



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

MÁRIO JORGE GUIMARÃES ROCHA NETO

ESTUDO DE MODELOS DE ISING COM SPIN 1 EM REDES HIERÁRQUICAS

Recife
2018

MÁRIO JORGE GUIMARÃES ROCHA NETO

ESTUDO DE MODELOS DE ISING COM SPIN 1 EM REDES HIERÁRQUICAS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Sérgio Galvão Coutinho

Co-Orientador: Prof. Dr. Edvaldo Nogueira Junior

Recife
2018

Catálogo na fonte
Bibliotecária Elaine Cristina de Freitas CRB4-1790

R672e Rocha Neto, Mário Jorge Guimarães
Estudo de modelos de Ising com Spin 1 em redes hierárquicas / Mário
Jorge Guimarães Rocha Neto. – 2018.
125 f., fig.

Orientador: Sérgio Galvão Coutinho
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN.
Física. Recife, 2018.
Inclui referências e apêndices.

1. Física Estatística 2. Modelo de Ising spin-1. 3. Modelo Blume-Capel .
4. Redes Hierárquicas I. Coutinho, Sérgio Galvão (Orientador) II. Título.

530.1595 CDD (22. ed.) UFPE-FQ 2018-36

MÁRIO JORGE GUIMARÃES ROCHA NETO

ESTUDO DE MODELOS DE ISING COM SPIN 1 EM REDES HIERÁRQUICAS

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Aprovada em: 22/02/2018.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Sérgio Galvão Coutinho
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Edvaldo Nogueira Junior
Co-Orientador
Universidade Federal da Paraíba

Prof. Dr. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Maurício Domingues Coutinho Filho
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Dr. Francisco Cesar de Sá Barreto
Examinador Externo
Universidade Federal de Minas Gerais

Prof. Dr. Welles Antônio Martinez Morgado
Examinador Externo
Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

*Dedico às
minhas queridas avós Ivone França e Lúcia Samico, à João Dias, à minha esposa, à meus pais e
irmãos .*

AGRADECIMENTOS

À Deus,

À minha querida Edilânia Rocha que ao longo dessa jornada se tornou minha esposa, obrigado por sempre acreditar em mim, por sua paciência, companheirismo e amor ao longo dessa difícil caminhada, sem você não seria capaz de passar por mais esse desafio. Te amo amor!

Aos meus pais, Francisco Rocha e Ivoneide França, pelo apoio, pela educação, amor, carinho, dedicação ao longo de toda a minha formação e que me inspiram para ser uma pessoa cada vez melhor.

Aos meus irmãos: André Samico, Teo Dias e Manuella Rocha, vocês são partes fundamentais dessa conquista.

À minha família: meu avô, Mário Jorge Rocha, minha tia Fátima Costa, meu sogro Clélio Elizio Albuquerque, para minha sogrinha Edilene Santos, às minhas cunhadas Camila Albuquerque e Carolayne Albuquerque, meus tios e tias: Helder França e Elke Vieira, Israel França e Kênia Gomes, Geórgia França e Mário Rodrigues, Regina Celli, Vera Samico, Paula Samico, Eduardo Samico e Eliana, Mônica Samico e Joseildo, meus primos e primas.

Aos amigos que sempre me apoiaram e que de maneira direta ou indireta contribuíram nessa jornada. Paulo Hertton e Ariane, Pedro Henrique e Tati, Hildson Dornelas e Catarina, Hugo Souza e Rayanna, Felipe e Ariane Clara, Maelyson Rolim, Adson Rodrigues e Rodrigo Ordônio.

Aos amigos de “trabalho” por tanto me ajudarem no dia-a-dia da universidade: , Wendson Antônio, Milton Vianna, Daniel Souza , Fillipe, Rick 2/3, Wellington, Raoni, Alisson, Pedro.

Agradeço ao professor Sérgio Coutinho além de excelente professor e orientador um amigo, sempre solícito, dedicado e paciente.

Agradeço também ao professor Edvaldo Nogueira Jr. pela sua co-orientação que mesmo a distância enriqueceu o trabalho com idéias, observações e sugestões pertinentes.

Agradeço ao professor Gustavo Camelo Neto pelo suporte, e pelos ensinamentos teóricos e computacionais para o desenvolvimento desta tese.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro, que foi sem dúvida de fundamental importância.

RESUMO

Nesta tese são estudadas as transições de fase e as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising com variável de spin-1, definido em redes hierárquicas com dimensão d arbitrária. Esses modelos têm sido estudados por diversos métodos e técnicas utilizadas para análise das transições de fase em mecânica estatística e aplicados em muitos sistemas físicos, como para a transição- λ para a superfluidez e separação de fases em misturas de ^3He - ^4He líquidos, a qual exibe um ponto tricrítico. As propriedades críticas e termodinâmicas de modelos de Ising com spin-1, em redes hierárquicas diamante, são investigadas com uma metodologia que combina a técnica do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff com um procedimento *exato* que possibilita calcular, através de relações de recorrência, o parâmetro de ordem e outras grandezas locais do modelo. Inicialmente, o modelo Blume-Capel ferromagnético foi estudado em detalhes. O diagrama de fases, no espaço de parâmetros temperatura *versus* campo cristalino, apresenta o fenômeno da reentrância entre as fases ferromagnética e paramagnética onde observa-se uma descontinuidade no parâmetro de ordem e na densidade de spins n_0 no estado $S = 0$ sobre a linha de transição em baixas temperaturas. Essas descontinuidades se reduzem até se anularem à medida que, sobre a linha de transição, aumentamos a temperatura sinalizando a presença do ponto tricrítico. Utilizando as relações de recorrência exatas para as magnetizações e funções de correlação locais, entre hierarquias sucessivas, são calculadas as propriedades locais e globais do modelo incluindo, além dos parâmetros de ordem que descrevem cada fase, grandezas termodinâmicas do modelo. Os expoentes críticos associados ao parâmetro de ordem e ao comprimento de correlação são estimados e apresentam boa concordância com resultados exatos conhecidos na literatura para o modelo de Ising com spin-1/2 nas mesmas redes hierárquicas. Ademais, foi estudada como a magnetização está distribuída ao longo de uma *geodésica* ligando os sítios externos da rede, em temperaturas e campos cristalinos sobre a linha de transição. A estrutura formada apresenta um espectro multifractal, nas transições de segunda ordem, convergindo para o espectro fractal de um único ponto (monofractal) à medida a temperatura crítica do sistema é reduzida ao longo da linha de transição. As descontinuidades no parâmetro de ordem e na densidade de spins n_0 , o comportamento das propriedades termodinâmicas e do espectro multifractal do parâmetro de ordem foram utilizados para delimitar a localização do ponto tricrítico sobre a linha de transição. O modelo Blume-Capel desordenado com interações e campos cristalinos competitivos é também estudado. Nesse caso, as interações entre pares de spins e os valores para o campo cristalino local são fixados através de variáveis aleatórias independentes que seguem uma distribuição de probabilidades gaussiana simétrica. Para esse modelo, o procedimento recursivo exato para as grandezas locais entre hierarquias sucessivas é generalizado para incluir

a desordem. A temperatura crítica para a transição vidro de spins-paramagnética é calculada através da evolução das distribuições de probabilidades para as interações e campos sob renormalização. Por fim, as propriedades multifractais do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson nas vizinhanças da transição são calculadas e discutidas.

Palavras-chaves: Modelo de Ising spin-1. Modelo Blume-Capel. Redes Hierárquicas. Magnetização Local

ABSTRACT

In this thesis we study the phase transitions and thermodynamic properties of the Ising model with spin-1 variable, defined on hierarchical lattices with arbitrary dimension d . These models have been studied by several methods and techniques used to analyze the phase transitions in statistical mechanics and applied in many physical systems, such as for the λ -transition of the superfluidity and phase separation in mixtures of ^3He - ^4He liquids, which exhibits a tricritical point. The critical and thermodynamic properties of spin-1 Ising models in diamond hierarchical lattice are investigated with a methodology that combines the technique of the Migdal-Kadanoff renormalization group of with an *exact* procedure that makes it possible to calculate, through recurrence relations, the order parameter and other local quantities of the model. Initially, the ferromagnetic Blume-Capel model was studied in detail. The phase diagram, in the parameter space temperature *versus* crystal field, presents the phenomenon of reentrancy between the ferromagnetic and paramagnetic phases, where a discontinuity is observed both in the order parameter and in the density of spins n_0 in state $S = 0$, on the transition line at low temperatures. These discontinuities are reduced until they are annulled as we increase the temperature on the transition line, signaling the presence of the tricritical point. Using the exact recurrence relations for the magnetizations and local correlation functions, between successive hierarchies, the local and global properties of the model are calculated, including, in addition to the order parameters that describe each phase, the thermodynamic quantities of the model. The critical exponents associated with the order parameter and the correlation length are estimated and show good agreement with the exact results known in the literature for the Ising model with spin-1/2 in the same hierarchical lattice. In addition, it has been studied how the magnetization is distributed along a geodesic linking the external sites of the lattice, at values of the temperatures and crystal fields on the transition line. The structure formed has a multifractal spectrum, at the second order transitions, converging to the fractal spectrum of a single point (monofractal) as the system critical temperature is reduced along the transition line. The discontinuities in the order parameter and the spins density n_0 , the behavior of the thermodynamic properties and the multifractal spectrum of the order parameter were used to delimit the location of the tricritical point on the transition line. The disordered Blume-Capel model with competing interactions and random crystal fields is also studied. In this case, the interactions between pairs of spins and values for the local crystalline field are set by independent random variables following a symmetric Gaussian probability distributions. For this model, the exact recursive procedure for local quantities between successive hierarchies is generalized to include disorder. The critical temperature for the transition paramagnetic-spin glass is calculated through the evolution of probability distributions for the interactions and fields

under renormalization. Finally, the multifractal properties of the Edwards-Anderson order parameter in the vicinity of the transition are calculated and discussed.

Keywords: Spin-1 Ising model. Blume–Capel model. Hierarchical lattices. Local magnetization

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

| | |
|---|----|
| Figura 1 – Diagrama de fases para misturas de ^3He - ^4He líquidos. Temperatura em função da concentração molar (x_3) de ^3He , ao final da linha- λ no encontro com as linhas que contornam a região de coexistência está localizado o ponto tricrítico. Figura retirada da referência (1). | 20 |
| Figura 2 – Calor específico do ^4He à temperatura de vapor sobre o ponto λ . Figura retirada da referência (1). | 20 |
| Figura 3 – Diagramas de fases para (a) aproximação de campo médio (MFA) e (b) aproximação de campo efetivo para o modelo Blume-Capel numa rede diamante para um cluster de cinco sítios. Em ambos os casos a fronteira de transição F - P apresenta um ponto tricrítico C_1 e C_2 . Figura retirada da referência (2). | 21 |
| Figura 4 – Representação da transformação de blocos de spins para de uma rede quadrada onde cada sítio é ocupado por um spin: (a) a representação da rede original da construção de Kadanoff, (b) blocos de spins representando a fração dos graus de liberdade que são somados e (c) rede nova renormalizada com menos graus de liberdade que a rede original. | 26 |
| Figura 5 – Representação de um fluxo genérico e dos tipos de ponto fixo, ponto fixo repulsivo \mathbf{K}_A^* , misto \mathbf{K}_B^* e atrativo \mathbf{K}_C^* , em um espaço de parâmetros. | 29 |
| Figura 6 – Processo de construção de uma rede hierárquica tipo diamante: (a) representa a ligação primitiva de ordem 0, (b) célula geradora de ordem 1 com p conexões e fator de escala b igual ao número de ligações por conexão. | 30 |
| Figura 7 – Processo de construção de uma rede hierárquica com $p = 2$ e $b = 2$ com dimensão $d = 2$. A figura (a) representa a ligação primitiva de ordem 0, (b) célula geradora de ordem 1 e (c) rede de ordem 2. | 31 |
| Figura 8 – Ilustração do processo de deflação da rede, por simplicidade, de ordem (a) $n = 1$ para (b) $n = 0$. Todos os sítios internos $\{\sigma_i\}$, $i = 1, \dots, p$ em (a) são dizimados até que apenas reste um acoplamento efetivo entre os sítios externos S_1 e S_2 como pode ser observado em (b) . | 36 |

