

1993/11

R317

TESE DE MESTRADO



ANTIFERROMAGNETO DE POTTS
EM UMA REDE FRACTAL :
ESTUDO DE UMA FASE NÃO USUAL

JOSÉ ARNALDO REDINZ

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO

BRASIL

530.474

À minha família

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores Aglaé Cristina Navarro de Magalhães e Evaldo Mendonça Fleury Curado pela colaboração, atenção, amizade e apoio.

Ao Constantino Tsallis pelo apoio, atenção e amizade.

Aos professores da UFES Manoelito, Bosco e Narciso pela amizade, apoio e incentivo.

A Andre Sznajder, Andre Mauricio, Fernando Vieira, Edson Passamani, Mateo Jacome, Victor Peña, Nilson, Celina Costa, Ladario da Silva, Celia Anteneodo, Francisco Tamarit, Daniel Stariolo, Ricardo Costa e Cesar pela amizade e apoio.

Aos funcionários do CBPF. Em especial à Myriam, Vanda e Almério pela constante colaboração e apoio.

Ao CBPF pela oportunidade concedida e ao CNPq pela ajuda financeira.

RESUMO

Estudamos o antiferromagneto de Potts com três estados em uma rede hierárquica bipartida do tipo Migdal-Kadanoff. Esse sistema possui entropia residual (entropia à temperatura nula) por partícula não nula e apresenta, conforme foi sugerido por Berker e Kadanoff, uma fase não usual a baixas temperaturas, onde as correlações entre spins decaem algebricamente com a distância. Demonstramos exatamente o decaimento algébrico das correlações entre os spins das raízes da rede e calculamos o expoente crítico η associado a esse decaimento ao longo de toda a fase não usual.

Fazendo uso de equações de recorrência exatas que fornecem as magnetizações locais dos spins gerados em uma determinada hierarquia em função das magnetizações locais dos spins gerados nas hierarquias anteriores, demonstramos que a distribuição de magnetizações ao longo de um caminho mais curto entre as raízes da rede apresenta um caráter multifractal. Essa multifractalidade apresenta uma dependência com a temperatura, refletida nos dois espectros $f(\alpha)$ diferentes que caracterizam as multifractalidades do sistema ao longo da fase não usual e na temperatura crítica.

Calculamos exatamente as seguintes grandezas termodinâmicas do sistema em função da temperatura: o parâmetro de ordem, a energia interna, o calor específico e a entropia. Obtivemos também alguns expoentes críticos, em particular, verificamos a validade da relação de hiper-escala para esse sistema. Assumindo como também válidas outras relações de escala (de Rushbrooke e de Fisher), calculamos o expoente crítico η associado ao decaimento algébrico das correlações no ponto crítico. Esse expoente crítico resulta diferente daquele associado ao decaimento algébrico ao longo da fase não usual, evidenciando uma descontinuidade do expoente η na temperatura crítica.

ABSTRACT

We study the three-state Potts antiferromagnet on a bipartite Migdal-Kadanoff-type hierarchical lattice. This system has non-null residual entropy (entropy at zero temperature) per particle and presents, as was suggested by Berker and Kadanoff, an unusual low-temperature phase, where the correlations between spins decay algebraically with distance. We prove the algebraic decay of correlations between the spins at the roots of the lattice and calculate the critical exponent η associated with this decay along the whole unusual phase.

Using exact recurrent equations which provide the local magnetizations of spins generated at a given hierarchy as function of the local magnetizations of spins generated at previous hierarchies, we demonstrate that the magnetization distribution along a shortest path between the roots of the lattice presents a multifractal character. This multifractality presents a dependence with the temperature, reflected in the two different spectra $f(\alpha)$ which characterize the multifractalities along the unusual phase and at the critical temperature.

We calculate exactly the following thermodynamical quantities as functions of temperature : the order parameter, the internal energy, the specific heat and the entropy. We also obtain some critical exponents, in particular, we verify the validity of the hyperscaling relation for this system. Assuming that other scaling relations (those of Rushbrooke and Fisher) are also valid, we calculate the η exponent associated with the algebraic decay of correlations at the critical point. This critical exponent is different from that associated with the algebraic decay along the unusual phase, exhibiting a discontinuity in the η exponent at the critical temperature.

SUMÁRIO

Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	iv
Abstract	v
Sumário	vi
Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	x

INTRODUÇÃO	1
------------------	---

CAPÍTULO 1 : TRANSIÇÕES DE FASE, FENÔMENOS CRÍTICOS E GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

1.1) Transições de Fase	9
1.2) Fenômenos Críticos	11
1.3) Grupo de Renormalização	16
1.3.1) Blocos de Kadanoff	16
1.3.2) Transformações de Grupo de Renormalização	19

CAPÍTULO 2 : FRACTAIS E MULTIFRACTAIS

2.1) Fractais	24
2.1.1) Introdução	24
2.1.2) Geometria Fractal	28
2.1.3) Redes Hierárquicas	29
2.2) Multifractais	35
2.2.1) Introdução	35
2.2.2) Caracterização de Medidas Multifractais	36
2.2.2.1) Dimensões Generalizadas	36
2.2.2.2) Espectro $f(\alpha)$	38

2.2.3) Relação entre o Espectro $f(\alpha)$ e as Dimensões Generalizadas D_q	39
2.2.4) Método Direto de Determinação do Espectro $f(\alpha)$	41

CAPÍTULO 3 : ANTIFERROMAGNETO DE POTTS EM UMA REDE FRACTAL : ESTUDO DE UMA FASE NÃO USUAL..... 44

3.1) Introdução	44
3.2) Origem da Fase não Usual	45
3.3) O Modelo	50
3.4) Escolha da Célula Básica e o Atrator AF.....	52
3.5) Decaimento Algébrico das Correlações	56
3.6) Recorrências para as Magnetizações Locais	58
3.7) Parâmetro de Ordem	66
3.8) Multifractalidade da Distribuição de Magnetizações Locais	75
3.9) Energia Interna.....	89
3.10) Calor Específico	91
3.11) Entropia	93
3.12) Hiper-escala e Expoente η em T_c	97

CONCLUSÕES..... 99

APÊNDICE A 103

APÊNDICE B 105

BIBLIOGRAFIA 107

LISTA DE FIGURAS

Fig. 1.1 : Construção dos Blocos de Kadanoff para uma Rede Quadrada	17
Fig. 1.2 : Linha Física e Superfície Crítica no Espaço de Parâmetros	21
Fig. 1.3 : Fluxo de Renormalização sobre a Superfície Crítica	22
Fig. 2.1 : (a) Construção do Fractal Sierpinski Gasket, (b) Comportamento da Densidade como Função do Comprimento Característico	26
Fig. 2.2 : Exemplos de Fractais Deterministas	30
Fig. 2.3 : Exemplos de Fractais Aleatórios	31
Fig. 2.4 : Exemplos de Redes Hierárquicas	33
Fig. 2.5 : (a) Medida Binomial, (b) Espectro D_q e (c) Espectro $f(\alpha)$	40
Fig. 3.1 : Caminho Linear com quatro sítios Destacado de uma Rede Hipercubica ..	46
Fig. 3.2 : Diagramas de Fluxos de Renormalização para Sistemas (a) sem Entropia Residual e (b) com Entropia Residual	48
Fig. 3.3 : Construção da Rede Hierárquica utilizada no nosso Modelo	51
Fig. 3.4 : Plano $t' \times t$ e Diagrama de Fases para $P=9$ e $P=10$	55
Fig. 3.5 : Representação Esquemática das Posições Relativas dos Sítios que aparecem nas Recorrências Locais	61
Fig. 3.6 : Comportamento do Parâmetro de Ordem em Função da Temperatura para diversos Tamanhos da Rede	72
Fig. 3.7 : Comportamento do $\ln M_n$ com a hierarquia n	73
Fig. 3.8 : Comportamento do $\ln \delta T_n$ com a hierarquia n	74
Fig. 3.9 : Representação de um Caminho mais Curto entre as Raízes da Rede na Hierarquia 2	76
Fig. 3.10 : Distribuição de Magnetizações (a) na Temperatura Crítica e (b) na Temperatura do Atrator AF	77

Fig. 3.11 : Distribuição de magnetizações na Temperatura Crítica para (a) $n=6$ e (b) $n=7$	79
Fig. 3.12 : Distribuição de magnetizações na Temperatura do Atrator AF para (a) $n=6$ e (b) $n=7$	80
Fig. 3.13 : Comportamento das Somas $S_f(q)$ e $S_\alpha(q)$ em Função da Hierarquia da Rede	83
Fig. 3.14 : Espectros $f(\alpha)$ nas Temperaturas Crítica e do Atrator AF	84
Fig. 3.15 : Representação das posições dos sítios contendo as Menores Medidas nas Hierarquias 0,1 e 2	86
Fig. 3.16 : Energia Interna por Sítio em Função da Temperatura	90
Fig. 3.17 : Calor Específico por Sítio em Função da Temperatura	92
Fig. 3.18 : Entropia por Sítio em Função da Temperatura	95

LISTA DE TABELAS

Tab. 1.1 : Exemplos de Transições de Fase e seus Parâmetros de Ordem	12
Tab. 3.1 : Comparação dos Resultados Exatos e da Computação dos Espectros $f(\alpha)$ para os Expoentes de Hölder Limites	88

Introdução

No estudo das transições de fase e fenômenos críticos é digno de nota o papel desempenhado por modelos que são simples em suas definições formais porém ricos em informações e resultados que muito contribuíram para o desenvolvimento desse ramo da física estatística. Dentre esses modelos destacam-se o modelo de Ising (para um histórico ver [1]) e o modelo de Potts [2]. No modelo de Ising associa-se uma variável binária σ_i ($\sigma_i = \pm 1$) à cada sítio s_i de uma rede, sendo o termo de interação entre σ_i e σ_j localizados, por exemplo, em sítios primeiros vizinhos dado tipicamente por $-J_{ij}\sigma_i\sigma_j$, onde J_{ij} é a constante de acoplamento entre σ_i e σ_j . A variável σ_i associada à cada sítio da rede pode ter diversos significados diferentes, dependendo do sistema físico que se deseja modelar. Para o caso de magnetos uniaxiais, σ_i representa a projeção ao longo do eixo preferencial (para cima ou para baixo) do spin da molécula posicionada no sítio s_i . No caso de um sistema de mistura de dois tipos diferentes de moléculas, a variável σ_i indica qual o tipo de molécula que ocupa o sítio s_i . De maneira análoga, em um gás de rede (uma mistura de moléculas e ‘buracos’), essa variável indica a presença ou ausência de moléculas em cada sítio da rede.

A solução exata do modelo de Ising ferromagnético a campo nulo na rede quadrada [3], mostrando que este sistema apresenta magnetização espontânea e possui expoentes críticos não clássicos, é um marco no progresso da teoria dos fenômenos críticos, conferindo ao modelo de Ising um status comparável ao do átomo de Hidrogênio dentro da mecânica quântica. Modelos não triviais que sejam exatamente solúveis desempenham um papel importante dentro do desenvolvimento da física estatística. Estes modelos podem simular algum sistema físico real, ou servir de referência para o desenvolvimento de novas teorias aproximadas.

No modelo de Potts generaliza-se o modelo de Ising associando-se a cada sítio s_i de uma rede uma variável σ_i que pode assumir q estados diferentes, $\sigma_i = 0, 1, \dots, q - 1$, sendo, por exemplo, o termo de interação entre primeiros vizinhos dado tipicamente por $-J_{ij}\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ onde $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ é a função delta de Kronecker. Esse modelo está relacionado com vários problemas de mecânica estatística [2] tais como o modelo $Z(N)$, o modelo de vértices com regra do gelo, percolação (limite $q \rightarrow 1$) e rede de resistores aleatórios (limite $q \rightarrow 0$).

Além de sua importância teórica, esses modelos têm se mostrado também relevantes sob o ponto de vista experimental. Dentre as realizações experimentais do modelo de Ising podemos citar vários magnetos uniaxiais [4] como o Rb_2CoF_4 em dimensão 2, bem como diversos sistemas de adsorção em substratos [5] como por exemplo, o Hélio 4 adsorvido em uma superfície de Grafite e Kriptônio com cobertura 1/2. O modelo de Potts apresenta também diversas aplicações experimentais [2] em sistemas de adsorção como o O_2 adsorvido em Ni ($q=4$), assim como em processos que envolvem polímeros, vulcanização, etc..

O modelo de Potts com acoplamento ferromagnético ($J_{ij} > 0$) tem sido extensivamente estudado e podemos dizer que suas propriedades críticas são hoje razoavelmente bem conhecidas [2]. No entanto, no caso do antiferromagneto de Potts (AFP) ($J_{ij} < 0$), o mesmo não ocorre. Esse sistema ganhou bastante atenção após o artigo de Berker e Kadanoff [6] sobre entropia residual e ordenamento a baixas temperaturas. Neste trabalho, através de um argumento de Grupo de Renormalização (GR) a um parâmetro, os autores sugerem que sistemas com alto grau de degenerescência no estado fundamental podem apresentar uma fase não usual a baixas temperaturas onde as correlações entre spins decaem algebricamente com a distância e onde o ordenamento, se existir, deve ser não trivial. O AFP com $q_0 + 1$ estados definido em uma rede q_0 -partida, isto é, uma rede que pode ser dividida em q_0 subredes tal que um sítio pertencente à uma dada

subrede só possa como primeiros vizinhos sítios pertencentes às outras subredes, é um simples candidato para apresentar esse comportamento. Esse sistema possui entropia residual não nula, originada no grande número de diferentes configurações possíveis que satisfazem ao critério de mínima energia do estado fundamental, qual seja, o de que spins primeiros vizinhos estejam em estados diferentes.

Na argumentação de Berker e Kadanoff a dimensão espacial do sistema desempenha um papel importante. Segundo os autores, um sistema de baixa dimensão oferecerá pouca conectividade entre spins distantes, havendo, portanto, uma tendência para a independência completa entre esses spins, o que implicará na existência de um grande número de configurações diferentes de mesma energia, e portanto, em um sistema trivialmente paramagnético. No extremo oposto, qual seja, um sistema de alta dimensão, haveria uma grande redução neste número de configurações degeneradas, graças à alta conectividade entre spins distantes. Deve haver portanto, conclui o argumento, uma dimensão crítica d_c , que no caso do AFP depende do número q de estados do sistema, acima da qual esse deixa de ser trivialmente paramagnético e passa a apresentar duas fases distintas, a paramagnética e a já citada fase não usual a baixas temperaturas. Essa fase não usual está associada, dentro do contexto do formalismo de grupo de renormalização, a um ponto fixo atrator localizado à uma temperatura finita não nula. Esse comportamento foi verificado por Berker e Kadanoff, fazendo uso da aproximação de Migdal-Kadanoff, no AFP com q estados definido em redes hiper-cúbicas d -dimensionais.

Nos trabalhos subsequentes enfocando o AFP, esta fase não usual tem sido procurada. Estes trabalhos, em sua grande maioria, consideram sistemas definidos nas redes quadrada e cúbica simples [7]-[25], havendo uma predominância do uso do método Monte Carlo (MC) [7,8,12,13,14,16,18,21,22,23,24]. Os resultados obtidos apresentaram inicialmente uma certa ambigüidade, principalmente na questão da existência ou não de ordenamento a baixas temperaturas. Essa ambigüidade pode ser atribuída à discussão

sobre a confiabilidade dos resultados de simulações MC, havendo casos onde diferentes trabalhos sobre o mesmo sistema apresentam resultados bastante discordantes. Existe também uma questão relacionada ao fato de que a sugestão de Berker e Kadanoff é baseada na aplicação de uma transformação de GR contendo somente um parâmetro, havendo a possibilidade de que, ao não adotar um GR com mais parâmetros, a fase não usual surja como um simples artefato resultante deste tratamento [26].

Atualmente existe um consenso de que o AFP com três estados na rede quadrada possui um ponto crítico somente à temperatura nula [9,10,11,12,13,14,17,22,25], onde o decaimento algébrico das correlações ocorre [14,25]. No caso desse mesmo sistema na rede cúbica, resultados de simulações MC estabelecem a existência de uma transição de fase contínua em $T_c \neq 0$, havendo uma fase ordenada a baixas temperaturas [7,16, 21,22,24] caracterizada pela predominância de um dos três estados em uma subrede e dos outros dois estados distribuídos aleatoriamente, mas com iguais probabilidades, na outra subrede. Assim, por exemplo, teríamos a grande maioria dos spins da subrede \mathcal{A} no estado 0, enquanto que na subrede \mathcal{B} teríamos distribuídos igualmente os estados 1 e 2. Esse tipo de ordenamento ganhou o nome de BSS do inglês *Broken Sublattice Symmetry* (Quebra de Simetria de Subrede). Em particular, um desses trabalhos [22] sugere fortemente que o comprimento de correlação diverge ao longo da fase a baixas temperaturas, apesar de, nessa fase, o sistema apresentar ordem de longo alcance.

Quanto aos expoentes críticos, a questão da classe de universalidade para o AFP com $q = 3$ na rede cúbica apresenta ainda uma certa controvérsia, manifestada nos resultados de MC. Ueno et al [21] sugerem que este sistema está em uma nova classe de universalidade, enquanto alguns trabalhos [7,22,24], por outro lado, sugerem que este se encontra na mesma classe de universalidade do modelo XY ferromagnético em dimensão 3.

Além destes trabalhos em redes de Bravais, o AFP em redes **fractais** tem sido

também estudado [27,28,29]. Os objetos fractais são aqueles que em geral possuem dimensão não inteira e que têm como importante propriedade a invariância de escala. Na natureza existem hoje diversos objetos que são classificados como fractais (em uma certa escala de comprimento) [30], dentre eles podemos citar os agregados formados por partículas em difusão, a estrutura de fraturas em materiais submetidos a tensões, substâncias porosas, sistemas percolantes, bem como a estrutura de aglomerados estelares encontrados no universo. O conceito de fractal tem encontrado aplicação em diversas áreas. Em particular, dentro da física podemos citar como exemplos, sistemas caóticos, sistemas com turbulência e modelos magnéticos. A modelagem de sistemas magnéticos em redes hierárquicas, que são basicamente redes construídas por um processo de se substituir iterativamente ligações entre sítios primeiros vizinhos por uma célula básica possuindo uma estrutura interna de sítios e ligações, originou um grande número de sistemas não triviais exatamente solúveis [31]-[46][29]. As redes hierárquicas não possuem a invariância translacional, característica das redes de Bravais. Os sítios de uma rede hierárquica não são todos equivalentes entre si, havendo a possibilidade de que um sítio se conecte com um número infinito de outros sítios primeiros vizinhos. Assim sendo, os sistemas definidos em redes hierárquicas não podem, em geral, modelar um objeto físico real, como por exemplo um ferromagneto natural. No entanto, esses sistemas apresentam uma variedade de comportamentos críticos interessantes, havendo também casos onde a solução de um modelo em uma determinada rede hierárquica convenientemente escolhida pode ser vista como uma aproximação para o mesmo modelo definido em uma rede de Bravais (por exemplo, a aproximação de Migdal-Kadanoff) [47].

Ao lado dos fractais, um outro conceito importante que tem sido aplicado em diversas áreas da física é o de **multifractal** [48]-[58][43]-[46]. O conceito de multifractal geralmente está associado à distribuição de alguma quantidade escalar sobre um objeto

suporte como, por exemplo, a distribuição de regiões dissipativas em um fluido turbulento, a distribuição de probabilidades de visitação sobre um atrator caótico em sistemas dinâmicos e a distribuição de magnetizações sobre uma rede de spins. Nesse tipo de sistemas, algumas regiões podem desempenhar um papel mais importante que outras no processo físico que sobre eles se desenrola. Por exemplo, em um fluido turbulento existem regiões de alta dissipação de energia, enquanto que em outras regiões, essa dissipação praticamente inexistente. Sendo assim, o termo multifractal expressa a idéia de que esses objetos apresentam um espectro de dimensões, podendo ser vistos como uma grande quantidade de diferentes conjuntos fractais entrelaçados. Cada um desses conjuntos fractais é selecionado segundo sua importância no processo físico envolvido.

Para o AFP definido na família de redes hierárquicas tipo diamante [28], na família de Sierpinski gasket com m folhas [29], e também nos fractais Sierpinski carpet e Sierpinski pastry shell [27], as transformações de grupo de renormalização exibem um ponto fixo atrator à uma temperatura finita não nula, sugerindo a existência de uma fase não usual similar àquela estudada por Berker e Kadanoff. Para os modelos definidos nas redes do tipo Sierpinski gasket e em algumas redes hierárquicas tipo diamante, os resultados obtidos são exatos, enquanto que nos casos do Sierpinski carpet e Sierpinski pastry shell foi utilizada a aproximação de Migdal-Kadanoff (que não é exata nestas redes). Tanto em [29] como em [27] foi usado, em geral, um GR com dois parâmetros, mostrando que a existência da fase não usual não é um artefato do GR a um parâmetro. Para o caso do modelo de Ising AF em algumas redes do tipo Sierpinski gasket, o decaimento algébrico das correlações ao longo da fase associada a este atrator foi demonstrado exatamente [29]. Entretanto, em nosso conhecimento, uma caracterização mais completa desta fase, principalmente no que concerne ao parâmetro de ordem, não foi apresentada na literatura.

No presente trabalho objetivamos estudar um modelo de spins exatamente solúvel

que exiba o comportamento sugerido por Berker e Kadanoff. O AFP em algumas redes hierárquicas tipo diamante demonstra ser um simples candidato para a realização do nosso propósito. Nesse sistema, as transformações de GR podem ser obtidas exatamente, permitindo a localização do ponto fixo atrator à uma temperatura finita não nula [28]. Além disso, o processo iterativo pelo qual estas redes são construídas permite a utilização de um método de equações de recorrência [43,44,45,46] que fornece resultados exatos para diversas grandezas físicas. Esse método foi aplicado com bastante sucesso a sistemas semelhantes, quais sejam, os modelo de Ising [43,44,45] e Potts [46] ferromagnéticos e vidros de spin tipo Ising [45] em redes hierárquicas.

No primeiro capítulo deste trabalho, fazemos uma breve digressão sobre as transições de fase, fenômenos críticos e o método de Grupo de Renormalização. No segundo capítulo definimos e comentamos sobre os objetos fractais e multifractais, dando ênfase às suas propriedades mais importantes. As redes hierárquicas são discutidas juntamente com os fractais. Quanto às distribuições multifractais, discutimos também sobre os métodos utilizados para se computar o espectro $f(\alpha)$ característico destas distribuições.

No terceiro e último capítulo introduzimos o sistema por nós estudado, o AFP com três estados em uma rede hierárquica bipartida escolhida convenientemente. Iniciamos por demonstrar a existência do ponto fixo atrator da renormalização associado à fase não usual. Em seguida demonstramos exatamente o decaimento algébrico das correlações entre spins, calculando também o expoente crítico η_{AF} associado a esse decaimento em toda a fase não usual. Em um próximo passo fazemos uso de um método [43,44,45,46] que permite a obtenção de equações de recorrência exatas relacionando as magnetizações locais de sítios gerados em diferentes hierarquias da rede. Realizando a iteração sucessiva dessas equações de recorrência, exibimos o perfil de magnetizações ao longo da rede e demonstramos que estes perfis, vistos como uma distribuição de magnetizações sobre um suporte unidimensional, apresentam um caráter multifractal. O espectro $f(\alpha)$ dessas

distribuições é calculado para duas diferentes temperaturas, a temperatura crítica e a temperatura do atrator antiferromagnético.

Fazendo uma soma sobre as magnetizações locais de cada subrede, construímos um parâmetro de ordem para o sistema como o proposto em trabalhos anteriores de Monte Carlo [7]. Essa soma fornece uma equação de recorrência para o parâmetro de ordem em diferentes hierarquias da rede. A iteração dessa equação de recorrência resulta em uma expressão **exata** para o parâmetro de ordem como função da temperatura e da hierarquia da rede.

Calculamos **exatamente** as expressões das seguintes grandezas termodinâmicas do sistema em função da temperatura: a energia interna, o calor específico e a entropia. Calculamos também alguns expoentes críticos, permitindo-nos verificar a validade da relação de hiper-escala para este sistema. Supondo também válidas outras relações de escala (de Rushbrooke e de Fisher), obtivemos o expoente η associado ao decaimento algébrico das correlações na temperatura crítica do sistema.

Capítulo 1

Transições de Fase, Fenômenos Críticos e Grupo de Renormalização

1.1 Transições de Fase

Um sistema físico, em geral, pode ser descrito por um potencial termodinâmico que é função de seus parâmetros intensivos associados, como por exemplo, a pressão e a temperatura. Uma fase estável desse sistema é, essencialmente, uma configuração particular de suas variáveis intensivas que corresponde a um mínimo absoluto do potencial termodinâmico. Variando-se continuamente os parâmetros do sistema, o potencial muda de forma, fazendo com que eventualmente, um mínimo do potencial perca a estabilidade. Quando o sistema passa, devido à variação de seus parâmetros, de um mínimo do potencial para outro, ocorre uma transição de fase.

As transições de fase em geral podem ser classificadas conforme o comportamento

das grandezas físicas associadas ao sistema. Uma primeira classificação das transições de fase, devida a Ehrenfest (1933), classifica como transições de fase de primeira ordem aquelas que são acompanhadas de descontinuidades nas grandezas físicas obtidas das primeiras derivadas do potencial termodinâmico. Nessa classe estão as transições onde se observa a liberação ou absorção de calor latente, que está associado à descontinuidade na entropia do sistema, como por exemplo na transição da água líquido-gelo. De acordo ainda com essa classificação, as transições de fase de segunda ordem são aquelas acompanhadas de descontinuidades nas grandezas físicas obtidas das segundas derivadas do potencial termodinâmico, como por exemplo, o calor específico.

Essa classificação de Ehrenfest conserva hoje somente um valor histórico, sendo uma primeira tentativa de sistematizar o estudo das transições de fase. Uma outra classificação de aplicação mais geral é devida principalmente a Landau (1937). Segundo a visão de Landau, uma transição de fase sem calor latente é, em geral, acompanhada por uma mudança de simetria do sistema. A essa mudança de simetria associa-se a noção de parâmetro de ordem : uma grandeza física extensiva que é nula na fase mais simétrica e não nula na fase menos simétrica. Portanto, nesse contexto, as transições de fase podem ser divididas em duas classes principais [59] :

1. As transições sem parâmetro de ordem, onde os grupos de simetria das duas fases são tais que um não está estritamente incluso no outro.
2. As transições com parâmetro de ordem, onde o grupo de simetria da fase menos simétrica é um subgrupo do grupo de simetria da fase mais simétrica.

De uma maneira geral, as transições de fase sem parâmetro de ordem são classificadas como transições de fase de primeira ordem no sentido de Ehrenfest. As transições com parâmetro de ordem podem ser classificadas como de primeira ordem : aquelas onde o parâmetro de ordem é descontínuo no ponto de transição, ou de segunda ordem : aquelas onde o parâmetro de ordem é contínuo, sendo essas últimas também chamadas

de transições de fase contínuas. Transições de fase contínuas podem ocorrer em diversos sistemas físicos como ligas binárias, ferromagnetos, antiferromagnetos, cristais líquidos e supercondutores. No diagrama de fases destes sistemas, estas transições ocorrem quando estes sistemas atingem o chamado 'ponto crítico'.

Experiências de espalhamento de luz, raios X e neutrons por sistemas que se encontram no limiar de uma transição de fase contínua revelam que esses estão sujeitos a violentas flutuações, estando seus graus de liberdade altamente correlacionados entre si. Esse comportamento se observa, por exemplo, no fenômeno da opalescência crítica [60], que consiste no espalhamento de luz pelas violentas flutuações na densidade de um fluido que se encontra no limiar de uma transição contínua. Essas flutuações de longo alcance desempenham um papel fundamental na teoria moderna dos fenômenos críticos, sendo responsáveis também, em grande parte, pelo fracasso das primeiras tentativas de se estudar as transições de fase contínuas. Ao não levar em conta essas flutuações, a teoria de van der Waals (1873) para o estudo de fluidos, a teoria do campo molecular de Weiss (1907) para sistemas magnéticos e a teoria de Landau (1937) para transições de fase em geral, falharam na previsão dos valores corretos dos expoentes críticos associados a diversas grandezas físicas relevantes para esses sistemas.

1.2 Fenômenos Críticos

Uma idéia fundamental que colaborou para elucidar o comportamento de sistemas físicos no limiar de uma transição contínua é o conceito de parâmetro de ordem. Para uma transição ferro-paramagnética o parâmetro de ordem natural é a magnetização do sistema. Na fase paramagnética o sistema apresenta uma simetria rotacional que é quebrada quando ocorre, na fase ferromagnética, o ordenamento ao longo de uma direção preferencial dos momentos magnéticos que constituem o sistema. Em uma transição antiferro-paramagnética o parâmetro de ordem natural é a diferença entre as magne-

Ponto Crítico	Parâmetro de Ordem	Exemplo
Líquido-gas	Diferença de densidades	H_2O
Ferromagnético	Momento magnético	Fe
Antiferromagnético	Diferença dos momentos magnéticos de subrede	FeF_2
Linha- λ em He^4	Amplitude quântica do He^4	He^4
Supercondutividade	Amplitude de pares de elétrons	Pb
Fluido binário	Concentração dos componentes	$CCl_4 - C_7F_{14}$
Liga binária	Concentração de uma espécie em cada subrede	Cu-Zn
Ferroelétrico	Momento de dipolo elétrico	Sulfato de triglicerina

Tabela 1.1: Exemplos de diversas transições de fase e seus parâmetros de ordem associados.

tizações das subredes nas quais pode ser dividida a rede onde estão localizados os sítios magnéticos. O termo parâmetro de ordem é utilizado também para a diferença de densidades em uma transição líquido-gás, apesar de nesse caso não haver nenhuma quebra de simetria no sistema. Na tabela (1.1) apresentamos alguns outros exemplos de sistemas físicos e seus parâmetros de ordem associados.

A escolha do parâmetro de ordem para um determinado sistema não é sempre óbvia, havendo às vezes uma escolha natural, como no caso da magnetização para um sistema ferromagnético. No entanto, há também casos, como na superfluidez, nos vidros de spin e na supercondutividade onde um longo tempo após a observação experimental desses fenômenos foi necessário até que uma compreensão teórica satisfatória permitisse a definição correta do parâmetro de ordem.

Uma característica importante do parâmetro de ordem é sua dimensionalidade n , que depende da classe de sistemas estudados. Na classe $n = 1$ encontram-se, por exemplo, os fluidos simples, fluidos binários e magnetos uniaxiais (modelo de Ising), na classe $n = 2$ estão a superfluidez do He^4 e o modelo XY. Como exemplo de sistema na classe

$n = 3$ podemos citar os magnetos isotrópicos (modelo de Heisenberg).

O comportamento crítico de um sistema físico é caracterizado pela forma como se comportam as diversas grandezas físicas associadas a esse sistema na vizinhança do ponto de transição de fase. Para esse fim, associa-se à cada grandeza física na vizinhança desse ponto um expoente crítico que caracteriza o comportamento desta grandeza como função da temperatura ou de outra variável relevante. Assim por exemplo, definindo-se $\epsilon \equiv (T - T_c)/T_c$ onde T_c é a temperatura crítica do sistema, resulta para $\epsilon \rightarrow 0$ os seguintes comportamentos

- Calor específico, $C \sim |\epsilon|^{-\alpha}$
- Suscetibilidade, $\chi \sim |\epsilon|^{-\gamma}$
- Parâmetro de ordem, $M \sim |\epsilon|^\beta$
- Comprimento de correlação, $\xi \sim |\epsilon|^{-\nu}$
- Função de correlação, $\Gamma(R_{ij}) \sim R_{ij}^{-(d-2+\eta)}$ com $R_{ij} \rightarrow \infty$ e $\epsilon = 0$
- Isoterma crítica, $M \sim H^{1/\delta}$ com $\epsilon = 0$

O símbolo \sim é usado com o significado de que a função à esquerda tem uma parte dominante proporcional ao termo da direita. Na definição do expoente η , d é a dimensão espacial do sistema e R_{ij} é a distância entre os graus de liberdade i e j do sistema. A isoterma crítica fornece o comportamento do parâmetro de ordem M , quando se fixa a temperatura em T_c e varia-se o campo conjugado H . Outros expoentes críticos são definidos [60], produzindo um conjunto de índices que caracterizam o comportamento crítico do sistema físico estudado. Vale aqui ressaltar que qualquer que seja a função $f(\epsilon)$, o seu expoente crítico λ associado será dado por

$$\lambda \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\epsilon)}{\ln \epsilon} \quad (1.1)$$

Isto abrange toda uma gama de funções $f(\epsilon)$ como

$$f(\epsilon) = A\epsilon^x (1 + B\epsilon^y + \dots) \quad (y > 0) \quad (1.2)$$

que para $\epsilon \rightarrow 0$ terão o mesmo comportamento dado pelo termo dominante que contém o expoente crítico.

Um conceito importante que surgiu no estudo de diversos sistemas físicos que apresentam transições de fase contínuas é o de universalidade. Uma das primeiras observações experimentais de comportamento universal em sistemas físicos se refere à forma da curva de coexistência líquido-vapor para diversos gases [61]. Gases como o Argônio, Nitrogênio e Oxigênio apresentam a mesma curva de coexistência quando a temperatura e densidade são devidamente normalizadas pela temperatura crítica e pela densidade crítica respectivamente. A universalidade se manifesta nos expoentes críticos que se apresentam independentes de diversos detalhes dos sistemas físicos estudados. Por outro lado, alguns parâmetros como a dimensionalidade do parâmetro de ordem, a dimensionalidade espacial do sistema e o alcance das interações (finito ou infinito), parecem desempenhar um papel fundamental na definição destes expoentes.

Intuitivamente podemos compreender a universalidade nestes sistemas como uma consequência do surgimento de regiões englobando um grande número de graus de liberdade que se encontram altamente correlacionados entre si. O comprimento de correlação, que é definido como a extensão linear média destas regiões apresenta uma divergência na transição contínua e a função de correlação entre os graus de liberdade tem um decaimento algébrico com a distância, em contraste com o decaimento exponencial que ocorre, em geral, fora da transição. Dessa forma, um comprimento característico em princípio importante, como o espaçamento interatômico, se torna invisível para as flutuações do sistema e as interações efetivas não mais se efetuam em escala atômica mas sim em uma escala semi-macroscópica. A existência de comportamentos universais em sistemas físicos leva ao conceito das classes de universalidade : conjuntos de sis-

temas, em princípio bastante diversos que, no entanto, apresentam o mesmo conjunto de expoentes críticos.

