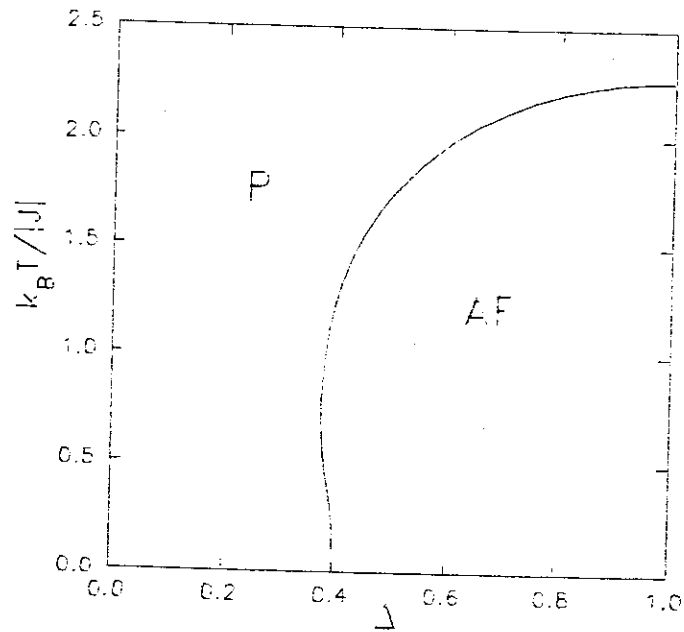


Figura 4.3: Diagrama de fases do modelo de Heisenberg anisotrópico para o caso antiferromagnético

de reentrância que é a presença de fase ordenada a altas temperaturas para certos valores do parâmetro de anisotropia não acompanhada de ordem a baixas temperaturas. O efeito de reentrância foi encontrado no intervalo de  $0.375 < \Delta \leq 0.399$ . Esses resultados podem enriquecer as discussões sobre a existência de transições de fases sem ordem de longo alcance.

Os eixos  $\Delta = 0$  e  $\Delta = 1$ , correspondem aos modelos Heisenberg isotrópico e Ising, respectivamente. Eles são renormalizados neles mesmos, e contêm pontos fixos críticos semi-estáveis em  $(\pm 2.269, 1)$  e  $(0, 0)$ . O sinal  $+(-)$  corresponde aos casos que  $J$  é positivo (negativo), isto é, para o caso ferromagnético (antiferromagnético).

Todos os resultados acima, para pontos críticos, são respostas exatas para a rede quadrada.

Os expoentes críticos calculados nos pontos críticos acima a partir da equação (3.16) são:

$\nu = \infty$  para o ponto  $(0, 0)$  (modelo de Heisenberg anisotrópico).

$\nu = 0.864$  para o ponto  $(\pm 2.269, 1)$  (modelo de Ising).

Comparando com os expoentes da rede quadrada temos uma resposta exata para o modelo de Heisenberg anisotrópico e uma boa aproximação para o modelo de Ising (erro de 15 %).

A criticalidade do caso ferromagnético é do tipo modelo de Ising para  $0 < \Delta \leq 1$ . O mesmo não é verdade para o caso antiferromagnético que para pequenas anisotropias ( $\Delta \leq \Delta_c$ ) tem seu ordenamento destruído por flutuações quânticas da parte  $XY$  do Hamiltoniano.

## Capítulo 5

### Conclusões

Estudamos dentro do método do GR no espaço real a criticalidade do modelo cúbico discreto com mistura de ligações e do modelo de Heisenberg anisotrópico em redes hierárquicas autoduais que garantem uma boa aproximação para a rede quadrada.

No modelo cúbico discreto utilizamos a rede da ponte de Wheatstone e nossos parâmetros foram restritos ao caso ferromagnético. Reobtivemos o diagrama de fases para alguns casos limites, como para o caso puro e para o modelo de Ising no subespaço de parâmetros correspondente ao modelo de Potts de 2-estados. Para o caso geral constatamos que a criticalidade pode ser entendida como uma competição entre as criticalidades dos modelos de Ising, Potts de  $N$ -estados, Potts de  $2N$ -estados,

cúbico e percolação .