| | |
|--|----|
| Figura 9 – Representação esquemática do modelo equivalente. As linhas duplas representam as interações (J_i, L_i, K_i) entre o sítio interno (círculo preto) e um dos sítios externos (círculo branco) de uma única conexão arbitrária da célula básica. As linhas pontilhadas representam as interações efetivas do restante da rede $(J'_\ell, L'_\ell, K'_\ell)$ ($\ell = 1, 2$). As setas cinzas representam o campo magnético externo efetivo e o campo cristalino externo efetivo sobre os sítios externos. | 38 |
| Figura 10 – Diagrama de fluxo para o modelo Blume-Capel ferromagnético numa rede hierárquica tipo diamante. Os pontos indicam as localizações dos pontos fixos das fase ferromagnética e paramagnética, o ponto I indica um ponto relevante e o ponto E indica ponto fixo, definidos na Tabela 4.1. | 44 |
| Figura 11 – Diagrama de fases para o modelo Blume-Capel ferromagnético numa rede hierárquica tipo diamante. As cores indicam a dimensão: a preta para $d = 2$, a azul para $d = 3$ e a vermelha para $d = 4$. As letras F e P, com cores diferentes, indicam as regiões ferromagnética e paramagnética, respectivamente. As letras A, B, D e E indicam pontos relevantes, que serão discutidos ao longo desta tese, definidos na Tabela 4.1. . . | 45 |
| Figura 12 – Magnetização total por spin versus temperatura para alguns valores de α de acordo com as cores da legenda antes da reentrância ($\alpha < \alpha^*$) e na região da reentrância ($\alpha^* < \alpha < \alpha_B$) para rede hierárquica tipo diamante para (a) dimensão $d = 2$, (b) dimensão $d = 3$ e (c) dimensão $d = 4$ | 50 |
| Figura 13 – Fração de sítios n_0 com configuração de spin $S_i = 0$ em função da temperatura para valores alguns valores fixos do parâmetro α indicados nas legendas (a) para $d = 2$, (b) $d = 3$ e (c) $d = 4$. Para $d = 2$, adicionamos um valor de $\alpha > \alpha_B$ indicado por quadrados pretos. . . | 52 |
| Figura 14 – Gráficos das densidades da fração de spins no estado $S_i = 0$ (n_0) em função da temperatura reduzida ($1/J$) e do campo cristalino reduzido ($\alpha = \Delta/J$) para a rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 2$. A linha contínua indica a fronteira de separação das fases ferromagnética e paramagnética (ordenada e desordenada). As \star marcam os valores onde as derivadas de n_0 em função da temperatura são mínimos, para um valor de α fixo. Os pontos \bullet representam as coordenadas dos pontos (T_0, α_0) , (T_{max}, α_B) , (T_c, α_c) e $(T = 0, \alpha_d)$. As cores definem as densidades de acordo com a legenda a direita. | 53 |

| | |
|--|----|
| Figura 15 – Gráficos das densidades da fração de spins no estado $S_i = 0$ (n_0) em função da temperatura reduzida ($1/J$) e do campo cristalino reduzido ($\alpha = \Delta/J$) para a rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 3$. A linha contínua indica a fronteira de separação das fases ferromagnética e paramagnética (ordenada e desordenada). As \star marcam os valores onde as derivadas de n_0 em função da temperatura são mínimos, para um valor de α fixo. Os pontos \bullet representam as coordenadas dos pontos (T_0, α_0) , (T_{max}, α_B) , (T_c, α_c) e $(T = 0, \alpha_d)$. As cores definem as densidades de acordo com a legenda a direita. | 54 |
| Figura 16 – Diagrama de fases para o modelo BC ferromagnético da temperatura em função da densidade n_0 para (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$ | 55 |
| Figura 17 – Energia interna do modelo BC em unidades de J em função da temperatura para valores de α fixo com $\alpha = 0,00$, $d = 2$ e $n = 21$ hierarquias recuperando o modelo de Ising $S = 1$ | 56 |
| Figura 18 – Energia interna do modelo BC em unidades de J em função da temperatura para valores de α fixo com $\alpha = 1,061$ na região da reentrância ($\alpha^* < \alpha \leq \alpha_B$). | 57 |
| Figura 19 – Densidade de energia interna em função de T/T_c sobre a fronteira de transição F-PO para $d = 2$, evidenciando o aumento no salto da densidade de energia à medida que reduzimos a temperatura. Os símbolos indicam valores das respectivas temperaturas críticas. | 58 |
| Figura 20 – Calor específico versus temperatura em unidades de J , para $\alpha = 0,00$ para o modelo BC ferromagnético na rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 2$ | 59 |
| Figura 21 – Calor específico versus α para alguns valores de n de acordo com as cores da legenda com $T_c = 1,000$ para o modelo BC na rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 2$ | 60 |
| Figura 22 – Picos do calor específico versus L . Observando em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$ o comportamento linear para os picos em função na escala logarítmica na região de baixas temperaturas. Enquanto que em (c) observamos um comportamento semelhante a função logarítmica para transições de segunda ordem. | 62 |
| Figura 23 – Susceptibilidade χ_D associada ao campo cristalino D sobre a fronteira de transição para $n = 15$, (a) $T_c = 0,200$, (b) $T_c = 0,300$ e $d = 3$ | 64 |
| Figura 24 – Valores dos picos da susceptibilidade χ_D em função do número de hierarquias sobre a fronteira de transição para (a) $T_c = 0,200$, (b) $T_c = 0,300$ e $d = 3$ | 65 |

| | |
|--|----|
| Figura 25 – Densidade de entropia $s(T)$ em unidades de J em função de T/T_c sobre a fronteira de transição F-PO para o modelo BC em redes com $d = 2$, evidenciando o aumento na descontinuidade da densidade de entropia à medida que reduzimos a temperatura. Os símbolos indicam valores das temperaturas críticas. | 66 |
| Figura 26 – Calor latente em função da temperatura sobre a linha crítica de transição de fase de primeira ordem. O valor na legenda indica a dimensão da $d = 2$. O calor latente vai se anulando à medida que se aproxima do ponto tricrítico, em $T_c = 0,20$ | 67 |
| Figura 27 – Magnetização versus temperatura para $d = 2$, com $n = 15$ e calculada em três intervalos. | 68 |
| Figura 28 – Gráfico $\log m$ versus $\log[(T - T_c)/T_c]$ mostrando o comportamento na vizinhança da transição em $\alpha = 0,00$ e $T = 1,216848$ para rede com $n = 15$, como pode ser observado no gráfico. A linha vermelha indica o ajuste realizado para estimar o valor de $\beta = 0,16100$ | 69 |
| Figura 29 – $\log m$ versus $\log L$ para $d = 2$ para o valor fixo de $T = 1,216848$ com o coeficiente angular igual β/ν | 70 |
| Figura 30 – Descontinuidades de Δm (círculos abertos) e Δn_0 (quadrados abertos) ao longo da fronteira de transição que separa a região com magnetização diferente de zero da região com magnetização nula em baixas temperaturas no intervalo $\alpha_e \leq \alpha < \alpha_B$ para $d = 2$ cores pretas e $d = 3$ cores azuis. | 72 |
| Figura 31 – Rede hierárquica tipo diamante de ordem $n = 3$ e dimensão fractal $d = 2$ (a) e menor caminho que conecta os sítios externos, correspondendo ao perfil. Na Figura (b) a linha tracejada azul corresponde a geodésica que conecta os sítios externos representados nessa figura por A e B . Os números indicam em que ordem esses sítios foram introduzidos na rede. | 73 |
| Figura 32 – Perfis típicos de uma transição contínua com campo cristalino nulo $\alpha = 0,000$ e $T_c = 1,217$ para $d = 2$ para redes de ordem (a) $n = 8$, (b) $n = 10$ e (c) $n = 12$ | 74 |
| Figura 33 – Perfis típicos de uma transição contínua com campo cristalino nulo $\alpha = 0,000$ e $T_c = 2,682$ para $d = 3$ para redes de ordem (a) $n = 8$, (b) $n = 10$ e (c) $n = 12$ | 75 |
| Figura 34 – Perfis típicos de uma transição de fase descontínua com $n = 12$ e dimensão $d = 2$ para (a) $\alpha = 1,076$ e $T_c = 0,100$ e (b) $\alpha = 1,114$ e $T_c = 0,150$ | 76 |

| | |
|---|----|
| Figura 35 – Perfis típicos de uma transição de fase descontínua com $n = 12$ e dimensão $d = 3$ para (a) $\alpha = 1,512$ e $T_c = 0,150$ e (b) $\alpha = 1,537$ e $T_c = 0,200$ | 77 |
| Figura 36 – Magnetização média da rede <i>versus</i> número de hierarquias calculado para um valor fixo de T_c com valor de α indicado nas legendas, ligeiramente antes e depois da fronteira entre as fases ferromagnética e a região com magnetização nula para (a) $T_c = 0,100$, $d = 2$ e (b) $T_c = 0,150$ e $d = 3$ | 78 |
| Figura 37 – Espectro multifractal de perfis típicos da magnetização com $d = 2$ sobre pontos na linha de transição para diversas temperaturas com $T > T_{\alpha_B}$. A linha tracejada preta para ($\alpha = 0,000, T_c = 1,217$) é utilizada para efeito comparativo. A largura aumenta com a redução da temperatura. | 81 |
| Figura 38 – Espectro multifractal de perfis padrão da magnetização sobre pontos na linha de transição para diversas temperaturas com $T < T_{\alpha_B}$. A linha tracejada preta para (a) ($\alpha = 0,00, T_c = 1,217$), $d = 2$, (b) ($\alpha = 0,00, T_c = 2,682$) e $d = 3$, utilizadas para efeitos comparativos. Inicialmente, a largura aumenta com a redução da temperatura, em seguida percebe-se um estreitamento da largura até convergir para um ponto (monofractal). | 82 |
| Figura 39 – Temperatura ($1/J$) em relação campo cristalino reduzido ($\alpha = \Delta/J$) em baixas temperaturas para modelo BC definido na rede hierárquica com dimensões $d = 2$ (linhas pretas) e $d = 3$ (linhas azuis). F e P indicam as regiões ferromagnéticas e paramagnéticas correspondentes, respectivamente. B, C, D e E são os pontos relatados na Tabela ?? . A linha contínua indica uma transição de fase contínua. Os X 's (trecho D-E) marcam uma linha de transição de fase de primeira ordem com uma descontinuidade completa no parâmetro da ordem e um perfil fractal da magnetização. A linha tracejada delimita uma transição de fase descontínua com uma descontinuidade do parâmetro de ordem finita e um perfil multifractal da magnetização. | 83 |
| Figura 40 – Representação ilustrativa do processo de renormalização usando o método dos reservatórios | 87 |

| | |
|--|-----|
| Figura 41 – Exibimos o comportamento da função densidade de probabilidades ao longo de 11 iterações do grupo de renormalização para o modelo BC na rede com dimensão $d = 3$, para três valores de temperatura (a) $T = 0,685$, (b) $T = 0,785$ e (c) $T = 0,735$. Em (a), para um valor menor que T_c , a cada iteração a largura aumenta mantendo-se sempre com média nula. Em (b), temperatura maior que T_c , a cada iteração a largura diminui levando a uma função δ no limite $n \rightarrow \infty$. Em (c), temperatura crítica, a cada iteração a largura tende a se permanecer invariante, dentro da precisão numérica e estão normalizadas de modo que a soma de todas as probabilidades seja um. | 90 |
| Figura 42 – Fluxo do desvio padrão da distribuição das constantes de acoplamentos J_{ij} para as várias distribuições geradas no processo de renormalização da rede para três valores de temperaturas indicadas na legenda. | 91 |
| Figura 43 – Temperatura crítica da transição de fase VS-P em função da dimensão. | 92 |
| Figura 44 – Perfil do parâmetro de ordem local de EA para uma amostra da rede com dimensão $d = 3$ e $n = 9$ hierarquias para (a) $T = 0,300$, (b) $T = 0,400$, (c) $T = T_c \simeq 0,735$ e (d) $T = 0,800$ | 95 |
| Figura 45 – Perfil do parâmetro de ordem local de EA para 400 amostras das interações e campos para rede com dimensão $d = 3$ e $n = 9$ hierarquias para (a) $T = 0,300$, (b) $T = 0,400$, (c) $T = T_c \simeq 0,735$ e (d) $T = 0,800$ | 97 |
| Figura 46 – Função $f(\bar{\alpha})$ para várias temperaturas indicadas na legenda. A curva vermelha está associada à temperatura crítica $T_c = 0,735$. Para valores menores que T_c observa-se um estreitamento das curvas enquanto que, para temperaturas acima de T_c é observado um alargamento da curva. | 98 |
| Figura 47 – α_{max} e α_{min} do espectro $f(\bar{\alpha})$ do parâmetro de EA em função da temperatura. | 98 |
| Figura 48 – Ilustração do processo de deflação da rede, por simplicidade, de ordem (a) $n = 1$ para (b) $n = 0$. Todos os sítios internos em (a) são dizimados até que apenas reste uma ligação efetiva entre os sítios externos S_1 e S_2 como pode ser observado em (b) | 110 |