Utilizando-se considerações termodinâmicas pode-se demonstrar rigorosamente que os expoentes críticos não são todos independentes entre si, havendo relações entre eles expressas por meio de desigualdades como por exemplo $\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2$ [60]. No entanto, observações experimentais e soluções exatas de modelos teóricos, como o modelo de Ising bidimensional [3], sugerem fortemente que estas relações são satisfeitas como igualdades e não como desigualdades. Relações como

- Rushbrooke : $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$
- Fisher : $\gamma = (2 - \eta)\nu$
- Josephson (ou hiper-escala) : $d\nu = 2 - \alpha$
- Widom : $\gamma = \beta(\delta - 1)$

são verificadas. Ainda que não se possa dar uma demonstração rigorosa de que essas relações valham como igualdades, essas podem ser deduzidas tomando como ponto de partida a hipótese de escala proposta por B. Widom [62]. Essa hipótese assume que na região crítica as partes singulares da energia livre e da função de correlação do sistema satisfazem relações de homogeneidade generalizadas do tipo

$$g(\lambda^s \epsilon, \lambda^r h) = \lambda g(\epsilon, h) \quad (1.3)$$

que expressam a idéia de que na região crítica as partes singulares da energia livre e da função de correlação são invariantes a menos de um fator de escala (λ) se suas variáveis ϵ e h são redefinidas por fatores de escala convenientes (λ^s e λ^r).

1.3 Grupo de Renormalização

1.3.1 Blocos de Kadanoff

Em um sistema ferromagnético do tipo Ising na vizinhança do ponto crítico, diversos spins se comportam coerentemente como se formassem uma só unidade : todos os spins de um determinado bloco mudam de estado, virando para cima (ou para baixo) simultaneamente. A idéia desses blocos atuando como um só objeto foi primeiro introduzida por Kadanoff [63], na tentativa de justificar a conjectura de Widom sobre a homogeneidade das funções termodinâmicas. Kadanoff considerou o modelo de Ising com campo magnético fraco em uma rede hiper-cúbica d -dimensional. O Hamiltoniano do sistema (em unidades de $k_B T$) é dado por

$$H\{\sigma\} = K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (\sigma_i = \pm 1) \quad (1.4)$$

onde $K \equiv J/k_B T$, sendo J a constante de acoplamento entre spins primeiros vizinhos, e $h \equiv H/k_B T$, sendo H o campo magnético externo (k_B é a constante de Boltzmann).

Considerando-se que este sistema esteja próximo do ponto de transição contínua ($T = T_c$, $H = 0$), o comprimento de correlação ξ é muito maior que o espaçamento a entre spins primeiros vizinhos. Dessa forma, podemos construir blocos de lado L ($a \ll L \ll \xi$) e considerar, devido à alta correlação, que cada um desses blocos contendo L^d spins atua como um só spin efetivo. O processo de criação dos blocos de spin é ilustrado na figura (1.1) para uma rede quadrada. Como resultado final do processo de criação dos blocos de spin, uma rede com N spins espaçados de uma distância a se transforma em uma rede com $\bar{N} = L^{-d} N$ spins espaçados de uma distância $\bar{a} = La$.

Quanto ao comportamento dos blocos e à interação entre eles, as duas hipóteses principais feitas por Kadanoff são :

- Cada bloco de spins (representado pela variável de spin μ_i) assume, como no

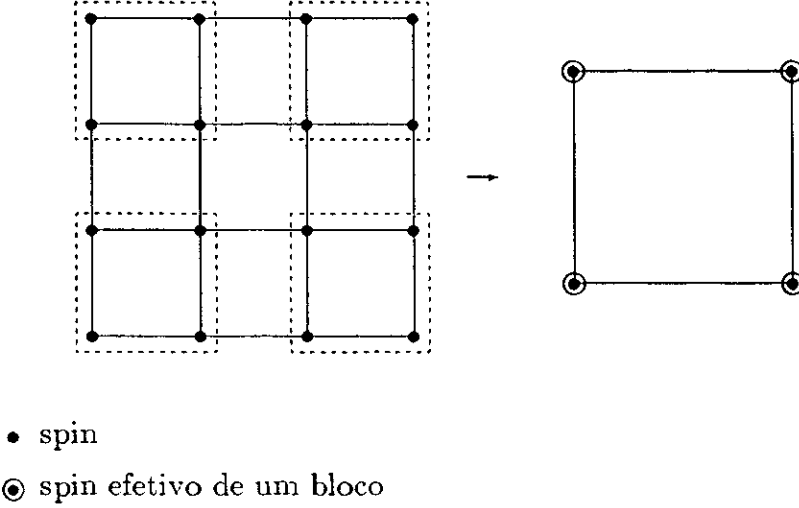


Figura 1.1: Ilustração do processo de construção dos blocos de Kadanoff para um sistema de spins bidimensional, neste caso temos $a = 1$ e $L = 2$.

modelo original, somente dois estados.

- Os blocos de spin só interagem, também como no modelo original, entre primeiros vizinhos.

Portanto, o Hamiltoniano do modelo de blocos de spin será dado por

$$\bar{H}\{\mu\} = \bar{K} \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j + \bar{h} \sum_i \mu_i \quad (\mu_i = \pm 1) \quad (1.5)$$

onde \bar{K} e \bar{h} são os parâmetros K e h redefinidos para o novo sistema e o spin μ_i do bloco b_i é definido por

$$\mu_i = \frac{1}{\langle \sigma \rangle_L L^d} \sum_{\sigma_j \in b_i} \sigma_j \quad (1.6)$$

onde $\langle \sigma \rangle_L$ é a média dos spins σ em um bloco de lado L e a soma sobre σ_j é somente sobre os spins englobados pelo bloco b_i .

Os novos parâmetros \bar{K} e \bar{h} do Hamiltoniano de blocos serão funções dos parâmetros antigos K e h e também do tamanho L dos blocos. A relação entre o novo campo \bar{h} e o campo h do Hamiltoniano original pode ser obtida reescrevendo-se a soma sobre todos os spins σ como uma soma sobre blocos, ou seja

$$h \sum_i \sigma_i = h \sum_{b_i} \sum_{\sigma_j \in b_i} \sigma_j = h \sum_{b_i} \langle \sigma \rangle_L L^d \mu_i = h \langle \sigma \rangle_L L^d \sum_i \mu_i = \bar{h} \sum_i \mu_i \quad (1.7)$$

e portanto

$$\bar{h}(h, L) = h \langle \sigma \rangle_L L^d \quad (1.8)$$

Por outro lado, supondo que o processo de criação dos blocos não altera a densidade de energia livre por partícula do sistema, deve valer a relação

$$f(\epsilon, h) = L^{-d} f(\bar{\epsilon}, \bar{h}) \quad (1.9)$$

onde $\epsilon = (T - T_c)/T_c$ e $f(\epsilon, h)$ ($f(\bar{\epsilon}, \bar{h})$) é a energia livre por partícula do sistema original de spins (do sistema de blocos de spins). Portanto, assumindo uma singularidade na energia livre do tipo

$$f_{sing}(\epsilon, h = 0) \sim \epsilon^{2-\alpha} \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad (1.10)$$

onde α é o expoente crítico associado ao calor específico ($C \sim \epsilon^{-\alpha}$), resulta de maneira análoga

$$f_{sing}(\bar{\epsilon}, \bar{h} = 0) \sim \bar{\epsilon}^{2-\alpha} \quad (\bar{\epsilon} \rightarrow 0) \quad (1.11)$$

e portanto, a relação entre o novo parâmetro $\bar{\epsilon}$ e o parâmetro ϵ do sistema original é dada por

$$\bar{\epsilon}(\epsilon, L) = \epsilon L^{d/(2-\alpha)} \quad (1.12)$$

Assim, a parte singular da energia livre satisfaz à relação de homogeneidade

$$f_{sing}(\epsilon, h) = L^{-d} f_{sing}(L^{d/(2-\alpha)} \epsilon, L^{d-\psi} h) \quad (1.13)$$

onde ψ é definido por $\langle \sigma \rangle_L \sim L^{-\psi}$. Essa relação de homogeneidade permite, como demonstrado por Widom, a dedução das relações de escala entre os expoentes críticos (relações de Widom, de Rushbrooke e de Josephson (hiper-escala)).

Para permitir a dedução de todas as relações de escala, resta ainda analisar o comportamento da função de correlação entre spins. De acordo com Kadanoff, a função de correlação entre spins separados por uma distância R na rede original se relaciona com a função de correlação na rede de blocos por

$$\langle \sigma_{\bar{r}} \sigma_{\bar{r}'} \rangle = \langle \sigma \rangle_L^2 \langle \mu_{\bar{r}} \mu_{\bar{r}'} \rangle \quad (1.14)$$

onde $|\vec{r} - \vec{r}'| = R$. Portanto, das considerações anteriores, resulta a relação de homogeneidade para a função de correlação ($g(\epsilon, h, R)$) dada por

$$g(\epsilon, h, R) = L^{-2\psi} g(L^{d/(2-\alpha)}\epsilon, L^{d-\psi}h, L^{-1}R) \quad (1.15)$$

que permite deduzir a relação de escala de Fisher.

1.3.2 Transformações de Grupo de Renormalização

A idéia dos blocos de Kadanoff contem a semente do processo do Grupo de Renormalização. Uma transformação de Grupo de Renormalização consiste em eliminar do sistema original graus de liberdade que se encontram fortemente correlacionados, construindo blocos que serão os constituintes do sistema renormalizado, e em determinar como se transforma o Hamiltoniano do sistema sujeito à essa transformação. Em geral um sistema físico pode ser descrito por um Hamiltoniano $H(K_1, K_2, \dots, K_m)$ que é função de m parâmetros adimensionais K_i (divididos por $k_B T$). Assim por exemplo, em um modelo magnético, o parâmetro K_1 pode corresponder a um acoplamento entre spins primeiros vizinhos, K_2 pode corresponder a um campo magnético externo, K_3 a interações entre segundos vizinhos, etc.. Ao se eliminar graus de liberdade do sistema, os parâmetros K'_i que determinarão o Hamiltoniano do sistema renormalizado serão funções dos parâmetros antigos, a saber

$$K'_i = R_i(K_1, K_2, \dots, K_m) \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (1.16)$$

A transformação $\mathbf{K}' = R(\mathbf{K})$ é chamada transformação de grupo de renormalização.

A aplicação sucessiva $\mathbf{K}^{(n)} = R(\mathbf{K}^{(n-1)})$ do processo de renormalização implica em uma trajetória para o conjunto de parâmetros K_i , partindo de $(K_1^{(0)}, \dots, K_m^{(0)})$ em um espaço de parâmetros m -dimensional. Podemos pensar cada ponto deste espaço como representando um Hamiltoniano, $H_0 = H(\mathbf{K}^{(0)})$, $H_1 = \tau(H_0)$ e assim por diante, onde τ representa a transformação de renormalização para os Hamiltonianos, ou seja, τ repre-

senta a substituição dos parâmetros $\mathbf{K}^{(n)}$ no Hamiltoniano H_n pelos novos parâmetros $R(\mathbf{K}^{(n)})$, resultando no Hamiltoniano H_{n+1} . A transformação τ é em geral contínua, diferenciável e preserva a função de partição do sistema, ou seja

$$\mathcal{Z}_N(H) = \mathcal{Z}_{N'}(\tau(H)) \quad (1.17)$$

No espaço dos parâmetros, quando consideramos um Hamiltoniano inicial $H_0(T_0)$, correspondente a um dado sistema físico à temperatura T_0 , e variamos a temperatura, o ponto no espaço que representa este sistema se deslocará continuamente descrevendo uma órbita chamada 'linha física'. Quando o sistema atinge a temperatura crítica, a linha física cruza a superfície neste espaço onde o comprimento de correlação do sistema é infinito, a chamada 'superfície crítica' (ver figura (1.2)). Neste mesmo espaço a transformação de renormalização τ aplicada a um Hamiltoniano H_0 faz com que o ponto que representa o sistema descreva uma órbita chamada de 'trajetória de renormalização'. Seleccionando Hamiltonianos fora da superfície crítica, vemos que as trajetórias de renormalização se afastam dessa superfície, fato esse associado à redução de ξ ($\xi' = \xi/L$) devido à renormalização das distâncias. Essas trajetórias geralmente convergem para pontos fixos totalmente estáveis H^* (pontos fixos triviais) da transformação τ onde tem-se $\xi = 0$. Esse pontos fixos totalmente estáveis correspondem às diferentes fases que o sistema pode apresentar. Nos sistemas ferromagnéticos como o modelo de Ising bidimensional, as transformações de renormalização têm em geral dois pontos fixos totalmente estáveis, um correspondendo à fase ferromagnética ($T = 0$) e outro correspondendo à fase paramagnética ($T = \infty$).

Se por outro lado, seleccionamos um Hamiltoniano inicial H_0^c localizado sobre a superfície crítica, a trajetória de renormalização fica confinada à essa superfície (já que $\xi = \infty$ é invariante sob τ). De uma maneira geral, as trajetórias de renormalização sobre a superfície crítica convergem para algum ponto fixo H_c^* da transformação τ (pontos fixos não triviais) localizado sobre essa superfície. Existindo mais de um ponto

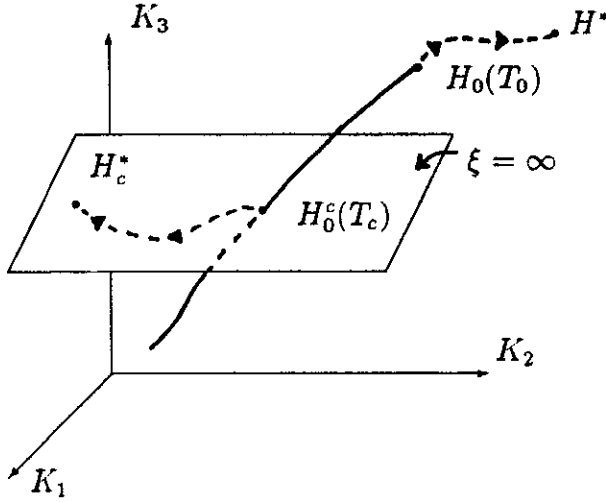


Figura 1.2: Linha física (linha cheia) e superfície crítica em um espaço de 3 parâmetros K_i . As linhas tracejadas representam trajetórias de renormalização. O Hamiltoniano H_0 está fora da superfície crítica (trajetória convergindo para o ponto fixo H^*), enquanto que o Hamiltoniano H_0^c se encontra sobre essa superfície (trajetória convergindo para o ponto fixo H_c^*).

fixo ($H_{c1}^*, H_{c2}^*, \dots$), haverá uma competição entre esses pontos, cada um com sua região atratora, na definição de para qual ponto fixo convergirá a sequência de Hamiltonianos renormalizados após um número infinito de iterações (ver a figura (1.3)).

Próximo de cada ponto fixo H_c^* sobre a superfície crítica podemos, em geral, fazer uma aproximação linear para a transformação $R(\mathbf{K})$

$$R(\mathbf{K}_c^* + \Delta\mathbf{K}) = R(\mathbf{K}_c^*) + \mathbf{W}\Delta\mathbf{K} \quad (1.18)$$

onde \mathbf{K}_c^* é o conjunto de parâmetros correspondente ao Hamiltoniano do ponto fixo H_c^* e $\Delta\mathbf{K}$ é um desvio pequeno na vizinhança deste ponto. A matriz \mathbf{W} é a matriz Jacobiana da transformação $R(\mathbf{K})$ cujos elementos são dados por

$$W_{ij} = \left. \frac{\partial R_i(\mathbf{K})}{\partial K_j} \right]_{\mathbf{K}=\mathbf{K}_c^*} \quad (1.19)$$

Definindo um sistema local de coordenadas com origem no ponto \mathbf{K}_c^* e cujos eixos tem as direções dos autovetores ϕ_i da matriz \mathbf{W}

$$\mathbf{W}\phi_i = \lambda_i\phi_i \quad , \quad (1.20)$$

as projeções do desvio $\Delta\mathbf{K}$ sobre estes vetores de base ϕ_i , U_i , são chamadas de 'campos de escala'. Esses são combinações lineares dos desvios ΔK_i e sob renormalização mudam

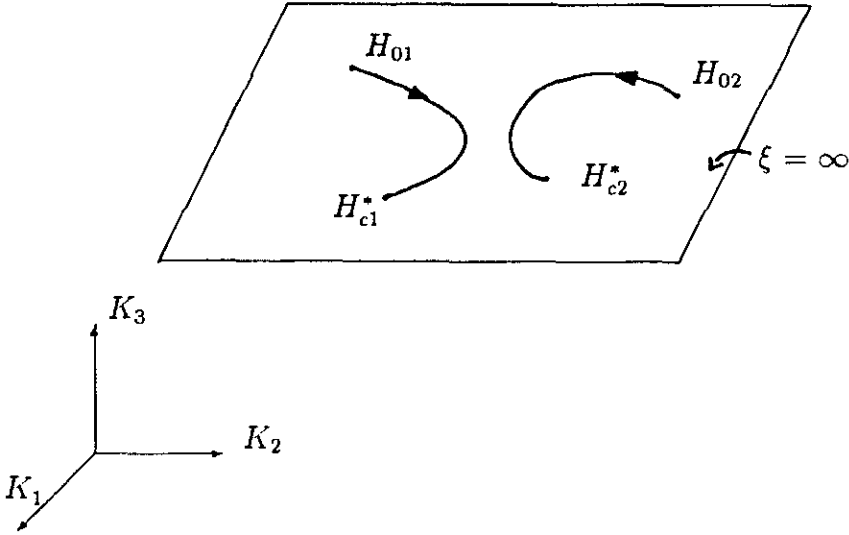


Figura 1.3: Fluxo da renormalização sobre a superfície crítica exibindo a competição entre dois pontos fixos não triviais, H_{c1}^* e H_{c2}^* .

apenas por um fator de escala λ_i

$$R(U_i) = \lambda_i U_i \quad (1.21)$$

Um campo de escala U_i é dito irrelevante se seu autovalor associado λ_i é menor que 1, neste caso resulta

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R^{(n)}(U_i) = 0 \quad (1.22)$$

significando que esta direção é estável sob pequenas perturbações. No caso $\lambda_i > 1$, o campo de escala U_i é dito relevante, sendo esta direção instável, levando o Hamiltoniano perturbado a outro ponto fixo. No caso $\lambda_i = 1$, U_i é dito marginal, não tendo estabilidade definida na aproximação linear.

Portanto, a situação dos fluxos de renormalização no espaço de parâmetros se assemelha bastante à uma região de relevo complexo com vales, planos, morros e bacias hidrográficas. A superfície crítica separa esse espaço em diferentes bacias atratoras correspondentes aos pontos fixos totalmente estáveis H^* que determinam as fases do sistema. Sobre a superfície crítica, cada ponto fixo H_c^* têm suas direções estáveis que são atraentes e suas direções instáveis que são repelentes, havendo também direções que se assemelham a

planos, que não repelem nem atraem. Um Hamiltoniano H_0^c que se encontra na região estável de um determinado ponto fixo H_{c1}^* será atraído para este ponto sob sucessivas transformações de renormalização. Os expoentes críticos do sistema físico descrito pelo Hamiltoniano H_0^c serão determinados pelos autovalores da matriz de linearização \mathbf{W}_1 correspondente ao ponto crítico H_{c1}^* . Portanto, a superfície crítica fica separada em diferentes classes de universalidade, cada classe estando associada a um ponto fixo localizado sobre a superfície crítica. Todos os sistemas físicos cujos Hamiltonianos H_0^c estiverem na região estável do ponto fixo H_{c1}^* estarão na mesma classe de universalidade definida pelos autovalores da matriz \mathbf{W}_1 .

Capítulo 2

Fractais e Multifractais

2.1 Fractais

2.1.1 Introdução

Nos últimos anos tem sido reconhecido que muitas estruturas presentes em diversas áreas da física possuem uma geometria bastante complexa, onde os conceitos usuais de dimensão, comprimento, área e volume necessitam de uma maior elaboração formal [64,65,30,66,67,68]. Dentre os vários exemplos podemos citar os agregados obtidos por processos de difusão limitada, superfícies adsorventes e fraturas em materiais submetidos a tensões [30,66,67,68]. A palavra fractal, derivada do latim *fractus* que significa irregular ou fragmentado, foi introduzida por B. B. Mandelbrot [64,65] para denominar essa classe de objetos com formas complexas e que possuem, em geral, dimensões não inteiras.

Um exemplo simples que ilustra como surgem essas dimensões não inteiras pode

ser dado pelo fractal Sierpinski Gasket (SG). O processo de construção desse fractal é mostrado na figura (2.1-a). A primeira etapa da construção ($n = 0$) constitui-se de um triângulo de massa M e lado $L = 1$. Na segunda etapa, toma-se três réplicas do triângulo da etapa $n = 0$, dispondo-os de tal maneira a formar um triângulo de massa $3M$ e lado $L = 2$. Repetindo-se este processo um número infinito de vezes resulta no fractal SG. Definindo a densidade do objeto que constitui o estágio n do processo de construção por

$$\rho_n = \frac{M_n}{L_n^2} \quad (2.1)$$

onde M_n é a massa total do objeto no estágio n e L_n é uma dimensão linear (o comprimento linear do lado do objeto) característica desse mesmo estágio, essa densidade apresenta um comportamento como função do comprimento L_n como mostrado na figura (2.1-b).

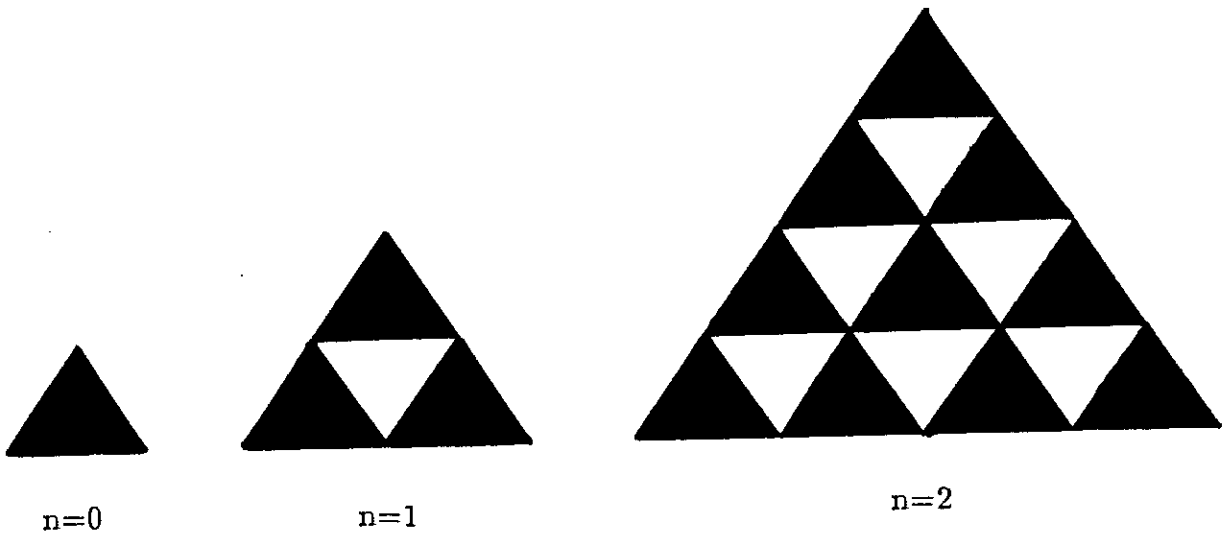
Desse gráfico podemos inferir que :

- ρ_n decresce monotonamente com o aumento de L_n .
- ρ_n decresce segundo uma lei de potência do tipo $\rho_n = \mathcal{A}L_n^x$.

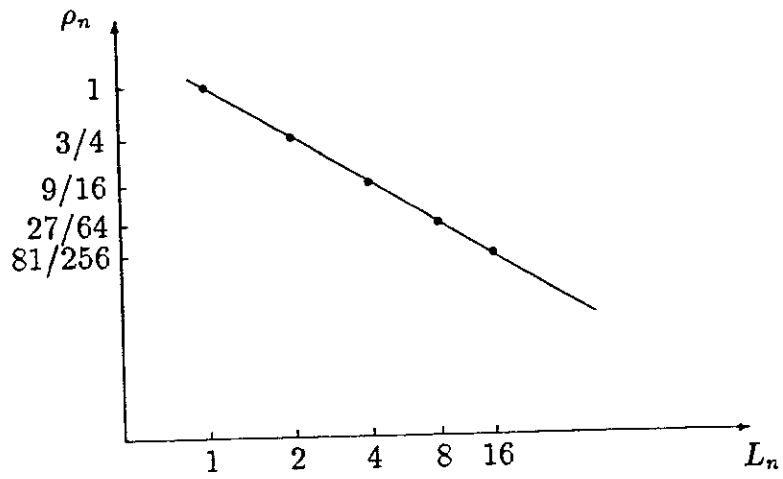
A amplitude \mathcal{A} da forma funcional dessa lei de potência depende da nossa escolha das unidades de M_n e L_n . Por outro lado, a informação principal, que é aquela que diz respeito unicamente ao processo de formação do objeto fractal, está no expoente x , que para o fractal SG, conforme vemos na figura, vale $x = \ln 3 / \ln 2 - 2$.

Nos objetos regulares como segmentos de reta ou objetos planos, o comportamento da massa com um comprimento característico tem em geral a forma $M = \mathcal{A}L$ e $M = \mathcal{A}L^2$ respectivamente para um objeto retilíneo e para um objeto plano. Portanto, seguindo uma analogia com estes casos, definimos a dimensão fractal d_f do Sierpinski gasket por

$$M_n \equiv \mathcal{A}L_n^{d_f} \quad (2.2)$$



(a)



(b)

Figura 2.1: (a)-Primeiros estgios no processo de construo do fractal Sierpinski gasket. (b)-Comportamento da densidade ρ como funo do comprimento L em escalas logartmicas.

e conseqüentemente

$$\rho_n = \mathcal{A}L_n^{d_f-2} \quad (2.3)$$

Concluimos então, que o fractal SG possui uma dimensão fractal dada por

$$d_f = x + 2 = \frac{\ln 3}{\ln 2} = 1,58\dots \quad (2.4)$$

que é uma dimensão intermediária entre as dimensões de um segmento de reta ($d = 1$) e de uma figura plana ($d = 2$), que são objetos com formas regulares descritas pela geometria euclidiana. Portanto, podemos dizer que o fractal Sierpinski gasket é mais 'volumoso' que um segmento de reta, porém não chega a ocupar uma área finita no espaço bidimensional no qual está imerso, já que possui dimensão menor que 2.

Uma característica comum a todos os objetos fractais é a invariância de escala. Considerando o conjunto de pontos que forma um fractal imerso em um espaço d -dimensional, podemos definir uma função de correlação $c(\vec{r})$ por

$$c(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}'} \rho(\vec{r} + \vec{r}') \rho(\vec{r}') \quad (2.5)$$

onde $\rho(\vec{r})$ é a densidade local no ponto \vec{r} , ou seja, $\rho(\vec{r}) = 1$ se o ponto \vec{r} pertence ao fractal e $\rho(\vec{r}) = 0$ no caso contrário, e N é o número total de pontos que compõem o fractal. Essa função de correlação fornece a probabilidade de que dois pontos no espaço separados pelo vetor \vec{r} pertençam simultaneamente à estrutura do fractal. A invariância de escala se manifesta na função de correlação de um objeto fractal através de sua invariância, a menos de um fator de proporcionalidade, sob mudanças de escala, ou seja

$$c(b\vec{r}) \sim b^{-\omega} c(\vec{r}) \quad (2.6)$$

onde b é um fator de mudança de escala e ω é um número não inteiro entre 0 e d . A invariância de escala pode ter como consequência a auto-similaridade: partes do objeto fractal, quando ampliadas por um fator de escala apresentam um aspecto similar ao

próprio objeto fractal do qual foram destacadas. Essa auto-similaridade é não trivial, diferentemente da que ocorre, por exemplo, em uma reta. A auto-similaridade não trivial e a dimensionalidade fractal estão intimamente relacionadas. Em geral, um objeto com dimensão fractal possui volume nulo no espaço no qual está imerso (com exceção dos fractais 'gordos' [67,68]), isso significa que sua estrutura geométrica deve possuir grandes regiões vazias (buracos) com diâmetros comparáveis ao próprio tamanho do objeto. A presença destes buracos em todas as escalas de comprimento está na origem da auto-similaridade não trivial.

2.1.2 Geometria Fractal

Um procedimento simples para se determinar a dimensão de um objeto fractal pode ser resumido nos seguintes termos : Seja L um comprimento linear característico do objeto em questão que se encontra imerso em um espaço d -dimensional. Cobrimos o volume desse objeto com pequenas caixas hiper-cúbicas de lado l ($l \ll L$), e volume l^d . Seja $N(l,L)$ o número mínimo dessas caixas necessário para se cobrir todo o volume deste objeto. Definindo

$$\epsilon \equiv \frac{l}{L} \quad , \quad (2.7)$$

isto é, o tamanho das caixas expresso em termos do comprimento característico do objeto, o número $N(l,L)$ só deve depender de ϵ , ou seja

$$N(l,L) = N(\epsilon) \quad . \quad (2.8)$$

Adotando uma resolução cada vez mais fina (limite $\epsilon \rightarrow 0$) assumimos o seguinte comportamento assintótico para $N(\epsilon)$:

$$N(\epsilon) \sim \epsilon^{-d_f} \quad , \quad (2.9)$$

onde d_f , por definição, é a dimensão fractal do objeto. Logo, a dimensão fractal será dada por

$$d_f = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln N(\epsilon)}{\ln 1/\epsilon} \quad (2.10)$$

Esse modo de definir a dimensão fractal, originalmente denominada dimensão de capacidade, tem maior apelo intuitivo, havendo, não obstante, outras definições de aplicação mais geral e de maior rigor matemático [69]. Essas diferentes definições fornecem, em um grande número de casos, o mesmo valor da dimensão fractal.

Quanto aos processos pelo qual podem ser formados, os objetos fractais podem ser classificados como deterministas ou aleatórios. Os fractais deterministas são aqueles que podem ser construídos seguindo um algoritmo determinista, como é o caso do Sierpinski gasket apresentado anteriormente e dos outros exemplos mostrados na figura (2.2). No caso dos fractais aleatórios o processo de construção envolve alguma variável aleatória, como é o caso dos agregados construídos por um processo de crescimento onde estão envolvidas partículas que se deslocam aleatoriamente no espaço (*random walks*). Alguns exemplos de fractais aleatórios são mostrados na figura (2.3). Os fractais deterministas satisfazem exatamente à invariância de escala e à auto-similaridade. Nos processos físicos as flutuações estão sempre presentes e não levam a estruturas com perfeita simetria, por isso, os fractais encontrados na natureza são sempre aleatórios e sua auto-similaridade não é exata, sendo satisfeita somente em um sentido estatístico.