O caso da fronteira espúria encontrada no limite  $N=1$ ( Ising) foi analisado para uma dimensão( $d=1$ ) utilizando o GR no método da matriz transferência e já neste caso obtivemos uma diferença de comportamentos dos diagramas de fases entre aplicar o método diretamente ao modelo de Ising ou aplicar o método ao modelo cúbico discreto e depois fazer o limite de  $N \rightarrow 1$ .

No nosso tratamento, todos os 5 parâmetros permaneceram livres para renormalização , levando a resultados cuja precisão é maior que os obtidos em modelos diluídos.

No modelo de Heisenberg anisotrópico usamos outro tipo de rede autodual, pois queríamos tratar do caso antiferromagnético e, por ser frustrada, a rede da ponte de Wheatstone não poderia ser usada. Mostramos que, como previsto, a criticalidade do caso ferromagnético é tipo Ising para toda a região estudada( $0 < \Delta \leq 1$ ) e do caso antiferromagnético é tipo Ising para  $\Delta_c < \Delta \leq 1$  e para pequenas anisotropias ( $\Delta \leq \Delta_c$ ) a ordem é destruída por flutuações quânticas da parte XY do Hamiltoniano. Observamos o efeito de reentrância, pouco comum na literatura, que é a presença de uma fase ordenada a altas temperaturas não acompanhada a baixas temperaturas.

Em todos os casos estudados, e sempre que possível, comparamos nossos resultados com os da literatura para a rede quadrada e obtivemos uma boa concordância entre eles, ressaltando que o presente tratamento mostrou-se muito eficiente e com fácil tratamento matemático.

Como comentário final, possíveis extensões do nosso trabalho seriam:

No modelo cúbico discreto com mistura de ligações :

- i) Fazer o caso antiferromagnético.

ii) Ao invés de aproximar a distribuição de probabilidades dos parâmetros na rede da ponte de Wheatstone de forma binária, pode-se verificar se a forma da distribuição irá tender a alguma forma constante após várias iterações .

No modelo de Heisenberg:

i) Utilizar a renormalização entre a segunda iteração da formação da rede e a ligação simples e observar alguma mudança no diagrama por não desprezar algumas comutações .

ii) Estender esse processo para spins  $S > \frac{1}{2}$  e estudar o comportamento entre spin inteiro e semi-inteiro, verificando a conjectura de Haldane[77] que obtem uma diferença qualitativa entre estes sistemas.

## Apêndice A

Se caracterizarmos cada ligação da ponte de Wheatstone( figura 2.9) por uma distribuição de probabilidades

$$P(t_1, t_2) = (1 - p)\delta(t_1 - t_1^{(1)})\delta(t_2 - t_2^{(1)}) + p\delta(t_1 - t_1^{(2)})\delta(t_2 - t_2^{(2)}) \quad (\text{A.1})$$

obteremos  $2^5 = 32$  configurações possíveis que nos dá:

$$\begin{aligned} P_H(t_1, t_2) = & (1 - p)^5\delta(t_1 - t_{1(0)})\delta(t_2 - t_{2(0)}) + p(1 - p)^4[4\delta(t_1 - t_{1(1)})\delta(t_2 - t_{2(1)}) \\ & + \delta(t_1 - t_{1(2)})\delta(t_2 - t_{2(2)})] + p^2(1 - p)^3[4\delta(t_1 - t_{1(3)})\delta(t_2 - t_{2(3)}) \\ & + 2\delta(t_1 - t_{1(4)})\delta(t_2 - t_{2(4)}) + 2\delta(t_1 - t_{1(5)})\delta(t_2 - t_{2(5)}) \\ & + 2\delta(t_1 - t_{1(6)})\delta(t_2 - t_{2(6)})] \\ & + p^3(1 - p)^2[4\delta(t_1 - t_{1(7)})\delta(t_2 - t_{2(7)}) + 2\delta(t_1 - t_{1(8)})\delta(t_2 - t_{2(8)}) \\ & + 2\delta(t_1 - t_{1(9)})\delta(t_2 - t_{2(9)}) + 2\delta(t_1 - t_{1(10)})\delta(t_2 - t_{2(10)})] \\ & + p^4(1 - p)[4\delta(t_1 - t_{1(11)})\delta(t_2 - t_{2(11)}) + \delta(t_1 - t_{1(12)})\delta(t_2 - t_{2(12)})] \\ & + p^5\delta(t_1 - t_{1(13)})\delta(t_2 - t_{2(13)}) \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