SUMÁRIO

| | | |
|-------|--|----|
| 1 | INTRODUÇÃO | 18 |
| 2 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA | 25 |
| 2.1 | Grupo de renormalização no espaço real | 25 |
| 2.2 | Grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff em redes hierárquicas | 29 |
| 3 | MODELO DE ISING DE SPIN 1 EM REDES HIERÁRQUICAS. . . | 34 |
| 3.1 | Hamiltoniano do modelo de Ising spin 1 | 35 |
| 3.2 | Equações de recorrência para magnetizações e correlações locais . | 37 |
| 4 | MODELO BLUME-CAPEL FERROMAGNÉTICO | 43 |
| 4.1 | Diagrama de fases do modelo Blume-Capel ferromagnético | 43 |
| 4.2 | Propriedades locais e globais | 46 |
| 4.3 | Propriedades termodinâmicas e comportamento crítico | 47 |
| 4.3.1 | Magnetização | 47 |
| 4.3.2 | Parâmetro Quadrupolar | 50 |
| 4.3.3 | Energia Interna | 55 |
| 4.3.4 | Calor específico | 57 |
| 4.3.5 | Susceptibilidade associada ao campo cristalino D | 62 |
| 4.3.6 | Entropia | 65 |
| 4.3.7 | Expoentes críticos | 67 |
| 5 | PROPRIEDADES MULTIFRACTAIS DO MODELO BLUME-CAPEL FERROMAGNÉTICO | 71 |
| 5.1 | Perfis das magnetizações locais | 71 |
| 5.2 | Espectro multifractal | 78 |
| 5.3 | Propriedades multifractais das magnetizações locais | 79 |
| 6 | MODELO BLUME-CAPEL DESORDENADO NA REDE HIERÁR- QUICA | 84 |
| 6.1 | Equação de renormalização do modelo BC desordenado | 86 |
| 6.2 | Temperatura crítica e dimensão crítica inferior | 86 |
| 6.3 | Propriedades locais | 92 |
| 7 | CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS | 99 |

| | |
|---|-----|
| REFERÊNCIAS | 101 |
| APÊNDICE A – RELAÇÕES DE RECORRÊNCIA: LIGAÇÕES E CAMPOS LOCAIS | 110 |
| APÊNDICE B – RELAÇÕES DE RECORRÊNCIA PARA A MAGNETIZAÇÃO E PARES DE CORRELAÇÕES LOCAIS | 114 |
| APÊNDICE C – RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA PARA AS INTERAÇÕES E CAMPOS CRISTALINOS NO REGIME DE BAIXAS TEMPERATURAS PARA O MODELO BLUME-CAPEL FERROMAGNÉTICO . . | 121 |

1 INTRODUÇÃO

Sistemas de muitas partículas ocorrem na natureza, quando em equilíbrio, em diversas *fases termodinâmicas*, as mais conhecidas são as fases gasosa, líquida e sólida dos meios materiais. Entretanto, são bem conhecidas outras fases como, por exemplo, as fases magnéticas e as fases supercondutora e de superfluides. Estas diferentes fases estão associadas às condições e vínculos externos nos quais o sistema está submetido. Além disso, cada fase apresenta diferentes características que as tornam distintas entre si. Em particular, para sistemas magnéticos em equilíbrio as diferenças nas propriedades físicas estão relacionadas às orientações dos momentos magnéticos. Tais orientações são governadas pelas diversas formas possíveis de interações entre os momentos magnéticos como, por exemplo, as interações de intercâmbio entre momentos magnéticos vizinhos. Assim, a mudança de uma fase para outra, no mesmo sistema, com simetrias diferentes não pode ocorrer de maneira contínua (3). Em geral, tais mudanças drásticas ocorrem quando parâmetros externos como a temperatura, a pressão e o campo magnético são modificados e alcançam certos valores especiais. Em sistemas magnéticos as transições de fase podem ocorrer espontaneamente em uma certa temperatura finita e campo magnético nulo.

As transições de fase são identificadas por singularidades ou divergências nas grandezas termodinâmicas fundamentais. Dependendo da forma como ocorre a singularidade as transições de fase podem ser classificadas como contínuas ou descontínuas. Estas, também nomeadas transições de primeira ordem, ocorrem quando a primeira derivada dos potenciais termodinâmicos apresenta uma singularidade. Também é comum ser observada uma descontinuidade no parâmetro de ordem. Já aquelas, também nomeadas de transições de segunda ordem, ocorrem quando as singularidades se apresentam em derivadas de ordem superior à primeira. Neste caso, o parâmetro de ordem decresce continuamente até zero quando o sistema passa então de uma fase ordenada para uma fase desordenada.

Frazer, Shirane, Cox e Olsen (4) mostraram, experimentalmente, que a transição paramagnética-antiferromagnética do dióxido de urânio UO_2 , um semicondutor, é de primeira ordem. Nessa transição não foi observada nenhuma alteração na estrutura ou volume no sistema, indicando que a mudança na fase ocorria devido às propriedades magnéticas do sistema. O caso mais simples de um modelo magnético não-trivial que exhibe uma transição contínua com quebra de simetria é o modelo de Ising ferromagnético de spin $1/2$ (puro). Por sua simplicidade, diversas generalizações desse modelo têm sido estudadas com aplicações em numerosas áreas.

Motivados por observações experimentais (4), o modelo de Ising generalizado para

variáveis de spin 1 foi proposto originalmente há mais de 50 anos para investigar não só a transição de fase magnética em UO_2 , mas também a transição emblemática λ para a superfluidez e separação de fase em misturas de ^3He - ^4He líquidos, a qual exibe um ponto tricrítico. A partir do trabalho de Frazer et al. (4) o modelo de Ising ferromagnético com variáveis de spin 1 foi formulado, independentemente, por Blume (5) e Capel (6) e chamado mais a frente de modelo Blume-Capel (BC). O modelo BC tornou-se um dos modelos mais investigados desde então por ser um dos primeiros a descrever transições de fase de primeira ordem e a incluir a interação com campo cristalino anisotrópico (D). Seu hamiltoniano é descrito por

$$\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + D \sum_i S_i^2, \quad (1.1)$$

onde $K > 0$ é a interação de troca entre os spins em sítios vizinhos e D é o campo cristalino com simetria axial atuando em uma direção bem definida para todos os spins do sistema. O campo cristalino é oriundo das interações efetivas entre os átomos e o potencial químico. O modelo BC exibe diversos fenômenos multicríticos incluindo uma mudança de uma transição de fase contínua para uma transição de fase de primeira ordem no ponto tricrítico. Além disso, o modelo BC pode ser visto como uma extensão do modelo de Ising para variáveis de spin 1, uma vez que no limite $D \rightarrow -\infty$ é equivalente ao modelo de Ising de spin 1/2, isto é, um sistema com dois estados $S_i = \pm 1$, enquanto que no limite $D \rightarrow \infty$ equivale ao modelo de Ising trivial com $S_i = 0$, isto é, uma fase ordenada com todos os spins no estado $S_i = 0$.

Outro modelo de Ising com variáveis de spin 1, mais geral que o modelo BC, é o chamado modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) (7), que simula o comportamento termodinâmico ao longo da transição λ para a superfluidez e a separação de fase em misturas de ^3He - ^4He líquidos. O modelo de Ising com spin 1 reproduz, ao menos, qualitativamente o diagrama de fases da transição λ (ver Figura 1). Por se tratar de um sistema de variáveis de spin discretas, é possível associar os átomos de ^3He aos sítios da rede no estado $S_i = 0$ e os átomos de ^4He aos sítios nos estados $S_i = \pm 1$. No diagrama de fases, a temperatura é colocada em função da concentração molar (x_3) de ^3He . A transição de fase ao longo da linha- λ é de segunda ordem separando as fases superfluida-normal. No final da linha- λ , no encontro com as linhas que marcam a região de coexistência, está a localização do ponto tricrítico. Ilustramos na Figura 2 o comportamento do calor específico, típico de segunda ordem, calculado sobre a linha λ .

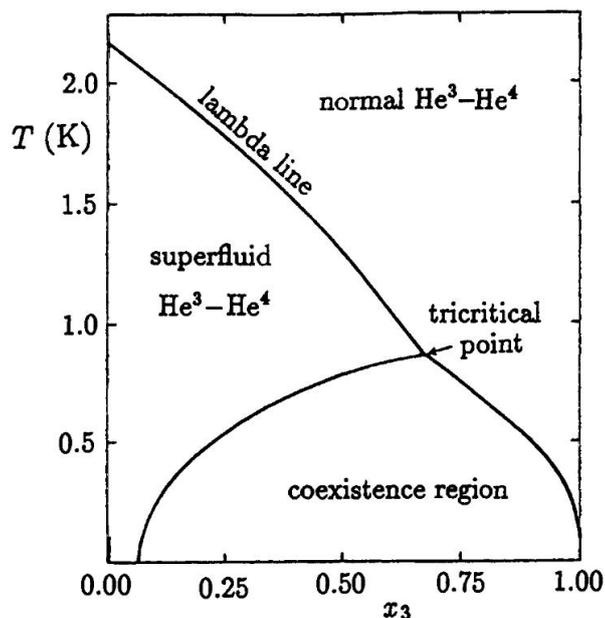


Figura 1 – Diagrama de fases para misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ líquidos. Temperatura em função da concentração molar (x_3) de ${}^3\text{He}$, ao final da linha- λ no encontro com as linhas que contornam a região de coexistência está localizado o ponto tricrítico. Figura retirada da referência (1).

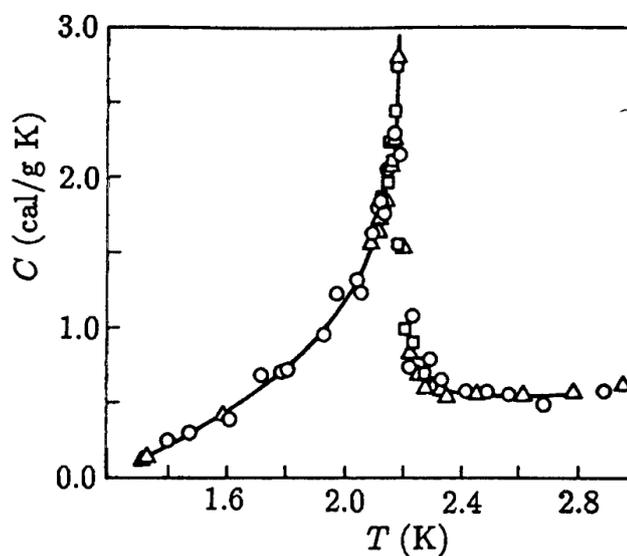


Figura 2 – Calor específico do ${}^4\text{He}$ à temperatura de vapor sobre o ponto λ . Figura retirada da referência (1).

Usualmente, o primeiro método teórico empregado para se estudar transições de fase é a aproximação de campo médio. Para o modelo de Ising com spin 1 não foi diferente. Além dos trabalhos originais de Blume e Capel (5, 6), podemos destacar o trabalho de Plascak et al. (8) onde foi utilizada a solução de campo médio para o modelo Blume-Capel com variáveis de spin inteiras e semi-inteiras, determinando a existência

de um ponto tricrítico e uma fase ordenada em baixas temperaturas para variáveis de spin inteiras. Além da aproximação de campo médio, outros métodos foram usados como, por exemplo, o da aproximação de campo efetivo (9, 10, 11, 12, 13). Na Figura 3, ilustramos os diagramas de fases apresentados por Santos et al. (2) obtidos através de soluções de (a) campo médio e (b) aproximação de campos efetivos. Em ambos os casos é previsto o ponto tricrítico, representados por C_1 e C_2 respectivamente, na fronteira de separação das fases ferromagnética (F) - paramagnética (P).