2.1.3 Redes Hierárquicas

Dentre os fractais classificados como deterministas, uma classe que têm sido bastante utilizada em física para o estudo de diversos modelos magnéticos é a classe das redes hierárquicas [31]-[46]. O processo de construção das redes hierárquicas, bem como dos fractais deterministas em geral, pode ser visto de duas maneiras diferentes. Na primeira, chamada *agregação*, em um primeiro passo, um número n de ligações (uma ligação é

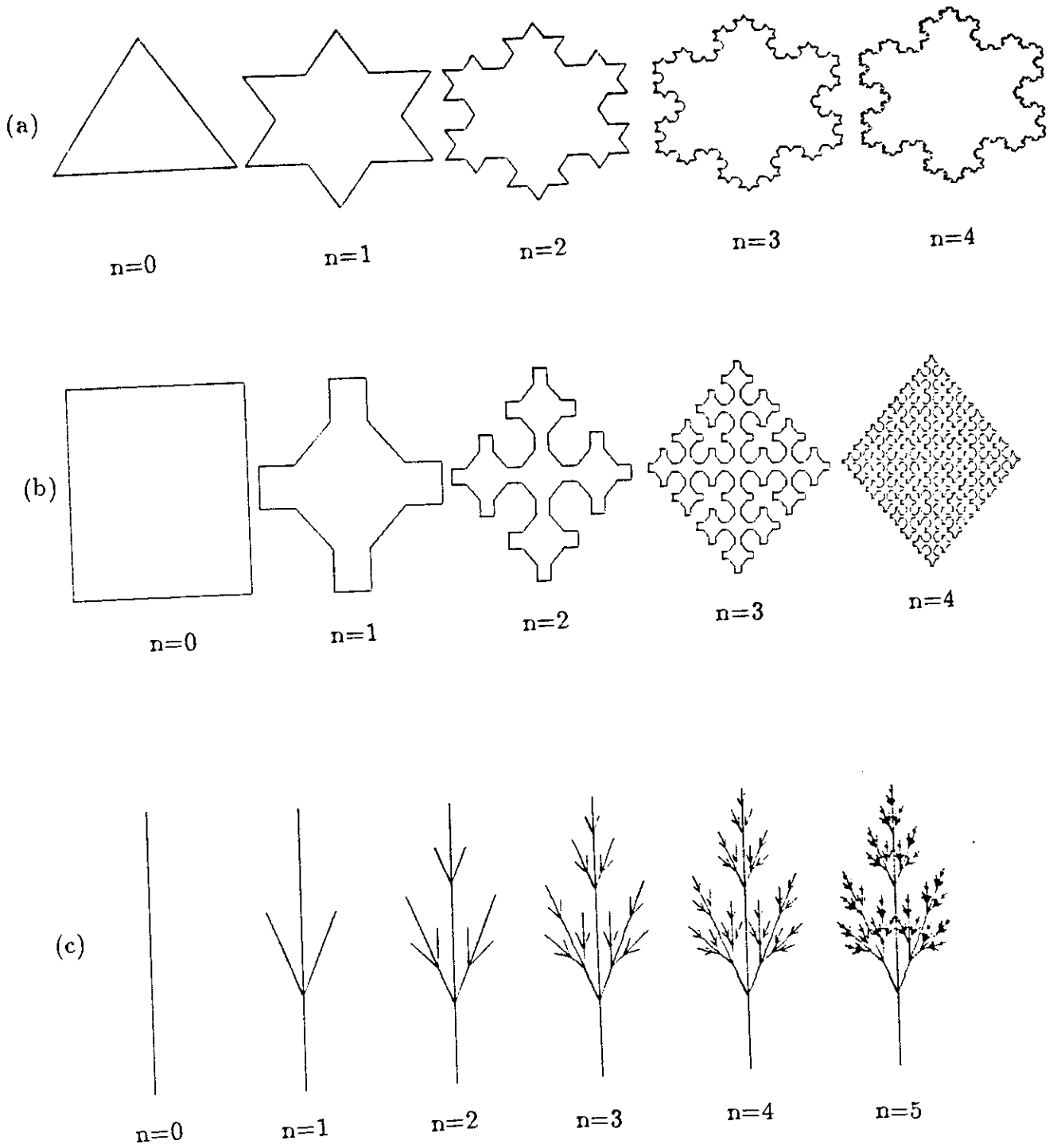


Figura 2.2: Alguns exemplos de fractais deterministas : (a) Uma curva de Koch, (b) Uma curva de Peano, (c) Um 'ramo de árvore'

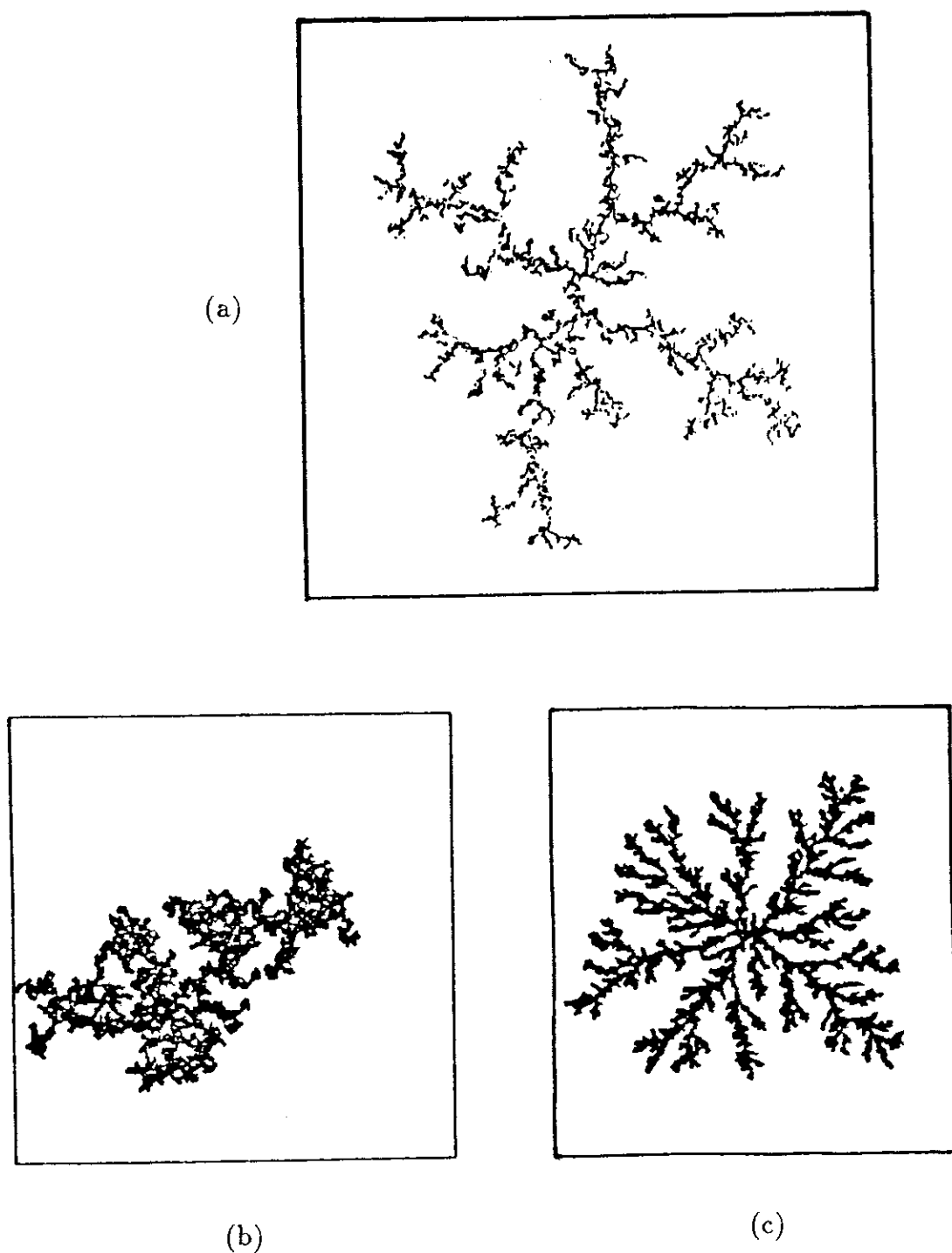


Figura 2.3: Exemplos de fractais aleatórios : (a) Um fluido se difundindo em um meio poroso, (b) Um *cluster* percolante em uma rede quadrada, (c) Um aglomerado (DLA) produzido por partículas em difusão.

a hierarquia zero do processo de construção) são dispostas de maneira a formar um bloco único, que é a célula básica (bloco de hierarquia um) do processo. No próximo passo n células básicas são dispostas de maneira análoga àquela do primeiro passo e assim sucessivamente, n blocos de hierarquia $k - 1$ são dispostos de maneira análoga à disposição das ligações na célula básica para formar o bloco de hierarquia k . No limite $k \rightarrow \infty$ resulta uma rede hierárquica.

Uma segunda alternativa para se ver o processo de construção das redes hierárquicas é chamada *miniaturização*, onde cada etapa de construção é vista como uma ampliação da etapa anterior, permitindo revelar detalhes que antes eram invisíveis. Assim, uma ligação é interpretada como uma visão com um mínimo de detalhes de toda a rede hierárquica, a próxima etapa é vista como uma ampliação da etapa anterior que revela alguns detalhes internos da constituição da rede. Esse processo pode ser iterado um número arbitrário de vezes até que no limite de um número infinito de iterações a rede pode ser vista com toda sua riqueza de detalhes internos. Na figura (2.4) mostramos alguns exemplos de redes hierárquicas.

Em geral, a célula básica de uma rede hierárquica não precisa ser constituída apenas de sítios e ligações [34]. As redes hierárquicas que estão nesse caso são chamadas de redes do tipo ligação (como nos exemplos (a) e (b) na figura (2.4)). Dentre as redes do tipo ligação, estão aquelas que se constituem apenas de ligações em série e em paralelo (como no exemplo (b) da figura (2.4)) : chamadas de redes do tipo Migdal-Kadanoff (ou tipo Diamante). Podemos no entanto, construir redes hierárquicas cuja célula básica é um outro objeto, como por exemplo, um triângulo, caso esse que resultará no fractal Sierpinski gasket (figura (2.1-a)).

As redes hierárquicas, em geral, não apresentam a simetria translacional que é uma característica essencial das redes de Bravais. Sendo assim, os sítios das redes hierárquicas não são todos equivalentes entre si, como ocorre nas redes de Bravais, havendo casos

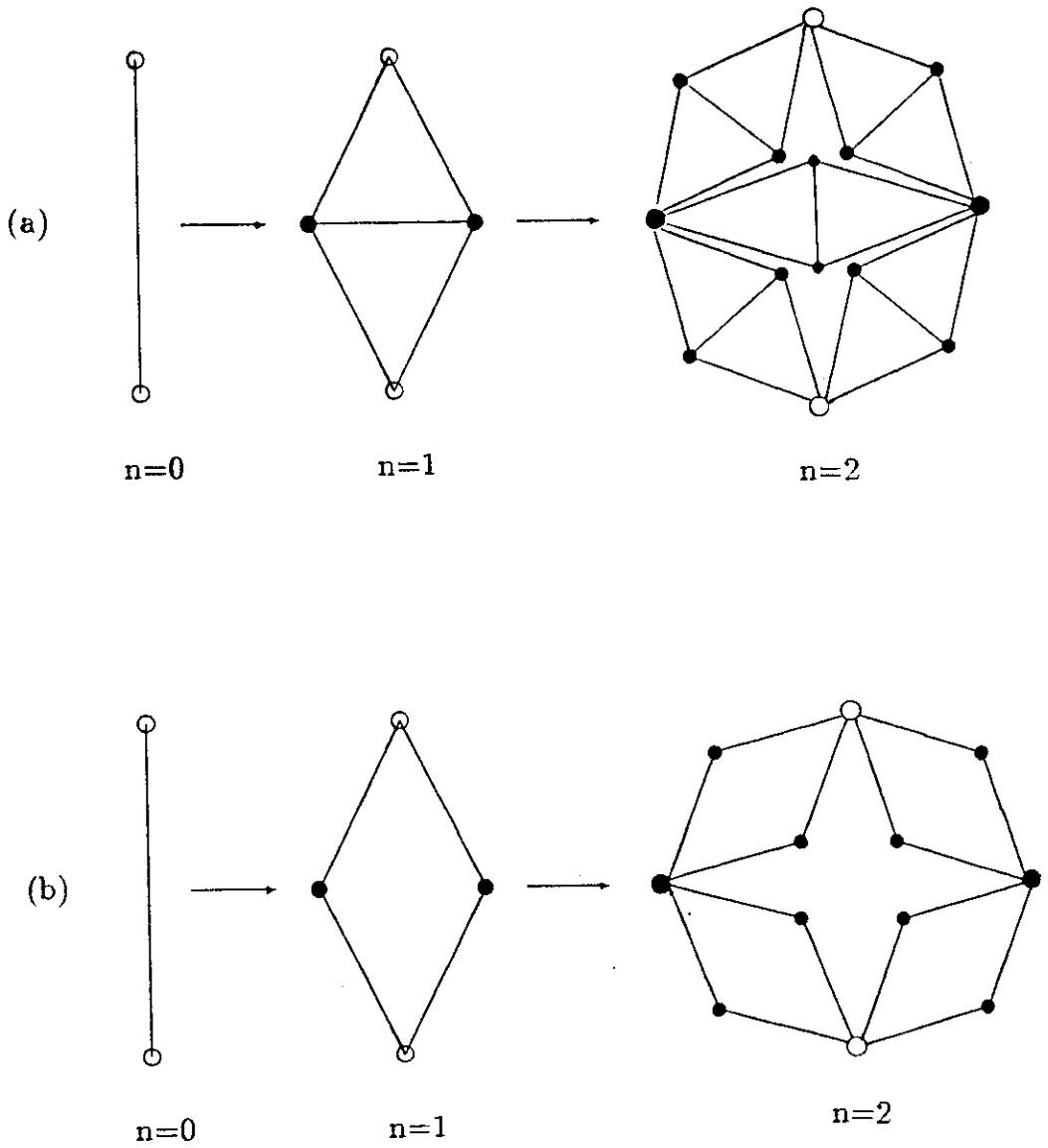


Figura 2.4: Exemplos de redes hierárquicas (a) Rede da ponte de Wheatstone, (b) Rede diamante



onde um determinado sítio se conecta, no limite termodinâmico, a um número infinito de outros sítios primeiros vizinhos. Esse tipo de característica topológica das redes hierárquicas torna difícil, senão impossível, que sistemas definidos em redes hierárquicas possam modelar um sistema físico real, como um ferromagneto natural. No entanto, as redes hierárquicas possuem a invariância de escala não trivial, que é uma simetria intrínseca aos objetos fractais. Modelos definidos em redes hierárquicas constituem uma vasta fonte de problemas exatamente solúveis que, se definidos em redes de Bravais, seriam de difícil tratamento. Esses problemas exatamente solúveis apresentam uma variedade de comportamentos críticos interessantes, fornecendo informações importantes para o estudo de sistemas com muitos graus de liberdade. Além disso, alguns formalismos de Grupo de Renormalização que fornecem resultados aproximados em redes de Bravais tornam-se exatos quando aplicados ao mesmo sistema definido em uma rede hierárquica convenientemente escolhida [47].

Dois parâmetros importantes na caracterização das redes hierárquicas são o número de agregação g , que é o número de ligações que constituem a célula básica e a distância química b entre as duas raízes da rede (as raízes de uma rede hierárquica são os sítios presentes na primeira etapa de construção), que é definida como o número de ligações contidas em um caminho mais curto entre essas duas raízes. Em termos desses parâmetros a dimensão fractal de uma rede hierárquica pode ser definida por [35]

$$d_f \equiv \frac{\ln g}{\ln b} \quad (2.11)$$

Para as redes mostradas na figura (2.4), esses parâmetros valem $g = 5$ e $b = 2$, e $g = 4$ e $b = 2$ para a rede da ponte de Wheatstone e para a rede diamante respectivamente.

2.2 Multifractais

2.2.1 Introdução

O formalismo dos multifractais está intimamente relacionado aos processos físicos cujo comportamento é determinado pela distribuição espacial de alguma quantidade escalar sobre um objeto suporte. Como exemplos podemos citar : • sistemas caóticos onde se pode definir uma probabilidade de visitação distribuída sobre as regiões de um atrator estranho [48,49,50,51], • sistemas de agregação por difusão [52] onde se pode definir uma distribuição de probabilidades sobre a superfície onde as partículas estão se agregando, fornecendo em cada ponto a probabilidade de que a próxima partícula se agregue nesse ponto, • sistemas magnéticos como os ferromagnetos de Ising [43,44,45] e de Potts [46] e vidros de spin [45] definidos em redes hierárquicas onde existe uma distribuição de magnetizações definida sobre um perfil da rede, • fluxos turbulentos [50,55] com a distribuição das regiões dissipativas, e • redes de resistores diluídos [56] e suas flutuações de resistência. Nestes sistemas, algumas regiões podem desempenhar um papel mais importante que outras no processo físico envolvido. Por exemplo, em um sistema turbulento, existem regiões de grande dissipação de energia, enquanto que em outras regiões essa dissipação praticamente não ocorre.

O conceito de medida multifractal se refere àquelas medidas que apresentam um número infinito de diferentes tipos de singularidades. O termo multifractal expressa a idéia de que esse tipo de distribuição espacial se espalha sobre o objeto suporte de tal maneira que esse se particiona em diferentes conjuntos fractais entrelaçados, cujas dimensões fractais constituem um espectro de índices que caracteriza a complexidade da estrutura resultante da combinação suporte-medida. As dimensões fractais dos diferentes conjuntos que compõem a partição definida sobre o suporte podem ser relacionadas aos diferentes tipos de singularidades presentes na distribuição da medida. Esses diferentes tipos de singularidades, por sua vez, estão relacionados à importância

que cada conjunto fractal desempenha no processo físico envolvido.

2.2.2 Caracterização de medidas multifractais

A simples atribuição de uma dimensão fractal a um objeto multifractal não é suficiente para caracterizar a sua estrutura de singularidades, havendo a necessidade de se dividir o objeto suporte sobre o qual está definida a distribuição em diferentes subconjuntos com dimensões fractais dadas em função do tipo de singularidade que neles ocorrem. Esse processo de análise será discutido à seguir.

Seja L um comprimento linear característico do objeto que serve de suporte para a distribuição escalar, suporemos que este suporte se encontra imerso em um espaço d -dimensional e chamaremos indistintamente de medida à qualquer distribuição escalar (positiva e devidamente normalizada) definida sobre este suporte. Cobrimos o volume do suporte com uma rede de caixas hiper-cúbicas d -dimensionais de lado $l \ll L$, e definimos $\epsilon = l/L$, o comprimento linear das caixas expresso em termos do comprimento do suporte. A cada caixa hiper-cúbica associamos um índice i , chamamos de P_i a porção da medida contida dentro dessa caixa e denotamos por $\{P_i\}$ o conjunto dos valores de $P_i \neq 0 \forall i$. Discutiremos aqui dois modos equivalentes de se caracterizar os objetos multifractais, o das dimensões generalizadas e o do espectro $f(\alpha)$.

2.2.2.1 Dimensões generalizadas

Definimos, a partir do conjunto da medida $\{P_i\}$, as somas

$$\chi_q(\epsilon) = \sum_i P_i^q \quad -\infty < q < \infty \quad (2.12)$$

A dimensão generalizada de ordem q , D_q [49], é definida pelo comportamento assintótico da soma $\chi_q(\epsilon)$ no limite $\epsilon \rightarrow 0$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \chi_q(\epsilon) \sim \epsilon^{(q-1)D_q} \quad . \quad (2.13)$$

Variando-se o parâmetro q de $-\infty$ a ∞ , diferentes subconjuntos de $\{P_i\}$ irão ter uma contribuição dominante sobre a soma $\chi_q(\epsilon)$; no limite $q \rightarrow \infty$ o maior dos P_i , P_{max} , contido em $\{P_i\}$ irá dominar a soma $\chi_\infty(\epsilon)$ fazendo com que D_∞ corresponda à região do suporte onde a medida está mais concentrada. No outro extremo, $q \rightarrow -\infty$, $D_{-\infty}$ corresponde à região do suporte onde a medida é mais rarefeita. Portanto o parâmetro q seleciona diferentes regiões do suporte onde está concentrada a porção da medida que irá ter uma contribuição dominante sobre a soma $\chi_q(\epsilon)$.

Para $q = 0$, a soma $\chi_q(\epsilon)$ fica

$$\chi_0(\epsilon) = \sum_i 1 = N(\epsilon) \sim \epsilon^{-d_S} \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad (2.14)$$

onde $N(\epsilon)$ é o número mínimo de caixas de lado ϵ necessárias para se cobrir todo o suporte, e portanto d_S é a dimensão fractal do suporte da medida. Pela definição dada anteriormente resulta ainda $\chi_0(\epsilon) \sim \epsilon^{-D_0}$ ($\epsilon \rightarrow 0$), e portanto

$$D_0 = d_S \quad . \quad (2.15)$$

Para um fractal comum vale $D_q = D_0 \quad \forall q$.

O comportamento assintótico de $\chi_q(\epsilon)$ para $q \rightarrow 1$ fornece

$$\chi_q(\epsilon, q \rightarrow 1) \simeq 1 + (q - 1) \sum_i P_i \ln P_i = 1 - (q - 1)S(\epsilon) \quad (2.16)$$

onde $S(\epsilon)$ é a entropia associada ao processo que gera a medida $\{P_i\}$. Usando ainda que $\chi_q(\epsilon \rightarrow 0, q \rightarrow 1) \sim \epsilon^{(q-1)D_1}$ resulta

$$D_1 \sim \frac{S(\epsilon)}{\ln 1/\epsilon} \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad . \quad (2.17)$$

A dimensão generalizada D_1 , chamada de dimensão de informação [70], mede como a entropia se escala com o $\ln(1/\epsilon)$ no limite $\epsilon \rightarrow 0$.

Portanto, a distribuição multifractal fica caracterizada pelo conjunto infinito de dimensões generalizadas $\{D_q, -\infty < q < \infty\}$, onde cada dimensão D_q está associada ao conjunto do suporte onde se localiza a porção da medida que dá a contribuição dominante para a soma χ_q .

2.2.2.2 Espectro $f(\alpha)$

Seja $N_q(\epsilon)$ o número de caixas cúbicas de lado ϵ que contém o subconjunto de $\{P_i\}$ que fornece a contribuição dominante para a soma $\chi_q(\epsilon)$. A porção do suporte contida nesse conjunto de caixas constitui um conjunto fractal com dimensão fractal f_q definida pelo comportamento assintótico

$$N_q(\epsilon) \sim \epsilon^{-f_q} \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad . \quad (2.18)$$

Se todas as N_q caixas contribuem igualmente para a soma χ_q , todas essas caixas devem ter aproximadamente uma mesma medida $P_i = P_q$ que independe do índice i . Definimos o expoente de Hölder, α_q , que caracteriza o tipo de singularidade nesse conjunto por

$$P_q \sim \epsilon^{\alpha_q} \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad . \quad (2.19)$$

A eliminação do parâmetro q no par f_q e α_q fornece o espectro $f(\alpha)$ da medida multifractal [53,54].

Para $q = 0$, vale $\chi_0(\epsilon) = N(\epsilon)$, logo

$$f_0 = d_S \quad (2.20)$$

onde d_S é a dimensão fractal do suporte da medida. Além disso, resulta $f_q \leq f_0 \quad \forall q$, já que nenhum subconjunto do suporte pode ter dimensão fractal maior que o próprio suporte. O espectro $f(\alpha)$ deve ser, portanto, uma função côncava para baixo, definida entre os extremos α_∞ e $\alpha_{-\infty}$ e com um valor máximo $f_{max} = d_S$.

A medida multifractal fica, dentro deste contexto, caracterizada pelo espectro $f(\alpha)$ que relaciona as diferentes intensidades de singularidades α_q com as dimensões fractais f_q dos subconjuntos do suporte que contém estas singularidades.

Na figura 2.5 mostramos a distribuição de uma medida sobre o intervalo $[0,1]$ seguindo o processo de se dividir inicialmente esse intervalo em três partes iguais de comprimento 3^{-1} e distribuir de maneira homogênea uma fração P da medida no intervalo central e

uma fração $1 - P$ nos intervalos dos extremos. No próximo passo cada subintervalo é dividido em três intervalos de comprimento 3^{-2} , sendo redistribuída a medida em cada intervalo de maneira análoga àquela do primeiro passo. Assim, no primeiro passo, o intervalo central concentrará uma medida P (um retângulo de altura $3P$) e cada intervalo dos extremos por sua vez, concentrará uma medida $(1 - P)/2$ (um retângulo de altura $3(1 - P)/2$). No segundo passo o intervalo central concentrará uma medida P^2 (um retângulo de altura $3^2 P^2$) e assim por diante. Repetindo esse processo um número infinito de vezes geramos uma medida multifractal distribuída sobre um suporte de dimensão $d_S = 1$.

2.2.3 Relação entre o espectro $f(\alpha)$ e as dimensões generalizadas D_q

O espectro $f(\alpha)$ e o espectro de dimensões generalizadas D_q podem ser obtidos, um a partir do outro, através de uma transformada de Legendre. Essa conexão pode ser demonstrada como segue :

No formalismo do espectro $f(\alpha)$ a soma χ_q é dada por

$$\chi_q(\epsilon) = N_q(\epsilon) P_q^q \sim \epsilon^{-f_q} \epsilon^{q\alpha_q} \quad . \quad (2.21)$$

Portanto, como pela definição da dimensão generalizada D_q , vale também $\chi_q(\epsilon) \sim \epsilon^{(q-1)D_q}$, segue que

$$(q - 1)D_q = q\alpha_q - f_q \quad (2.22)$$

Por outro lado, considerando α como uma variável contínua, podemos escrever o comportamento assintótico da soma χ_q para $\epsilon \rightarrow 0$ por

$$\chi_q(\epsilon) \sim \int \epsilon^{q\alpha - f(\alpha)} d\alpha \quad (\epsilon \rightarrow 0) \quad (2.23)$$

A integral na expressão acima será dominada pelo integrando avaliado em α_q que satisfaz à condição

$$\frac{d}{d\alpha}(q\alpha - f(\alpha)) \Big|_{\alpha_q} = 0 \Rightarrow \frac{df(\alpha)}{d\alpha} \Big|_{\alpha_q} = q \quad (2.24)$$

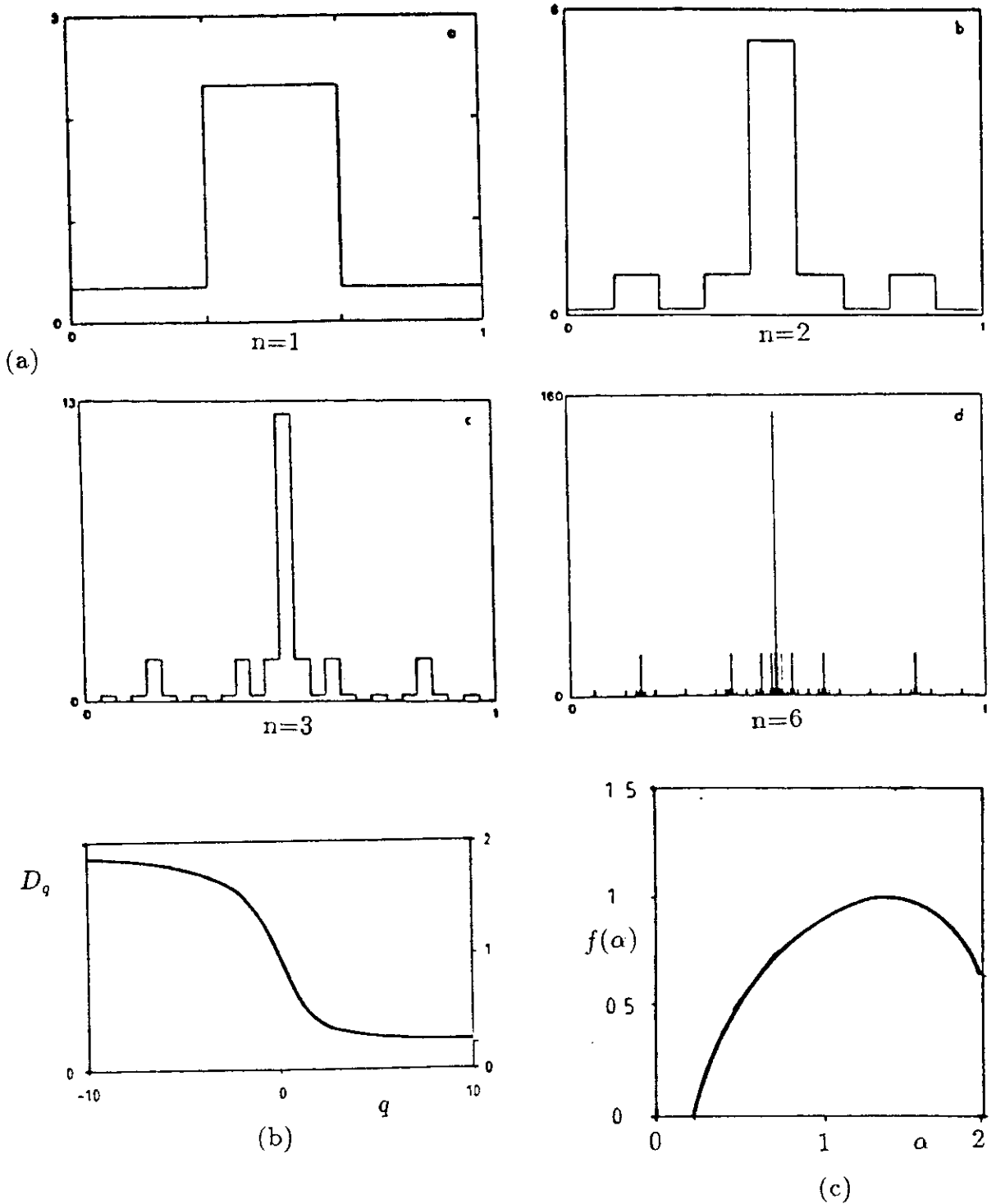


Figura 2.5: Medida Binomial (com $P=0,772$) como exemplo de medida multifractal definida sobre um suporte unidimensional. Na figura (a) mostramos as primeiras etapas da construção da medida sobre o intervalo $[0,1]$. Nas figuras (b) e (c) mostramos o conjunto de dimensões generalizadas D_q e o espectro $f(\alpha)$ que caracterizam a multifractalidade desta medida.

que minimiza o expoente de ϵ nesse integrando. Considerando ainda que $f_q = f(\alpha_q)$, derivando a equação (2.22) em relação à q e usando a equação (2.24) resulta

$$\frac{d}{dq}(q-1)D_q = \alpha_q + q \frac{d\alpha_q}{dq} - \frac{df_q}{dq} = \alpha_q + q \frac{d\alpha_q}{dq} - \frac{df(\alpha_q)}{d\alpha_q} \frac{d\alpha_q}{dq} = \alpha_q \quad (2.25)$$

Portanto, dado o espectro D_q , passamos da variável q para a variável α realizando a transformada de Legendre

$$\begin{cases} \alpha_q = -\frac{d}{dq}(1-q)D_q \\ f(\alpha_q) = (1-q)D_q - q \frac{d}{dq}(1-q)D_q = (1-q)D_q + q\alpha_q \end{cases} \quad (2.26)$$

No sentido inverso, dado o espectro $f(\alpha)$, passamos da variável α para a variável q , pela transformação

$$\begin{cases} q = \frac{df(\alpha)}{d\alpha} |_{\alpha_q} \\ (1-q)D_q = f(\alpha_q) - \alpha_q \frac{df(\alpha)}{d\alpha} |_{\alpha_q} = f(\alpha_q) - q\alpha_q \end{cases} \quad (2.27)$$

2.2.4 Método direto de determinação do espectro $f(\alpha)$

A determinação do espectro $f(\alpha)$ a partir de uma determinada medida $\{P_i\}$ distribuída sobre um objeto suporte pode ser efetuada de diversas maneiras. Uma alternativa é calcular o conjunto de dimensões generalizadas $\{D_q\}$ para um determinado conjunto de valores do parâmetro q e, a partir de uma curva suave de $(1-q)D_q$ contra q efetuar uma transformada de Legendre, conforme discutido anteriormente.

Uma segunda alternativa é calcular para cada $P_i \in \{P_i\}$ o expoente de Hölder

$$\alpha_i = \frac{\ln P_i}{\ln \epsilon} \quad (2.28)$$

e determinar através de uma contagem direta, quantas caixas de lado ϵ possuem o expoente de Hölder no intervalo entre α e $\alpha + d\alpha$, esse número é identificado com $N(\alpha)$ e então

$$f(\alpha) = \frac{\ln N(\alpha)}{\ln(1/\epsilon)} \quad (2.29)$$

Chhabra e Jensen [57,58] desenvolveram um método de determinação do espectro $f(\alpha)$ que tem se mostrado bastante preciso e de rápida computação. Nesse método definimos uma família de medidas $\{\{\mu(q)\}\}$, sendo que na medida $\{\mu(q)\}$, a medida local na caixa de índice i é definida por

$$\mu_i(q) = \frac{P_i^q}{\sum_i P_i^q} \quad (2.30)$$

Em geral uma medida distribuída sobre um objeto suporte se concentra em um único subconjunto do suporte chamado *suporte teórico da medida*, ou seja

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_i P_i^{(ST)} = 1 \quad (2.31)$$

onde $\{P_i^{(ST)}\}$ denota a medida contida sobre o suporte teórico da medida. A dimensão do conjunto suporte teórico da medida $\{P_i\}$ é dada pela dimensão de informação [71]

$$d_I = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_i P_i \ln P_i}{\ln \epsilon} \quad (2.32)$$

que já identificamos com a dimensão generalizada D_1 . Neste novo método de computação do espectro $f(\alpha)$ define-se f_q pela dimensão do suporte teórico que concentra a medida $\{\mu(q)\}$

$$f_q = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_i \mu_i(q) \ln \mu_i(q)}{\ln \epsilon} \quad (2.33)$$

enquanto que o expoente de Hölder α_q é definido pelo valor médio do expoente de Hölder α_i ($P_i \sim \epsilon^{\alpha_i}$) com respeito à medida $\{\mu(q)\}$

$$\alpha_q = \langle \alpha \rangle_{\mu_q} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\sum_i \mu_i(q) \ln P_i}{\ln \epsilon} \quad (2.34)$$

Portanto, podemos resumir este método pelo simples algoritmo dado abaixo :

1. Partindo-se da medida original $\{P_i\}$ define-se, para um determinado conjunto de valores do parâmetro q , a família de medidas $\{\mu_i(q)\}$.
2. Realiza-se as somas $\sum_i \mu_i(q) \ln \mu_i(q)$ e $\sum_i \mu_i(q) \ln P_i$.

3. Os dois passos acima devem ser realizados para diferentes valores do comprimento da caixa ϵ . Plotando essas somas em função de $\ln \epsilon$, resulta em retas cujas declividades fornecerão as variáveis f_q e α_q .
4. A eliminação do parâmetro q entre essas variáveis fornece o espectro $f(\alpha)$.

Esse procedimento será ilustrado quando calcularmos o espectro $f(\alpha)$ na distribuição de magnetizações locais no sistema aqui estudado.

Capítulo 3

Antiferromagneto de Potts em uma Rede Fractal : Estudo de uma Fase Não Usual

3.1 Introdução

Nesse capítulo estudamos um sistema que apresenta uma fase não usual com decaimento algébrico das correlações, conforme proposto por Berker e Kadanoff [6]. Iniciamos fazendo uma digressão sobre o trabalho original de Berker e Kadanoff onde essa fase foi originalmente proposta. Após essa discussão, definimos o sistema por nós estudado, qual seja, o antiferromagneto de Potts (AFP) definido em uma Rede Hierárquica (RH) bipartida. A escolha da RH por nós utilizada está justificada na seção 3.4, onde exibimos, variando a dimensão fractal da RH, o surgimento de um ponto fixo atrator da renormalização que está associado à fase não usual. Na seção 3.5 demonstramos o decaimento algébrico, ao longo da fase não usual, das correlações entre os spins locali-

zados nas raízes da rede. Calculamos também o expoente crítico η_{AF} associado a esse decaimento.

Nas seções seguintes, estudamos diversas grandezas associadas ao sistema. Iniciamos por obter equações de recorrência exatas que nos permitem definir a magnetização local de cada sítio da rede em qualquer hierarquia e temperatura. Dessa forma, obtemos uma expressão exata para o parâmetro de ordem do sistema e estudamos seu comportamento com a variação da temperatura e da hierarquia da rede. A distribuição de magnetizações locais definida sobre um caminho mais curto entre as raízes da rede apresenta, conforme demonstramos na seção 3.8, um caráter multifractal. Os espectros $f(\alpha)$ dessa distribuição na temperatura crítica e na temperatura do atrator da fase não usual são obtidos.

A energia interna, o calor específico e a entropia do sistema são obtidas nas seções 3.9, 3.10 e 3.11. Essas funções termodinâmicas são calculadas analiticamente, sendo expressas como funções da temperatura. Finalmente, na seção 3.12, fazendo uso de expoentes críticos exatos obtidos nas seções anteriores (que nos permitiram verificar a validade da relação de hiperescala), e supondo válidas as relações de escala de Fisher e de Rushbrooke, obtemos o expoente η_c associado ao decaimento algébrico das correlações na temperatura crítica do sistema.

3.2 Origem da Fase não Usual

A idéia de uma fase não usual a baixas temperaturas onde o comprimento de correlação é infinito, e portanto onde a função de correlação decai algebricamente com a distância, foi primeiro apresentada por Berker e Kadanoff [6]. Segundo esses autores, sistemas com estado fundamental complexo, ou seja, sistemas com entropia por partícula à temperatura nula diferente de zero, podem apresentar essa fase não usual a baixas temperaturas. Uma outra característica dessa fase é que o ordenamento do sistema, caso exista,

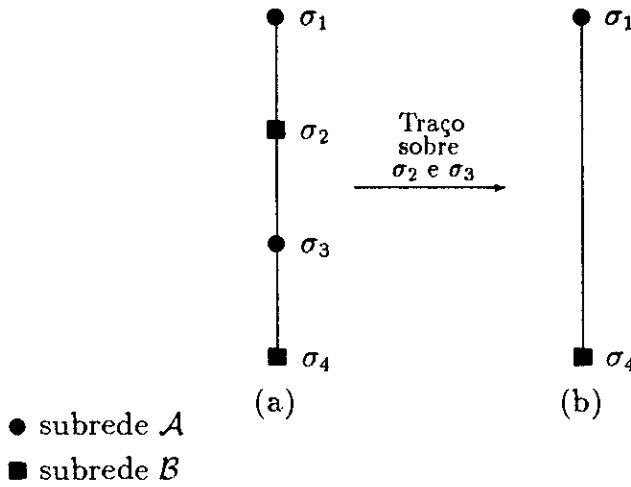


Figura 3.1: Quatro sítios destacados de uma rede hipercúbica. Os sítios σ_1 e σ_3 (σ_2 e σ_4) estão na subrede \mathcal{A} (\mathcal{B}). As outras ligações desses sítios com o restante da rede não são mostradas.

deve ser não trivial. Berker e Kadanoff verificaram esse tipo de comportamento no modelo de Potts com acoplamento antiferromagnético (AF) definido em redes hipercúbicas. Para esse fim, eles utilizaram a aproximação de Migdal-Kadanoff [72] em um Grupo de Renormalização (GR) a um parâmetro, cuja transformação apresenta um ponto fixo atrator localizado à uma temperatura finita (não nula). O surgimento desse ponto fixo atrator pode ser entendido conforme o esquema que apresentaremos a seguir.