onde as transmissividades  $(t_{1(i)}, t_{2(i)})$  da  $(i)$ -ésima configuração são obtidas substituindo nas equações (2.34) e (2.37) as seguintes configurações ( ver figura 2.9):

configuração (0)	configuração (1)	configuração (2)
$x_1 = t_1^{(1)}, x_2 = t_2^{(1)}$	$x_1 = t_1^{(2)}, x_2 = t_2^{(2)}$	$x_1 = t_1^{(1)}, x_2 = t_2^{(1)}$
$y_1 = t_1^{(1)}, y_2 = t_2^{(1)}$	$y_1 = t_1^{(1)}, y_2 = t_2^{(1)}$	$y_1 = t_1^{(1)}, y_2 = t_2^{(1)}$
$z_1 = t_1^{(1)}, z_2 = t_2^{(1)}$	$z_1 = t_1^{(1)}, z_2 = t_2^{(1)}$	$z_1 = t_1^{(1)}, z_2 = t_2^{(1)}$
$w_1 = t_1^{(1)}, w_2 = t_2^{(1)}$	$w_1 = t_1^{(1)}, w_2 = t_2^{(1)}$	$w_1 = t_1^{(1)}, w_2 = t_2^{(1)}$
$u_1 = t_1^{(1)}, u_2 = t_2^{(1)}$	$u_1 = t_1^{(1)}, u_2 = t_2^{(1)}$	$u_1 = t_1^{(2)}, u_2 = t_2^{(2)}$
configuração (3)	configuração (4)	configuração (5)
$x_1 = t_1^{(2)}, x_2 = t_2^{(2)}$	$x_1 = t_1^{(2)}, x_2 = t_2^{(2)}$	$x_1 = t_1^{(2)}, x_2 = t_2^{(2)}$
$y_1 = t_1^{(1)}, y_2 = t_2^{(1)}$	$y_1 = t_1^{(2)}, y_2 = t_2^{(2)}$	$y_1 = t_1^{(1)}, y_2 = t_2^{(1)}$
$z_1 = t_1^{(1)}, z_2 = t_2^{(1)}$	$z_1 = t_1^{(1)}, z_2 = t_2^{(1)}$	$z_1 = t_1^{(2)}, z_2 = t_2^{(2)}$
$w_1 = t_1^{(1)}, w_2 = t_2^{(1)}$	$w_1 = t_1^{(1)}, w_2 = t_2^{(1)}$	$w_1 = t_1^{(1)}, w_2 = t_2^{(1)}$
$u_1 = t_1^{(2)}, u_2 = t_2^{(2)}$	$u_1 = t_1^{(1)}, u_2 = t_2^{(1)}$	$u_1 = t_1^{(1)}, u_2 = t_2^{(1)}$
configuração (6)	configuração (7)	configuração (8)
$x_1 = t_1^{(2)}, x_2 = t_2^{(2)}$	$x_1 = t_1^{(1)}, x_2 = t_2^{(1)}$	$x_1 = t_1^{(1)}, x_2 = t_2^{(1)}$
$y_1 = t_1^{(1)}, y_2 = t_2^{(1)}$	$y_1 = t_1^{(2)}, y_2 = t_2^{(2)}$	$y_1 = t_1^{(1)}, y_2 = t_2^{(1)}$
$z_1 = t_1^{(1)}, z_2 = t_2^{(1)}$	$z_1 = t_1^{(2)}, z_2 = t_2^{(2)}$	$z_1 = t_1^{(2)}, z_2 = t_2^{(2)}$
$w_1 = t_1^{(2)}, w_2 = t_2^{(2)}$	$w_1 = t_1^{(2)}, w_2 = t_2^{(2)}$	$w_1 = t_1^{(2)}, w_2 = t_2^{(2)}$
$u_1 = t_1^{(1)}, u_2 = t_2^{(1)}$	$u_1 = t_1^{(1)}, u_2 = t_2^{(1)}$	$u_1 = t_1^{(2)}, u_2 = t_2^{(2)}$