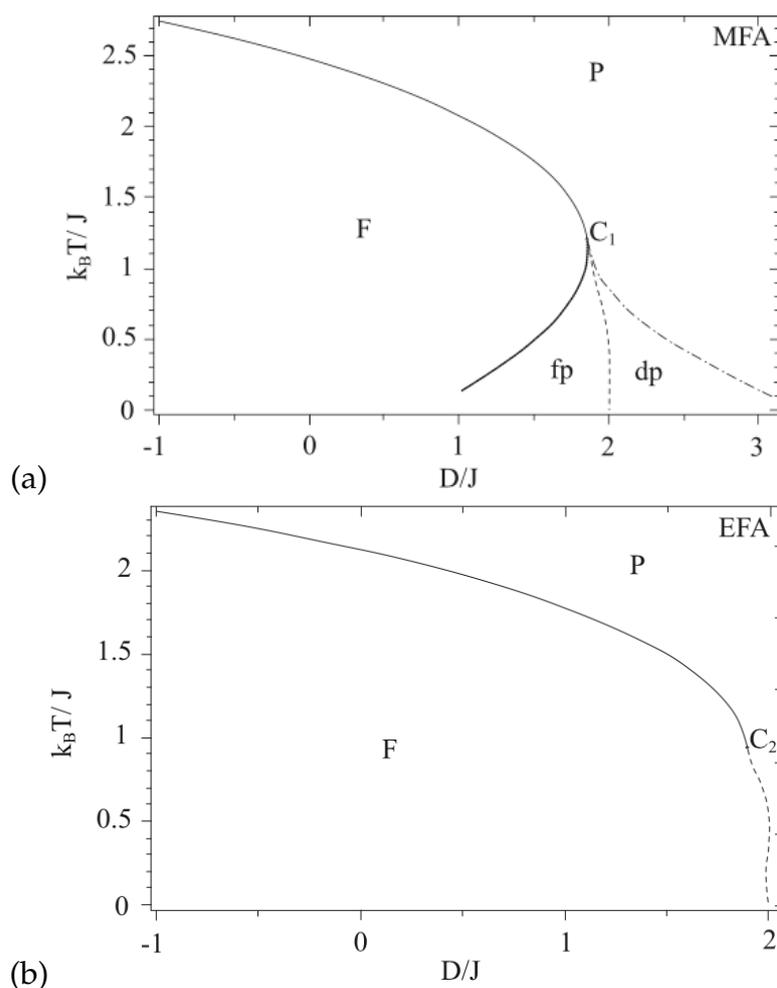


Figura 3 – Diagramas de fases para (a) aproximação de campo médio (MFA) e (b) aproximação de campo efetivo para o modelo Blume-Capel numa rede diamante para um cluster de cinco sítios. Em ambos os casos a fronteira de transição F - P apresenta um ponto tricrítico C_1 e C_2 . Figura retirada da referência (2).

O modelo BC também foi investigado pelo método da variação de cluster (14, 15, 16), pelo método de expansão em série para altas e baixas temperaturas (17, 18, 19, 20), por simulações de Monte Carlo (21, 22, 23, 24, 25, 26), usando as igualdades e desigualdades das funções de correlações para modelos de spins (27, 28, 29, 30, 31, 32) e pelo grupo de renormalização no espaço real (33, 34, 35, 36, 37, 38). Além disso, algumas variantes do modelo BC com diferentes valores de spin e/ou na presença de desordem nas interações e/ou nos campos têm sido objeto de estudos recentes (39, 40, 41, 42, 43, 44,

45, 2). A existência do ponto tricrítico é detectada tanto para os métodos mencionados acima quanto em simulações computacionais. O ponto tricrítico é obtido na vizinhança da fronteira que separa a fase com magnetização nula da fase com magnetização diferente de zero. Entretanto a localização deste ponto depende da técnica utilizada para investigar a transição de fase. O trabalho de Zierenberg, J., Fytas, N.G., Weigel, M. et al (46) apresenta alguns dos procedimentos para a localização do ponto tricrítico.

Nas vizinhanças de um ponto crítico certas grandezas termodinâmicas possuem comportamento singular, anulando-se ou crescendo sem limites e divergindo no ponto crítico. Verifica-se que as singularidades são bem representadas por uma lei de potência quando as grandezas são representadas por desvios em relação ao ponto crítico. Para isso, é necessário estimar valores para um conjunto de índices, chamados de expoentes críticos (47). Podemos supor que essa diferença se anule no ponto crítico seguindo uma lei de potência do tipo

$$y \sim \left(\frac{|T - T_c|}{T_c} \right)^x, T \rightarrow T_c, \quad (1.2)$$

com y representando uma grandeza termodinâmica arbitrária e x é denominado o expoente crítico a essa grandeza. Por exemplo, considerando que a grandeza y de interesse seja a magnetização m , o expoente x associado a este parâmetro de ordem é chamado de β . Neste caso, a equação 1.2 pode ser reescrita na forma

$$m \sim \left(\frac{|T - T_c|}{T_c} \right)^\beta, T \rightarrow T_c. \quad (1.3)$$

De maneira análoga é possível mostrar (48) que, próximo à região crítica, o comportamento do comprimento de correlação (ξ) em função da temperatura pode ser escrito como

$$\xi \sim \left(\frac{|T - T_c|}{T_c} \right)^{-\nu}, T \rightarrow T_c, \quad (1.4)$$

com ν sendo o expoente crítico associado ao comprimento de correlação. Além disso, no ponto crítico de um sistema grande, porém finito, o comprimento de correlação ξ alcança todo o sistema, isto é,

$$\xi \sim L. \quad (1.5)$$

Usando as equações (1.3), (1.4) e (1.5), se obtém uma importante relação definida por

$$m \sim L^{-\beta/\nu}, T \rightarrow T_c. \quad (1.6)$$

A equação (1.6) representa o comportamento na região crítica do parâmetro de ordem m em função do tamanho L da rede através de uma lei de escala segundo um expoente $-\beta/\nu$. Em modelos de Ising com spin 1 os expoentes críticos foram estimados para redes de dimensões $d = 2$ e 3 para diversas aproximações (19, 49, 33, 50, 51, 52).

Atualmente a solução de campo médio para modelos de Ising com variável de spin 1 é bem compreendida. Por outro lado, soluções exatas são de extrema importância para

o desenvolvimento da mecânica estatística. Poucos modelos são exatamente solúveis, como por exemplo: a solução de Onsager (53) para o modelo de Ising bidimensional ou a solução de Baxter (54) para o modelo de oito vértices. As soluções exatas possuem um efeito profundo nas idéias teóricas e desempenham um papel significativo, tanto em termos de resultados explícitos quanto como guia de métodos aproximativos.

Nesta tese vamos investigar propriedades do modelo de Ising com spin 1 em redes hierárquicas tipo diamante, fator de escala $b = 2$ e dimensão d arbitrária, utilizando a técnica do grupo de renormalização para obter um conjunto de equações de recorrência exatas e então calcular, com baixo custo computacional, propriedades locais e globais do modelo.

Além desta introdução geral a tese está dividida em cinco capítulos e três apêndices. No capítulo 2, apresentamos a metodologia que será utilizada durante a tese, definindo o método do grupo de renormalização assim como suas principais características. Em seguida, apresentamos definições e propriedades de redes hierárquicas, em particular, redes do tipo diamante.

No capítulo 3, implementamos a técnica do grupo de renormalização em redes hierárquicas, apresentando o conjunto de relações de recorrência para calcular as magnetizações e pares de correlações locais para o modelo de Ising spin 1 com um hamiltoniano completo.

No capítulo 4, com as equações de recorrência para as magnetizações e pares de correlações locais obtidas no capítulo anterior, aplicamos ao modelo Blume-Capel ferromagnético e investigamos o diagrama de fases, o parâmetro de ordem, a densidade de sítios no estado $S_i = 0$. Grandezas termodinâmicas como energia interna, calor específico, susceptibilidade e entropia também são discutidas, bem como são estimados os expoentes críticos β e ν .

No capítulo 5, são discutidas as propriedades das medidas fractais que permitem uma análise multifractal da rede. Apresentamos como a magnetização está distribuída ao longo de uma geodésica que conecta os sítios externos, possibilitando uma análise das propriedades locais através dos perfis. Observamos através do espectro de $f(\bar{\alpha})$ características multifractais que convergem para um monofractal à medida que, ao longo da linha de transição, reduzimos a temperatura.

No capítulo 6, estudamos o modelo Blume-Capel desordenado com interações e campos cristalinos competitivos. Neste caso, os valores são fixados através de variáveis aleatórias independentes que seguem uma distribuição de probabilidade gaussiana simétrica. Delimitamos o intervalo para dimensão crítica inferior juntamente com a temperatura crítica para transição vidro de spin-paramagnética. Além disso, as propriedades multifractais do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson na fronteira de transição são calculadas e discutidas.

No capítulo 7, apresentamos nossas conclusões e perspectivas para os próximos trabalhos.

Nos apêndices A e B incluímos o desenvolvimento analítico para obtenção das equações de renormalização e de recorrência associadas ao modelo de Ising spin 1 descrito no capítulo 3. No apêndice C, incluímos o conjunto de equações de renormalização no regime de baixas temperaturas que descrevem o diagrama de fases no modelo BC ferromagnético descrito no capítulo 4.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Grupo de renormalização no espaço real

O método do grupo de renormalização (GR) fornece uma compreensão teórica de problemas que apresentam singularidades, tornando-se uma ferramenta poderosa na investigação das transições de fase. O método foi proposto por Kadanoff (55) e posteriormente desenvolvido por Wilson (56, 57). A análise de problemas através do método de GR é dividida em dois ramos principais. Um dos ramos, o mais geral, envolve o trabalho no vetor de onda espacial desenvolvido por Wilson (56, 57), estendendo o método além do campo das transições de fase. O segundo é aplicado a sistemas de rede e é conhecido como método do grupo de renormalização no espaço real, baseando-se nas idéias fenomenológicas de Kadanoff (55). Outro ramo do método do GR que merece destaque é denotado como aproximação do grupo de renormalização de campo médio (58, 59, 60). Nesta tese estamos interessados em entender e aplicar o método do grupo de renormalização no espaço real.

A ideia fundamental do método do grupo de renormalização no espaço real é fazer uma redução de escala espacial do sistema e calcular a nova função de partição eliminando graus de liberdade (61) mas resguardando as simetrias do hamiltoniano original. Comparando-se as funções de partição do sistema reduzido com a do sistema original, encontra-se uma relação entre os parâmetros do hamiltoniano reduzido e os do original, dita equação de renormalização. Para um modelo de spins, localizados nos sítios de uma rede com propriedades de simetria bem definidas, um procedimento chamado de transformação blocos de spins permite que em cada etapa uma fração de graus de liberdade do sistema seja somada, esse processo é denominado de dizimação da rede. A transformação blocos de spins permite obter uma nova rede com menos graus de liberdade mas envolvendo interações cada vez mais complicadas. Impossibilitando a manutenção do hamiltoniano em cada etapa, por este motivo o método é aproximativo. A Figura 4 representa a transformação de blocos de spins onde (a) representa a rede original, (b) indica a fração de graus de liberdade a serem somadas e (c) a nova rede com menos graus de liberdade. O mapeamento entre os conjuntos de constantes de acoplamentos $\{K'\}$ e $\{K\}$, dos sistemas reduzidos e original, respectivamente, constitui o método do grupo de renormalização no espaço real.

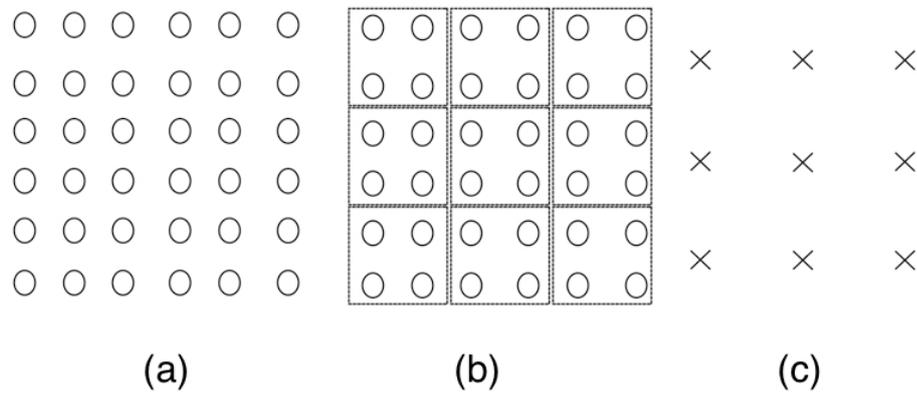


Figura 4 – Representação da transformação de blocos de spins para de uma rede quadrada onde cada sítio é ocupado por um spin: (a) a representação da rede original da construção de Kadanoff, (b) blocos de spins representando a fração dos graus de liberdades que são somados e (c) rede nova renormalizada com menos graus de liberdade que a rede original.