Suporemos o AFP com q estados definido em uma rede hipercúbica com N sítios. Essa rede possui a propriedade de ser bipartida, ou seja, pode ser dividida em duas subredes que se interpenetram, subrede \mathcal{A} e subrede \mathcal{B} , de tal forma que os $N/2$ sítios de uma subrede possuam como primeiros vizinhos somente sítios da outra subrede. Na figura (3.1-a) isolamos quatro sítios dessa rede dispostos como em uma cadeia linear. As ligações desse sítios com o restante da rede não serão levadas em conta neste raciocínio, fato esse que não alterará qualitativamente nossas conclusões.

Nessa figura mostramos também o resultado de um procedimento de GR (dizimação) que, através de um traço parcial sobre $N/2$ sítios da rede, resulta em uma rede renormalizada com apenas $N/2$ sítios. Essa transformação, aplicado aos quatro spins mostrados, transforma os spins σ_1 e σ_4 em primeiros vizinhos (fig. (3.1-b)).

O acoplamento entre spins primeiros vizinhos em um AFP requer que, à temperatura

nula, esses estejam em estados diferentes. Para os quatro spins mostrados na figura (3.1-a) e para valores fixos de σ_1 e σ_4 existem $N_I = (q-1)(q-2)$ configurações que admitem $\sigma_1 = \sigma_4$, e $N_D = 1 + (q-1)(q-2)$ configurações que admitem $\sigma_1 \neq \sigma_4$, para um sistema com q estados.

Consideremos o caso $q = 2$ (modelo de Ising). Das definições dadas acima, vemos que $N_I = 0$ e $N_D = 1$. Esse caso é um exemplo de sistema com entropia residual (entropia por partícula à temperatura nula) igual a zero, já que só existem duas configurações possíveis no estado fundamental: todos os spins da subrede \mathcal{A} no estado '0' e todos os spins da subrede \mathcal{B} no estado '1' ou vice-versa. Concluimos que para esse sistema, a temperatura nula é um ponto fixo da renormalização, pois spins que se tornam primeiros vizinhos após a renormalização têm probabilidade zero de estarem no mesmo estado, continuando, portanto, a respeitar o critério do estado fundamental.

Consideremos agora o caso $q > 2$. Esses sistemas apresentam entropia residual não nula graças ao número infinito de configurações possíveis que satisfazem ao critério do estado fundamental. Voltando à figura (3.1) vemos que a temperatura nula não é mais um ponto fixo da renormalização, pois agora os spins σ_1 e σ_4 se tornam primeiros vizinhos com probabilidade não nula de estarem no mesmo estado. Após a renormalização, o sistema ainda possui um caráter AF pois a probabilidade de que este assuma uma configuração com $\sigma_1 \neq \sigma_4$ é maior que a probabilidade para $\sigma_1 = \sigma_4$, mas não está mais à temperatura nula onde necessariamente deve valer $\sigma_1 \neq \sigma_4$.

Os diagramas de fluxo de renormalização para os dois casos citados anteriormente são mostrados na figura (3.2). Para o caso do sistema com entropia residual nula (fig. (3.2-a)), existe uma dimensão crítica d_c , acima da qual o sistema apresenta dois pontos fixos atratores e um ponto fixo repulsor (ponto crítico C). Um ponto fixo atrator está a temperatura infinita e corresponde à fase paramagnética do sistema (ponto P). O outro ponto fixo atrator está à temperatura zero e corresponde à fase AF do sistema, onde

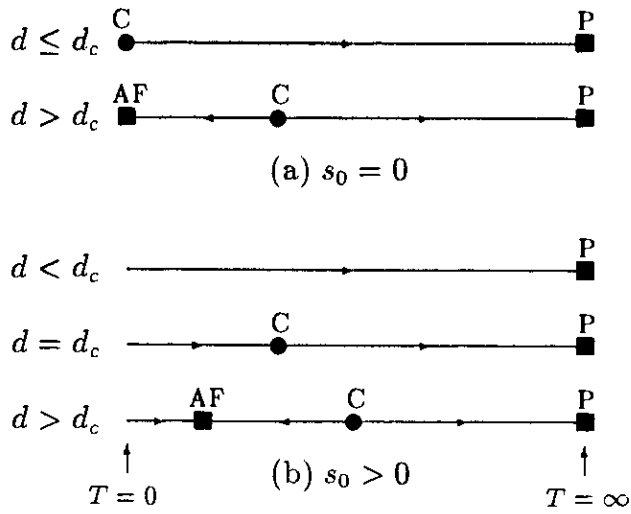


Figura 3.2: Diagramas de fluxos para os casos de (a) entropia residual nula ($s_0 = 0$) e (b) entropia residual não nula ($s_0 \neq 0$).

spins primeiros vizinhos estão em estados diferentes (ponto AF). Para o caso de entropia residual não nula (fig. (3.2-b)), existe uma dimensão crítica abaixo da qual o sistema só apresenta a fase paramagnética (ponto P), como no caso anterior. Aumentando a dimensão do sistema aumenta-se também a conectividade entre spins distantes, o que acarreta uma diminuição no número total de configurações do estado fundamental. Assim, acima da dimensão crítica, o fluxo de renormalização apresenta dois pontos fixos atratores, um correspondendo à fase paramagnética e o outro (ponto AF) localizado à uma temperatura finita (não nula) correspondendo à uma fase não usual a baixas temperaturas.

Durante o processo de renormalização o comprimento de correlação ξ se transforma como $\xi' = \xi/b$ onde ξ' é o comprimento de correlação da rede renormalizada e b é o fator de renormalização para os comprimentos. Portanto, em um ponto fixo da renormalização deve valer $\xi = 0$ ou $\xi = \infty$. O primeiro caso ($\xi = 0$) é geralmente associado à temperatura infinita e à temperatura zero onde os spins estão sem correlação entre si. O segundo caso ($\xi = \infty$) é geralmente associado à temperatura crítica do sistema onde este fica sujeito a violentas flutuações de longo alcance. Na fase não usual dominada pelo atrator AF o sistema visita as diferentes configurações nas quais spins primeiros vizinhos têm maior probabilidade de estarem em estados diferentes, ficando

sujeito a flutuações análogas às aquelas que ocorrem em um ponto crítico. Ao longo de toda essa fase o comprimento de correlação é infinito e a função de correlação decai algebricamente com a distância com um expoente η determinado no ponto fixo AF.

Esse trabalho de Berker e Kadanoff originou um grande interesse no estudo do AFP com $q > 2$. Em particular, uma questão que tem sido mais abordada é a que se refere ao ordenamento dos spins na fase não usual a baixas temperaturas. No AFP com $q = 3$ definido nas redes quadrada e cúbica, essa questão tem sido abordada por diferentes métodos com predominância do método Monte Carlo (MC). Para o caso da rede quadrada, vários trabalhos [9,11,12,13,17,22] indicam que o sistema não apresenta uma fase a baixas temperaturas, estando a temperatura crítica T_c em $T = 0$. No caso da rede cúbica, vários trabalhos fornecem uma temperatura crítica não nula [7,15,16,18,20,21,22,24], abaixo dessa temperatura crítica, as simulações MC [7,16,21,22,24] sugerem a existência de uma fase ordenada. O tipo de ordenamento nessa fase recebeu o nome de BSS (do inglês *Broken Sublattice Symmetry*) (quebra de simetria de subrede) e consiste em uma distribuição dos estados em que uma subrede tem a maioria dos spins no estado '0' enquanto que a outra subrede tem igualmente distribuídos os estados '1' e '2'. Os resultados de MC para o caso da rede cúbica não se mostram conclusivos com respeito à afirmação da existência de uma fase do tipo Berker e Kadanoff. A questão do ordenamento a baixas temperaturas apresenta resultados discordantes. Em particular, I. Ono [18] defende que o sistema não apresenta nenhum ordenamento a baixas temperaturas. A questão do decaimento algébrico das correlações é raramente abordada nestes trabalhos. Wang et al [22] sugerem fortemente que, apesar de haver ordem de longo alcance, o comprimento de correlação diverge ao longo de toda a fase a baixas temperaturas, chamando atenção para o fato de que essa conclusão necessita de maiores esclarecimentos.

Para o caso do AFP definido em redes fractais, existem trabalhos usando GR que

indicam a presença de um ponto fixo atrator à uma temperatura finita (não nula), como fora sugerido por Berker e Kadanoff. Nos fractais Sierpinski carpet e Sierpinski pastry shell [27], as transformações de GR a dois parâmetros na aproximação de Migdal e Kadanoff (que não é exata nessas redes) exibem um ponto fixo atrator não usual. Nas redes hierárquicas tipo diamante [28], as transformações de GR são exatas e exibem também um ponto fixo atrator não usual para uma dimensão fractal acima de uma dimensão crítica $d_c(q)$ dependente do número de estados q . No fractal Sierpinski gasket, o modelo de Ising AF, devido à frustração, apresenta entropia residual não nula. Para esse sistema [29] as transformações de GR exatas também exibem um atrator não usual. Nesse trabalho, os autores demonstraram exatamente que a função de correlação decai algebricamente com a distância ao longo de toda a fase a baixas temperaturas. Em nenhum desses trabalhos em fractais, a fase associada ao atrator não usual foi estudada em detalhe. Nesse nosso trabalho, estudamos um sistema em uma rede fractal onde exibimos o surgimento do ponto fixo atrator não usual e, com o intuito de caracterizar a existência de uma fase do tipo Berker e Kadanoff, estudamos diversas grandezas termodinâmicas associadas à fase correspondente a esse atrator.

3.3 O Modelo

Estudaremos o AFP com três estados em uma RH bipartida, do tipo Migdal-Kadanoff, construída recursivamente partindo-se de uma única ligação. Cada hierarquia da rede é obtida a partir da hierarquia anterior substituindo-se cada ligação desta última pela célula básica constituída de dez ramos em paralelo, cada ramo sendo constituído de três ligações em série, conforme mostrado na figura (3.3). A nossa escolha da célula básica, como será discutido na próxima seção, está associada à dimensão crítica necessária para o surgimento do ponto fixo atrator AF da renormalização à uma temperatura finita (não nula). No limite termodinâmico (hierarquia $\rightarrow \infty$) este processo de construção da

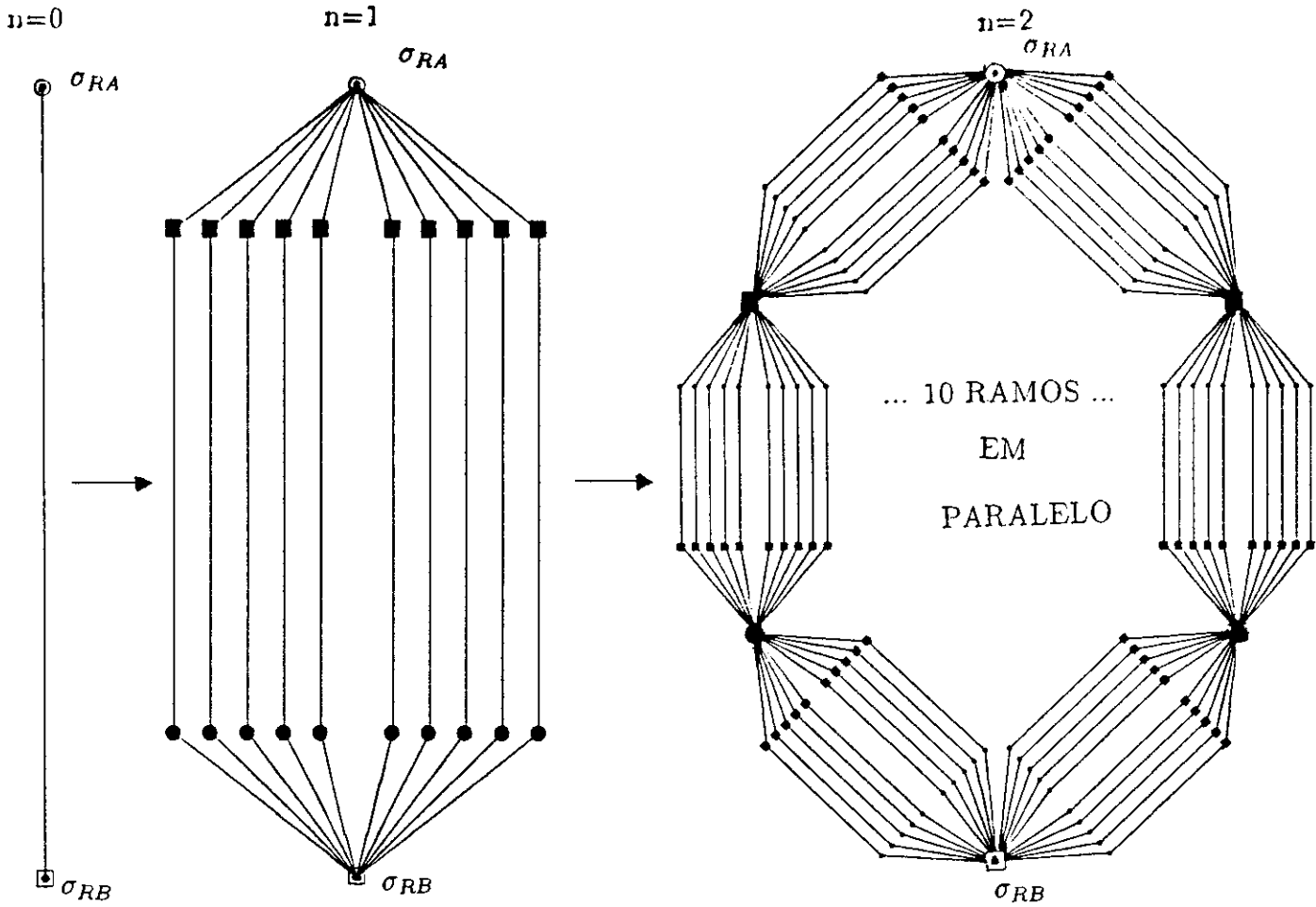


Figura 3.3: Primeiros passos de construção da rede hierárquica. Os sítios da subrede A (B) estão representados por círculos (quadrados). Os dois sítios σ_{RA} e σ_{RB} presentes na hierarquia zero são as raízes da rede hierárquica.

rede hierárquica, resulta, conforme a equação (2.11), em uma rede de dimensão fractal d_f dada por

$$d_f = \frac{\ln 30}{\ln 3} = 3,095 \dots \quad (3.1)$$

Além de possuir a propriedade de invariância de escala, característica das redes hierárquicas, esta rede possui ainda a propriedade de ser bipartida em qualquer hierarquia. Essa propriedade, como veremos mais adiante, é importante para o estudo de um sistema de spins antiferromagnético.

Definimos o modelo em estudo associando-se a cada sítio s_i da RH uma variável de Potts σ_i que pode assumir três estados, que convencionaremos chamar de estados 0, 1 e 2. Spins primeiros vizinhos em uma hierarquia n interagem entre si com acoplamento

antiferromagnético $J_n < 0$, sendo o Hamiltoniano do sistema nessa hierarquia definido por

$$-\beta\mathcal{H}_n = 3K_n \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \quad (K_n \equiv J_n/k_B T) \quad (3.2)$$

onde a soma em $\langle i, j \rangle$ é somente sobre sítios primeiros vizinhos, T é a temperatura absoluta do sistema e $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$ é a função delta de Kronecker.

3.4 Escolha da Célula Básica e o Atrator AF

A nossa escolha da célula básica da RH foi determinada pelas condições necessárias para que o sistema apresente uma fase não usual para um número de estados de Potts inteiro e maior que dois. O AFP com $q = 3$ definido em uma rede bipartida é o caso mais simples com entropia residual não nula. A RH onde esse sistema será definido deve possuir uma dimensão fractal acima da dimensão crítica necessária para o surgimento da fase não usual com decaimento algébrico das correlações. Em redes fractais do tipo diamante podemos variar a dimensão fractal de diferentes maneiras : variando-se o número de ramos na célula básica e/ou o número de ligações em cada um desses ramos. Conforme o trabalho de Qin e Yang [28], variando-se esses parâmetros, para um número de estados de Potts fixo, podemos atingir a dimensão crítica para o AFP definido nessas redes a partir da qual surge uma fase não usual caracterizada, em termos do GR, por um ponto fixo atrator à uma temperatura finita não nula.

No nosso problema adotamos, a priori, uma rede cuja célula básica possui ramos constituídos de três ligações em série, visto ser esse o caso mais simples que resultará em uma rede bipartida sem ambigüidade (i.e. uma rede onde um dado sítio pertence sempre à mesma subrede qualquer que seja a hierarquia). Assim, podemos variar a dimensão fractal da rede mudando o número de ramos em paralelo que compõem a célula básica. Para isto vamos considerar uma rede análoga àquela definida na última seção, com a diferença de que consideraremos a célula básica com P ramos em paralelo

ao invés de dez como fora definido. Neste caso, no limite termodinâmico, resulta numa rede com dimensão $d_f(P)$, dependente do parâmetro P , dada por

$$d_f(P) = \frac{\ln(3P)}{\ln 3} . \quad (3.3)$$

Portanto, ajustando-se o parâmetro P , podemos variar a dimensão fractal da rede. O caso $P = 10$ refere-se à rede definida na primeira seção, com a qual iremos trabalhar durante a maior parte desta tese.

Para analisar o diagrama de fases do sistema estudado, iniciamos por definir, por conveniência, a transmissividade térmica $t(K)$ entre spins primeiros vizinhos [73] dada por

$$t(K) \equiv \frac{1 - e^{-3K}}{1 + 2e^{-3K}} . \quad (3.4)$$

Nessa variável, o intervalo de temperaturas $[0, \infty)$ fica reduzido ao intervalo $[-1/2, 0]$: $T = 0$ corresponde a $t = -1/2$ e $T = \infty$ a $t = 0$.

Analogamente, para uma dada hierarquia n definimos t_n , a transmissividade de uma ligação da RH nessa hierarquia, por

$$t_n \equiv \frac{1 - e^{-3K_n}}{1 + 2e^{-3K_n}} . \quad (3.5)$$

O diagrama de fases do sistema é obtido a partir da transformação de grupo de renormalização resultante da eliminação, através de um traço parcial, dos spins internos da célula básica da rede hierárquica. Dessa forma, partimos da célula básica com $3P$ ligações com acoplamento K , ou equivalentemente com transmissividade t , e obtemos, eliminando os graus de liberdade internos, uma única ligação com acoplamento K' , ou transmissividade t' . Impomos a condição de que a função de correlação entre as raízes da rede σ_{RA} e σ_{RB} seja preservada, o que equivale a impor [74]

$$Tr_{\{\sigma_i\}} \exp(\mathcal{H}(t, \sigma_{RA}, \sigma_{RB}, \{\sigma_i\})) = A \exp(\mathcal{H}'(t', \sigma_{RA}, \sigma_{RB})) , \quad (3.6)$$

onde \mathcal{H} é o Hamiltoniano do sistema na hierarquia 1 (célula básica), \mathcal{H}' é o Hamiltoniano do sistema na hierarquia 0 (uma ligação), σ_{RA} e σ_{RB} são os spins das raízes da rede,

$\{\sigma_i\}$ representa o conjunto de spins internos (distintos das raízes) que compõem a célula básica e A é uma constante. Usando a equação (3.6), obtemos a transformação que fornece a transmissividade renormalizada t' em função da transmissividade original t

$$t'(t) = \frac{1 - \left[\frac{1-t^3}{1+2t^3} \right]^P}{1 + 2 \left[\frac{1-t^3}{1+2t^3} \right]^P} . \quad (3.7)$$

Assim, partindo de uma dada hierarquia n , cujas ligações possuem transmissividade t_n , as transmissividades das hierarquias anteriores podem ser obtidas a partir da transformação $t'(t)$, sendo dadas por $t_{n-1} = t'(t_n)$, $t_{n-2} = t'(t_{n-1}) = t^{(2)}(t_n)$, e assim sucessivamente até restar apenas uma ligação com $t_0 = t^{(n)}(t_n)$. A transmissividade t_0 é denominada transmissividade equivalente entre as raízes da rede, denotada por t_{AB}^{eq} [74]. Essa, como veremos na próxima seção, está diretamente relacionada à função de correlação entre as raízes da rede.

O diagrama de fases do sistema fica então definido a partir dos pontos fixos t^* da transformação $t'(t)$, $t^* = t'(t^*)$. Na figura (3.4) mostramos o fluxo de renormalização no espaço $t' \times t$ para dois diferentes valores do parâmetro P , $P = 9$ e $P = 10$, ilustrando o surgimento do atrator AF. Somente nesse parágrafo usaremos a notação t_{SUB}^{SUP} onde SUB=p (de paramagnético), c (de crítico) ou AF (de antiferromagnético) e SUP=(9) (para a rede com P=9) ou (10) (para a rede com P=10); nas próximas seções, quando nos concentrarmos no caso P=10, usaremos apenas os subíndices c e AF para t_c e t_{AF} . Para $P = 9$, ou seja $d_f = 3$, o único ponto fixo da renormalização é $t_p^{(9)} = 0$ ($T = \infty$) e portanto o sistema é paramagnético para todas as temperaturas. Para $P = 10$ e portanto $d_f = 3,095\dots$, os pontos fixos são $t_p^{(10)} = 0$ correspondendo ao atrator da fase paramagnética, $t_c^{(10)} = -0,390\dots$ ($k_B T/3 \mid J \mid = 0,54\dots$) correspondendo ao ponto crítico do sistema e $t_{AF}^{(10)} = -0,477\dots$ ($k_B T/3 \mid J \mid = 0,28\dots$) que é um ponto fixo atrator à uma temperatura finita não nula e corresponde à fase AF (chamaremos essa fase a baixas temperaturas de fase "antiferromagnética" (AF) embora esta não apresente ordem de longo alcance conforme veremos na seção 3.7) não usual prevista por Berker e

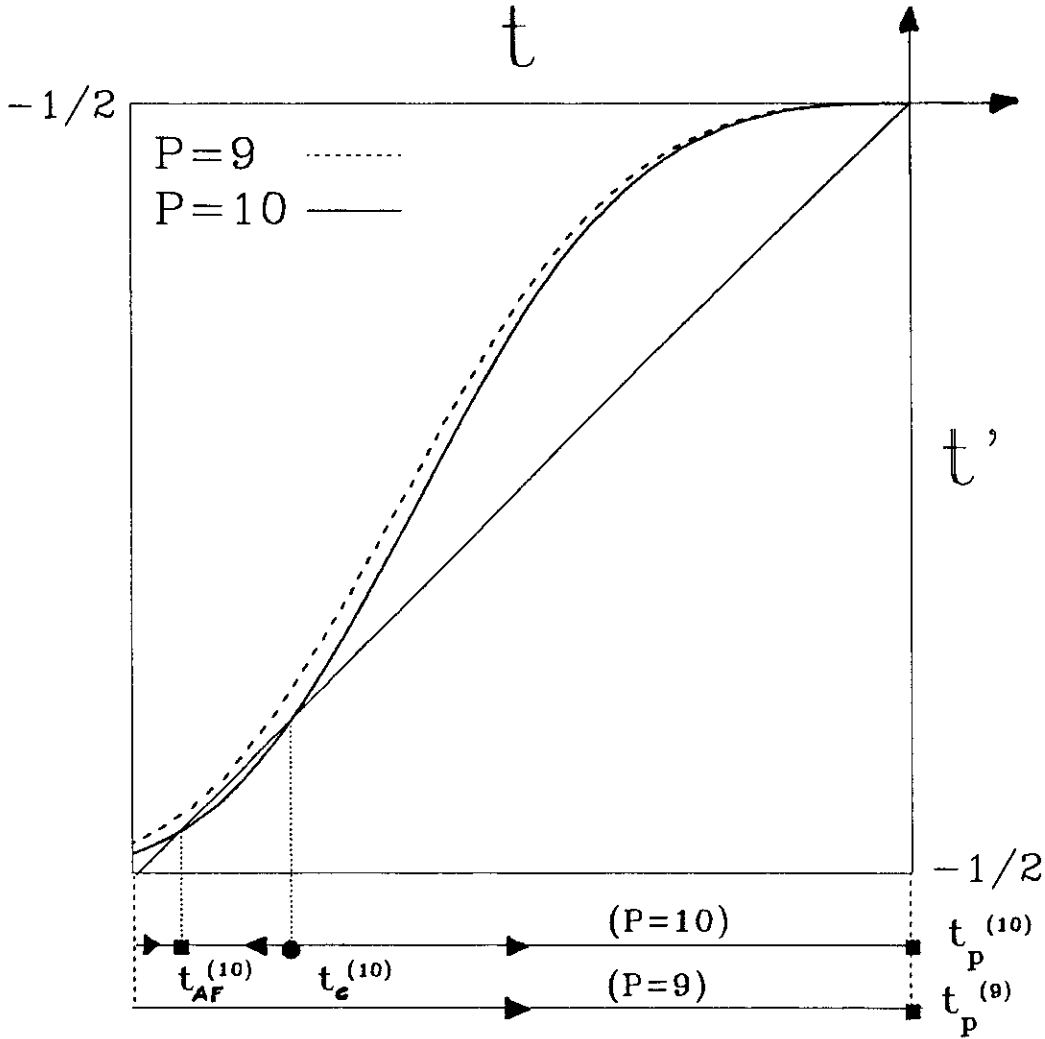


Figura 3.4: Plano $t' \times t$ e diagramas de fase para as redes com $P = 9$ e $P = 10$ mostrando o surgimento do atrator antiferro à uma temperatura finita não nula.

Kadanoff. Vemos portanto que a dimensão crítica $d_c(3)$ para o AFP com 3 estados nesse tipo de rede está dentro do intervalo delimitado pelos valores 3 e 3,095. Essa dimensão crítica pode ser obtida exatamente resolvendo-se o sistema de equações $t^* = t'(t^*)$ e $dt'/dt|_{t^*} = 1$ (com $t'(t)$ dado pela extensão analítica de (3.7) para valores reais de P) cujas incógnitas são t^* (a temperatura crítica) e P . Para o nosso sistema, essas equações fornecem $P = 9,25 \dots$ (o que corresponde a $d_c(3) = 3,025 \dots$) e $t^* = -0,443 \dots$. Para dimensões maiores que $d_c(3)$, ou seja, se aumentarmos o valor de P , o atrator $t_{AF}^{(P)}$ tende a $-1/2$, isto é, a temperatura do atrator AF tende à temperatura zero, enquanto que o ponto crítico $t_c^{(P)}$ tende a zero, ou seja, a temperatura crítica tende a infinito. Vamos

daqui por diante nos concentrar no caso $P = 10$, que é aquele onde o atrator AF está mais separado de $t = -1/2$ no diagrama de fases. Vale notar neste diagrama de fluxos que a temperatura nula, que corresponde a $t = -0,5$, não é um ponto fixo da renormalização, sendo renormalizada sucessivamente em direção ao atrator t_{AF} a medida que aplicamos a transformação $t'(t)$.

O expoente crítico ν associado ao comportamento do comprimento de correlação ξ na vizinhança da temperatura crítica

$$\xi_n \sim (\delta t_n)^{-\nu} \quad , \quad (3.8)$$

onde ξ_n é o comprimento de correlação na hierarquia n e $\delta t_n = t_n - t_c$, pode ser obtido diretamente da transformação de renormalização $t_{n-1}(t_n)$, a saber

$$3 = \frac{\xi_n}{\xi_{n-1}} = \left(\frac{\delta t_n}{\delta t_{n-1}} \right)^{-\nu} \quad . \quad (3.9)$$

Portanto

$$\nu = \frac{\ln 3}{\ln r_c} \quad , \quad (3.10)$$

onde definimos $r_c \equiv dt'/dt|_{t_c} = 1,49\dots$, resultando finalmente em $\nu = 2,75\dots$

3.5 Decaimento Algébrico das Correlações

Conforme já discutimos anteriormente, na fase AF o sistema fica sujeito a flutuações análogas as que ocorrem em um ponto crítico. O comprimento de correlação diverge ao longo de toda a fase e a função de correlação entre spins decai algebricamente com a distância. Esse comportamento já foi demonstrado para o caso do modelo de Ising AF em um fractal do tipo Sierpinski gasket [29], onde devido à frustração, a entropia residual é não nula. A seguir, vamos demonstrar, seguindo um procedimento análogo ao de [29], o decaimento algébrico calculando a função de correlação entre os spins situados nas duas raízes da rede hierárquica.

Consideremos a função de correlação Γ_{ij} entre os spins σ_i e σ_j para o modelo de Potts com q estados definida por [2]

$$\Gamma_{ij} \equiv \frac{q \langle \delta(\sigma_i, \sigma_j) \rangle - 1}{q - 1} \quad (3.11)$$

e definamos $\Gamma_{AB}^{(n)}(t_n)$ como sendo a função de correlação entre as raízes σ_{RA} e σ_{RB} da rede em uma hierarquia n à uma temperatura correspondente à transmissividade t_n . Resulta, portanto, para $q=3$ que

$$\Gamma_{AB}^{(n)}(t_n) = \frac{3 \langle \delta(\sigma_{RA}, \sigma_{RB}) \rangle_n - 1}{2} \quad (3.12)$$

onde $\langle \dots \rangle_n$ denota a média termodinâmica tomada na hierarquia n . Na referência [74] Essam e Tsallis demonstram que, para um sistema de Potts definido em um grafo G com duas raízes R_A e R_B , a função de correlação entre as raízes $\Gamma_{AB}(G)$ é igual à transmissividade equivalente t_{AB}^{eq} entre estas duas raízes. Portanto, seguindo nossa notação, resulta

$$\Gamma_{AB}^{(n)}(t_n) = t_n^{(n)} \quad , \quad (3.13)$$

onde $t_n^{(n)} = t_{AB}^{eq}$, como já foi mencionado, é a n -ésima iteração da renormalização aplicada à t_n .

Expandindo $t'(t_n)$ em torno do atrator AF obtemos

$$t'(t_n) = t_{AF} + \lambda_{AF}(t_n - t_{AF}) \quad (t_n \simeq t_{AF}) \quad , \quad (3.14)$$

onde $\lambda_{AF} \equiv dt'/dt |_{t_{AF}} = 0,52 \dots$. A iteração sucessiva desta equação resulta em

$$t_n^{(n)} = t_{AF} + \lambda_{AF}^n(t_n - t_{AF}) \quad (t_n \simeq t_{AF}) \quad . \quad (3.15)$$

Combinando (3.13) e (3.15) obtemos o seguinte comportamento assintótico no limite de hierarquias muito grandes ($n \rightarrow \infty$)

$$\Gamma_{AB} \equiv [\Gamma_{AB}^{(n)}(t_n) - \Gamma_{AB}^{(\infty)}(t_{\infty})] \sim \lambda_{AF}^n(t_n - t_{AF}) \sim L_n^{-a} \quad (3.16)$$

onde L_n é a distância química entre as raízes da rede hierárquica na hierarquia n ($L_n = 3^n$), e o expoente a é dado por $a = -\ln \lambda_{AF} / \ln 3$. Fica assim demonstrado o decaimento algébrico com a distância da função de correlação entre as raízes da rede ao longo de toda a fase associada ao atrator t_{AF} .

Definindo o expoente crítico η associado ao decaimento da função de correlação de uma forma similar à utilizada em redes de Bravais [2], a saber

$$\Gamma_{AB}(L_{AB}) \sim L_{AB}^{-(d_f - 2 + \eta)} \quad L_{AB} \rightarrow \infty \quad (3.17)$$

onde L_{AB} é a distância química entre as raízes da rede, obtemos $\eta = -0,51 \dots$. Esse expoente η (daqui para frente η_{AF}) está associado ao decaimento algébrico das correlações ao longo de toda a fase renormalizada no atrator t_{AF} , ou seja para $-1/2 \leq t < t_c$.

Concluimos das seções (3.4) e (3.5) que o sistema em estudo possui uma fase não usual a baixas temperaturas como aquela prevista por Berker e Kadanoff. Nas próximas seções vamos estudar em detalhe o comportamento desse sistema, e em particular dessa fase. Calcularemos o parâmetro de ordem, discutiremos a multifractalidade das magnetizações locais e obteremos outras grandezas termodinâmicas do sistema.

3.6 Recorrências para as Magnetizações Locais

Durante o processo de construção da rede hierárquica, à medida que passamos de uma hierarquia para outra novos sítios são criados e portanto novos spins se unem aos já existentes para formar o sistema. Uma partição natural do conjunto de sítios $\{s_i\}_n$ que compõem a rede na hierarquia n é induzida pela propriedade de que cada sítio teve origem em uma dada hierarquia qualquer entre 0 e n . Denotamos por l (do inglês *level*) a hierarquia na qual foi criado o sítio pertencente ao subconjunto $\{s_i\}_{n,l} \subset \{s_i\}_n$, portanto

$$\{s_i\}_n = \bigcup_{l=0}^n \{s_i\}_{n,l} \quad (3.18)$$

Dessa forma, em uma rede com hierarquia n , as raízes da rede hierárquica s_{RA} e s_{RB} formam o subconjunto com $l = 0$, $\{s_i\}_{n,l=0} = \{s_{RA}, s_{RB}\}$. Os próximos 20 sítios criados na hierarquia 1 de uma rede com 10 ramos na célula básica pertencem ao subconjunto com $l = 1$, $\{s_i\}_{n,l=1}$, e assim por diante até os últimos $20 \cdot 30^{n-1}$ spins criados na própria hierarquia n , que estão no subconjunto com $l = n$, $\{s_i\}_{n,l=n}$.