configuração (9)	configuração (10)	configuração (11)
$x_1 = t_1^{(1)}, x_2 = t_2^{(1)}$	$x_1 = t_1^{(1)}, x_2 = t_2^{(1)}$	$x_1 = t_1^{(1)}, x_2 = t_2^{(1)}$
$y_1 = t_1^{(2)}, y_2 = t_2^{(2)}$	$y_1 = t_1^{(2)}, y_2 = t_2^{(2)}$	$y_1 = t_1^{(2)}, y_2 = t_2^{(2)}$
$z_1 = t_1^{(1)}, z_2 = t_2^{(1)}$	$z_1 = t_1^{(2)}, z_2 = t_2^{(2)}$	$z_1 = t_1^{(2)}, z_2 = t_2^{(2)}$
$w_1 = t_1^{(2)}, w_2 = t_2^{(2)}$	$w_1 = t_1^{(1)}, w_2 = t_2^{(1)}$	$w_1 = t_1^{(2)}, w_2 = t_2^{(2)}$
$u_1 = t_1^{(2)}, u_2 = t_2^{(2)}$	$u_1 = t_1^{(2)}, u_2 = t_2^{(2)}$	$u_1 = t_1^{(2)}, u_2 = t_2^{(2)}$

configuração (12)	configuração (13)
$x_1 = t_1^{(2)}, x_2 = t_2^{(2)}$	$x_1 = t_1^{(2)}, x_2 = t_2^{(2)}$
$y_1 = t_1^{(2)}, y_2 = t_2^{(2)}$	$y_1 = t_1^{(2)}, y_2 = t_2^{(2)}$
$z_1 = t_1^{(2)}, z_2 = t_2^{(2)}$	$z_1 = t_1^{(2)}, z_2 = t_2^{(2)}$
$w_1 = t_1^{(2)}, w_2 = t_2^{(2)}$	$w_1 = t_1^{(2)}, w_2 = t_2^{(2)}$
$u_1 = t_1^{(1)}, u_2 = t_2^{(1)}$	$u_1 = t_1^{(2)}, u_2 = t_2^{(2)}$

## Bibliografia

- [1] L.Onsager, Phys.Rev. 65(1944)117
- [2] E.Ising, Z.Phys. 31(1925)253
- [3] L.D.Landau and E.M.Lifshitz, "Statistical Physics", Addison-Wesley, Reading Mass., 1969
- [4] H.E.Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Clarendon Press,1971.
- [5] K.G.Wilson, Phys. Rev. B 4(1971)3174,3184
- [6] M. Gell-Mann and F.E.Low, Phys.Rev 95(1954)1300
- [7] L.P.Kadanoff, Physics(N.Y.) 2(1966)263
- [8] T.Niemeijer and J.M.J.Van Leeuwen, in Phase Transition and Critical Phenomena", Ed. C.Domb and J.L.Lebowitz Academic Press, New York,1987.