Com o propósito de motivar a utilização do método do grupo de renormalização no espaço real, presumiremos um modelo com graus de liberdade descritos pelas variáveis estatísticas $\{\sigma_i\}$ e um hamiltoniano $\mathcal{H}\{\sigma_i\}$. O cálculo estatístico é definido pela distribuição de probabilidades, dada como uma expressão na forma $\exp(-\beta\mathcal{H}\{\sigma_i\})$, com $\beta = 1/\kappa_B T$, sendo κ_B a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Uma grandeza termodinâmica arbitrária \mathcal{G} do sistema é definida a partir da média

$$\langle \mathcal{G} \rangle = \frac{\{\sigma_i\} \mathcal{G} \exp(-\beta\mathcal{H}\{\sigma_i\})}{\{\sigma_i\} \exp(-\beta\mathcal{H}\{\sigma_i\})}, \quad (2.1)$$

sendo $\{\sigma_i\}$ a operação linear chamada de traço definida como soma sobre todas as configurações possíveis das variáveis $\{\sigma_i\}$. Desde modo, o cálculo exato da média definida pela equação (2.1) possibilita caracterizar o sistema para qualquer temperatura e valores para os parâmetros do hamiltoniano. Todavia, na maioria dos casos o cálculo do traço sobre as variáveis torna-se impraticável, em virtude do grande número de estados incluídos na soma.

O método do grupo de renormalização sugere um processo iterativo por redução de escala para diminuir os graus de liberdade do sistema. Para isso, um passo fundamental é definir a transformação do grupo de renormalização, analisar a evolução das constantes de acoplamentos $\{K\}$ no seu espaço de parâmetros e introduzir o conceito de ponto fixo que descreverá o sistema na região de criticalidade. O modelo original, representado por um hamiltoniano reduzido, $H^{(0)} \equiv \mathcal{H}/\kappa_B T$, é renormalizado para um novo sistema, obtendo o novo hamiltoniano reduzido $H^{(1)}$:

$$H^{(1)} = \mathbf{R}H^{(0)}, \quad (2.2)$$

aqui o operador \mathbf{R} representa transformação do grupo de renormalização, esse efeito diminui o número de graus de liberdade de N para N' . Isto pode ser feito no espaço real,

removendo ou agrupando spins como ilustrado na Figura 4. Esse processo pode ser repetido n vezes produzindo uma sequência de hamiltonianos. A diminuição sucessiva no número de graus de liberdade faz com que o tamanho do sistema seja reduzido a cada passo, provocando uma diminuição do comprimento de correlação ζ . Deste modo, se o fator de escala da redução de graus de liberdade do sistema for b , o comprimento de correlação renormalizado $\zeta^{(n+1)}$ obedecerá à relação

$$\zeta^{(n+1)} = \frac{\zeta^{(n)}}{b} = \frac{\zeta^{(0)}}{b^n}, \quad (2.3)$$

sendo $\zeta^{(0)} = \zeta$ o comprimento de correlação original do sistema.

Para preservar as propriedades da rede original é necessário satisfazer à condição que a função de partição não deve mudar, essa exigência é fundamental para qualquer transformação de renormalização de grupo. Além disso as interações do hamiltoniano renormalizado também deverão preservar as simetrias presentes no hamiltoniano original. Deste modo podemos obter, a partir de uma transformação, uma equação de recorrência capaz de relacionar as constantes de acoplamento do hamiltoniano $H^{(n+1)}$ com as do hamiltoniano $H^{(n)}$

$$\mathbf{K}^{(n+1)} = f(\mathbf{K}^{(n)}), \quad (2.4)$$

sendo $\mathbf{K}^{(n)} = (K_1^{(n)}, K_2^{(n)}, \dots, K_N^{(n)})$ um vetor em que cada componente representa uma constante de acoplamento para as diferentes formas de interações que o sistema apresenta. Por este motivo, podemos ponderar que no espaço de interações cada vetor $\mathbf{K}^{(n)}$ representa um ponto do espaço e os $K_i^{(n)}$ expressam as coordenadas do vetor. A sequência de pontos produzidos pela repetição da equação (2.4) determina a evolução e o comportamento crítico do sistema formando assim uma trajetória chamada de fluxo de renormalização. Esta aplicação da teoria baseia-se no conceito de um ponto fixo, um conjunto de sistemas estatísticos que descreve o comportamento de todos os sistemas estatísticos individuais dentro de uma determinada classe de universalidade.

Para a construção do diagrama de fluxo, o primeiro passo é identificar os pontos fixos da equação (2.4), de modo que um ponto fixo é definido por

$$\mathbf{K}^{(n+1)} = f(\mathbf{K}^{*(n)}) = \mathbf{K}^*. \quad (2.5)$$

Para entendermos o significado físico de uma transformação de grupo de renormalização, partimos da equação (2.3) no ponto fixo

$$\zeta(\mathbf{K}^*) = \frac{\zeta(\mathbf{K}^*)}{b}. \quad (2.6)$$

Como $b > 1$, a equação (2.8) apresenta duas soluções. A primeira para $\zeta(\mathbf{K}^*) = 0$ denominado ponto fixo trivial a segunda $\zeta(\mathbf{K}^*) \rightarrow \infty$ (limite termodinâmico) chamado de ponto fixo crítico. Os pontos fixos podem ser classificados de acordo com o fluxo de

renormalização. Pontos atrativos ou estáveis são caracterizados pela convergência do fluxo de renormalização para ele em todas as direções de sua vizinhança. Nos pontos repulsivos ou instáveis o fluxo de renormalização diverge em todas as direções de sua vizinhança. Por fim nos pontos fixos mistos, conhecidos também como pontos de sela, o fluxo de renormalização se aproxima em algumas direções e se afasta em outras. Assim, o agrupamento de todas as trajetórias que fluem em direção a um ponto fixo é chamado de bacia de atração, como pode ser observado na Figura 5 para um fluxo genérico.

A idéia das bacias de atração com as trajetórias fluindo para alguns pontos fixos no espaço de parâmetros de acoplamentos remete a uma classe de universalidade. Entretanto, a análise torna-se incompleta se não for investigado o comportamento do fluxo próximo ao ponto fixo crítico. De fato, tal análise permite determinar a natureza do ponto fixo. Para tanto, escolhamos um ponto \mathbf{K}' ligeiramente afastado de um ponto fixo \mathbf{K}^*

$$\mathbf{K}' = \mathbf{K}^* + \delta\mathbf{K}', \quad (2.7)$$

podemos calcular $\delta\mathbf{K}'$ fazendo uma expansão em série de Taylor, em torno de \mathbf{K}^*

$$\delta\mathbf{K}' = \mathbf{K}' - \mathbf{K}^* = \mathcal{M} \delta\mathbf{K}, \quad (2.8)$$

sendo \mathcal{M} uma matriz real com seus elementos de matriz obtidos por $M_{ij} = \frac{\partial K'_i}{\partial K_j}$, de modo que a obtenção dos autovalores e autovetores de \mathcal{M} é de fundamental importância para a caracterização da natureza de um ponto fixo. Portanto, se o módulo do autovalor em uma direção for maior (menor) que 1 a constante de acoplamento renormalizada irá se afastar (aproximar) do ponto fixo. Desse modo, se todos os autovalores de \mathcal{M} em todas as direções forem maiores que 1, o ponto fixo é definido como repulsivo ou instável; já se todos autovalores de \mathcal{M} forem menores que 1 em todas as direções, será chamado de ponto fixo atrativo ou estável. Se possuir autovalores maiores que 1 em algumas direções e menores que 1 em outras direções, será um ponto fixo misto ou ponto de sela. Caso o módulo do autovalor seja 1, será necessário considerar termos de ordem superior na expansão de Taylor; caso persista a situação, dizemos que é um ponto fixo marginal, nem atraindo e nem repelindo nesta direção, tendo um comportamento diferente de leis de potência.

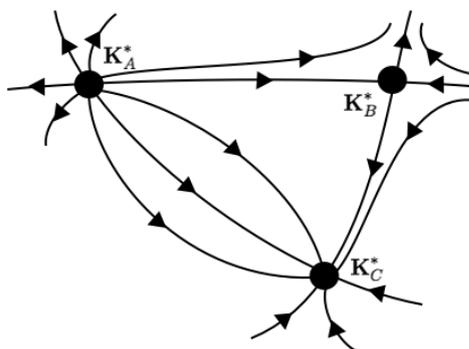


Figura 5 – Representação de um fluxo genérico e dos tipos de ponto fixo, ponto fixo repulsivo K_A^* , misto K_B^* e atrativo K_C^* , em um espaço de parâmetros.

2.2 Grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff em redes hierárquicas

É difícil medir a importância de modelos exatamente solúveis para o desenvolvimento da mecânica estatística das transições de fase. Para entender, basta observar a solução exata de Onsager (53), em 1944, do modelo bidimensional de Ising que, por longo tempo, manteve-se como o primeiro e único modelo como solução exata para sistemas com dimensão maior que 1, ou a solução de Baxter (54) do modelo de oito vértices, para perceber que soluções exatas podem ter um profundo efeito sobre as idéias teóricas.

A exploração de uma grande classe de modelos de rede exatamente solúvel exibindo uma variedade de transições de fase de primeira ordem e fenômenos críticos em temperaturas finitas deu origem a um entusiasmo considerável no mundo da mecânica estatística. Isto porque estudos anteriores ao modelo de Ising em redes hierárquicas incluíam apenas alguns casos que apresentavam transição de fase em $T = 0$ (62, 63, 64) e cálculo em redes de Bethe (65, 66).

Entretanto, uma descoberta muito importante feita por Berker e Ostlund (67) foi que a aplicação do grupo renormalização de Migdal-Kadanoff (MK) no espaço real aos modelos de Ising em rede de Bravais, rede baseada em uma célula unitária e que apresenta simetria translacional, é equivalente a uma solução exata para o modelo de Ising (Potts, etc) em redes hierárquicas (68). O método do grupo de renormalização no espaço real para o modelo de Ising em redes hierárquicas é exato uma vez que não é necessário desprezar interações mais complicadas à medida que aplicamos a transformação para seguir o fluxo no espaço de parâmetros. Porém o número de modelos definidos em redes de Bravais que possuem solução exata é limitado. Uma possibilidade na procura

por soluções exatas para esses modelos é analisar o comportamento em redes fractais. Redes fractais são geradas a partir de um procedimento de iteração de uma célula básica e são chamadas de redes hierárquicas. De modo que, este tipo de rede por vezes é considerada um tipo de aproximação para alguma rede de Bravais (69).

As redes hierárquicas são grafos produzidos de forma iterativa por um processo conhecido como agregação (70). Inicialmente partimos de uma ligação primitiva de ordem zero, ver Figura 6 (a). Em seguida, geramos uma rede de ordem 1 substituindo a ligação primitiva por uma célula geradora arbitrária, Figura 6 (b). Neste exemplo a célula geradora conta com p conexões e fator de escala b igual ao número ligações por conexão.

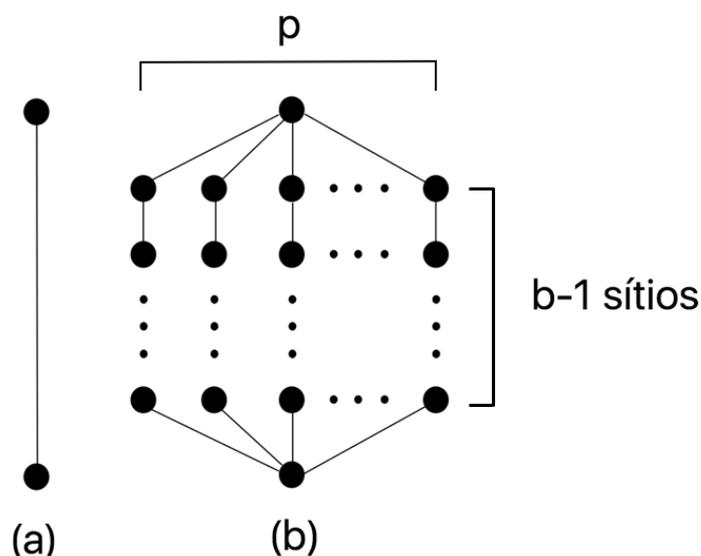


Figura 6 – Processo de construção de uma rede hierárquica tipo diamante: (a) representa a ligação primitiva de ordem 0, (b) célula geradora de ordem 1 com p conexões e fator de escala b igual ao número de ligações por conexão.