Nosso objetivo nesta seção é obter um conjunto de equações de recorrência que nos permita calcular, em uma dada hierarquia n da rede, médias termodinâmicas, especificamente as magnetizações locais, dos últimos spins agregados à rede (portanto localizados nos sítios com $l = n$) em função das médias termodinâmicas envolvendo os spins que já compunham a rede com hierarquia $n - 1$, spins estes localizados em sítios com $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

Com o objetivo de se quebrar a simetria de configurações do sistema e obter médias termodinâmicas não nulas, adotamos o procedimento de fixar o spin da raiz σ_{RA} da rede no estado zero. Esse procedimento, além de quebrar a simetria de configurações, permitindo médias não nulas, produz uma quebra na simetria entre as subredes. Os spins da subrede \mathcal{A} , que é aquela onde está localizado o spin fixo no estado 0, e que estão localizados em sítios relativamente próximos desse spin fixo, ficam com maior probabilidade de assumir o estado 0, enquanto que os spins da subrede \mathcal{B} por outro lado, ficam com maior probabilidade de assumir, indistintamente, os estados 1 e 2. Essa quebra de simetria entre as subredes é similar àquela encontrada nos trabalhos usando MC para o AFP em redes de Bravais. Nessas simulações constatou-se, para o AFP ($q=3$) na rede cúbica, que o sistema apresenta um ordenamento do tipo BSS que, como já discutimos, apresenta as características de quebra de simetria entre as duas subredes similar a que foi induzida por nossa condição de contorno na raiz σ_{RA} . Como resultado do processo recursivo de se construir a rede, bem como da condição de contorno em uma das raízes, resulta ainda a propriedade de que todos os caminhos mais curtos ligando

as duas raízes da rede em uma determinada hierarquia são equivalentes em relação à distribuição de magnetizações locais. Todos os spins pertencentes a um subconjunto $\{s_i\}_{n,l}$ que possuem a mesma posição relativa a uma das raízes da rede possuem a mesma magnetização local.

As equações de recorrência para as magnetizações locais serão obtidas a partir de um método de Hamiltoniano efetivo que já foi utilizado em sistemas definidos em redes hierárquicas : o ferromagneto de Ising na rede diamante [43,44], o ferromagneto de Ising na família de redes hierárquicas tipo diamante [45] e finalmente, estendendo esse método para o modelo de Potts, o ferromagneto de Potts na rede diamante [46]. Para isso, começamos isolando na rede na hierarquia n (ver figura 3.5) dois spins σ_1 e σ_2 localizados em sítios primeiros vizinhos com índice $l = n$. Esses spins estão conectados ao resto da rede através de ligações com os spins μ_1 e μ_2 que estão localizados em sítios que devem possuir índices l , não necessariamente iguais entre si, entre 0 e $n - 1$. Em geral, um dos spins μ está em um sítio com $l = n - 1$ e o outro está em um sítio com $l \in [0, n - 2]$.

Isolando no Hamiltoniano do sistema estes quatro spins obtemos (para maior simplicidade omitiremos o subíndice n da hierarquia)

$$-\beta\mathcal{H} = 3K[\delta(\mu_1, \sigma_2) + \delta(\sigma_1, \sigma_2) + \delta(\mu_2, \sigma_1)] - \beta\mathcal{H}_{RESTO} \quad (3.19)$$

onde o Hamiltoniano \mathcal{H}_{RESTO} , que representa o resto da rede, não envolve os spins σ_1 e σ_2 .

Realizando um traço parcial somente sobre os spins diferentes de μ_1 , μ_2 , σ_1 e σ_2 , definimos o Hamiltoniano efetivo \mathcal{H}_{EF} por

$$Tr_{\sigma \neq \mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2} \exp(-\beta\mathcal{H}) = \exp[-\beta(\mathcal{H}_1(\mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2) + \mathcal{H}_{EF}(\mu_1, \mu_2))] \quad (3.20)$$

onde

$$-\beta\mathcal{H}_1 = 3K[\delta(\mu_1, \sigma_2) + \delta(\sigma_1, \sigma_2) + \delta(\mu_2, \sigma_1)] \quad (3.21)$$

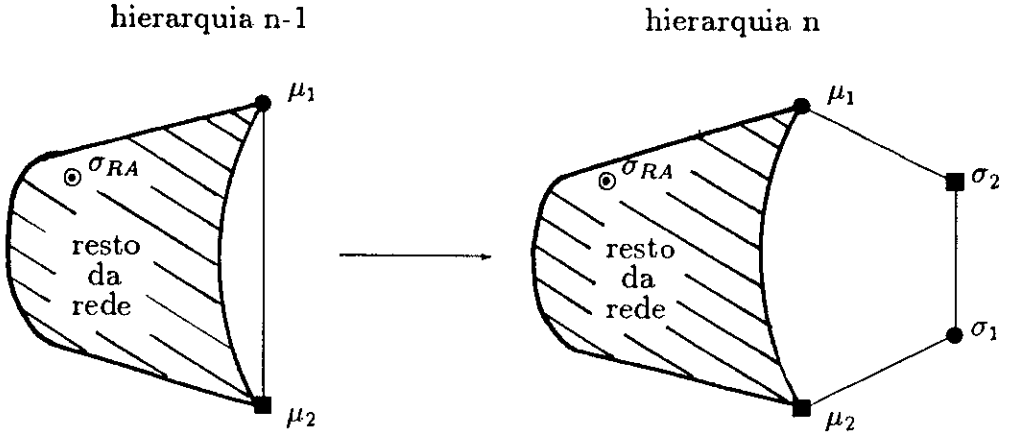


Figura 3.5: Representação esquemática das posições relativas dos spins σ_1 , σ_2 , μ_1 e μ_2 . Na hierarquia $n-1$ os spins μ_1 e μ_2 são primeiros vizinhos, na hierarquia n a ligação entre estes spins é substituída pela célula básica. Em um dos ramos ligando os spins μ_1 e μ_2 estão localizados os spins σ_1 e σ_2 .

e \mathcal{H}_{EF} deve ter a forma mais geral dada por

$$-\beta\mathcal{H}_{EF} = 3[h_1\delta(\mu_1, 0) + h_2\delta(\mu_2, 0) + K_E\delta(\mu_1, \mu_2) + K_S\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0) + C] \quad (3.22)$$

onde h_1 , h_2 , K_E , K_S e C são parâmetros a serem determinados. Os parâmetros h_1 e h_2 podem ser interpretados como campos magnéticos efetivos na direção do estado 0. Esses, assim como o termo K_S , têm origem na nossa escolha de quebrar a simetria do sistema fixando uma raiz da rede no estado 0. A origem do parâmetro K_E é o acoplamento efetivo existente entre os spins μ_1 e μ_2 devido à ligação efetiva entre esses spins através dos spins onde o traço foi realizado. O parâmetro C é um parâmetro de normalização.

Portanto, a introdução do Hamiltoniano Efetivo parte do pressuposto de que os parâmetros h_1 , h_2 , K_E , K_S e C são escolhidos de tal forma que valha a igualdade

$$\text{Tr}_{\sigma \neq \sigma_1, \sigma_2, \mu_1, \mu_2} \{ \exp(-\beta\mathcal{H}) \} = \exp[-\beta(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_{EF})] \quad (3.23)$$

que conduz à preservação da função de partição do sistema.

Utilizando a identidade

$$e^{X\delta(i,j)} = (e^X - 1)\delta(i,j) + 1 \quad (3.24)$$

e aplicando a seguinte transformação de variáveis

$$\begin{aligned} e^{3K} &= \frac{1+2t}{1-t} & e^{3h_1} &= \frac{1+2f_1}{1-f_1} & e^{3h_2} &= \frac{1+2f_2}{1-f_2} \\ e^{3K_E} &= \frac{1+2\kappa_E}{1-\kappa_E} & e^{3K_S} &= \frac{1+2\kappa_S}{1-\kappa_S} & e^{3C} &= A \end{aligned} \quad (3.25)$$

(a variável t é a transmissividade já definida) ficamos com

$$\begin{aligned} e^{-\beta[\mathcal{H}_1+\mathcal{H}_{EF}]} &= A \left[\frac{3t}{1-t} \delta(\mu_1, \sigma_2) + 1 \right] \left[\frac{3t}{1-t} \delta(\sigma_1, \sigma_2) + 1 \right] \left[\frac{3t}{1-t} \delta(\mu_2, \sigma_1) + 1 \right] \times \\ &\times \left[\frac{3f_1}{1-f_1} \delta(\mu_1, 0) + 1 \right] \left[\frac{3f_2}{1-f_2} \delta(\mu_2, 0) + 1 \right] \left[\frac{3\kappa_E}{1-\kappa_E} \delta(\mu_1, \mu_2) + 1 \right] \times \\ &\times \left[\frac{3\kappa_S}{1-\kappa_S} \delta(\mu_1, 0) \delta(\mu_2, 0) + 1 \right] \end{aligned} \quad (3.26)$$

Aplicando uma nova transformação de variáveis definida por

$$T_D = \frac{t}{1-t} \quad H_1 = \frac{f_1}{1-f_1} \quad H_2 = \frac{f_2}{1-f_2} \quad T_E = \frac{\kappa_E}{1-\kappa_E} \quad T_S = \frac{\kappa_S}{1-\kappa_S} \quad , \quad (3.27)$$

a expressão (3.26) resulta na forma simplificada

$$\begin{aligned} e^{-\beta[\mathcal{H}_1+\mathcal{H}_{EF}]} &= A [3T_D \delta(\mu_1, \sigma_2) + 1] [3T_D \delta(\sigma_1, \sigma_2) + 1] [3T_D \delta(\mu_2, \sigma_1) + 1] \times \\ &\times [3H_1 \delta(\mu_1, 0) + 1] [3H_2 \delta(\mu_2, 0) + 1] [3T_E \delta(\mu_1, \mu_2) + 1] \times \\ &\times [3T_S \delta(\mu_1, 0) \delta(\mu_2, 0) + 1] \end{aligned} \quad (3.28)$$

Utilizando essa forma simplificada do Hamiltoniano, expressa em termos dos parâmetros efetivos, e utilizando a equação (3.23) calculamos as médias envolvendo os spins situados em sítios com índices $l < n$

$$\left\{ \begin{aligned} Z &\equiv \text{Tr} \{ e^{-\beta\mathcal{H}} \} & &= \psi_1(T_D, T_E, T_S, H_1, H_2, A) \\ Z \langle \delta(\mu_1, 0) \rangle &\equiv \text{Tr} \{ \delta(\mu_1, 0) e^{-\beta\mathcal{H}} \} & &= \psi_2(T_D, T_E, T_S, H_1, H_2, A) \\ Z \langle \delta(\mu_2, 0) \rangle &\equiv \text{Tr} \{ \delta(\mu_2, 0) e^{-\beta\mathcal{H}} \} & &= \psi_3(T_D, T_E, T_S, H_1, H_2, A) \\ Z \langle \delta(\mu_1, \mu_2) \rangle &\equiv \text{Tr} \{ \delta(\mu_1, \mu_2) e^{-\beta\mathcal{H}} \} & &= \psi_4(T_D, T_E, T_S, H_1, H_2, A) \\ Z \langle \delta(\mu_1, 0) \delta(\mu_2, 0) \rangle &\equiv \text{Tr} \{ \delta(\mu_1, 0) \delta(\mu_2, 0) e^{-\beta\mathcal{H}} \} & &= \psi_5(T_D, T_E, T_S, H_1, H_2, A) \end{aligned} \right. \quad (3.29)$$

resultando em

$$\begin{aligned}
 Z = & A \{ [1 + (1 + 3H_1) + (1 + 3H_2)] [6 + 6(1 + 3T_D) + \\
 & + 6(1 + 3T_D)^2] + (1 + 3T_E) [4 + 12(1 + 3T_D) + \\
 & + 2(1 + 3T_D)^3 + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(2 + \\
 & + 6(1 + 3T_D) + (1 + 3T_D)^3)] \} \quad (3.30)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z(\delta(\mu_1, 0)) = & A(1 + 3H_1) \{ 6 + (1 + 3T_D) [6 + 6(1 + 3T_D) + \\
 & + (1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_E) (6 + (1 + 3T_D)^2)] + \\
 & + 2(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_E) \} \quad (3.31)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z(\delta(\mu_2, 0)) = & A(1 + 3H_2) \{ 6 + (1 + 3T_D) [6 + (1 + 3T_D) + \\
 & + (1 + 3H_1)(1 + 3T_S)(1 + 3T_E) (6 + (1 + 3T_D)^2)] + \\
 & + 2(1 + 3H_1)(1 + 3T_S)(1 + 3T_E) \} \quad (3.32)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z(\delta(\mu_1, \mu_2)) = & A(1 + 3T_E) \{ 4 + (1 + 3T_D) [6 + \\
 & + (1 + 3T_D)^2] [2 + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)] + \\
 & + 2(1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S) \} \quad (3.33)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z(\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)) = & A(1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_E) [2 + \\
 & + 6(1 + 3T_D) + (1 + 3T_D)^3] \quad (3.34)
 \end{aligned}$$

Vemos portanto, que as médias termodinâmicas são funções polinomiais das variáveis T_D, T_E, T_S, H_1, H_2 e A , havendo entre elas apenas cinco incógnitas já que a temperatura, sendo um dado de entrada a ser fixado por nós, especifica o valor do parâmetro T_D . Da mesma maneira podemos obter as médias que envolvem os spins σ_1 e σ_2 situados em sítios com índices $l = n$ expressas em termos dos parâmetros do Hamiltoniano efetivo. Essas, de maneira análoga às médias envolvendo μ_1 e μ_2 serão funções polinomiais dos parâmetros do Hamiltoniano efetivo. Assim, obtemos, por exemplo,

$$\begin{cases} Z(\delta(\sigma_1, 0)) \equiv Tr \{ \delta(\sigma_1, 0) e^{-\beta \mathcal{H}} \} = \phi_1(T_D, T_E, T_S, H_1, H_2, A) \\ Z(\delta(\sigma_2, 0)) \equiv Tr \{ \delta(\sigma_2, 0) e^{-\beta \mathcal{H}} \} = \phi_2(T_D, T_E, T_S, H_1, H_2, A) \end{cases} \quad (3.35)$$

e assim por diante (ver Apêndice A). Invertendo o sistema de equações (3.30 a 3.34) de tal forma a expressar os parâmetros do Hamiltoniano efetivo T_E , T_S , H_1 , H_2 e A em termos do parâmetro conhecido T_D e das médias envolvendo os spins μ_1 e μ_2 (ver Apêndice B), efetuamos a substituição desses parâmetros nas expressões das médias que envolvem os spins σ_1 e σ_2 . Como resultado, obtemos equações de recorrência que envolvem médias termodinâmicas de spins pertencentes a diferentes hierarquias. Essas equações de recorrência, em contraste com o que ocorre no modelo de Ising na rede diamante [43,44], envolvem, além das próprias magnetizações locais, um tipo de função de correlação Δ_{ij} definida entre sítios primeiros vizinhos i e j na hierarquia n por

$$\Delta_{\sigma_i, \sigma_j} \equiv 3\langle \delta(\sigma_i, 0)\delta(\sigma_j, 0) \rangle - \langle \delta(\sigma_i, \sigma_j) \rangle \quad (3.36)$$

Essa função de correlação está presente também no caso do modelo de Potts ferromagnético na rede diamante [46], onde foi primeiro introduzida. Definindo a magnetização local no sítio i , m_{σ_i} , por

$$m_{\sigma_i} \equiv \langle \delta(\sigma_i, 0) \rangle - 1/3 \quad , \quad (3.37)$$

(em geral define-se a magnetização local com um fator $3/2$ de tal forma que $m(T = 0) = 1$, mas aqui, para maior simplicidade não incluiremos esse fator) as equações de recorrência locais entre os spins σ_1 e σ_2 gerados na hierarquia n e os spins μ_1 e μ_2 gerados nas hierarquias anteriores podem ser expressas como :

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{\sigma_1} = a_n m_{\mu_2} + b_n m_{\mu_1} + c_n \Delta_{\mu_1 \mu_2} \\ m_{\sigma_2} = a_n m_{\mu_1} + b_n m_{\mu_2} + c_n \Delta_{\mu_1 \mu_2} \\ \Delta_{\mu_1 \sigma_2} = (2a_n - b_n + 1)m_{\mu_1} + (b_n + 2c_n)\Delta_{\mu_1 \mu_2} \\ \Delta_{\mu_2 \sigma_1} = (2a_n - b_n + 1)m_{\mu_2} + (b_n + 2c_n)\Delta_{\mu_1 \mu_2} \\ \Delta_{\sigma_1 \sigma_2} = (a_n + b_n)(m_{\mu_1} + m_{\mu_2}) + d_n \Delta_{\mu_1 \mu_2} \quad , \end{array} \right. \quad (3.38)$$

onde os parâmetros a_n , b_n , c_n e d_n são funções da temperatura dadas, em termos da

transmissividade, por

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{t_n(1+t_n)}{1+t_n+t_n^2} & b_n &= \frac{t_n^2}{1+t_n+t_n^2} \\ c_n &= \frac{t_n^3(1-t_n^2)}{(1+2t_n^3)(1+t_n+t_n^2)} & d_n &= \frac{t_n^2(1+3t_n+t_n^2-2t_n^3)}{(1+2t_n^3)(1+t_n+t_n^2)} \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde t_n obedece à equação de recorrência (3.7), qual seja

$$t_{n-1} = \frac{1 - \left(\frac{1-t_n^3}{1+2t_n^3}\right)^{10}}{1 + 2 \left(\frac{1-t_n^3}{1+2t_n^3}\right)^{10}} \quad (3.40)$$

Obtivemos também a equação de recorrência

$$\langle \delta(\mu_1, \sigma_2) \rangle = \langle \delta(\sigma_1, \sigma_2) \rangle = \langle \delta(\mu_2, \sigma_1) \rangle = e_n \langle \delta(\mu_1, \mu_2) \rangle + f_n \quad (3.41)$$

onde definimos

$$e_n \equiv b_n + 2c_n \quad (3.42)$$

e

$$f_n \equiv (2a_n - b_n + 1)/3 \quad (3.43)$$

Essa equação, como veremos, será útil quando formos calcular a energia interna do sistema.

De posse dessas equações de recorrência podemos definir o valor da magnetização local de todos os spins presentes no sistema em qualquer temperatura e em qualquer hierarquia da rede, bastando para isso que se defina as condições iniciais nas raízes da rede hierárquica. Como já partimos do pressuposto que o spin da raiz s_{RA} está fixo no estado 0, o spin na raiz s_{RB} terá magnetização local dada por

$$m_{\sigma_{RA}} = \frac{2}{3} \Rightarrow m_{\sigma_{RB}} = \frac{\text{Tr}\{\delta(\sigma_{RB}, 0) \exp(3K_0 \delta(\sigma_{RB}, 0))\}}{\text{Tr}\{\exp(3K_0 \delta(\sigma_{RB}, 0))\}} - \frac{1}{3} = \frac{2t_0}{3} \quad (3.44)$$

onde t_0 é a transmissividade da hierarquia zero obtida da equação de renormalização (3.40). A função de correlação $\Delta_{\sigma_{RA}\sigma_{RB}}$ entre spins primeiros vizinhos definida anteriormente fica também determinada pela condição inicial, a saber

$$\Delta_{\sigma_{RA}\sigma_{RB}} = \frac{2(1 + 2t_0)}{3} \quad (3.45)$$

Dessa forma, para calcular as magnetizações locais de todos os spins da rede em uma hierarquia n e temperatura t_n , procede-se da seguinte maneira : Inicialmente itera-se a equação (3.40), resultando no conjunto de transmissividades t_n, t_{n-1}, \dots, t_0 . Com o valor de t_0 ficam definidos os valores das condições iniciais dadas em (3.44) e (3.45). O conjunto de equações (3.39) fornece os parâmetros para, juntamente com essas condições iniciais, realizar a iteração sucessiva das recorrências para as magnetizações locais dadas em (3.38), resultando nas magnetizações, após n iterações, dos spins de toda a rede.

3.7 Parâmetro de Ordem

O ordenamento do AFP com três estados definido em redes de Bravais se manifesta, segundo resultados de MC, em uma quebra na simetria entre as duas subredes, resultando que os sítios de uma subrede ficam, quase que em sua maioria, em um dos três estados enquanto que os sítios da outra subrede assumem, com igual probabilidade, os outros dois estados - ordenamento este chamado de BSS. Uma definição de parâmetro de ordem que leve em conta essa quebra de simetria e que é utilizado em quase todos os trabalhos sobre o AFP ($q=3$)(usando o método MC) pode ser dada por [7] :

$$M = \frac{1}{N_s} \left[\left| \sum_{i \in A} \langle \delta(\sigma_i, 0) \rangle - \sum_{i \in B} \langle \delta(\sigma_i, 0) \rangle \right| + \left| \sum_{i \in A} \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle - \sum_{i \in B} \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle \right| + \left| \sum_{i \in A} \langle \delta(\sigma_i, 2) \rangle - \sum_{i \in B} \langle \delta(\sigma_i, 2) \rangle \right| \right], \quad (3.46)$$

onde a soma com $i \in \mathcal{A}$ ($i \in \mathcal{B}$) é realizada somente sobre os sítios da subrede \mathcal{A} (\mathcal{B}) e N_s é o número de sítios na rede. No nosso problema, como já mencionamos, nossa escolha de quebrar a simetria de configurações do sistema fixando o spin de uma das raízes da rede induz naturalmente uma quebra de simetria entre as subredes igual à descrita anteriormente. Tendo isto em conta, adotaremos como definição do parâmetro de ordem do sistema a mesma utilizada nos trabalhos usando MC, para a qual obtemos uma expressão exata, derivada a partir das equações de recorrência para as magnetizações

locais. Para a obtenção deste parâmetro de ordem no sistema particular que estamos estudando devemos usar as equações de recorrência para as magnetizações locais e somar sobre todos os sítios de uma determinada subrede \mathcal{A} ou \mathcal{B} . Para isso vamos utilizar as recorrências locais (3.38) e somar inicialmente somente sobre os spins localizados nos sítios que foram criados por último durante o processo de construção da rede (sítios com $l = n$)

$$\begin{aligned} \sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=n}} m_i^{(A)} &= a_n \left[\sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n-1}} z_i^{(n)} m_i^{(B)} \right] + b_n \left[\sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n-1}} z_i^{(n)} m_i^{(A)} \right] + \\ &+ 10c_n \left[\sum_{s_i, s_j \in \{s_k\}_{n,l=0,1,\dots,n-1}} \Delta_{ij} \right] \end{aligned} \quad (3.47)$$

onde $m_i^{(A)}$ é a magnetização local em um sítio que pertence à subrede \mathcal{A} e, analogamente, $m_i^{(B)}$ é a magnetização local em um sítio que pertence à subrede \mathcal{B} . Nessas somas $z_i^{(n)}$ representa o número de coordenação do sítio i na rede de hierarquia n , ou seja, representa o número de ligações que se conectam ao sítio i nessa hierarquia da rede. A soma em Δ_{ij} é sobre as funções de correlação entre todos os pares de spins primeiros vizinhos existentes na rede com hierarquia n , podendo ser vista também como uma soma sobre todas as ligações presentes na rede na hierarquia n . De maneira análoga, obtemos uma equação similar para a subrede \mathcal{B}

$$\begin{aligned} \sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=n}} m_i^{(B)} &= a_n \left[\sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n-1}} z_i^{(n)} m_i^{(A)} \right] + b_n \left[\sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n-1}} z_i^{(n)} m_i^{(B)} \right] + \\ &+ 10c_n \left[\sum_{s_i, s_j \in \{s_k\}_{n,l=0,1,\dots,n-1}} \Delta_{ij} \right] . \end{aligned} \quad (3.48)$$

Para simplificar o manuseio algébrico dessas equações definimos :

$$\begin{aligned} \Theta_n^{(A)} &\equiv \sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n}} z_i^{(n)} m_i^{(A)} & \Theta_n^{(B)} &\equiv \sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n}} z_i^{(n)} m_i^{(B)} \\ M_n^{(A)} &\equiv \sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n}} m_i^{(A)} & M_n^{(B)} &\equiv \sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=0,1,\dots,n}} m_i^{(B)} \\ \Delta_n &\equiv \sum_{s_i, s_j \in \{s_k\}_{n,l=0,1,\dots,n}} \Delta_{ij} \end{aligned} \quad (3.49)$$

Utilizando a relação

$$\sum_{s_i \in \{s_j\}_{n,l=n}} m_i^{(A)} = M_n^{(A)} - M_{n-1}^{(A)} , \quad (3.50)$$

e a análoga para a subrede \mathcal{B} , as equações (3.47) e (3.48) podem ser reescritas como :

$$M_n^{(A)} - M_{n-1}^{(A)} = 10[a_n \Theta_{n-1}^{(B)} + b_n \Theta_{n-1}^{(A)} + c_n \Delta_{n-1}] \quad (3.51)$$

$$M_n^{(B)} - M_{n-1}^{(B)} = 10[a_n \Theta_{n-1}^{(A)} + b_n \Theta_{n-1}^{(B)} + c_n \Delta_{n-1}] \quad , \quad (3.52)$$

onde utilizamos também a relação $z_i^{(n)} = 10z_i^{(n-1)}$. Definindo :

$$D_n \equiv M_n^{(A)} - M_n^{(B)} \quad , \quad (3.53)$$

obtemos, da diferença entre as equações (3.51) e (3.52) acima, a seguinte equação de recorrência

$$D_n - D_{n-1} = 10(a_n - b_n)[\Theta_{n-1}^{(B)} - \Theta_{n-1}^{(A)}] \quad . \quad (3.54)$$

A função Θ_n pode ser eliminada se utilizarmos a equação de recorrência

$$\Theta_n^{(A)} = 10\Theta_{n-1}^{(A)} + 2[M_n^{(A)} - M_{n-1}^{(A)}] \quad (3.55)$$

e sua análoga para a subrede \mathcal{B} , obtidas das próprias definições de $\Theta_n^{(A)}$ e $\Theta_n^{(B)}$ e do fato de que o número de coordenação $z^{(n)}$ vale 2 para os sítios com $l = n$. Dessa forma, obtemos

$$\Theta_n^{(B)} - \Theta_n^{(A)} = 10[\Theta_{n-1}^{(B)} - \Theta_{n-1}^{(A)}] - 2[D_n - D_{n-1}] \quad . \quad (3.56)$$

Utilizando (3.54) obtemos

$$\Theta_{n-1}^{(B)} - \Theta_{n-1}^{(A)} = \frac{D_n - D_{n-1}}{10(a_n - b_n)} \quad (3.57)$$

Substituindo este resultado em (3.56), obtemos finalmente uma equação de recorrência que envolve apenas a função D_n , a saber

$$D_n - D_{n-1} = 10 \left[\frac{b_n - a_n}{b_{n-1} - a_{n-1}} \right] [1 + 2(b_{n-1} - a_{n-1})] (D_{n-1} - D_{n-2}) \quad . \quad (3.58)$$

Para relacionar esta função D_n ao parâmetro de ordem M , faz-se necessário utilizar a nossa condição de quebra de simetria que implica em

$$\begin{aligned} \sum_{i \in \mathcal{A}} \langle \delta(\sigma_i, 0) \rangle - \sum_{i \in \mathcal{B}} \langle \delta(\sigma_i, 0) \rangle \geq 0 \quad & \sum_{i \in \mathcal{A}} \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle - \sum_{i \in \mathcal{B}} \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle \leq 0 \\ \sum_{i \in \mathcal{A}} \langle \delta(\sigma_i, 2) \rangle - \sum_{i \in \mathcal{B}} \langle \delta(\sigma_i, 2) \rangle \leq 0 \quad & , \end{aligned} \quad (3.59)$$

restando ainda a equiprobabilidade entre os estados 1 e 2, que implica em

$$\begin{aligned}\sum_{i \in A} \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle &= \sum_{i \in A} \langle \delta(\sigma_i, 2) \rangle \\ \sum_{i \in B} \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle &= \sum_{i \in B} \langle \delta(\sigma_i, 2) \rangle \quad .\end{aligned}\tag{3.60}$$

Utilizando ainda a condição

$$\langle \delta(\sigma_i, 0) \rangle + \langle \delta(\sigma_i, 1) \rangle + \langle \delta(\sigma_i, 2) \rangle = 1 \quad \forall i \quad ,\tag{3.61}$$

juntamente com (3.59) e (3.60) na definição de M dada em (3.46), é fácil mostrar a simples relação

$$M_n = \frac{D_n}{N_{sn}^{(A)}} \quad ,\tag{3.62}$$

existente entre o parâmetro de ordem definido na equação (3.46) e a função D_n definida por nós em (3.53). Nesta equação $N_{sn}^{(A)}$ é o número de sítios na subrede \mathcal{A} na hierarquia n ($N_{sn}^{(A)} = N_{sn}^{(B)}$). Vale notar que acrescentamos um subíndice n ao parâmetro de ordem M já que sempre devemos pensar nas grandezas definidas em alguma etapa de construção da rede hierárquica. Portanto, da equação (3.58), obtemos uma recorrência para M_n , a saber

$$M_n - \eta_{n-1} M_{n-1} = 10 \left[\frac{b_n - a_n}{b_{n-1} - a_{n-1}} \right] [1 + 2(b_{n-1} - a_{n-1})] (\eta_{n-1} M_{n-1} - \eta_{n-2} M_{n-2}) \quad ,\tag{3.63}$$

onde definimos

$$\eta_{n-1} \equiv \frac{N_{n-1}^{(A)}}{N_n^{(A)}} \quad \text{e} \quad \eta_{n-2} \equiv \frac{N_{n-2}^{(A)}}{N_n^{(A)}} \quad .\tag{3.64}$$

Definindo

$$\epsilon_n \equiv D_n - D_{n-1} \quad ,\tag{3.65}$$

a equação (3.58) pode ser reescrita como :

$$\epsilon_n = 10 \left(\frac{b_n - a_n}{b_{n-1} - a_{n-1}} \right) [1 + 2(b_{n-1} - a_{n-1})] \epsilon_{n-1} \quad .\tag{3.66}$$

Iterando essa equação obtemos

$$\epsilon_n = 10^{n-1} \left(\frac{b_n - a_n}{b_1 - a_1} \right) \epsilon_1 \prod_{i=1}^{n-1} [1 + 2(b_i - a_i)] \quad .\tag{3.67}$$

e, portanto, voltando à função D_n resulta em

$$D_n = D_1 + (D_1 - D_0) \sum_{i=2}^n 10^{i-1} \left(\frac{b_i - a_i}{b_1 - a_1} \right) \prod_{j=1}^{i-1} [1 + 2(b_j - a_j)] \quad . \quad (3.68)$$

Utilizando a relação entre D_n e M_n dada em (3.62) obtemos

$$M_n = \frac{N_{s1}}{N_{sn}} M_1 + \left[\frac{N_{s1}}{N_{sn}} M_1 - \frac{N_{s0}}{N_{sn}} M_0 \right] \sum_{i=2}^n 10^{i-1} \left(\frac{b_i - a_i}{b_1 - a_1} \right) \prod_{j=1}^{i-1} [1 + 2(b_j - a_j)] \quad (3.69)$$

onde utilizamos também que $N_{sn}^{(A)} = N_{sn}/2$. O número de sítios N_{sn} para a RH que estamos utilizando é dado por

$$N_{sn} = \frac{20}{29}(30)^n + \frac{38}{29} \quad . \quad (3.70)$$

Portanto, para uma hierarquia n muito grande, podemos tomar $N_{sn} \sim 20(30)^n/29$ resultando em

$$M_n = \left(\frac{29}{10} \right) \frac{1}{30^n} [11M_1 - M_0] \sum_{i=2}^n 10^{i-1} \left(\frac{b_i - a_i}{b_1 - a_1} \right) \prod_{j=1}^{i-1} [1 + 2(b_j - a_j)] \quad . \quad (3.71)$$

Para um ponto fixo da renormalização t^* ($t'(t^*) = t^*$) a equação acima pode ser escrita como

$$M_n = \left(\frac{29}{10} \right) \frac{1}{30^n} [11M_1 - M_0] \left[\frac{10(1 + 2(b^* - a^*)) - 10^n(1 + 2(b^* - a^*))^n}{1 - 10(1 + 2(b^* - a^*))} \right] \quad , \quad (3.72)$$

onde a^* e b^* são as funções a_i e b_i calculadas no ponto fixo t^* . Portanto, simplificando essa expressão obtemos para $n \rightarrow \infty$:

$$M_n = \left(\frac{29}{10[10(1 + 2(b^* - a^*)) - 1]} \right) [11M_1 - M_0] \left(\frac{1 + 2(b^* - a^*)}{3} \right)^n \quad (3.73)$$

Nessa expressão podemos ainda substituir o termo $11M_1 - M_0$ em termos da transmissividade t^* . Esse termo pode ser escrito como :

$$11M_1 - M_0 = (m_{\sigma_{RA}} + 10m_{\sigma_A} - m_{\sigma_{RB}} - 10m_{\sigma_B}) - (m_{\sigma_{RA}} - m_{\sigma_{RB}}) = 10(m_{\sigma_A} - m_{\sigma_B}) \quad , \quad (3.74)$$

onde m_{σ_A} (m_{σ_B}) representa a magnetização local de um spin da subrede \mathcal{A} (\mathcal{B}) criado na hierarquia 1. Iterando uma vez as equações de recorrência (3.38), com as condições iniciais dadas em (3.44) e (3.45), obtemos :

$$10(m_{\sigma_A} - m_{\sigma_B}) = \frac{20}{3}(1 - t^*)(b^* - a^*) \quad (3.75)$$

e portanto, a equação (3.73) fica

$$M_n = \frac{58(b^* - a^*)(1 - t^*)}{3(10(1 + 2(b^* - a^*) - 1))} \left(\frac{1 + 2(b^* - a^*)}{3} \right)^n \quad (n \rightarrow \infty) \quad (3.76)$$

Essa expressão do parâmetro de ordem é exata para o limite de hierarquias muito grandes e para qualquer ponto fixo da renormalização.

Vamos agora analisar a expressão (3.76) para diferentes temperaturas. Seja $v^* = (1 + 2(b^* - a^*))/3$, da equação (3.76) vemos que $M_n \sim (v^*)^n$. Na temperatura crítica T_c , v^* têm o valor $v^*(T_c) = 0,675\dots$ implicando em um parâmetro de ordem nulo quando tomamos o limite termodinâmico $n \rightarrow \infty$, o que indica uma transição de fase contínua. Na temperatura do atrator da fase antiferromagnética T_{AF} , $v^*(T_{AF}) = 0,757\dots$, o que acarreta também um parâmetro de ordem nulo a baixas temperaturas. Concluimos, portanto, que o parâmetro de ordem do sistema se **anula** para todas as temperaturas no limite termodinâmico. Na figura (3.6) mostramos como se comporta o parâmetro de ordem M_n com a temperatura (eq. (3.69)) para diferentes hierarquias da rede ($n = 3, 4, \dots, 11$). Nessa figura podemos visualizar como ocorre o decaimento do parâmetro de ordem quando se aumenta a hierarquia da rede.