- [9] R.B.Griffiths and M.Kaufman, Phys.Rev.B 24(1981)496
- [10] A.N.Berker and S.Ostlund, J.Phys C 12(1979)4961
- [11] P.M.Bleher and E.Zalys, Commun.Math.Phys. 67(1979)17
- [12] B.B.Mandelbrot, "Fractals: Form, Chance and Dimension", San Francisco: Freeman, 1977.
- [13] M.Matssushita, M.Sano, Y.Hayakawa, H.Honjo and Y.Sawada, Phys.Rev.Lett. 53(1984)286
- [14] J.Feder, T.Jossang and E.Rosenqvist, Phys.Rev.Lett. 53(1984)1403
- [15] K.J.Maloy, J.Feder and T.Jossang, Phys.Rev.Lett. 55(1985)369
- [16] J.Feder, "Fractals", Plenum Pub.Co., New York, 1988.
- [17] A.Coniglio, L.de Arcangelis, H.J.Herrmann and N.Jan, Europhys. Lett. 8(1989)315
- [18] A.M.Mariz, J.Phys. A:Math. Gen. 23(1990)979
- [19] A.M.C.de Souza, A.M.Mariz and C.Tsallis, em redação .
- [20] C.Tsallis, F.Tamarit and A.M.C.de Souza, submetido ao Phys.Rev.Lett. (1992)
- [21] W.Heisenberg, Z.Physik 49(1928)619
- [22] P.A.M.Dirac, Proc.Roy.Soc.(London) A123(1929)714
- [23] D.Kim, P.M.Levy and L.F.Uffer, Phys.Rev. B, 12(1975)989
- [24] R.B.Potts, Camb.Philos.Soc. 48(1952)106
- [25] J.Ashkin and E.Teller, Phys. Rev. 64(1943)178

- [26] C.Tsallis and S.V.F.Levy,Phys.Rev.Lett. 47(1981)950
- [27] J.M.Maillard,F.Y.Wu and Chin-Kun Hu,J.Phys. A:Math.Gen. 25(1992)2521
- [28] A.M.C.de Souza,A.M.Mariz and C.Tsallis, submetido ao Phys.Rev.B(1992)
- [29] P.W.Anderson, Science 235(1987)1196
- [30] A.O.Caride,C.Tsallis and S.I.Zanette, Phys.Rev.Lett. 51(1983)145
- [31] A.M.Mariz,C.Tsallis and A.O.Caride, J.Phys.C 18(1985)4189
- [32] A.M.C. de Souza, submetido ao Phys.Rev. B (1992)
- [33] A.Aharony,J.Phys. A:Math. Gen. 10(1977)389
- [34] G.T.Trammell, Phys. Rev. 131(1963)932
- [35] H.E.Stanley, Phys.Rev.Lett. 20(1968)589
- [36] E.Domany and E.K.Riedel, Phys.Rev.B 19(1979)5817
- [37] E.Domany and E.K.Riedel,Phys.Rev.Lett. 40(1978)561
- [38] M.J.Tejuwani,O.Ferreira and O.E.Vilches, Phys. Rev. Lett. 44(1980)152
- [39] J.Hubbard, Phys.Lett. 39A(1972)365
- [40] F.Y.Wu, Rev.Mod.Phys. 54(1982)235
- [41] P.G. de Gennes, Phys. Lett. A 38(1972)339; H.Hilhorst, Phys.Rev B 16(1977)1253
- [42] B.Nienhuis,E.K.Riedel and M.Schick,Phys.Rev. B,27(1983)5625
- [43] G. von Gehlen and V.Rittenberg, J.Phys.A:Math. Gen. 19(1986)2439