A partir disso, esse processo pode ser repetido n vezes. Para gerar uma rede de ordem superior ($n + 1$), deve-se substituir cada ligação da ordem anterior (n) por uma célula geradora. Para esta tese vamos considerar uma rede com $p = 2$ conexões e fator de escala $b = 2$. A Figura 7 mostra por simplicidade a construção de uma rede com $p = 2$ conexões e $b = 2$. Os sítios externos são representados por círculos preenchidos pela cor preta mostrado na Figura 7 (a). Os novos sítios que são agregados no primeiro processo com $n = 1$ são representados por círculos preenchidos pela cor cinza (Figura 7 (b)) e os sítios gerado na rede de ordem $n = 2$ são círculos não preenchidos (Figura 7 (c)).

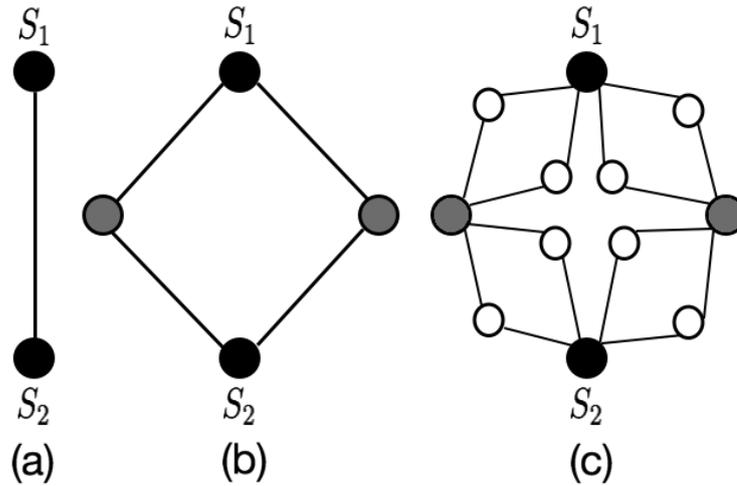


Figura 7 – Processo de construção de uma rede hierárquica com $p = 2$ e $b = 2$ com dimensão $d = 2$. A figura (a) representa a ligação primitiva de ordem 0, (b) célula geradora de ordem 1 e (c) rede de ordem 2.

Estas redes, mesmo em se tratando de redes com propriedades pouco usuais, são uma alternativa interessante uma vez que os procedimentos de renormalização são simples e o tempo computacional é baixo quando comparado com simulações mais sofisticadas, como exemplo simulação de Monte Carlo sobre redes Bravais. É importante notar que o processo da Figura 7 é auto-similar, ou seja, invariante por mudança de escala. Além disso, as redes hierárquicas possuem todas as partes equivalentes por este motivo são redes uniformes mas são altamente não-homogêneas, isto é, têm uma simetria muito mais baixa do que as redes de Bravais. Deste modo, são úteis para proporcionar intuições sobre outros problemas com baixa simetria, como por exemplo *random magnets*, superfícies e semelhantes. Existe um universo muito grande de redes hierárquicas, as quais podem apresentar propriedades diferentes (67, 68, 70, 71, 72, 73, 74, 75).

Descreveremos aqui alguns parâmetros importantes em uma rede hierárquica da família de MK. (i) O fator de escala b é o número de ligações sobre o menor caminho que conectam os dois sítios raízes (S_1 e S_2) na hierarquia de ordem 1. Para a Figura 7, $b = 2$. (ii) $N_L^{[n]}$, número total de ligações sobre a rede na hierarquia de ordem n é calculado por

$$N_L^{[n]} = (pb)^n, \tag{2.9}$$

com p representando o número de caminhos paralelos da célula geradora; (iii) o número de sítios $N_s^{[n]}$ sobre a rede hierárquica de ordem n é fornecido por

$$N_s^{[n]} = 2 + p(b - 1) \frac{[(bp)^n - 1]}{[bp - 1]}. \tag{2.10}$$

Sendo N_c , a razão do número de ligações por sítio da rede, definida como

$$N_c = \frac{N_L^{[n]}}{N_s^{[n]}} , \quad (2.11)$$

para $b = 2$ e no limite termodinâmico, quando $n \rightarrow \infty$, para redes hierárquicas da família MK, encontramos

$$N_c = \frac{2p - 1}{p} . \quad (2.12)$$

O número de ligações na rede, $N_L^{(n)}$, cresce como uma lei de potência,

$$N_L^{(n)} = L^d , \quad (2.13)$$

com $L = b^n$ representando o tamanho do sistema e d a dimensão fractal da rede hierárquica definida por

$$d = \frac{\log N_L}{\log b} \quad \text{ou} \quad d = 1 + \frac{\log p}{\log b} . \quad (2.14)$$

Assim, a rede hierárquica definida na Figura 7 possui $d = \log(2p)/\log 2$. Entretanto, como já mencionado acima, devido as redes hierárquicas serem não homogêneas, a dimensão apesar de coerente na classificação não é suficiente para determinar sua classe de universalidade. Para isso outros parâmetros são utilizados para classificar redes hierárquicas entre esses parâmetros podemos destacar a dimensão topológica (76), lacunaridade (64) e conectividade (71). Sendo esses parâmetros independentes um do outro, a mudança em algum deles faz com que o modelo mude sua classe de universalidade (64, 71). Como exemplo, se definirmos q como o número mínimo de cortes que devemos fazer nas ligações para isolar um sítio externo na célula primitiva, a conectividade Q da rede é dada por

$$Q = \frac{\log q}{\log b} , \quad (2.15)$$

enquanto para redes hierárquicas não há relação entre conectividade Q e dimensão d , para redes de Bravais a conectividade está relacionada com a dimensão por $d = 1 + Q$.

As técnicas do grupo de renormalização permitem analisar numericamente sistemas na região com escala de comprimento grande, entretanto nas rede de Bravais a aplicação das técnicas de renormalização de grupo leva o sistema a um espaço de dimensão muito grande (infinita). Para contornar esse problema a utilização de redes hierárquicas que, assim como o grupo de renormalização, são invariantes por transformação de escala, permitem estudar o grupo de renormalização num espaço de dimensão reduzido. Para isto, é suficiente que as interações entre spins diferentes ocorram apenas dentro da própria célula geradora. Com isso, não haverá nenhuma perda de informação durante a dizimação dos spins internos de uma célula geradora.

A aplicação do grupo de renormalização a modelos em redes hierárquicas pode representar uma aproximação desses modelos em rede de Bravais. Em outras palavras,

os resultados encontrados serão tão bons quanto forem as aproximações do modelo original na rede de Bravais. Desta forma, podemos pensar que os resultados do grupo de renormalização em redes hierárquicas é exato. Por isto, a importância das redes hierárquicas para a mecânica estatística fornecendo resultados exatos, desempenhando papel qualitativo e quantitativo na avaliação de métodos aproximados.

3 MODELO DE ISING DE SPIN 1 EM REDES HIERÁRQUICAS.

A maioria dos trabalhos realizados em redes hierárquicas utilizam como principal técnica o grupo de renormalização para se obter o diagrama de fases e propriedades críticas. O método que viabiliza o cálculo das magnetizações locais em redes hierárquicas foi proposto pela primeira vez no trabalho publicado por Morgado, Coutinho e Curado (77, 78) onde calcularam algumas grandezas termodinâmicas e as propriedades multifractais das magnetizações locais do modelo de Ising ferromagnético definido na rede hierárquica diamante. Esse método foi inspirado no trabalho (79), onde o modelo de vidro de spins de Ising foi estudado na rede de Bethe e uma relação de recorrência exata entre as magnetizações de sítios pertencentes a gerações consecutivas é obtida. Em seguida, o método foi estendido para diversos modelos magnéticos como por exemplo, o modelo de vidro de spins de Ising (80, 81), o modelo de Potts ferromagnético (69, 82) e o modelo de Ising com campo aleatório (83). Estes trabalhos foram realizados sobre redes hierárquicas, com foco em redes com dimensão fractal $d = 3$.

A técnica que possibilita investigar as propriedades locais de modelos em redes hierárquicas é separada em duas partes. Na primeira, gera-se um sistema com hierarquia de ordem n . Em seguida, dizima-se a rede até que reste apenas um acoplamento efetivo entre os dois sítios externos, resultando a hierarquia de ordem zero. Uma nota importante neste passo, para obtenção de resultados numéricos, é necessário que todos acoplamentos renormalizados sejam armazenados, aumentando consideravelmente o custo computacional, em especial para os casos sistemas desordenados. Na segunda parte, partindo-se da hierarquia de ordem zero, com acoplamento efetivo entre os dois sítios externos, refaz-se o processo de agregação ou inflação da rede, reconstrói-se toda a rede calculando paralelamente com as relações de recorrência das magnetizações e pares de correlações locais dos sítios internos em função dos sítios externos de cada unidade básica até reobter a hierarquia de ordem n .

Neste capítulo, estuda-se as relações de recorrência exatas que permitem calcular o parâmetro de ordem e as correlações locais entre spins vizinhos. O método é estendido para estudar o caso do modelo de Ising com spin 1. O modelo é definido sobre redes hierárquicas tipo diamante com fator de escala $b = 2$ e dimensão d arbitrária. Para tal, na primeira seção do capítulo, obtemos um conjunto de equações de recorrência do grupo de renormalização para as ligações e campos. Em seguida, na segunda seção, descrevemos as equações exatas e recursivas que conectam as magnetizações e pares de correlações locais dos sítios internos com as grandezas análogas para os sítios externos de cada célula básica.

3.1 Hamiltoniano do modelo de Ising spin 1

Estudamos o modelo de Ising spin 1, cujo hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + \sum_{\langle ij \rangle} K_{ij} S_i^2 S_j^2 + \sum_{\langle ij \rangle} L_{ij} S_i S_j (S_i + S_j) - \sum_i \Delta_i S_i^2 + \sum_i h_i S_i \quad (3.1)$$

com $\beta = 1/k_B T$, k_B sendo a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. As constantes de acoplamento adimensionais entre pares de spins primeiros vizinhos, $\langle ij \rangle$, são representadas por J_{ij} , K_{ij} e L_{ij} . Δ_i representa o campo cristalino local adimensional. h_i é o campo magnético local adimensional em cada sítio, com variáveis de spins $S_i = 0, \pm 1$. Dois casos particulares desse modelo e que são frequentemente alvos de análise, já mencionados na introdução, são: o modelo de Blume-Capel (BC)(6, 5) com $K_{ij} = L_{ij} = 0$ e o modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG)(7), com $L_{ij} = 0$. Deste modo, o Hamiltoniano descrito na equação (3.1) pode ser reescrito, respectivamente, nas formas

$$-\beta\mathcal{H}_{\text{BC}} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i \Delta_i S_i^2 + \sum_i h_i S_i, \quad (3.2)$$

$$-\beta\mathcal{H}_{\text{BEG}} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + \sum_{\langle ij \rangle} K_{ij} S_i^2 S_j^2 - \sum_i \Delta_i S_i^2 + \sum_i h_i S_i. \quad (3.3)$$

O procedimento usual da técnica do grupo de renormalização funciona no caminho inverso da construção da rede, isto é, iniciamos com uma rede de ordem n e dizimamos. Em certo sentido fazemos uma deflação da rede hierárquica até a rede de ordem zero. Para ilustrar, considere uma rede hierárquica com fator de escala $b = 2$ e p conexões mostrada na Figura 8. Partindo de uma célula básica de ordem n Figura 8 (a) e dizimando os sítios internos em cada unidade básica resulta um acoplamento efetivo de ordem $(n - 1)$ mostrado na Figura 8 (b) com um novo conjunto de constantes de acoplamento.

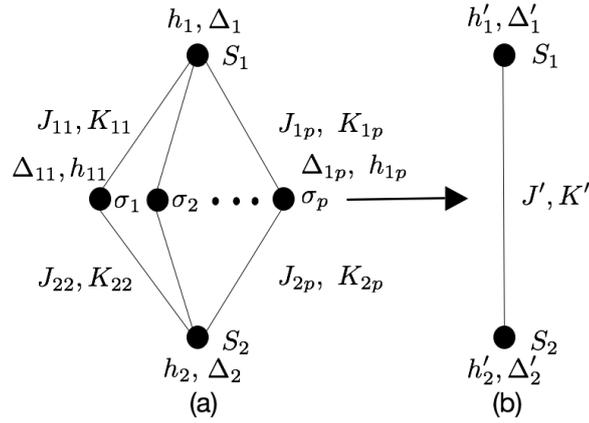


Figura 8 – Ilustração do processo de deflação da rede, por simplicidade, de ordem (a) $n = 1$ para (b) $n = 0$. Todos os sítios internos $\{\sigma_i\}$, $i = 1, \dots, p$ em (a) são dizimados até que apenas reste um acoplamento efetivo entre os sítios externos S_1 e S_2 como pode ser observado em (b) .