Ainda que o parâmetro de ordem do sistema se anule para todas as temperaturas no limite termodinâmico, vamos mostrar que com as equações de recorrência e expressões exatas envolvendo o parâmetro de ordem M_n em hierarquias finitas, podemos definir um expoente crítico β que caracteriza o comportamento de M_n na vizinhança da temperatura crítica T_c .

Iniciamos verificando o comportamento de M_n com n na vizinhança da temperatura crítica. A figura (3.7) mostra o decaimento linear do logaritmo de M_n com o aumento

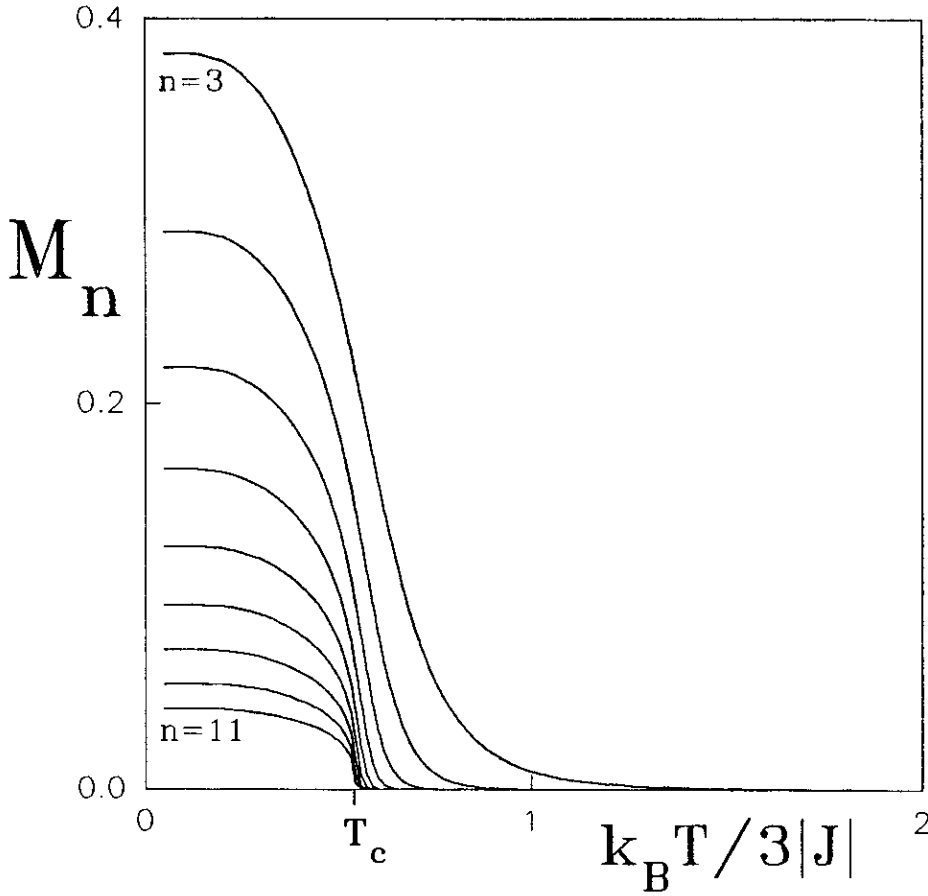


Figura 3.6: Comportamento do parâmetro de ordem M_n em função da temperatura para diferentes hierarquias da rede.

da hierarquia n , desse gráfico podemos inferir a seguinte relação

$$M_n(T \simeq T_c) \sim AL_n^{-\theta} \quad , \quad (3.77)$$

onde $L_n = 3^n$ é o tamanho linear da rede na hierarquia n , A é uma amplitude (cujo valor obtido é $0,717\dots$) e θ é um expoente com valor, obtido da figura, $\theta = 0,357\dots$

Por outro lado, na figura (3.8) podemos ver o comportamento de $\delta T_n = (T_n^{in} - T_c)/T_c$ versus a hierarquia n , onde T_n^{in} é a temperatura do ponto de inflexão da curva de M_n versus T (ou seja, $(\partial^2 M_n / \partial T^2)|_{T_n^{in}} = 0$). Dessa figura podemos inferir a relação

$$\delta T_n \sim BL_n^{-\zeta} \quad , \quad (3.78)$$

onde B é uma amplitude (do gráfico obtemos $B = 0,413\dots$) e o expoente ζ tem o valor $\zeta = 0,369\dots \simeq (2,71)^{-1}$. Na seção (3.4) obtivemos o valor do expoente ν para esse sistema, $\nu = 2,75\dots$, portanto, como a discrepância entre o valor de ζ obtido graficamente

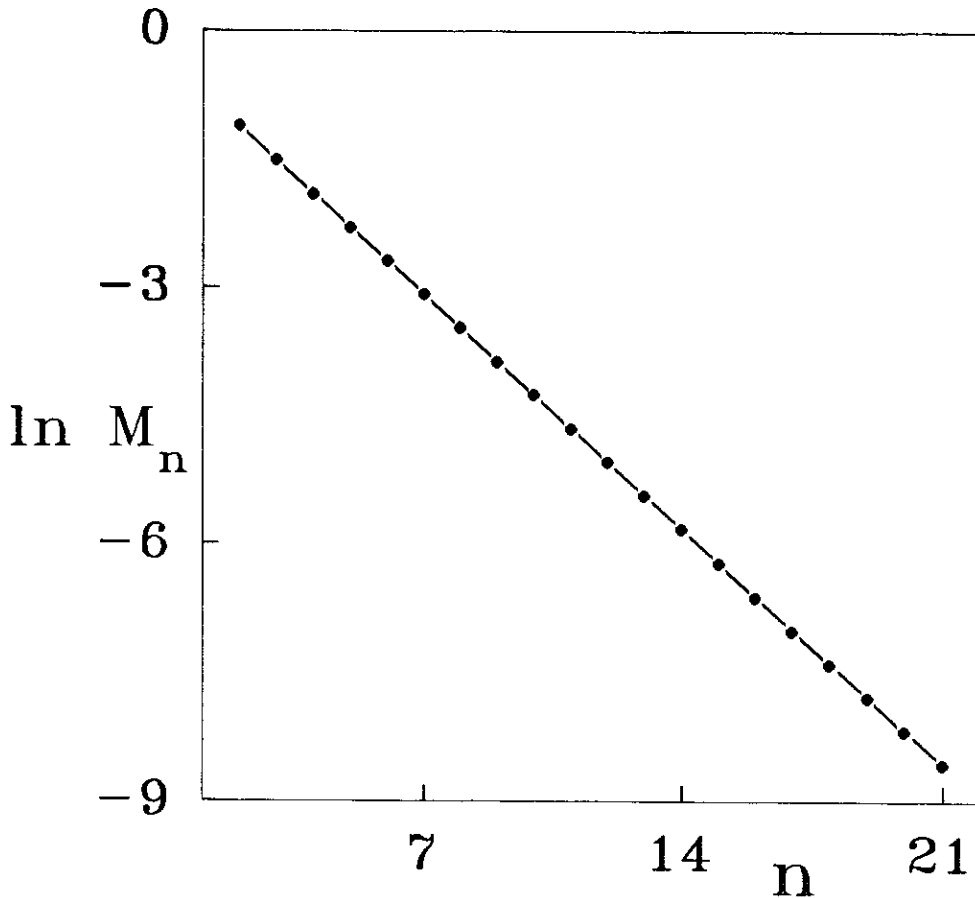


Figura 3.7: Comportamento do logaritmo do parâmetro de ordem M_n em função da hierarquia da rede na vizinhança da temperatura crítica.

(para $9 \leq n \leq 17$) difere do valor exato de $1/\nu$ por apenas 1.5% (discrepância essa que esperamos se anular para $n \rightarrow \infty$), consideraremos daqui para diante que

$$\zeta = 1/\nu \quad . \quad (3.79)$$

Concluimos portanto, que a temperatura T_n^{in} desempenha aqui o papel da *temperatura de arredondamento* que aparece no contexto da teoria de *finite size scaling* [75].

Combinando (3.77), (3.78) e (3.79), nós obtemos portanto,

$$M_n(T \simeq T_c) \sim (\delta T_n)^\beta \quad , \quad (3.80)$$

onde β é um expoente crítico cujo valor numérico obtido das considerações anteriores é

$$\beta = \nu\theta \simeq 0,982 \quad (3.81)$$

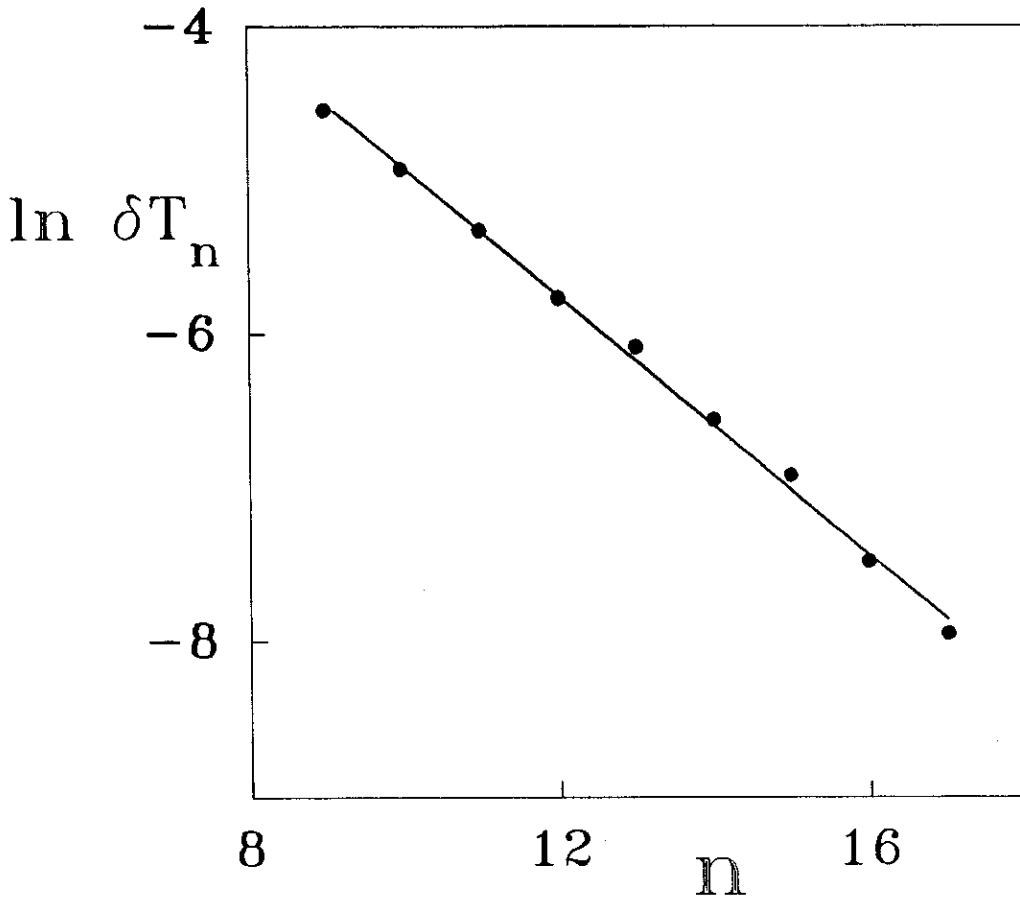


Figura 3.8: Comportamento do logaritmo da diferença δT_n em função da hierarquia da rede.

Por outro lado, utilizando o comportamento dado por (3.80) na equação de recorrência exata para M_n (eq. (3.63)), obtemos para o expoente β a equação

$$\frac{B_c}{30} \left(1 - \frac{w}{30}\right) w = 1 - \frac{w}{30} \quad , \quad (3.82)$$

onde definimos $w = r_c^\beta$ e

$$B_c \equiv \left(10 \left[\frac{b_n - a_n}{b_{n-1} - a_{n-1}} \right] [1 + 2(b_{n-1} - a_{n-1})] \right) \Big|_{t_c} \quad , \quad (3.83)$$

resultando portanto em

$$w = \frac{30}{B_c} \quad , \quad (3.84)$$

de onde obtemos o valor exato $\beta = 0,982\dots$ que concorda muito bem com o valor obtido graficamente. Concluimos portanto que o parâmetro de ordem M_n , ainda que nulo no limite termodinâmico, decai com o aumento do tamanho da rede respeitando

o comportamento próximo de T_c caracterizado por um expoente crítico β cujo valor é $\beta = 0,982\dots$

3.8 Multifractalidade da Distribuição de Magnetizações Locais

A iteração do conjunto de equações (3.38), seguindo o procedimento já discutido no final da seção (3.6), nos permite exibir a distribuição de magnetizações ao longo da rede para qualquer temperatura e hierarquia desejadas. Como já mencionamos, para analisar a estrutura desta distribuição é suficiente que nos concentremos somente sobre um caminho mais curto que liga as duas raízes da rede, todos os outros caminhos são equivalentes entre si, possuindo a mesma distribuição de magnetizações locais. A figura (3.9) mostra como isolamos um caminho mais curto para a rede na hierarquia 2. Sobre um caminho mais curto entre as raízes da rede com hierarquia n estão distribuídos sequencialmente $3^n + 1$ spins, partindo da raiz σ_{RA} e chegando à raiz σ_{RB} . Identificando um caminho mais curto entre as raízes com o intervalo $[0, 1]$, podemos linearizar este caminho, marcando a posição de cada spin por uma coordenada x . Assim, o spin σ_{RA} está em $x = 0$, o próximo spin em $x = 1/3^n$ e assim por diante até chegar à raiz σ_{RB} posicionado em $x = 1$. Definimos para cada spin um par de índices (s, l) onde o índice l , como já vimos na seção (3.6), denota a hierarquia na qual esse spin foi criado e o índice s denota a distância química desse spin em relação à raiz σ_{RA} na hierarquia l . Portanto, seguindo essa notação, o sítio (s, l) transportado para o intervalo $[0, 1]$ ocupará a posição

$$x = \frac{s}{3^l} \quad (3.85)$$

Na figura (3.9) exemplificamos esse procedimento para uma rede com hierarquia 2.

A distribuição das magnetizações locais sobre os sítios da rede apresenta um aspecto bastante irregular. Na figura (3.10) mostramos essa distribuição para duas temperaturas diferentes, a temperatura crítica e a temperatura do atrator AF.

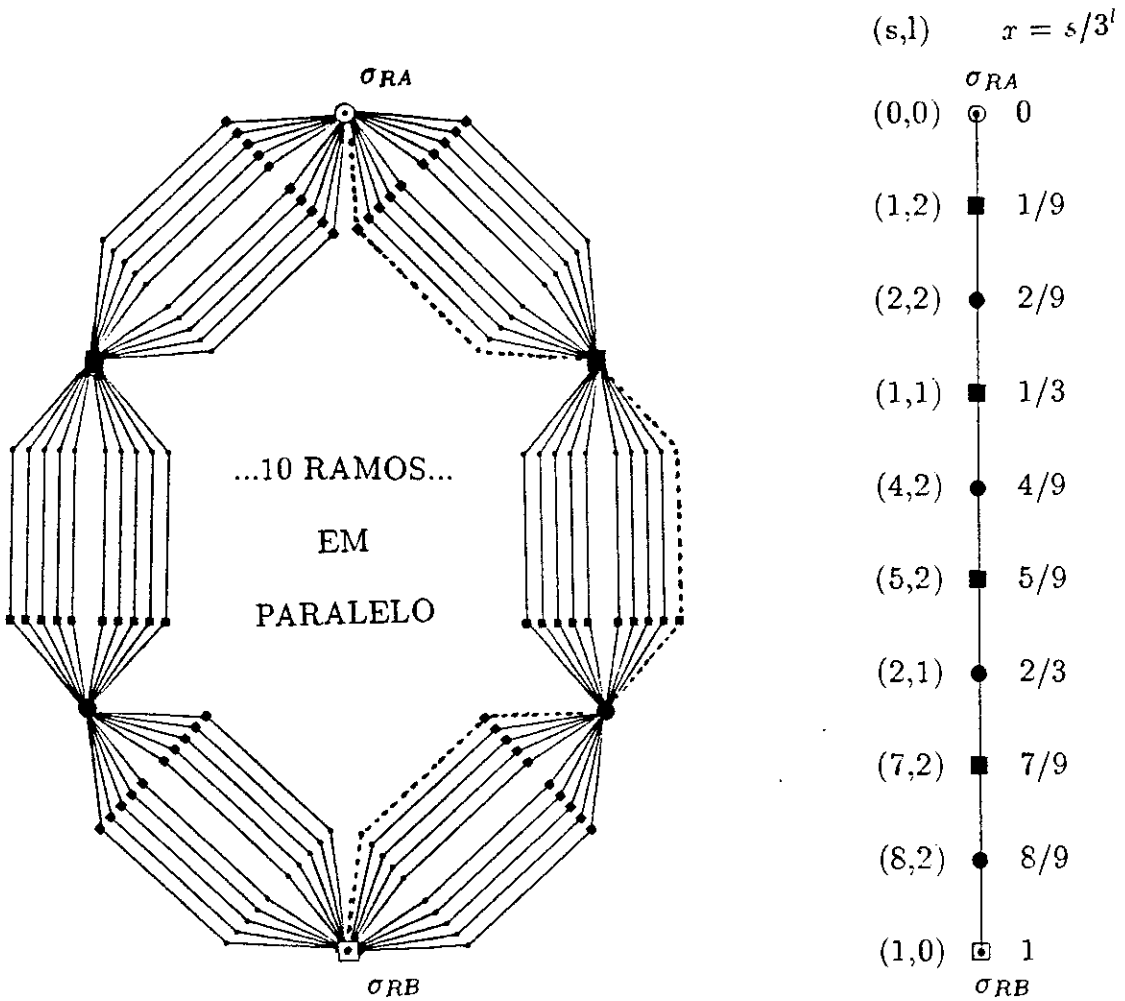


Figura 3.9: Rede na hierarquia 2 mostrando um dos caminhos mais curtos ligando as raízes da rede (em linhas tracejadas). Fazemos a identificação deste caminho com o intervalo $[0, 1]$ onde distribuímos os sítios.

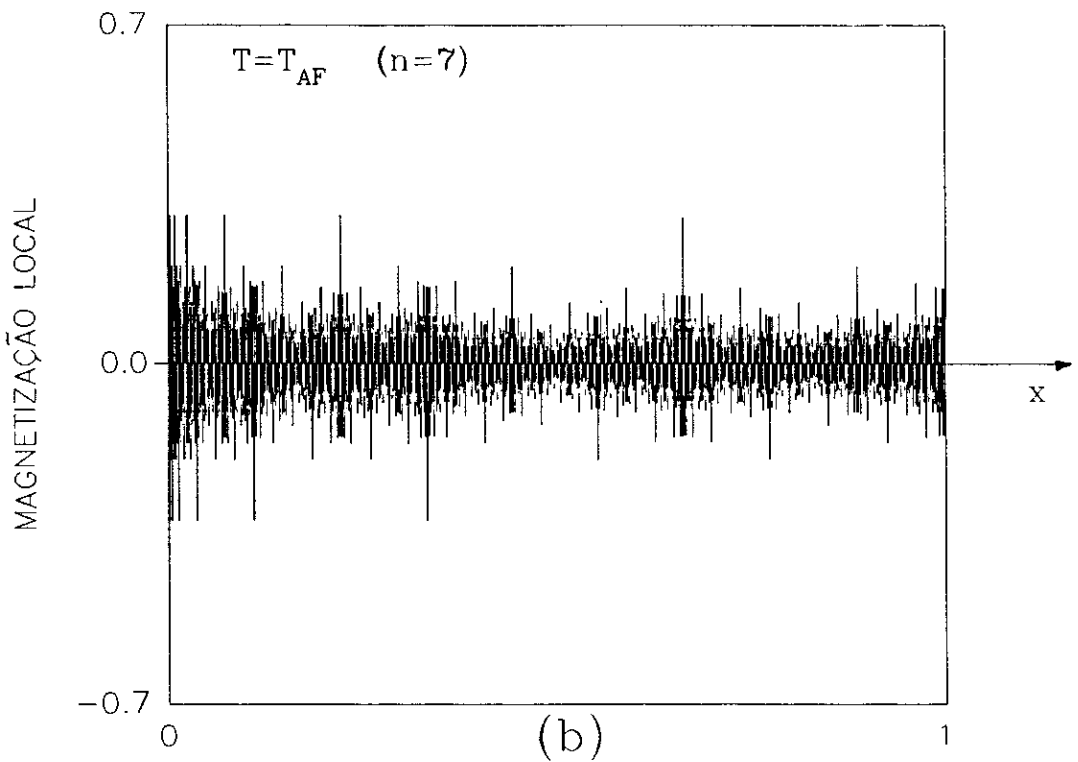
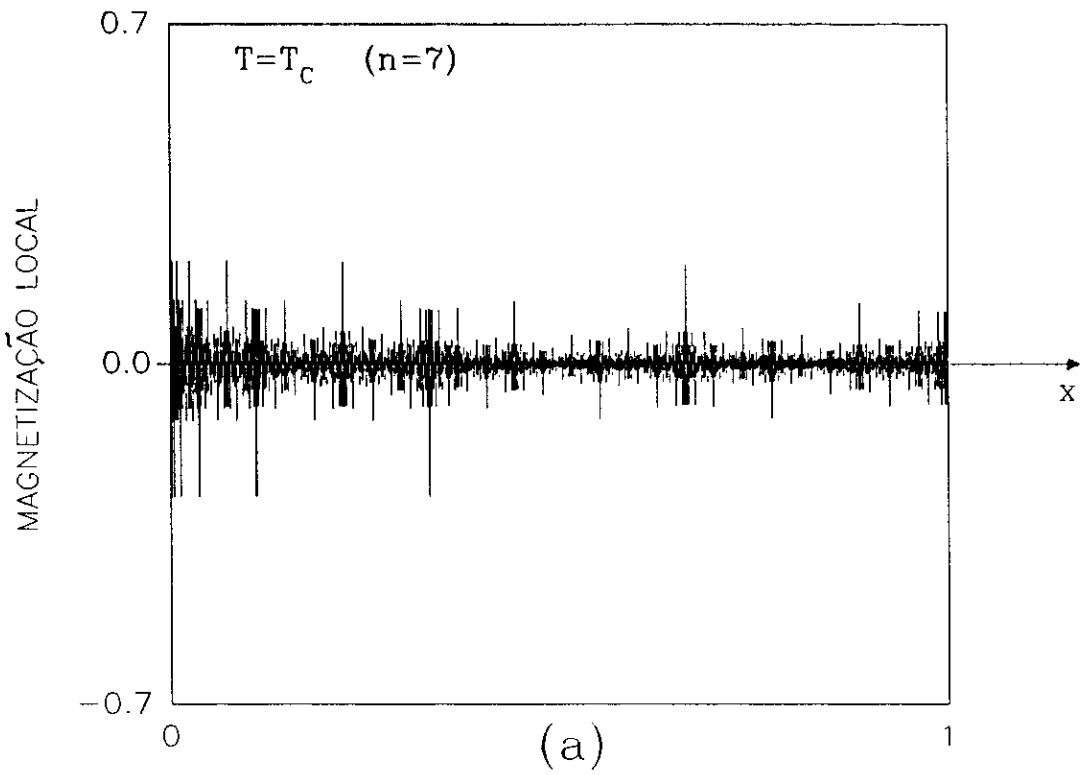


Figura 3.10: Distribuição de magnetizações ao longo de um caminho entre as raízes da rede na hierarquia 7. No eixo horizontal representamos o intervalo $[0, 1]$ (eixo x) onde estão distribuídos os spins, no eixo vertical representamos a magnitude da magnetização local em cada sítio na temperatura crítica (figura (a)) e na temperatura do atrator AF (figura (b)).

Vale notar que pela nossa definição da magnetização local (eq. (3.37)), os spins da subrede \mathcal{A} têm magnetização positiva enquanto que os spins da subrede \mathcal{B} têm magnetização negativa. A área $[A]^{(A)}$ abaixo da curva $m_\sigma^{(A)}(x)$ é proporcional à magnetização média por spin no perfil da subrede \mathcal{A} (analogamente para a subrede \mathcal{B}),

$$[A]_n^{(A)} = 3^{-n} \sum_i m_{\sigma_i}^{(A)} = \frac{\overline{m}_n^{(A)}}{2} \quad (3.86)$$

onde $\overline{m}_n^{(A)}$ é a magnetização média por spin no perfil da subrede \mathcal{A} na hierarquia n . Consequentemente, a área $[A]$ abaixo da curva $|m_\sigma(x)|$ é igual à magnetização por spin no perfil da rede. Essa magnetização média se anula no limite termodinâmico, conforme podemos ver das figuras (3.11) e (3.12) onde mostramos a distribuição do módulo das magnetizações. Nessas figuras, para melhor visualização do que pretendemos demonstrar, não traçamos as barras ligando o valor das magnetizações locais ao eixo x , deixando apenas os pontos representando o valor da magnetização local em cada posição sobre o eixo. Conforme vemos dessas figuras, independente da temperatura, as magnetizações dos spins criados nas sucessivas hierarquias vão tendendo para zero, o que já é evidenciado quando passamos da hierarquia 6 para a hierarquia 7. Isso significa que os spins criados nas hierarquias muito grandes fornecem uma pequena contribuição para a soma da equação (3.86), implicando no decaimento da magnetização média no perfil.

Estas distribuições apresentam um caráter multifractal de infinitas singularidades, essa característica já foi reportada para a distribuição de magnetizações na temperatura crítica nos ferromagnetos de Ising [43,44] e Potts [46]. Para o caso do AFP aqui estudado, em adição à multifractalidade na temperatura crítica, existe uma multifractalidade associada à toda a fase não usual renormalizada no atrator AF. Para estudarmos esta multifractalidade se faz necessário que definamos uma medida normalizada, derivada diretamente das magnetizações locais, definida sobre o suporte que é o intervalo $[0,1]$.

Traduzindo para a linguagem dos multifractais, o perfil da rede é um suporte de

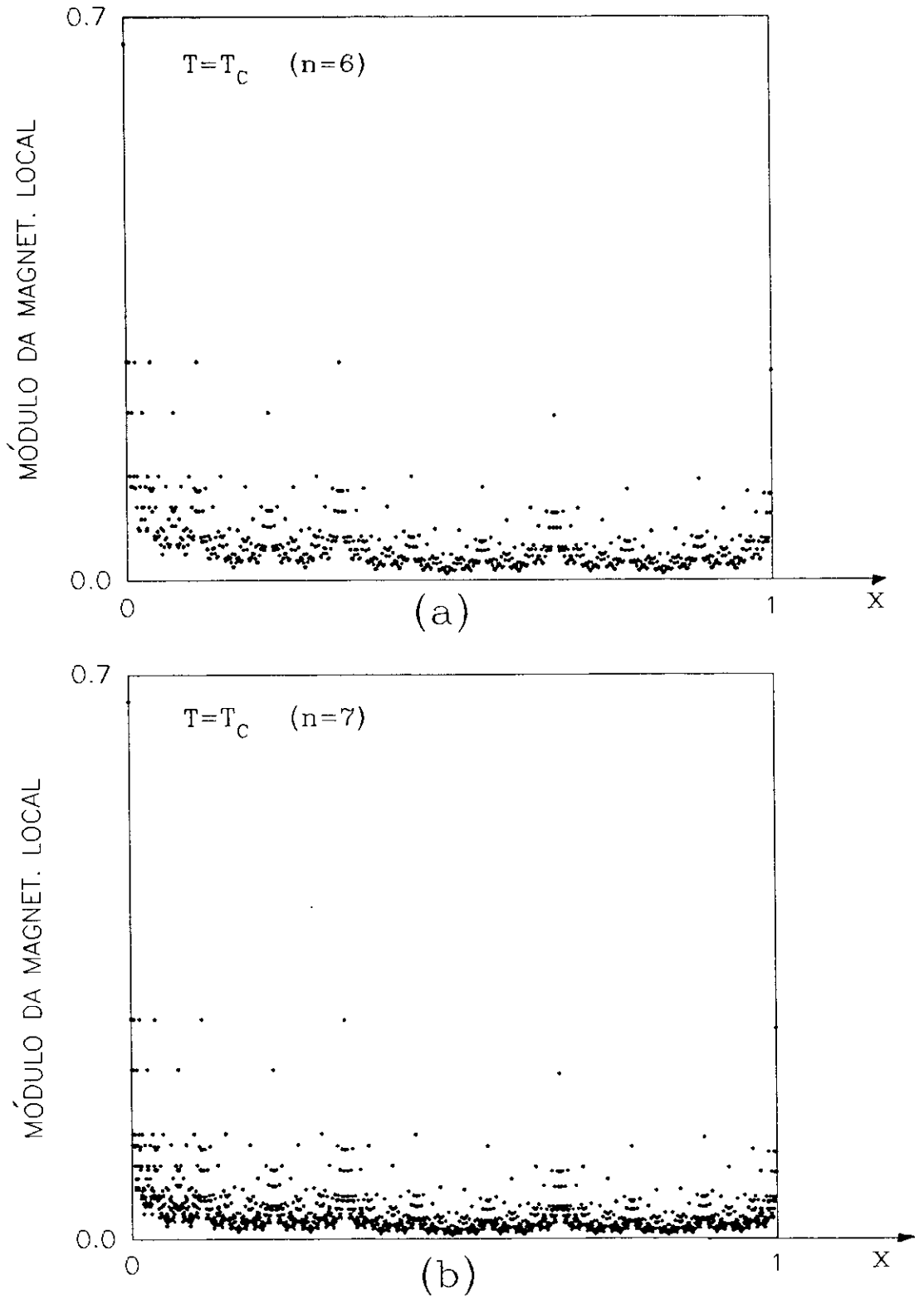


Figura 3.11: Distribuição de $|m_\sigma(x)|$ ao longo de um caminho entre as raízes da rede nas hierarquias 6 e 7 para a temperatura crítica. As magnetizações negativas foram rebatidas para o plano positivo.

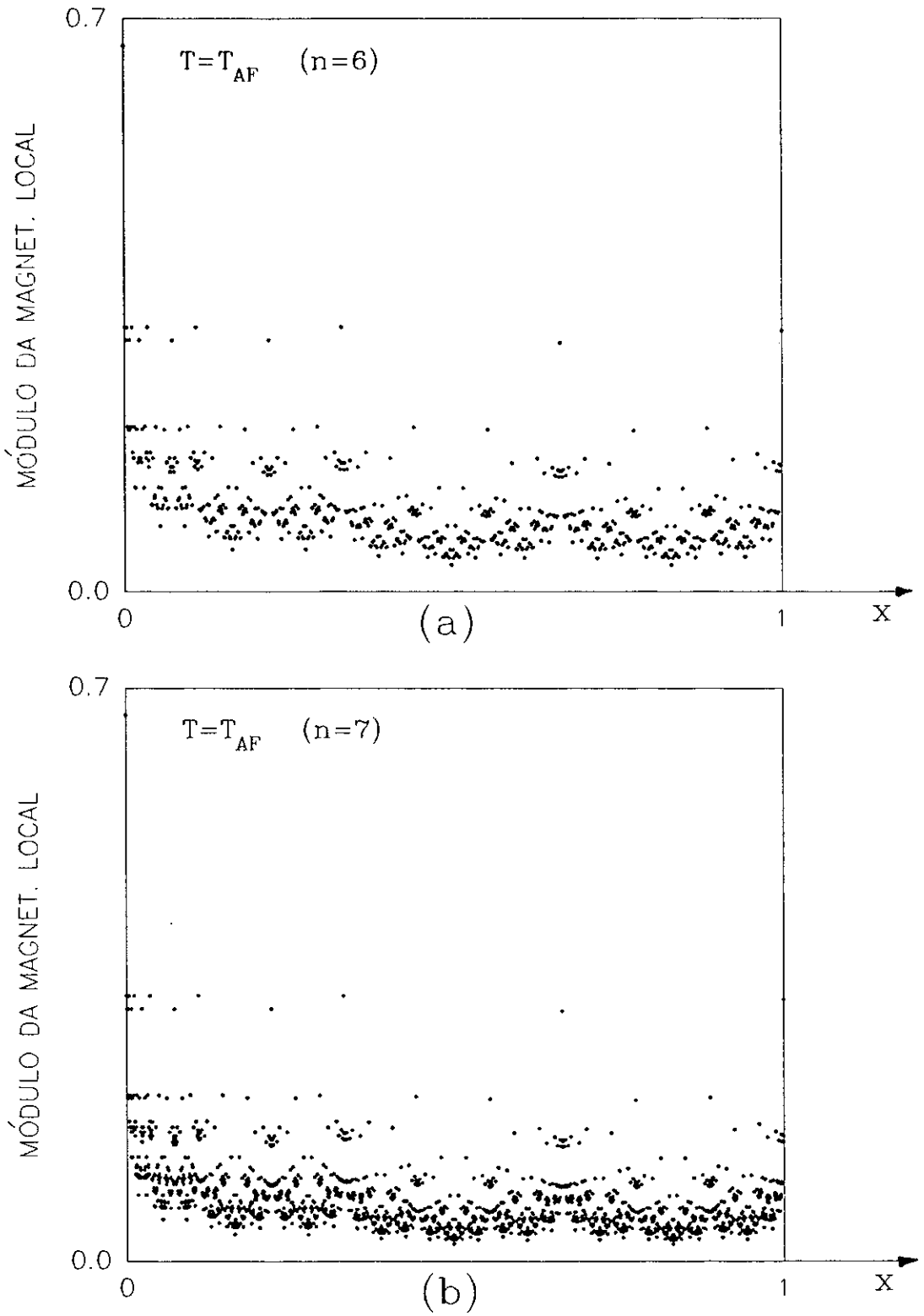


Figura 3.12: Distribuição de $|m_o(x)|$ ao longo de um caminho entre as raízes da rede nas hierarquias 6 e 7 para a temperatura do atrator AF. As magnetizações negativas foram rebatidas para o plano positivo.

dimensão igual a 1 sobre o qual está distribuída uma medida, medida essa obtida da distribuição de magnetizações locais devidamente normalizada. As singularidades na distribuição das magnetizações locais se refletirão na multifractalidade da medida distribuída sobre o perfil. Para caracterizar esta multifractalidade calcularemos os espectros $f(\alpha)$ destas distribuições para as duas temperaturas t_c e t_{AF} . Para esse fim, usaremos o método de Chhabra e Jensen [57,58], já discutido no capítulo 2.