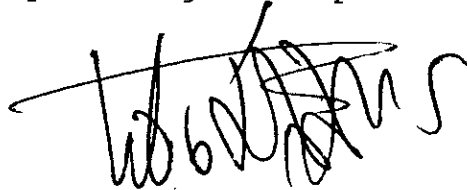
- [44] R.Badke Phys.Lett. 119A(1987)365
- [45] C.Tsallis,A.M.Mariz,A.Stella,L.R.da Silva, J.Phys. A:Math. Gen. 23(1990)329
- [46] E.P.da Silva,A.M.Mariz and C.Tsallis,J.Phys.A 24(1991)2835
- [47] J.R.Melrose, J.Phys. A:Math. Gen. 16(1983)1041,3077,L407
- [48] J.M.Yeomans and R.B.Stinchcombe, J.Phys. C 12(1979)347
- [49] J.M.Yeomans and R.B.Stinchcombe, J.Phys. C 12(1979)L169
- [50] S.V.F.Levy,C.Tsallis and E.M.F.Curado, Phys.Rev. B 21(1980)2991
- [51] U.M.S.Costa and C.Tsallis,Physica 128A(1984)207
- [52] A.C.N.Magalhães and J.W.Essam,J.Stat.Phys. 58(1990)1059
- [53] F.C.Alcaraz and C.Tsallis,J.Phys. A:Math.Gen. 15(1982)587
- [54] A.C.N.Magalhães,J.W.Essam and F.Y.Wu,J.Phys A:Math.Gen. 23(1990)2651
- [55] E.P.da Silva and C.Tsallis, preprint(1992)
- [56] R.Brout, Phys. Rev. 115(1959)824
- [57] V.K.S.Shante and S.Kirkpatrick, Adv.Phys. 20(1971)325
- [58] A.B.Harris, J.Phys. C 7(1974)1671
- [59] T.T.Wu,Phys.Rev. 149(1966)380
- [60] M.P.M.Den Nijs,Physica A 95(1979)449
- [61] D.J.Wallace and A.P.Young,Phys.Rev. B,17(1978)2384

- [62] F.Y.Wu and K.Y.Lin, *J.Phys. C* 7(1974)L181
- [63] E.Domany, *J.Phys. C* 11(1978)L337
- [64] B.W.Southern and M.F.Thorpe, *J.Phys. C* 12(1979)5351
- [65] R.Balian and G.Toulouse, *Ann.Phys. NY* 83(1974)28
- [66] L.D.Landau e E.M.Lifshitz, *Física Teórica-vol. 3.1*, editora Mir,1985.
- [67] J.H.Van Vleck, "Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities". Clarendon Press, Oxford. 1932.
- [68] H.Bethe, *Z.Phys.* 71(1931)205
- [69] R.Orbach, *Phys.Rev.* 112(1958)309
- [70] F.J.Dyson, E.H.Lieb and B.Simon, *J.Stat.Phys.* 18(1978)335
- [71] D.W.Robinson, *Commun. Math. Phys.* 14(1969)195; J.Ginibre, *Commun. Math. Phys.* 14(1969)205
- [72] S.A.Cannas and C.Tsallis, *Phys.Rev B* 46(1992)6261
- [73] E.Manousakis, *Rev.Mod.Phys* 63(1991)1
- [74] K.Kubo and T.Kishi, *Phys.Rev.Lett.* 61(1988)2585
- [75] M.D.Mermin and H.Wagner, *Phys.Rev.Lett.* 17(1966)1133
- [76] P.M.C.de Oliveira and C.Tsallis, *J.Phys.A* 15(1982)2865
- [77] F.D.M.Haldane, *Phys.Rev.Lett.* 50(1983)1153

"CRITICALIDADE DE MODELOS MAGNÉTICOS DISCRETOS EM  
REDES HIERÁRQUICAS"

ANDRÉ MAURÍCIO CONCEIÇÃO DE SOUZA

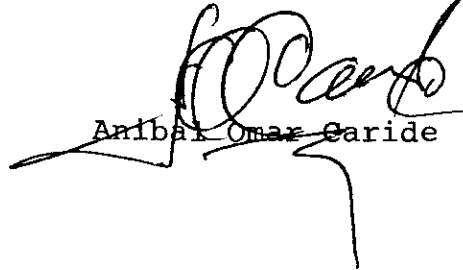
Tese de Mestrado apresentada ao Cen-  
tro Brasileiro de Pesquisas Físicas  
do Conselho Nacional de Desenvolvi-  
mento Científico e Tecnológico, pe-  
rante Banca Examinadora constituída  
pelos seguintes professores:



Constantino Tsallis - Presidente



Raimundo Rocha dos Santos



Anibal Omar Caride

Rio de Janeiro, 08 de janeiro de 1993