Analiticamente, sob o método do grupo de renormalização, é possível escrever um conjunto de equações de recorrência para as constantes de acoplamento e campos, indicados por um apóstrofo, em função das constantes de acoplamento e campos da hierarquia anterior. Para o modelo de Blume-Capel descrito pelo hamiltoniano fornecido na equação (3.2), as equações do grupo de renormalização podem ser escritas formalmente como (para maiores detalhes ver Apêndice A):

$$J' = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[-1,-1]}{Z_i[1,-1]Z_i[-1,1]} \right], \quad (3.4)$$

$$\Delta'_1 = \Delta_1 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,0]Z_i[-1,0]}{Z_i[0,0]^2} \right], \quad (3.5)$$

$$\Delta'_2 = \Delta_2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[0,1]Z_i[0,-1]}{Z_i[0,0]^2} \right], \quad (3.6)$$

$$h'_1 = h_1 + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[1,-1]}{Z_i[-1,-1]Z_i[-1,1]} \right], \quad (3.7)$$

$$h'_2 = h_2 + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[-1,1]}{Z_i[-1,-1]Z_i[1,-1]} \right]. \quad (3.8)$$

Para o modelo Blume-Emery-Griffiths, com hamiltoniano descrito pela equação (3.3), devemos acrescentar a esse conjunto de equações, a equação

$$K' = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[-1,-1]Z_i[1,-1]Z_i[-1,1]Z_i[0,0]^4}{Z_i[1,0]^2Z_i[-1,0]^2Z_i[0,1]^2Z_i[0,-1]^2} \right], \quad (3.9)$$

com

$$\begin{aligned} Z_i[S_1, S_2] &= \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \exp[J_{1S_1} \sigma_i S_1 + J_{1S_2} \sigma_i S_2 + K_{1S_1} \sigma_i^2 S_1^2 + K_{1S_2} \sigma_i^2 S_2^2 - \Delta_{1j} \sigma_i^2 + h_{1j} \sigma_i] , \\ Z_i[S_1, S_2] &= 1 + \exp[J_{1S_1} S_1 + J_{1S_2} S_2 + K_{1S_1} S_1^2 + K_{1S_2} S_2^2 - \Delta_{1j} + h_{1j}] + \\ &\quad + \exp[-J_{1S_1} S_1 - J_{1S_2} S_2 + K_{1S_1} S_1^2 + K_{1S_2} S_2^2 - \Delta_{1j} - h_{1j}] , \end{aligned} \quad (3.10)$$

$Z_i[S_1, S_2]$ representando a função de partição de uma dada célula básica com sítios externos mantidos fixos nos estados ($S_1, S_2 = 0, \pm 1$) e $\text{Tr}_{\{\sigma_i\}}$ indicando o traço sobre os sítios internos que são dizimados. Note que nas equações (3.5) - (3.8), referentes aos campos cristalinos e magnéticos, temos contribuição dos campos originais mais contribuição proveniente dos sítios que foram dizimados. Para o modelo BC, os valores de K_{1S_1} e K_{1S_2} devem ser nulos na equação (3.10).

3.2 Equações de recorrência para magnetizações e correlações locais

Nesta seção, calculamos analiticamente as equações de recorrência exatas para descrever as propriedades locais do sistema tais como a magnetização e pares de correlações. Desde modo, pode-se construir a rede a partir de um acoplamento efetivo entre os sítios externos, possibilitando um estudo do parâmetro de ordem.

Para determinar as relações de recorrência, devemos considerar que o hamiltoniano equivalente do modelo (3.1) pode ser decomposto para a n -ésima geração em duas partes: a primeira refere-se a uma unidade básica arbitrária introduzida na última geração e a segunda incluindo todas as interações restantes da rede, isto é:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{int}} + \mathcal{H}_{\text{ext}} , \quad (3.11)$$

com

$$\begin{aligned} -\beta \mathcal{H}_{\text{int}} &= J_1 \sigma_i S_1 + J_2 \sigma_i S_2 + K_1 \sigma_i^2 S_1^2 + K_2 \sigma_i^2 S_2^2 + L_1 \sigma_i^2 S_1 + L_2 \sigma_i S_1^2 + \\ &\quad + L_3 \sigma_i^2 S_2 + L_4 \sigma_i S_2^2 - \Delta_i \sigma_i^2 + h_i \sigma_i , \end{aligned} \quad (3.12)$$

e

$$-\beta \mathcal{H}_{\text{ext}} = J' S_1 S_2 + K' S_1^2 S_2^2 + L'_1 S_1^2 S_2 + L'_2 S_1 S_2^2 - \Delta'_1 S_1^2 - \Delta'_2 S_2^2 + h'_1 S_1 + h'_2 S_2 . \quad (3.13)$$

Na equação (3.12) J_i, K_i ($i = 1, 2$) e L_j ($j = 1, 2, 3, 4$) representam as constantes de acoplamentos das interações entre o sítio interno σ_i com o sítio externo S_j ($j = 1, 2$). Δ_i e h_i representam os campos cristalino e magnético externo que atuam sobre todos os sítios, respectivamente. A equação (3.13) descreve um hamiltoniano efetivo sobre os sítios externos, resultante de todas as interações do restante rede. As constantes de

acoplamentos e campos efetivos irão desempenhar o papel da rede, sendo representados por J', K', L', Δ'_ℓ e h'_ℓ ($\ell = 1, 2$). A representação esquemática desse modelo equivalente, foi inspirada no cálculo das interações efetivas (84) e pode ser esquematizada na Figura 9. As interações e campos efetivos que atuam nos sítio externos são parâmetros desconhecidos a serem determinados.

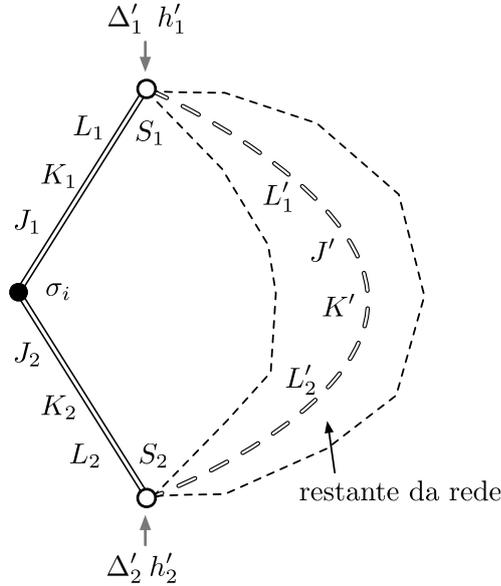


Figura 9 – Representação esquemática do modelo equivalente. As linhas duplas representam as interações (J_i, L_i, K_i) entre o sítio interno (círculo preto) e um dos sítios externos (círculo branco) de uma única conexão arbitrária da célula básica. As linhas pontilhadas representam as interações efetivas do restante da rede ($J'_\ell, L'_\ell, K'_\ell$) ($\ell = 1, 2$). As setas cinzas representam o campo magnético externo efetivo e o campo cristalino externo efetivo sobre os sítios externos.

Podemos então escrever formalmente a função de partição deste modelo, reescrevendo da seguinte maneira

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{S_1, S_2\}} G_1[S_1, S_2] \Phi[S_1, S_2], \quad (3.14)$$

com

$$\Phi[S_1, S_2] = \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \exp[-\beta \mathcal{H}_{\text{int}}], \quad (3.15)$$

$$G_1[S_1, S_2] = \exp[-\beta \mathcal{H}_{\text{ext}}]. \quad (3.16)$$

Calculando o traço $\text{Tr}_{\{S_1, S_2\}}$, a função de partição pode ser expandida em nove termos para as configurações possíveis configurações de $\{S_1, S_2\}$ com $S_i = 0, \pm 1$. Deste modo

$$\mathcal{Z} = A_0 + \sum_{j=1}^8 A_j \Phi_j, \quad (3.17)$$

sendo A_0 e A_j são grandezas, definidas nas equações (B.2)-(B.10) no Apêndice B e utilizadas para simplificar a notação, as quais dependem apenas dos acoplamentos e campos que atuam nos sítios internos e são quantidades conhecidas. Para ilustrar, apresentamos a seguir o termo A_0

$$A_0 = \frac{a_6}{a_5} + \frac{1}{a_5 a_6} + 1, \quad (3.18)$$

com $a_5 = e^{\Delta\sigma}$ e $a_6 = e^{h\sigma}$. Os demais termos são semelhantes, contudo com diferentes combinações de sinal e exponenciais das variáveis associadas ao sítio interno. Esses termos são multiplicados pelos termos de Φ_j , também definidos no Apêndice B no conjunto de equações (B.11)-(B.18), os quais dependem dos acoplamentos e campos efetivos que atuam nos sítios externos. Por este motivo são variáveis desconhecidas. Como exemplo, apresentamos o Φ_1

$$\Phi_1 = u^{-1} x^{-1} \quad (3.19)$$

com $x = e^{h'_1}$ e $u = e^{\Delta'_1}$ definidos na equação (B.20). Novamente os demais termos são semelhantes, sendo agora uma combinação das diferentes variáveis efetivas.

Nosso objetivo, descrito a seguir, será eliminar as variáveis (Φ_j) do sistema. Para isto, realizamos as médias térmicas para calcular os momentos magnéticos e pares de correlações médios referentes aos sítios externos e internos (para maiores detalhes ver Apêndice B). Neste caso, para os sítios externos obtemos,

$$\langle S_1 \rangle = \frac{1}{Z} [-A_1 \Phi_1 + A_2 \Phi_2 + A_5 \Phi_5 - A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.20)$$

$$\langle S_2 \rangle = \frac{1}{Z} [-A_3 \Phi_3 + A_4 \Phi_4 - A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.21)$$

$$\langle S_1^2 \rangle = \frac{1}{Z} [A_1 \Phi_1 + A_2 \Phi_2 + A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 + A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.22)$$

$$\langle S_2^2 \rangle = \frac{1}{Z} [A_3 \Phi_3 + A_4 \Phi_4 + A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 + A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.23)$$

$$\langle S_1 S_2 \rangle = \frac{1}{Z} [-A_5 \Phi_5 - A_6 \Phi_6 + A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.24)$$

$$\langle S_1 S_2^2 \rangle = \frac{1}{Z} [A_5 \Phi_5 - A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.25)$$

$$\langle S_1^2 S_2 \rangle = \frac{1}{Z} [-A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.26)$$

$$\langle S_1^2 S_2^2 \rangle = \frac{1}{Z} [A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8], \quad (3.27)$$

e para os sítios internos,

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} [\tilde{A}_0 + \tilde{A}_1 \Phi_1 + \tilde{A}_2 \Phi_2 + \tilde{A}_3 \Phi_3 + \tilde{A}_4 \Phi_4 + \tilde{A}_5 \Phi_5 + \tilde{A}_6 \Phi_6 + \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8] , \quad (3.28)$$

$$\langle \sigma_i S_1 \rangle = \frac{1}{Z} [-\tilde{A}_1 \Phi_1 + \tilde{A}_2 \Phi_2 + \tilde{A}_5 \Phi_5 - \tilde{A}_6 \Phi_6 - \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8] , \quad (3.29)$$

$$\langle \sigma_i S_2 \rangle = \frac{1}{Z} [-\tilde{A}_3 \Phi_3 + \tilde{A}_4 \Phi_4 - \tilde{A}_5 \Phi_5 + \tilde{A}_6 \Phi_6 - \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8] , \quad (3.30)$$

$$\langle \sigma_i S_1^2 \rangle = \frac{1}{Z} [\tilde{A}_1 \Phi_1 + \tilde{A}_2 \Phi_2 + \tilde{A}_5 \Phi_5 + \tilde{A}_6 \Phi_6 + \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8] , \quad (3.31)$$

$$\langle \sigma_i S_2^2 \rangle = \frac{1}{Z} [\tilde{A}_3 \Phi_3 + \tilde{A}_4 \Phi_4 + \tilde{A}_5 \Phi_5 + \tilde{A}_6 \Phi_6 + \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8] , \quad (3.32)$$