Iniciamos definindo sobre o intervalo $[0,1]$ uma rede de caixas de lado $l_n = 3^{-n}$. Assim, para a distribuição de magnetizações na hierarquia n , dentro de cada caixa existe um e somente um sítio do caminho entre as raízes. Associando um índice i à cada caixa ($i = 1, \dots, 3^n + 1$) definimos a medida na caixa i por

$$P_i = \frac{|m_{\sigma_i}|}{\sum_j |m_{\sigma_j}|}, \quad (3.87)$$

dada pelo módulo da magnetização local no sítio i devidamente normalizado. O denominador $\sum_j |m_{\sigma_j}|$ na expressão de P_i está associado ao parâmetro de ordem do sistema discutido na seção anterior. Naquela seção definimos uma função D_n (equação (3.53)) dada pela diferença entre as magnetizações das duas subredes na hierarquia n

$$D_n = \sum_i m_{\sigma_i}^{(A)} - \sum_i m_{\sigma_i}^{(B)} \quad (3.88)$$

onde $m_{\sigma_i}^{(A)}$ ($m_{\sigma_i}^{(B)}$) representa a magnetização de um spin da subrede \mathcal{A} (\mathcal{B}). Dessa forma, como por definição $m_{\sigma_i}^{(A)} > 0 \forall i$ e $m_{\sigma_i}^{(B)} < 0 \forall i$, podemos ver que o denominador na expressão da medida P_i é a restrição de D_n sobre um caminho mais curto entre as raízes, o que denotaremos por $D_n |_{SP}$ (SP de *Shortest Path* (caminho mais curto)) ($D_n |_{SP} = \sum_j |m_{\sigma_j}| = \sum_j m_{\sigma_j}^{(A)} - \sum_j m_{\sigma_j}^{(B)}$).

Construimos, para alguns valores do parâmetro q ($q = -30, -29, \dots, 19, 20$), uma família de medidas $\{\{\mu_i\}(q)\}$, sendo que na medida $\{\mu_i\}(q)$, a medida na caixa i é dada por

$$\mu_i(q) = \frac{P_i^q}{\sum_j P_j^q} \quad (3.89)$$

Definimos as somas

$$S_f(q) \equiv \sum_i \mu_i(q) \ln \mu_i(q) \quad (3.90)$$

e

$$S_\alpha(q) \equiv \sum_i \mu_i(q) \ln P_i \quad (3.91)$$

Portanto, de acordo com o método de Chhabra e Jensen

$$f(q) = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{S_f(q)}{\ln l} \quad (3.92)$$

e

$$\alpha(q) = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{S_\alpha(q)}{\ln l} \quad (3.93)$$

Na figura (3.13) mostramos, como exemplos, o comportamento das somas $S_f(q)$ e $S_\alpha(q)$ (em $T = T_c$) como função da hierarquia n para alguns valores do parâmetro q . O comportamento linear apresentado reflete a precisão do método na determinação do espectro $f(\alpha)$. As declividades das retas fornecem diretamente as variáveis $f(q)$ e $\alpha(q)$. A eliminação do parâmetro q entre essas variáveis fornece o espectro $f(\alpha)$ da medida, de acordo com o algoritmo apresentado no capítulo 2.

Na figura (3.14) mostramos os espectros $f(\alpha)$ na temperatura crítica e na temperatura do atrator da fase AF. Vale notar que o espectro $f(\alpha)$ em t_{AF} representa na verdade o espectro de toda a fase não usual, já que as distribuições de magnetizações nessa fase não diferirão muito da distribuição na temperatura t_{AF} mostrada na figura (3.10-b). Podemos notar que a função $f(\alpha)$ no atrator t_{AF} se apresenta mais estreita do que na temperatura crítica t_c , refletindo uma maior homogeneidade na distribuição de magnetizações na fase AF. Notamos também, como já era esperado, que o máximo das funções $f(\alpha)$ vale 1, que é a dimensão do suporte da medida. Com relação à precisão do método de computação do espectro $f(\alpha)$, esse se mostra bastante superior, no que diz respeito à definição da curva do espectro, ao método de contagem de caixas (*box counting*) utilizado em diversos trabalhos anteriores [43,44,45,46].

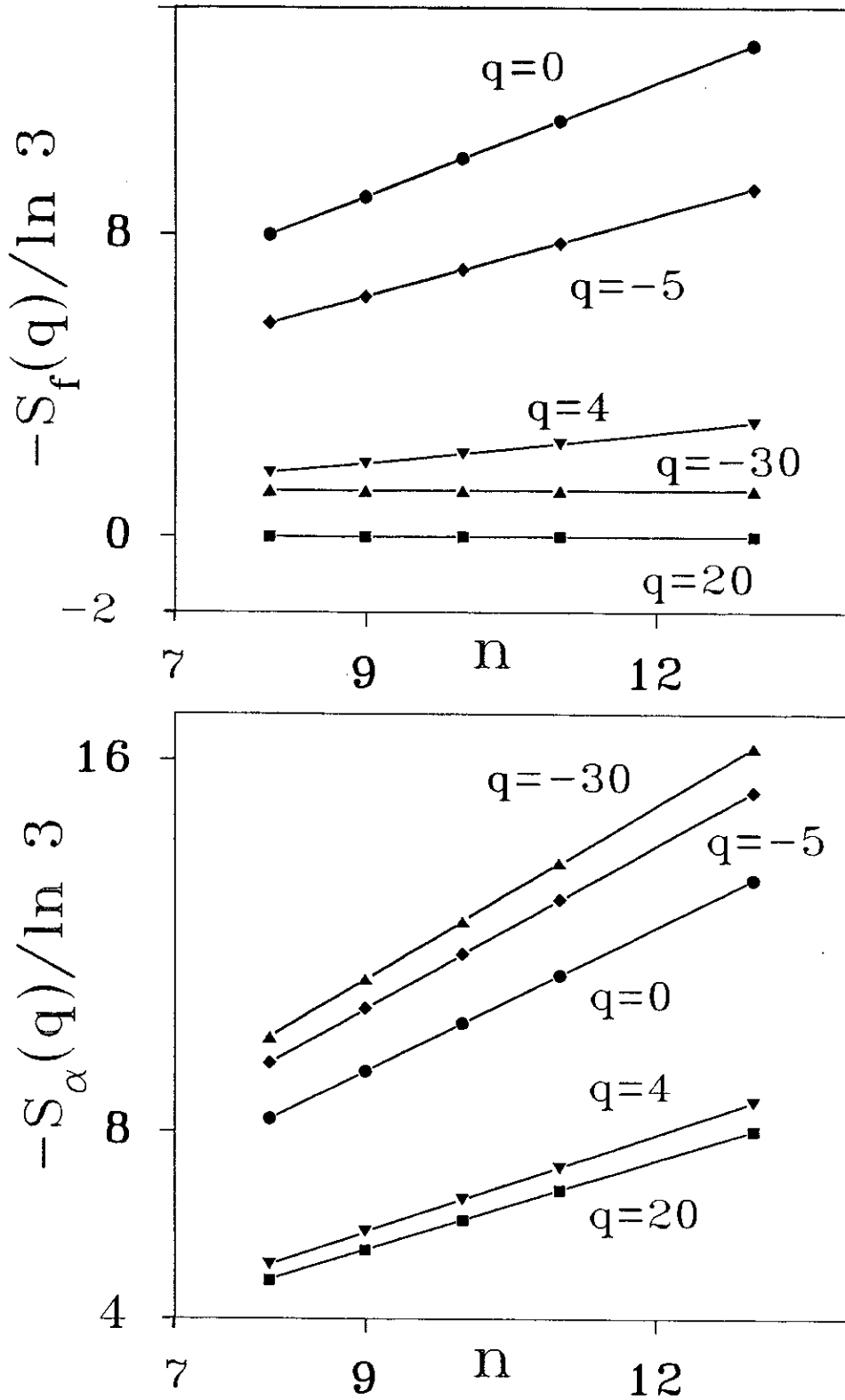


Figura 3.13: Comportamento das somas $S_f(q)$ e $S_\alpha(q)$ (em $T = T_c$) como função da hierarquia da rede para alguns valores do parâmetro q . As declividades das retas fornecem diretamente as funções $f(q)$ e $\alpha(q)$.

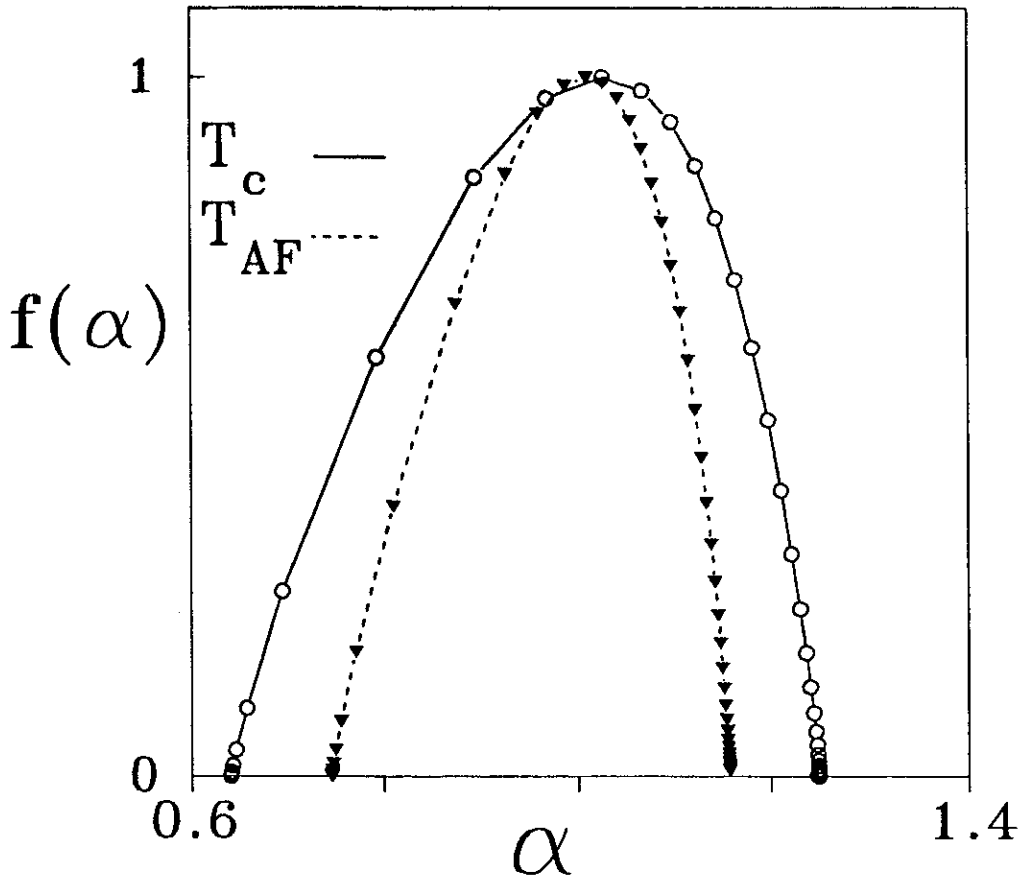


Figura 3.14: Espectros $f(\alpha)$ associados à distribuição de magnetizações na temperatura crítica (curva cheia) e na temperatura do atrator AF (curva tracejada).

Os espectros $f(\alpha)$ estão definidos entre os limites inferior α_{min} e superior α_{max} para o expoente de Hölder α . Esses expoentes limites estão associados aos subconjuntos do suporte da medida onde se concentram as maiores e as menores medidas respectivamente. Para a obtenção do valor exato do expoente de Hölder α_{min} devemos selecionar as maiores magnetizações em cada hierarquia. Essas magnetizações estão presentes logo no início do processo de construção da rede, sendo portanto independentes da hierarquia. Assim sendo, assumimos que

$$\max_i \{P_i^{(n)}\} = \frac{C}{D_n |_{SP}} \sim l_n^{\alpha_{min}^{(n)}} \quad (3.94)$$

onde C é uma constante independente de n e $\alpha_{min}^{(n)}$ é o expoente de Hölder α_{min} na hierarquia n . O denominador $D_n |_{SP}$, como já mencionamos está associado ao parâmetro de ordem do sistema, M_n , estudado na seção anterior. Naquela seção tínhamos associado

um expoente crítico β ao comportamento deste parâmetro de ordem na vizinhança da temperatura crítica. Portanto, assumindo o comportamento crítico $M_n \sim (\delta t_n)^\beta$, resulta para $n \gg 1$

$$D_n |_{SP} \sim 3^n (\delta t_n)^\beta \sim 3 \left(\frac{\delta t_n}{\delta t_{n-1}} \right)^\beta D_{n-1} |_{SP} \quad (t \simeq t_c) \quad (3.95)$$

Usando ainda que $r_c = dt_{n-1}/dt_n |_{t_c} = 3^{1/\nu}$, a iteração da equação acima resulta em

$$D_n |_{SP} \sim (3^{1-\beta/\nu})^n \quad (t \simeq t_c) \quad (3.96)$$

Logo, combinando (3.94) com (3.96) obtemos, na temperatura crítica,

$$\alpha_{min}^{(n)}(t_c) = \frac{1}{\ln l_n} [\ln C - \ln D_n |_{SP}] \quad , \quad (3.97)$$

resultando em

$$\alpha_{min}(t_c) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln D_n |_{SP}}{n \ln 3} = 1 - \frac{\beta}{\nu} = 0,642 \dots \quad (3.98)$$

Na temperatura do atrator AF podemos assumir o mesmo comportamento da equação (3.94) para as maiores medidas (apenas mudando a constante C). Portanto se tomarmos a razão entre as maiores medidas em cada hierarquia para as duas temperaturas obtemos

$$\frac{\max_i \{P_i^{(n)}\} |_{t_{AF}}}{\max_i \{P_i^{(n)}\} |_{t_c}} \sim l_n^{\alpha_{min}^{(n)}(t_{AF}) - \alpha_{min}^{(n)}(t_c)} \quad (3.99)$$

resultando finalmente em

$$\alpha_{min}^{(n)}(t_{AF}) = \alpha_{min}^{(n)}(t_c) + \frac{1}{\ln l_n} \ln \left(\frac{D_n |_{SP}(t_c)}{D_n |_{SP}(t_{AF})} \right) \quad (3.100)$$

Na seção anterior obtivemos uma expressão exata para $D_n |_{SP}$ (equação (3.76)) (efetivamente obtivemos uma expressão para D_n e não para $D_n |_{SP}$, porém é simples demonstrar que as duas expressões são similares, mudando apenas a amplitude da potência em n) dada por

$$D_n |_{SP} = \lambda(t^*) \left(\frac{1 + 2(b^* - a^*)}{3} \right)^n \quad (3.101)$$

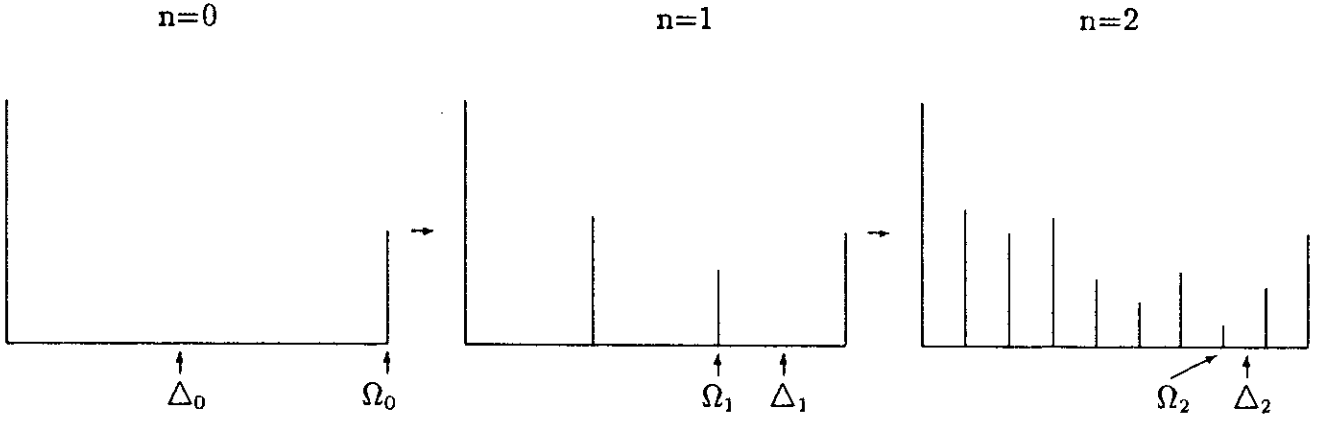


Figura 3.15: Sequência de sítios que contêm a menor magnetização local (em módulo) Ω nas hierarquias 0,1 e 2. Nessa figura, Δ é a função de correlação associada à ligação indicada pela seta.

onde $\lambda(t^*)$ é uma amplitude que depende da temperatura do ponto fixo considerado.

Assumindo esta expressão para $D_n|_{SP}$ na equação (3.100) resulta em

$$\alpha_{min}(t_{AF}) = \alpha_{min}(t_c) + \frac{\ln\left(\frac{1+2(b_{AF}-a_{AF})}{1+2(b_c-a_c)}\right)}{\ln 3} = 0,747\dots \quad (3.102)$$

onde b_{AF} , a_{AF} e b_c , a_c são as funções a^* e b^* calculadas no atrator AF e na temperatura crítica respectivamente.

O expoente de Hölder limite α_{max} associado com o conjunto das menores medidas pode também ser obtido exatamente na temperatura crítica. Para isso seguimos durante o processo de construção da rede os sítios que contêm as menores medidas para cada hierarquia. Esta sequência de sítios contendo a menor medida é mostrada na figura (3.15) para algumas hierarquias.

Dessa figura podemos notar que o sítio que contém a menor magnetização fica alternando de subrede à medida que passamos de uma hierarquia para outra. Se na hierarquia n a menor magnetização está em um sítio da subrede \mathcal{A} , na hierarquia $n+1$, a menor magnetização estará em um outro sítio da subrede \mathcal{B} e assim por diante. Particularizando as equações de recorrência (3.38) para uma sequência de sítios disposta

como mostrado na figura (3.15) obtemos

$$\begin{cases} \Omega_n^{(A)} = b_c \Omega_{n-1}^{(A)} - a_c \Omega_{n-1}^{(B)} + c_c \Delta_{n-1} \\ \Omega_n^{(B)} = b_c \Omega_{n-1}^{(B)} - a_c \Omega_{n-1}^{(A)} - c_c \Delta_{n-1} \\ \Delta_n = (a_c + b_c)(\Omega_{n-1}^{(A)} - \Omega_{n-1}^{(B)}) + d_c \Delta_{n-1} \end{cases} \quad (3.103)$$

onde $\Omega_n^{(A)}$ representa o módulo da magnetização local de um sítio na subrede \mathcal{A} e na hierarquia n (analogamente para a subrede \mathcal{B}), Δ_n é a função de correlação Δ_{ij} para a ligação particular envolvida nesta sequência de sítios (ver a figura (3.15)) e a_c , b_c , c_c e d_c são as funções a_n , b_n , c_n e d_n calculadas em t_c . Portanto, supondo que na hierarquia n a menor magnetização (em módulo) é dada por $\Omega_n^{(A)}$, na hierarquia $n + 1$ essa será dada por $\Omega_{n+1}^{(B)}$ e assim por diante. Logo, as equações (3.103) fornecem uma equação de recorrência para a menor magnetização (em módulo), Ω_n , dada por

$$\begin{cases} \Omega_{n+1} + 2a_c \Omega_n + (a_c^2 - b_c^2) \Omega_{n-1} = c_c [(a_c - b_c) \Delta_{n-1} - \Delta_n] \\ (b_c^2 - a_c^2) \Omega_n - (a_c + b_c) \Omega_{n+1} = [c_c (a_c + b_c) - d_c b_c] \Delta_n + b_c \Delta_{n+1} \end{cases} \quad (3.104)$$

onde Ω_n representa a menor magnetização local (em módulo) na hierarquia n .

Supondo um comportamento crítico para as menores magnetizações e para a função de correlação na forma

$$\begin{aligned} \Omega_n &\sim \lambda_1 (\delta t_n)^{\beta_M} \\ \Delta_n &\sim \lambda_2 (\delta t_n)^{\beta_M} \quad , \end{aligned} \quad (3.105)$$

onde β_M é o expoente crítico associado às menores magnetizações, e definindo $y \equiv r_c^{\beta_M}$ onde $r_c = dt'/dt|_{t_c}$, as equações de recorrência (3.104) fornecem para y a seguinte equação

$$\begin{aligned} (1 + 2a_c y + (a_c^2 - b_c^2) y^2) (b_c + (c_c (a_c + b_c) - d_c b_c) y) - \\ - c_c ((a_c - b_c) y^2 - y) ((b_c^2 - a_c^2) y - (a_c + b_c)) = 0 \quad , \end{aligned} \quad (3.106)$$

cuja solução implica em $\beta_M = 1.670 \dots$. Assim, ficamos com

$$\min_i \{P_i^{(n)}\} = \frac{\Omega_n}{D_n |_{SP}} \sim \frac{(\delta t_n)^{\beta_M}}{3^n (\delta t_n)^\beta} \quad , \quad (3.107)$$

expoente de Hölder	computação do espectro $f(\alpha)$	q	cálculo exato	erros relativos
$\alpha_{\min}(t_c)$	0,6421...	20	0,6427...	0,09%
$\alpha_{\min}(t_{AF})$	0,7468...	20	0,7470...	0,03%
$\alpha_{\max}(t_c)$	1,249...	-30	1,250...	0,08%

Tabela 3.1: Comparação dos valores obtidos para os expoentes de Hölder limites.

logo

$$\frac{\min_i\{P_i^{(n)}\}}{\min_i\{P_i^{(n-1)}\}} \sim 3^{-n} \left(\frac{\delta t_n}{\delta t_{n-1}} \right)^{\beta_M - \beta}, \quad (3.108)$$

e portanto, usando que $r_c = 3^{1/\nu}$, a iteração da equação anterior resulta em

$$\min_i\{P_i^{(n)}\} = \left(3^{-1 + (\beta - \beta_M)/\nu} \right)^n, \quad (3.109)$$

e finalmente em

$$\alpha_{\max}(t_c) = 1 + \frac{(\beta_M - \beta)}{\nu} = 1,250 \dots \quad (3.110)$$

Estes resultados exatos para os expoentes de Hölder limites, estão em excelente acordo com aqueles obtidos pela computação direta dos espectros $f(\alpha)$. Na tabela (3.1) mostramos, para efeito de comparação, os resultados para estes expoentes obtidos através da computação numérica do espectro $f(\alpha)$, via $S_\alpha(q)$ para os valores de q indicados na tabela e através de calculos exatos. Os erros relativos são inferiores a 0.1%, o que demonstra a grande precisão do método de Chhabra e Jensen.

3.9 Energia Interna

Definimos a energia interna adimensional por ligação na hierarquia n , E_{bn} , por

$$E_{bn} \equiv \frac{\langle \mathcal{H}_n \rangle}{3 |J_n| N_{bn}} \quad , \quad (3.111)$$

onde N_{bn} é o número de ligações na rede com hierarquia n ($N_{bn} = 30^n$). Portanto, como em uma dada hierarquia, todas as ligações possuem a mesma média para $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$, conforme podemos ver da equação (3.41), obtemos que

$$E_{bn} = \langle \delta(\sigma_i, \sigma_j) \rangle_n \quad , \quad (3.112)$$

onde $\langle \dots \rangle_n$ denota média termodinâmica calculada na hierarquia n . Logo, a equação (3.41) é uma recorrência para a energia interna, a saber

$$E_{bn} = e_n E_{bn-1} + f_n \quad . \quad (3.113)$$

A iteração desta equação fornece uma expressão exata para a energia interna por ligação. A energia adimensional por sítio E_s pode ser obtida a partir da energia adimensional por ligação multiplicando-se esta última pelo fator $29/20$ que é a razão entre o número de ligações e o número de sítios no limite termodinâmico. Portanto, obtemos

$$E_s = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle \mathcal{H}_n \rangle}{3 |J_n| N_{sn}} = \frac{29}{20} \left(\sum_{i=1}^{\infty} f_i \prod_{j=i+1}^{\infty} e_j + f_{\infty} \right) \quad , \quad (3.114)$$

onde f_{∞} , segundo nossa notação, representa o parâmetro f definido em (3.43) calculado na transmissividade t_{∞} da rede na hierarquia infinita. Na figura (3.16) mostramos o comportamento da energia interna adimensional por sítio em função da temperatura. A assíntota ($T \rightarrow \infty$) da energia por ligação E_b vale $1/3$, já que para uma fase totalmente desordenada resulta $\langle \delta(\sigma_i, \sigma_j) \rangle = 1/3$ e portanto, a assíntota para a energia por sítio vale $29/60 = 0,483\dots$. Na temperatura crítica a energia interna não apresenta descontinuidade, não havendo, portanto, calor latente na transição de fase, o que confirma que essa é uma transição contínua.

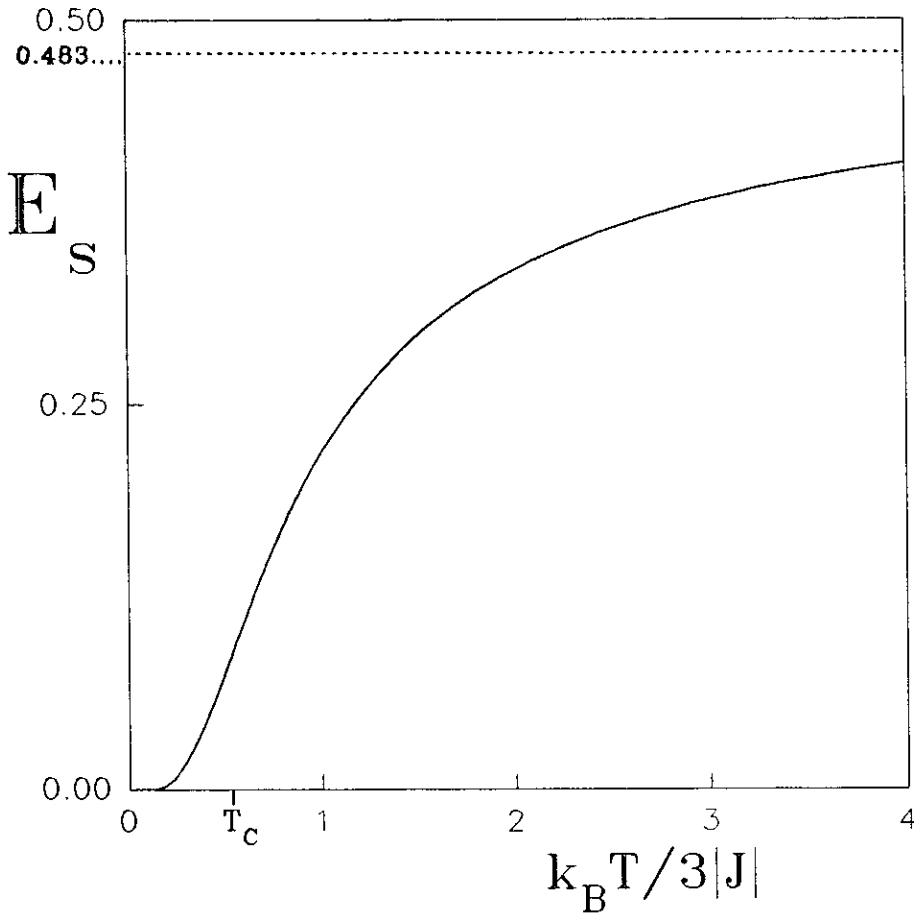


Figura 3.16: Energia interna adimensional por sítio em função da temperatura. A linha pontilhada representa a assíntota da energia para altas temperaturas

Assumindo um comportamento para a energia próximo do ponto crítico na forma $E_{bn} \sim (\delta t_n)^\sigma$, a equação (3.113) fornece para o expoente σ a equação

$$(\delta t_n)^\sigma = e_c r_c^\sigma (\delta t_n)^\sigma + f_c \quad (3.115)$$

onde e_c e f_c são as funções e_n e f_n calculadas no ponto crítico e $r_c \equiv dt'/dt|_{t_c}$. Portanto, obtemos

$$\sigma = -\frac{\ln e_c}{\ln r_c} = 7,514\dots, \quad (3.116)$$

resultado esse que utilizaremos no cálculo do expoente crítico para o calor específico do sistema.

3.10 Calor Específico

Definimos o calor específico adimensional por ligação C_{bn} na hierarquia n por

$$C_{bn} \equiv \frac{1}{3k_B N_{bn}} \frac{\partial \langle \mathcal{H}_n \rangle}{\partial T}, \quad (3.117)$$

onde T é a temperatura da rede e k_B é a constante de Boltzmann. Derivando a equação (3.113) obtemos uma recorrência para C_{bn} dada por

$$C_{bn} = e_n p_n C_{bn-1} + e'_n E_{bn-1} + f'_n \quad (3.118)$$

onde

$$e'_n \equiv \frac{|J_n|}{k_B dT} \frac{de_n}{dT}, \quad f'_n \equiv \frac{|J_n|}{k_B dT} \frac{df_n}{dT} \quad e \quad p_n \equiv \frac{J_n}{J_{n-1}}. \quad (3.119)$$

A iteração desta equação fornece uma expressão exata para o calor específico adimensional por ligação. O calor específico adimensional por sítio C_s , analogamente ao que foi feito para a energia, fica portanto

$$C_s = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{3k_B N_{sn}} \frac{\partial \langle \mathcal{H}_n \rangle}{\partial T} = \frac{29}{20} \left(\sum_{i=3}^{\infty} \left\{ e'_i \left[\sum_{l=1}^{i-2} f_l \prod_{j=l+1}^{i-1} e_j + f_{i-1} \right] + f'_i \right\} \prod_{k=i+1}^{\infty} e_k p_k + \right. \\ \left. + e'_{\infty} \left(\sum_{i=1}^{\infty} f_i \prod_{j=i+1}^{\infty} e_j + f_{\infty} \right) + f'_{\infty} \right) \quad (3.120)$$

Na figura (3.17) mostramos o comportamento do calor específico adimensional por sítio em função da temperatura. Para $T \rightarrow 0$ o calor específico se anula, de acordo com o que se espera da terceira lei da termodinâmica [76]. O calor específico não diverge na transição, estando seu máximo localizado à uma temperatura abaixo da temperatura crítica. Para $T \rightarrow \infty$ o calor específico se anula, concordando com o fato de que os graus de liberdade que compõem o sistema possuem um espectro de energia limitado superiormente. Esse tipo de comportamento não divergente para o calor específico é encontrado também no modelo F antiferroelétrico [77], no modelo XY na rede quadrada [78,79,80] e no modelo de Potts ($q = 3$) anisotrópico na rede quadrada [81]. Para o caso

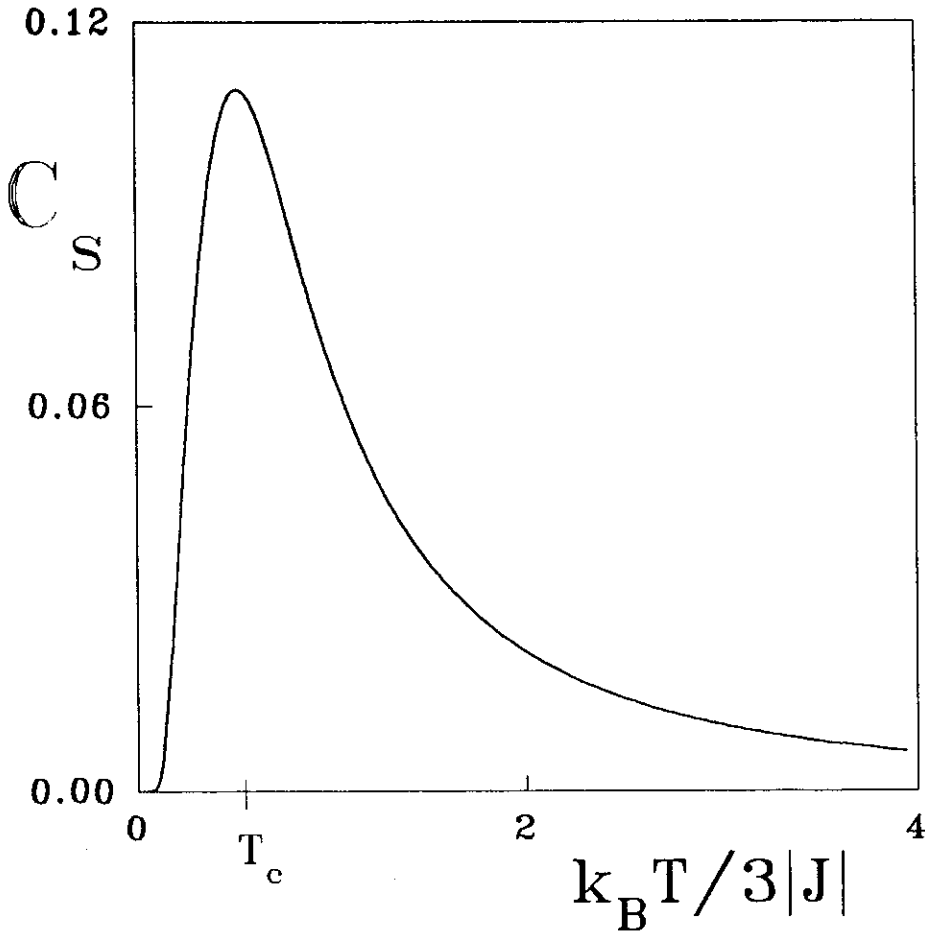


Figura 3.17: Calor Específico adimensional por sítio em função da temperatura.

do AFP com $q = 3$ na rede cúbica, os resultados de MC indicam uma divergência do calor específico na temperatura crítica [21,22].

Assumindo um comportamento para o calor específico na forma $C_{bn} = \psi(\delta t_n)^{-\alpha}$ resulta que $\alpha = 1 - \sigma$, onde σ é o expoente associado a energia (eq. (3.116)) e portanto o expoente crítico associado ao calor específico vale $\alpha = -6,514\dots$

3.11 Entropia

A entropia do sistema pode ser obtida da função de partição do sistema, Z , por

$$\frac{S}{k_B} = \ln Z + T \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \quad (3.121)$$

Para calcular a função de partição do sistema nós utilizamos um método que envolve as funções de partição restritas (vide, por exemplo, [42]) Z_{F_n} e Z_{I_n} , definidas na hierarquia n por

$$Z_{F_n} \equiv \text{Tr}_{\sigma|\sigma_{RA}=\sigma_{RB}=0} \exp(-\beta \mathcal{H}_n(\sigma)) \quad (3.122)$$

e

$$Z_{I_n} \equiv \text{Tr}_{\sigma|\sigma_{RA}=0, \sigma_{RB}=1} \exp(-\beta \mathcal{H}_n(\sigma)) \quad (3.123)$$

onde para o cálculo de Z_{F_n} impomos a condição de que as raízes da rede estejam ambas no estado 0, enquanto que para o cálculo de Z_{I_n} impomos que estas estejam em estados diferentes, σ_{RA} no estado 0 e σ_{RB} no estado 1. Portanto, definindo $r_n \equiv Z_{F_n}/Z_{I_n}$, obtemos para a função de partição do sistema, Z_n , na hierarquia n

$$Z_n = 3Z_{I_n}(2 + r_n) \quad (3.124)$$

Na hierarquia 0 (apenas uma ligação) essas definições fornecem

$$Z_{F_0} = \text{Tr}_{\sigma|\sigma_{RA}=\sigma_{RB}=0} \exp(3K \delta(\sigma_{RA}, \sigma_{RB})) = e^{3K} \quad (3.125)$$

e

$$Z_{I_0} = \text{Tr}_{\sigma|\sigma_{RA}=0, \sigma_{RB}=1} \exp(3K \delta(\sigma_{RA}, \sigma_{RB})) = 1 \quad (3.126)$$

onde K é a constante de acoplamento entre spins primeiros vizinhos. Para a hierarquia 1, um cálculo análogo resulta

$$Z_{F_1} = (2 + 6e^{3K} + e^{9K})^{10} = (2Z_{I_0}^3 + 6Z_{F_0}Z_{I_0}^2 + Z_{F_0}^3)^{10} \quad (3.127)$$

e

$$Z_{I_1} = 3^{10}(1 + e^{3K} + e^{6K})^{10} = 3^{10}(Z_{I_0}^3 + Z_{F_0}Z_{I_0}^2 + Z_{F_0}^2Z_{I_0})^{10} \quad (3.128)$$

ou seja

$$Z_{I1} = Z_{I0}^{30} (3(1 + r_0 + r_0^2))^{10} \quad (3.129)$$

De (3.127) e (3.128) segue que

$$r_1 = \left(\frac{2 + 6r_0 + r_0^3}{3(1 + r_0 + r_0^2)} \right)^{10} \quad (3.130)$$

Essas equações nos mostram que para calcular as funções de partição restritas da célula básica cujas ligações têm acoplamento K , basta conhecer as funções de partição restritas de cada ligação com acoplamento K . Desde que a célula básica é composta de 10 ramos em paralelo, cada ramo sendo constituído de 3 ligações em série, as equações acima seguem naturalmente. Logo, pela construção recursiva da rede, podemos pensar a rede na hierarquia n como sendo composta de 30 réplicas da rede na hierarquia $n-1$ dispostas da mesma maneira como as ligações na célula básica. Daí obtemos as seguintes equações de recorrência para a função de partição restrita Z_{In} e para a razão r_n :

$$Z_{In+1} = Z_{In}^{30} (3(1 + r_n + r_n^2))^{10} \quad (3.131)$$

e

$$r_{n+1} = \left(\frac{2 + 6r_n + r_n^3}{3(1 + r_n + r_n^2)} \right)^{10} \quad (3.132)$$

onde $r_0 = \exp(3K_n)$ e $Z_{I0} = 1$. Vale notar que para calcular a entropia do sistema na rede com hierarquia n , cujas ligações possuem acoplamento K_n , devemos pensa-la como que composta de 30 réplicas da rede na hierarquia $n-1$, cujas ligações também possuem acoplamento K_n . Portanto, iterando esse processo até se atingir apenas uma ligação, o acoplamento K_n entrará como condição inicial através de r_0 , já que a rede na hierarquia n é composta de 30^n ligações com acoplamento K_n . Iterando a recorrência (3.131) e usando a equação (3.124) obtemos

$$Z_n = 3(2 + r_n) \prod_{i=0}^{n-1} [3(1 + r_i + r_i^2)]^{10 \cdot 30^{n-1-i}} \quad (3.133)$$

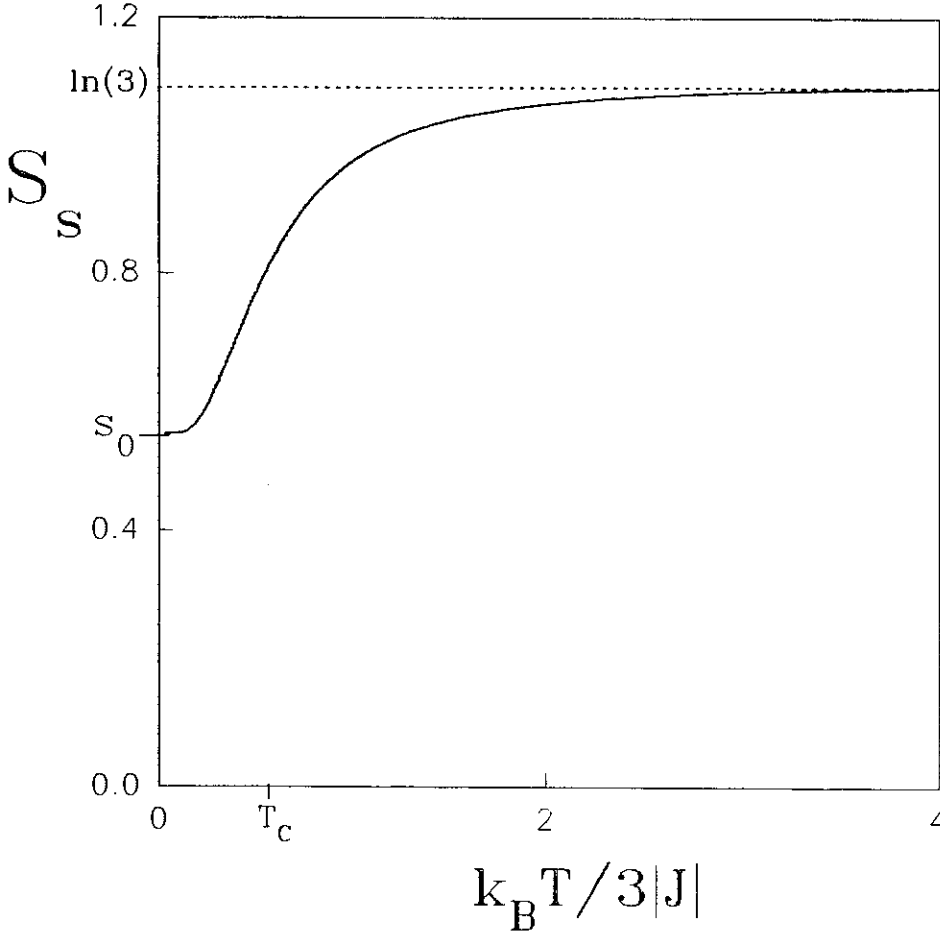


Figura 3.18: Entropia adimensional por sítio em função da temperatura.

e portanto, para $n \gg 1$, usando que $N_{sn} = 20 \cdot 30^n / 29$ obtemos, da expressão acima, que

$$\frac{\ln Z_n}{N_{sn}} = \frac{29}{2} \sum_{i=0}^{n-1} \frac{\ln 3(1 + r_i + r_i^2)}{30^{i+1}} \quad (3.134)$$

Derivando esta expressão em relação a temperatura resulta em

$$\frac{T}{N_{sn}} \frac{\partial \ln Z_n}{\partial T} = -\frac{29}{2} r_i \ln r_i \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1 + 2r_i}{30^{i+1}(1 + r_i + r_i^2)} \quad (3.135)$$

Logo a entropia adimensional por sítio, obtida das equações (3.134) e (3.135), de acordo com (3.121) fica, no limite termodinâmico

$$s \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{S_n}{k_B N_{sn}} = \frac{29}{2} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{30^{i+1}} \left\{ \ln [3(1 + r_i + r_i^2)] - r_i \ln r_i \left(\frac{1 + 2r_i}{1 + r_i + r_i^2} \right) \right\} \quad (3.136)$$

Na figura (3.18) mostramos o comportamento da entropia como função da temperatura. Para $T \rightarrow \infty$, a entropia tem como assíntota o eixo $s = \ln 3$, que corresponde

à entropia máxima esperada (existem 3^{N_s} configurações equiprováveis). Para $T \rightarrow 0$, a entropia por partícula do sistema converge para um valor residual s_0 diferente de zero. A expressão exata para a entropia residual por sítio do sistema, s_0 , é dada por

$$s_0 = \frac{29}{2} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\ln 3(1 + r_i + r_i^2)}{30^{i+1}} = 0,549 \dots \quad (3.137)$$

Para efeito de comparação, é importante notar que em uma cadeia linear a entropia residual exata para o AFP com q estados vale $s_0(d = 1) = \ln(q - 1)$, e portanto, para $q = 3$, $s_0(d = 1) = \ln 2 = 0,69 \dots$. Podemos pensar a RH por nós utilizada como que composta de várias cadeias lineares em paralelo que possuem sítios em comum. Os pontos extremos das cadeias lineares se colapsariam todos nos sítios das raízes da RH. Da mesma maneira existem pontos no interior onde várias cadeias lineares se conectam em um só sítio, formando os sítios da RH com alta conectividade. Com isso, o número de configurações permitidas ao sistema iria diminuindo. Portanto, seguindo esse raciocínio, à medida que as cadeias lineares fossem adquirindo pontos em comum para formar a RH, a entropia residual do sistema iria diminuindo até atingir o valor por nós obtido.

3.12 Hiper-escala e Expoente η em T_c

As relações de escala entre os expoentes críticos foram originalmente propostas para sistemas definidos em redes de Bravais. No entanto, para o caso da relação de Hiper-escala em particular, esta tem sido verificada numericamente para alguns sistemas definidos em redes hierárquicas [38,43,44,45,46] (para exemplos de sistemas onde a hiper-escala falha ver [82] e referências internas). No nosso problema podemos também fazer uma verificação numérica da validade da relação de Hiper-escala ($d_f \nu = 2 - \alpha$), utilizando para isso os expoentes críticos ν e α já calculados. No entanto, antes de fazer uma simples verificação numérica, nós podemos provar analiticamente, usando expressões exatas já obtidas, que a lei de Hiper-escala é satisfeita para esse sistema que estudamos. Para isso, inicialmente devemos derivar a equação de $t'(t)$ ((3.7) (para $P = 10$)) em relação à t . Avaliando a expressão resultante dessa derivação em um ponto fixo da renormalização t^* , essa se simplifica, resultando em uma função de t^* que chamaremos de $g(t^*)$ (note que $g(t_c) = r_c$). Avaliando o parâmetro e_n das recorrências para as magnetizações locais (eq. (3.42)) nesse mesmo ponto fixo, obtemos outra função de t^* , $e(t^*)$. Fazendo a razão entre as duas funções obtidas ficamos com

$$\frac{g(t^*)}{e(t^*)} = 30 \quad (3.138)$$

É fácil verificar que essa identidade tem como caso particular (para $t^* = t_c$) a relação de Hiper-escala.

Assumindo como também válidas as relações de escala

- $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ (Rushbrooke)
- $\nu(2 - \eta) = \gamma$ (Fisher)

obtivemos o expoente η associado ao decaimento algébrico das correlações na temperatura crítica do sistema (chamaremos este expoente de η_c), que vale $\eta_c = -0,381\dots$

Assim sendo, concluímos que existe uma descontinuidade no expoente η como função da temperatura, a saber

$$\eta = \begin{cases} \eta_{AF} = -0,511\dots & \text{para } -1/2 \leq t < t_c \\ \eta_c = -0,381\dots & \text{para } t = t_c \end{cases} \quad (3.139)$$

Em nosso conhecimento, tal comportamento nunca foi reportado na literatura. Note que se utilizarmos que as relações de escala valem apenas como desigualdades, concluímos que $\eta_c \leq -0,381\dots$, o que não exclui a possibilidade de que o expoente η seja contínuo em T_c .

Conclusões

Nesse trabalho apresentamos um sistema com entropia residual não nula onde pudemos demonstrar exatamente a existência de uma fase não usual a baixas temperaturas. A existência dessa fase foi sugerida originalmente por Berker e Kadanoff. As características dessa fase são : decaimento algébrico das correlações entre spins e ordenamento, caso esse exista, não trivial. Em termos do formalismo de GR essa fase está associada a um ponto fixo atrator localizado à uma temperatura finita não nula.

O antiferromagneto de Potts com três estados definido em uma rede hierárquica bipartida do tipo Migdal-Kadanoff, conforme mostramos nesse trabalho, apresenta uma fase com essas características. Pudemos demonstrar exatamente o decaimento algébrico das correlações entre os spins das raízes da RH em toda a fase não usual, calculando também o expoente crítico $\eta_{AF} = -0,51 \dots$ associado a esse decaimento.

Com o objetivo de estudar o ordenamento dos spins na fase não usual, bem como outras grandezas físicas relevantes para o sistema, utilizamos um método de equações de recorrência para as magnetizações locais. Esse método, já utilizado com sucesso em modelos ferromagnéticos definidos em RH's, nos permitiu obter equações de recorrência que expressam as magnetizações locais dos spins criados em uma hierarquia n da RH em função das magnetizações locais dos spins criados em hierarquias anteriores $(0, 1, \dots, n - 1)$.

Realizando uma soma nas equações de recorrência para as magnetizações locais, sobre todos os spins da RH, obtivemos uma recorrência para o parâmetro de ordem do sistema, e daí uma expressão exata para essa grandeza em função da temperatura. Utilizando essa expressão para o parâmetro de ordem, pudemos concluir que esse se anula para qualquer temperatura, resultado esse diferente do que é hoje aceito para o AFP com $q = 3$ na rede cúbica, onde se acredita que exista uma fase ordenada a baixas temperaturas. De fato, para o nosso sistema, verificamos que mesmo aumentando o

número de ramos P da célula básica, o que equivale a aumentar a dimensão da rede, o parâmetro de ordem ainda é nulo para todas as temperaturas. Em particular, isso ocorre para $P = 27$ que corresponde à aproximação de Migdal-Kadanoff para a rede hiper-cúbica com $d = 4$.

A análise da estrutura das distribuições de magnetizações locais revela que essas apresentam um caráter multifractal de infinitas singularidades. Definindo uma medida, derivada das magnetizações locais devidamente normalizadas, sobre um caminho mais curto ligando as duas raízes da RH, pudemos investigar essa multifractalidade. O espectro $f(\alpha)$ característico das distribuições multifractais foi calculado para a temperatura crítica e para a temperatura do atrator da fase não usual. Esses espectros para diferentes temperaturas são diferentes entre si, resultado esse que, em nosso conhecimento, não fora citado ainda na literatura. Os valores limites do expoente de Hölder entre os quais esses espectros estão definidos foram obtidos exatamente, estando em excelente concordância com os mesmos obtidos da computação numérica do espectro $f(\alpha)$.

Obtivemos exatamente a energia interna, o calor específico e a entropia do sistema como funções da temperatura. O calor específico apresenta um máximo à uma temperatura inferior à temperatura crítica T_c do sistema, analogamente ao que ocorre no modelo de Potts ($q = 3$) anisotrópico na rede quadrada e no modelo F de um antiferroelétrico. A entropia converge, à temperatura nula, para um valor residual $s_0 = 0,549\dots$

Fazendo uso de expressões obtidas de maneira exata ao longo do nosso trabalho, pudemos verificar analiticamente a validade da relação de hiper-escala $d_f \nu = 2 - \alpha$ para esse sistema. Assumindo como também válidas as relações de escala de Fisher e de Rushbrooke obtivemos o expoente crítico $\eta_c = -0,38\dots$ associado ao decaimento algébrico das correlações entre spins na temperatura crítica. Esse expoente é diferente daquele obtido para o decaimento na fase não usual, sugerindo uma descontinuidade no expoente η na temperatura crítica T_c , resultado esse que, em nosso conhecimento,

nunca fora citado na literatura.

É interessante citar, para efeito comparativo, as semelhanças e diferenças entre o sistema por nós estudado e o modelo XY em $d = 2$. No modelo XY bidimensional a transição de fase se origina do fato de que o sistema apresenta uma estrutura de vórtices (ordem topológica) que podem estar ligados aos pares (a baixas temperaturas) (fase Kosterlitz-Thouless [83]) ou podem estar totalmente independentes entre si (a altas temperaturas) (fase paramagnética) [84]. As simulações MC nesse sistema [78,79,80] indicam um parâmetro de ordem nulo para todas as temperaturas, analogamente ao que ocorre no nosso caso. A fase a baixas temperaturas apresenta decaimento algébrico das correlações, havendo, no entanto, uma dependência do expoente η com a temperatura, diferentemente do nosso caso onde η é determinado no ponto t_{AF} para toda a fase. Além disso, no modelo XY o expoente η é contínuo na temperatura crítica T_c , o que é provável que não ocorra no nosso caso. Quanto ao comportamento do calor específico, os dois sistemas apresentam um comportamento não divergente. No modelo XY, o calor específico é caracterizado ainda por um comportamento regular em T_c , enquanto que no nosso caso, este apresenta uma singularidade nessa temperatura.

Dentre as possíveis extensões desse nosso trabalho podemos citar

- Estudar esse mesmo sistema sujeito a um campo magnético externo. Isso requer uma generalização do método do Hamiltoniano efetivo, com a inclusão de termos adicionais que contenham esse parâmetro externo. Esse estudo nos permitiria obter o expoente crítico γ e com isso verificar ou não a validade de outras relações de escala (como a de Rushbrooke) para esse sistema. O conhecimento desse expoente nos permitiria também obter exatamente (da relação de Fisher) o expoente crítico η_c . De fato, a verificação de outras relações de escala, diferentes da relação de hiper-escala, para um sistema definido em uma rede fractal, no que é de nosso conhecimento, nunca foi citado na literatura.

- Estudar outros sistemas com entropia residual diferente de zero, via uma generalização do método do Hamiltoniano efetivo, em outras redes fractais. A rede por nós utilizada nesse trabalho é classificada como uma rede do tipo Migdal-Kadanoff, possuindo uma estrutura de ligações em série e em paralelo. Seria interessante fazer um estudo exato como o que foi feito nesse nosso trabalho para o AFP definido em uma rede do tipo Sierpinski gasket, que não possui apenas ligações em série e em paralelo. Isso exigiria uma generalização do método do Hamiltoniano efetivo para redes com três raízes. Com esse estudo poderíamos comparar os resultados em redes com estruturas bastante diferentes e verificar a influência que essa característica da rede exerce sobre o ordenamento do sistema.
- Estudar o modelo XY nessa mesma RH aqui utilizada. Isso nos permitiria concluir algo, comparando os expoentes críticos desses dois sistemas, sobre a relação entre as classes de universalidade do AFP e do modelo XY, analogamente ao que é feito para o AFP ($q=3, d=3$) e o modelo XY ($d=3$) [21,22,24]. Esse estudo deverá conter uma aproximação resultante da discretização dos graus de liberdade do modelo XY, analogamente ao que é feito em [85], .
- Aplicar o método de Monte Carlo (MC) para o AFP ($q=3$) definido nessa RH. No nosso trabalho vimos que a condição de contorno adotada implica que os estados '1' e '2' não podem ser distinguidos um do outro, resultando em uma quebra de simetria do tipo BSS. Em um estudo usando MC isso não ocorreria e, conseqüentemente, poderíamos estudar as configurações do sistema com maiores detalhes. Dessa forma poderíamos investigar se esse sistema apresenta algum tipo de estrutura de vórtices (definidos convenientemente para o AFP [14]) analogamente ao que ocorre no modelo XY ($d=2$). Este trabalho nos daria também uma boa oportunidade de verificar a confiabilidade do método MC para o AFP.

APÊNDICE A

As equações para as médias termodinâmicas envolvendo os spins gerados na última hierarquia σ_1 e σ_2 , obtidas do Hamiltoniano efetivo, em função dos parâmetros efetivos H_1 , H_2 , T_S , T_E e A e do parâmetro externo (temperatura) T_D são :

$$\begin{aligned}
 Z\langle\delta(\sigma_1, 0)\rangle = & \\
 & A\{2 + 4(1 + 3H_1) + 4(1 + 3T_D) + 2(1 + 3H_2)(1 + 3T_D) + \\
 & + 2(1 + 3H_1)(1 + 3T_D)^2 + 4(1 + 3H_2)(1 + 3T_D)^2 + 2(1 + 3T_E) + \\
 & + 4(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + 2(1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
 & + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)^3(1 + 3T_E)\}
 \end{aligned} \tag{3.140}$$

$$\begin{aligned}
 Z\langle\delta(\sigma_2, 0)\rangle = & \\
 & A\{2 + 4(1 + 3H_2) + 4(1 + 3T_D) + 2(1 + 3H_1)(1 + 3T_D) + 4(1 + 3H_1)(1 + 3T_D)^2 + \\
 & + 2(1 + 3H_2)(1 + 3T_D)^2 + 2(1 + 3T_E) + 4(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
 & + 2(1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
 & + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)^3(1 + 3T_E)\}
 \end{aligned} \tag{3.141}$$

$$\begin{aligned}
 Z\langle\delta(\mu_1, \sigma_2)\rangle = Z\langle\delta(\mu_2, \sigma_1)\rangle = Z\langle\delta(\sigma_1, \sigma_2)\rangle = & \\
 & A\{2(1 + 3T_D) + 2(1 + 3H_1)(1 + 3T_D) + 2(1 + 3H_2)(1 + 3T_D) + 4(1 + 3T_D)^2 + \\
 & + 4(1 + 3H_1)(1 + 3T_D)^2 + 4(1 + 3H_2)(1 + 3T_D)^2 + 4(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
 & + 2(1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
 & + 2(1 + 3T_D)^3(1 + 3T_E) + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)^3(1 + 3T_E)\}
 \end{aligned} \tag{3.142}$$

$$\begin{aligned}
& Z\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\sigma_2, 0)\rangle = \\
& A\{2(1 + 3H_1)(1 + 3T_D) + 4(1 + 3H_1)(1 + 3T_D)^2 + \\
& + 2(1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
& + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)^3(1 + 3T_E)\}
\end{aligned} \tag{3.143}$$

$$\begin{aligned}
& Z\langle\delta(\mu_2, 0)\delta(\sigma_1, 0)\rangle = \\
& A\{2(1 + 3H_2)(1 + 3T_D) + 4(1 + 3H_2)(1 + 3T_D)^2 + \\
& + 2(1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
& + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)^3(1 + 3T_E)\}
\end{aligned} \tag{3.144}$$

$$\begin{aligned}
& Z\langle\delta(\sigma_1, 0)\delta(\sigma_2, 0)\rangle = \\
& A\{2(1 + 3T_D) + 2(1 + 3H_1)(1 + 3T_D)^2 + \\
& + 2(1 + 3H_2)(1 + 3T_D)^2 + 2(1 + 3T_D)(1 + 3T_E) + \\
& + (1 + 3H_1)(1 + 3H_2)(1 + 3T_S)(1 + 3T_D)^3(1 + 3T_E)\}
\end{aligned} \tag{3.145}$$

APÊNDICE B

A inversão do sistema de equações (3.30 a 3.34) fornece os parâmetros efetivos H_1 , H_2 , T_S , T_E e A como funções das médias envolvendo os spins μ_1 e μ_2 e do parâmetro T_D . A substituição destes resultados nas equações mostradas no apêndice anterior fornecem as equações de recorrência para as magnetizações locais em diferentes hierarquias. Os parâmetros efetivos em termos das médias envolvendo μ_1 e μ_2 são dados por :

$$H_1 = \frac{3\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle - 2\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle + 1}{3(\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle + \langle\delta(\mu_2, 0)\rangle + \langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle - 2\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle - 1)} \quad (3.146)$$

$$H_2 = \frac{3\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_1, 0)\rangle - 2\langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle + 1}{3(\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle + \langle\delta(\mu_2, 0)\rangle + \langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle - 2\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle - 1)} \quad (3.147)$$

$$\begin{aligned} T_E = & \\ & - [3(\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle + \langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle - 2\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle + \langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - 1)]^{-1} \times \\ & \times \{ \langle\delta(\mu_1, 0)\rangle + \langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - 1 + \\ & + [1 + 3T_D + 3T_D^2 + 3T_D^3]^{-1} \times [\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle (2 + 6T_D + 6T_D^2 + 3T_D^3) - \\ & - 3\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle (1 + 3T_D + 3T_D^2 + 2T_D^3)] \} \end{aligned} \quad (3.148)$$

$$\begin{aligned} T_S = & \\ & [3(\langle\delta(\mu_1, 0) - \delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle)(\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle - \langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle) \times \\ & \times (\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_2, 0)\rangle)]^{-1} \times \\ & \times \{ (\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)) [-2\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle^2 - 5\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle - 2\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle^2 + \\ & + 9\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle + 9\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle - 9\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle^2 - \\ & - 5\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle\langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - 5\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle\langle\delta(\mu_2, 0)\rangle + \\ & + 9\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle\langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - 2\langle\delta(\mu_2, 0)\rangle^2 + 4\langle\delta(\mu_1, 0)\rangle + 4\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle - \\ & - 8\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle + 4\langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - 2] + \langle\delta(\mu_1, 0)\rangle\langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle\langle\delta(\mu_2, 0)\rangle \} \end{aligned} \quad (3.149)$$

$$A = Z \left[\frac{2\langle\delta(\mu_1, 0)\delta(\mu_2, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_1, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_2, 0)\rangle - \langle\delta(\mu_1, \mu_2)\rangle + 1}{18(1 + 3T_D + 3T_D^2)} \right] \quad (3.150)$$

Bibliografia

- [1] S. G. Brush, *History of the Lenz-Ising Model*, Rev. Mod. Phys. 39(1967)883
- [2] F. Y. Wu, *The Potts Model*, Rev. Mod. Phys. 54(1982)235 e *Potts Model of Magnetism*, J. Appl. Phys. 55(1984)2421
- [3] L. Onsager, *Cristal Statistics I : A two-dimensional model with an order-disorder transition*, Phys. Rev. 65(1944)117
- [4] L. J. De Jongh e A. R. Miedema, *Experiments on Simple Magnetic Model Systems*, Adv. Phys 23(1974)1
- [5] E. Domany e M. Schick, *Classification of Continuous Order-Disorder Transitions in Adsorbed Monolayers. II*, Phys. Rev. B 20(1979)3828
- [6] A. N. Berker e L. P. Kadanoff, *Ground-State Entropy and Algebraic Order at Low Temperatures*, J. Phys. A 13(1980)L259
- [7] J. R. Banavar, G. S. Grest e D. Jasnow, *Ordering and Phase Transitions in Antiferromagnetic Potts Models*, Phys. Rev. Lett. 45(1980)1424, e *Antiferromagnetic Potts and Ashkin-Teller Models in Three Dimensions*, Phys. Rev. B 25(1982)4639
- [8] G. S. Grest e J. R. Banavar, *Monte Carlo Study of the Antiferromagnetic Potts Model in two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. 46(1981)1458

- [23] A. V. Bakaev, V. I. Kabanovich e A. M. Kurbatov, *Ordering Problem for the Antiferromagnetic Potts Model : $T=0$ Monte Carlo Studies*, Int. J. Mod. Phys. B 5(1991)3061
- [24] Y. Okabe e M. Kikuchi, *Monte Carlo Study of Random Potts Model*, a ser publicado
- [25] A. V. Bakaev, V. I. Kabanovich e A. M. Kurbatov, *On the Correlation Function of the 2D Antiferromagnetic Potts Model*, J. Phys. A 25(1992)L31
- [26] Z. Rácz e T. Vicsek, *Ising Transition into an Order with Extensive Entropy at $T=0$: Potts Antiferromagnets in a Magnetic Field*, Phys. Rev. B 27(1983) 2992
- [27] R. Riera, *Critical Phases of Antiferromagnetic Potts Model on Fractals*, J. Phys. A 19(1986)3395
- [28] Y. Qin e Z. R. Yang, *Diamond-Type Hierarchical Lattices for the Potts Antiferromagnet*, Phys. Rev. B 43(1991)8576
- [29] F. S. de Menezes e A. C. N. de Magalhães, *Potts model on Infinitely Ramified Sierpinski gasket-Type Fractals and Algebraic Order at Antiferromagnetic Phases*, Phys. Rev. B 46(1992)11642
- [30] N. Ostrowsky e H. E. Stanley (eds.), *On Growth and Form*, M. Nijhoff, The Hague (1985)
- [31] Y. Gefen, B. B. Mandelbrot e A. Aharony, *Critical Phenomena on Fractal Lattices*, Phys. Rev. Lett. 45(1980)855
- [32] M. Kaufman e R. B. Griffiths, *Exactly Soluble Ising Models on Hierarchical Lattices*, Phys. Rev. B 24(1981)496
- [33] M. Kaufman e R. B. Griffiths, *First-order Transitions in Defect Structures at a Second-Order Critical Point for the Potts Model on Hierarchical Lattices*, Phys. Rev. B 26(1982)5282
- [34] R. B. Griffiths e M. Kaufman, *Spin Systems on Hierarchical Lattices. Introduction and Thermodynamic Limit*, Phys. Rev. B 26(1982)5022
- [35] J. R. Melrose, *Hierarchical Lattices : Some Examples with a Comparison of Intrinsic Dimension and Connectivity and Ising model Exponents*, J. Phys. A 16(1983)3077
- [36] M. Kaufman e R. B. Griffiths, *Spin Systems on Hierarchical Lattices. II : Some Examples of Soluble Models*, Phys. Rev. B 30(1984)244

- [51] M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, A. Libchaber, I. Procaccia e J. Stavans, *Global Universality at the Onset of Chaos : Results of a Forced Rayleigh-Bénard Experiment*, Phys. Rev. Lett. 55(1985)2798
- [52] P. Meakin, A. Coniglio, H. E. Stanley e T. A. Witten, *Scaling properties for the Surfaces of Fractal and Nonfractal Objects: An Infinite Hierarchy of Critical Exponents*, Phys. Rev. A 34(1986)3325
- [53] T. C. Halsey e M. H. Jensen, *Spectra of Scaling Indices for Fractal Measures: Theory and Experiment*, Phys. D 23 (1986)112
- [54] T. C. Halsey, M. H. Jensen, L. P. Kadanoff, I. Procaccia e B. I. Shraiman, *Fractal Measures and their Singularities : The Characterization of Strange Sets*, Phys. Rev. A 33(1986)1141
- [55] C. Meneveau e K. R. Sreenivasan, *Simple Multifractal Cascade Model for Fully Developed Turbulence*, Phys. Rev. Lett. 59(1987)1424
- [56] R. Blumenfeld, Y. Meir, A. Aharony e A. B. Harris, *Resistance Fluctuations in Randomly Diluted Networks*, Phys. Rev. B 35(1987)3524
- [57] A. B. Chhabra e R. V. Jensen, *Direct Determination of the $f(\alpha)$ Singularity Spectrum*, Phys. Rev. Lett. 62(1989)1327
- [58] A. B. Chhabra, C. Meneveau, R. V. Jensen e K. R. Sreenivasan, *Direct Determination of the $f(\alpha)$ Singularity Spectrum and its application to Fully Developed Turbulence*, Phys. Rev. A 40(1989) 5284
- [59] N. Boccara, *Symétries Brisées*, Hermann, Paris (1976)
- [60] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford Univ. Press, London (1971)
- [61] E. A. Guggenheim, *The Principle of Corresponding States*, J. Chem. Phys. 13(1945)253
- [62] B. Widom, *Equation of state in the neighborhood of the Critical Point*, J. Chem. Phys. 43(1965)3898
- [63] L. P. Kadanoff, *Scaling Laws for Ising Models near T_c* , Physics 2(1966)263
- [64] B. B. Mandelbrot, *Fractals Form, Chance, and Dimension*, Freeman, São Francisco (1977)

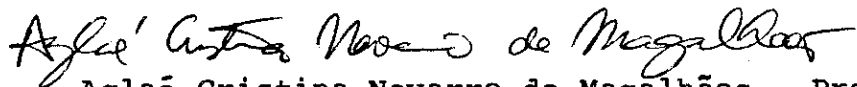
- [65] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, São Francisco (1983)
- [66] J. Feder, *Fractals*, Plenum Press, New York (1988)
- [67] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena*, World Scientific, Singapura (1988)
- [68] T. Tél, *Fractals, Multifractals and Thermodynamics*, Z. Naturforsch. 43a(1988)1154
- [69] K. Falconer, *Fractal Geometry : Mathematical Foundations and Applications*, J. Wiley (1990)
- [70] J. D. Farmer, *Information Dimension and the Probabilistic Structure of Chaos*, Z. Naturforsch. 37a(1982)1304
- [71] P. Billingsley, *Ergodic Theory and Information*, Wiley, New York (1965)
- [72] L. P. Kadanoff, *Notes on Migdal's Recursion Formulas*, Ann. Phys. 100(1976)359
- [73] C. Tsallis e S. V. F. Levy, *Simple Method to Calculate Percolation, Ising, and Potts Clusters : Renormalization-Group Applications*, Phys. Rev. Lett. 47(1981)950
- [74] J. W. Essam e C. Tsallis, *The Potts Models and Flows : I. The Pair Correlation Function*, J. Phys. A 19(1986)409
- [75] M. N. Barber, em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, pag. 145, eds. C. Domb e J. L. Lebowitz (Academic Press, New York)(1983)
- [76] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, Mc Graw Hill, 1988
- [77] E. H. Lieb, *Exact Solution of the F Model of an Antiferroelectric*, Phys. Rev. Lett. 18(1967)1046
- [78] J. Tobochnik e G. V. Chester, *Monte Carlo Study of the Planar Spin Model*, Phys. Rev. B 20(1979)3761
- [79] J. E. V. Himbergen e S. Chakravarty, *Helicity Modulus and Specific Heat of Classical XY Model in Two Dimensions*, Phys. Rev. B 23(1981)359
- [80] C. Bowen, D. L. Hunter e N. Jan, *Monte Carlo Simulation of the Two-Dimensional Planar Model*, J. Stat. Phys. 09(1992)1097
- [81] W. Kinzel, W. Selke e F. Y. Wu, *A Potts model with infinitely degenerate ground state*, J. Phys. A 14(1981)L399

- [82] W. Jezewsky e P Tomczak, *Exact Renormalization-Group Approach to Critical Phenomena in an Ising System with Long-Range Interactions on the Sierpinski-Gasket Lattice*, Phys. A 171(1991)209
- [83] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, *Ordering, Metastability and Phase Transitions in Two-Dimensional Systems*, J. Phys. C 6(1973)1181
- [84] J. M. Kosterlitz, *The Critical Properties of the Two-Dimensional XY Model*, J. Phys. C 7(1974)1046
- [85] M. Cieplak, J. R. Banavar, M. S. Li e A. Khurana, *Frustration, Scaling, and Local Gauge Invariance*, Phys. Rev. B 45(1992)786

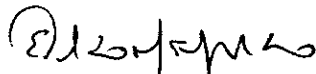
"ANTIFERROMAGNETO DE POTTS EM UMA REDE FRACTAL:
ESTUDO DE UMA FASE NÃO USUAL"

JOSE ARNALDO REDINZ

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



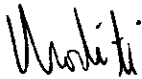
Aglaé Cristina Navarro de Magalhães - Presidente



Evaldo Mendonça Fleury Curado - Presidente



Rosane Riera Freire



Itzhak Roditi