$$\langle \sigma_i^2 \rangle = \frac{1}{Z} [B_0^+ + (A_1 - 1)\Phi_1 + (A_2 - 1)\Phi_2 + (A_3 - 1)\Phi_3 + (A_4 - 1)\Phi_4 + (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 + (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8] , \quad (3.33)$$

$$\langle \sigma_i^2 S_1 \rangle = \frac{1}{Z} [-(A_1 - 1)\Phi_1 + (A_2 - 1)\Phi_2 + (A_5 - 1)\Phi_5 - (A_6 - 1)\Phi_6 - (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8] , \quad (3.34)$$

$$\langle \sigma_i^2 S_2 \rangle = \frac{1}{Z} [-(A_3 - 1)\Phi_3 + (A_4 - 1)\Phi_4 - (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 - (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8] , \quad (3.35)$$

$$\langle \sigma_i^2 S_1^2 \rangle = \frac{1}{Z} [(A_1 - 1)\Phi_1 + (A_2 - 1)\Phi_2 + (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 + (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8] , \quad (3.36)$$

$$\langle \sigma_i^2 S_2^2 \rangle = \frac{1}{Z} [(A_3 - 1)\Phi_3 + (A_4 - 1)\Phi_4 + (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 + (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8] , \quad (3.37)$$

com B_0^+ e \tilde{A}_i 's definidos de forma similar A_i 's, no Apêndice B ver equações (B.39)-(B.48). O passo seguinte é resolver o sistema de equações lineares (3.20)-(3.27) para os sítios externos, correspondente a um sistema linear 8×8 com quantidades desconhecidas Φ_j ($j = 1, 2, 3, \dots, 8$), as soluções, obtidas através do *software Mathematica*, desse sistema linear

possui as seguintes soluções

$$\Phi_1 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_1} \left[-\langle S_1 \rangle + \langle S_1^2 \rangle + \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.38)$$

$$\Phi_2 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_2} \left[\langle S_1 \rangle + \langle S_1^2 \rangle - \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.39)$$

$$\Phi_3 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_3} \left[-\langle S_2 \rangle + \langle S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.40)$$

$$\Phi_4 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_4} \left[\langle S_2 \rangle + \langle S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.41)$$

$$\Phi_5 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_5} \left[-\langle S_1 S_2 \rangle + \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.42)$$

$$\Phi_6 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_6} \left[-\langle S_1 S_2 \rangle - \langle S_1 S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.43)$$

$$\Phi_7 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_7} \left[\langle S_1 S_2 \rangle - \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.44)$$

$$\Phi_8 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_8} \left[\langle S_1 S_2 \rangle + \langle S_1 S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (3.45)$$

com,

$$\mathcal{Z} = \frac{A_0}{[1 - \langle S_1^2 \rangle - \langle S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle]}. \quad (3.46)$$

Substituindo as equações (3.38)-(3.46) nas equações (3.28)-(3.37), com um pouco de manipulação algébrica, podemos reescrever as equações de forma que os sítios pertencentes a hierárquica atual, representado pelo sub-índice $(n + 1)$, dependam dos sítios da hierarquia anterior, representado pelo sub-índice n . Deste modo, as magnetizações e os pares de correlações locais para o modelo de Ising *spin* 1 definidos sobre redes hierárquicas com fator de escala $b = 2$ e dimensão d arbitrária, são descritas pelo conjunto de equações a seguir

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle_{n+1} = & M_0 + M_1 \langle S_1 \rangle_n + M_2 \langle S_2 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_4 \langle S_1^2 \rangle_n + M_5 \langle S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_6 \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_7 \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + M_8 \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_1^2 \rangle_{n+1} = & M_1 \langle S_1 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_9 \langle S_1^2 \rangle_n + M_{10} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_7 \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{11} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_2^2 \rangle_{n+1} = & M_2 \langle S_2 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{12} \langle S_2^2 \rangle_n + M_6 \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{13} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{14} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_1 \rangle_{n+1} = & M_{15} \langle S_1 \rangle_n + M_{16} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{17} \langle S_1^2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{19} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{20} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_2 \rangle_{n+1} = & M_{21} \langle S_2 \rangle_n + M_{22} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{23} \langle S_2^2 \rangle_n + M_{24} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{25} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 \rangle_{n+1} = & M_{26} + M_{27} \langle S_1 \rangle_n + M_{28} \langle S_2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{29} \langle S_1^2 \rangle_n + \\ & + M_{30} \langle S_2^2 \rangle_n + M_{31} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{20} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + M_{32} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_1 \rangle_{n+1} = & M_{33} \langle S_1 \rangle_n + M_{10} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_1 \langle S_1^2 \rangle_n + M_3 \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{11} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_7 \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_2 \rangle_{n+1} = & M_{34} \langle S_2 \rangle_n + M_{13} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_2 \langle S_2^2 \rangle_n + M_{14} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_4 \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_1^1 \rangle_{n+1} = & M_{27} \langle S_1 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{15} \langle S_1^2 \rangle_n + M_{16} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{20} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{19} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_2^2 \rangle_{n+1} = & M_{28} \langle S_2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{21} \langle S_2^2 \rangle_n + M_{25} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{22} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{24} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (3.56)$$

sendo os coeficientes M_i 's escritos em termos de combinações de \tilde{A}_i 's e/ou A_i 's, também definido nas equações (B.85)-(B.97) no Apêndice B. Como exemplo, apresentamos o coeficiente M_1

$$M_1 = \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} - \frac{\tilde{A}_1}{2A_1}. \quad (3.57)$$

Note que as equações representam uma conexão entre a magnetização e pares de correlação local dos sítios da hierarquia atual com a magnetização local e pares de correlação da hierarquia anterior. De modo que, partindo de hierarquia de ordem zero ($n = 0$), conhecendo os valores iniciais das grandezas associadas aos sítios externos e seus pares de correlação podemos utilizar as equações e calcular as propriedades locais das próximas gerações para toda a rede. Os valores iniciais das grandezas associadas aos sítios da hierarquia zero, são determinados pelas propriedades da fase condensada correspondente ao ponto fixo estável.

O conjunto de equações de recorrência, acima apresentadas, são equações exatas que podem ser numericamente iteradas para qualquer modelo de spin um, descrito pelo hamiltoniano geral dado pela equação (3.1), ordenado ou desordenado, exceto para modelo antiferromagnético. Neste caso, as equações precisam ser recalculadas para o caso de uma rede hierárquica com fator de escala 3 (ou para um fator de escala ímpar), de sorte a atender as simetrias do processo de normalização. Uma vez que, o comportamento do modelo para valores pares do fator de escala b é qualitativamente similar ao caso $b = 2$ enquanto que para valores ímpares do fator de escala b o comportamento assemelha-se ao caso em que $b = 3$ (85).

4 MODELO BLUME-CAPEL FERRO-MAGNÉTICO

Neste capítulo, apresentamos a solução exata para o caso particular do modelo BC ferromagnético definido na rede hierárquica tipo diamante. Na primeira seção analisamos as equações de renormalização e o diagrama de fase para as dimensões $d = 2, 3$ e 4 . Na segunda parte do capítulo encontramos as equações de recorrência particulares que descrevem as propriedades locais do modelo. Por fim, analisamos os resultados obtidos numericamente a partir das propriedades locais. Investigamos o comportamento termodinâmico do modelo, focalizando nas dimensões $d = 2$ e 3 , para auxiliar na determinação do ponto tricrítico do sistema.

4.1 Diagrama de fases do modelo Blume-Capel ferromagnético

Nesta seção, aplicamos as equações de renormalização (3.4)-(3.8) ao modelo Blume-Capel correspondente a um sistema *ferromagnético*, isto é, com constantes de acoplamento e campos locais, atuando em cada sítio independentemente, uniformes: $J_{ij} = J (> 0)$, $\Delta_i = \Delta$, $K_{ij} = L_{ij} = 0$. Para um campo magnético diferente de zero, consideramos o termo $h_i = h$, de modo que o Hamiltoniano geral do modelo, dado pela equação (3.2), é reescrito por

$$-\beta\mathcal{H}_{\text{BC}} = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - \Delta \sum_i S_i^2 + h \sum_i S_i. \quad (4.1)$$

Analisamos, a seguir, o diagrama de fases para $d = 2$, $d = 3$ e $d = 4$ obtidos através do conjunto de equações de renormalização no regime de campo magnético nulo ($h = 0$).

Na ausência de campo magnético ($h = 0$), o conjunto de equações de renormalização (3.4)-(3.8) é reduzido para,

$$J' = \ln \left[\frac{1 + 2e^{-\Delta} \cosh(2J)}{1 + 2e^{-\Delta}} \right]^{p/2}, \quad (4.2)$$

$$\Delta' = \Delta - \ln \left[\frac{1 + 2e^{-\Delta} \cosh(J)}{1 + 2e^{-\Delta}} \right]^p. \quad (4.3)$$

O fluxo de renormalização no espaço de parâmetros (J, Δ) , descritos nas equações (4.2) e (4.3) é caracterizado pelos pontos fixos estáveis: para a fase ferromagnética o ponto fixo é $(J \rightarrow \infty, \Delta \rightarrow -\infty)$ com a razão finita $\alpha \equiv \Delta/J \rightarrow \alpha_F$, descrita na Tabela 4.1 e ilustrada na Figura 10, cujos valores variam com a dimensão da rede. Para a

fase paramagnética obtemos uma linha de pontos fixos com $(J = 0, -\infty \leq \Delta \leq \infty)$. Também encontramos um ponto fixo instável em $(J_d^*, \Delta \rightarrow -\infty)$, onde o limite $\Delta \rightarrow -\infty$ aplicado ao hamiltoniano corresponde ao modelo de Ising com spin 1/2. Neste regime as configurações com spins no estado $S_i = 0$ são termodinamicamente eliminadas com peso estatístico nulo. Esse limite corresponde a uma temperatura crítica fornecida por $T_c = 1/J_d^*$. A linha que separa a região ferromagnética da paramagnética foi obtida numericamente utilizando o método da bissecção baseado nos pontos fixos estáveis.

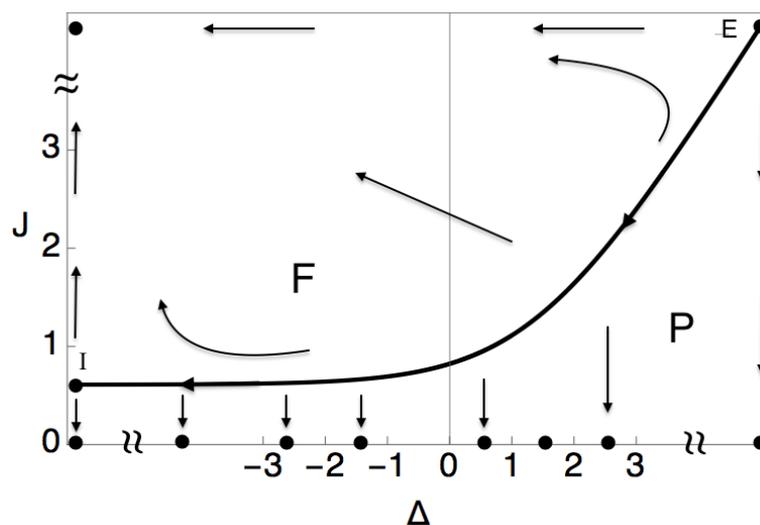


Figura 10 – Diagrama de fluxo para o modelo Blume-Capel ferromagnético numa rede hierárquica tipo diamante. Os pontos indicam as localizações dos pontos fixos das fase ferromagnética e paramagnética, o ponto I indica um ponto relevante e o ponto E indica ponto fixo, definidos na Tabela 4.1.

O diagrama também pode ser representado no espaço de parâmetros $(T = 1/J, \alpha = \Delta/J)$, no qual descreve o diagrama de fases usual do modelo BC. Na Figura 11 mostramos os respectivos diagramas do modelo BC ferromagnético definido numa rede hierárquica tipo diamante e fator de escala $b = 2$ para as dimensões $d = 2$ (cor preta), $d = 3$ (cor azul) e $d = 4$ (cor vermelha). Para completar o diagrama, na região de baixa temperatura, foi necessário calcular o fluxo no limite de baixas temperaturas, cujas equações estão detalhadas no Apêndice C. Entretanto, especificamos a seguir as equações de renormalização no estado fundamental $T = 0$. Deste modo, as equações de renormalizações encontradas no limite de baixas temperaturas (C.33) -(C.44) nesse

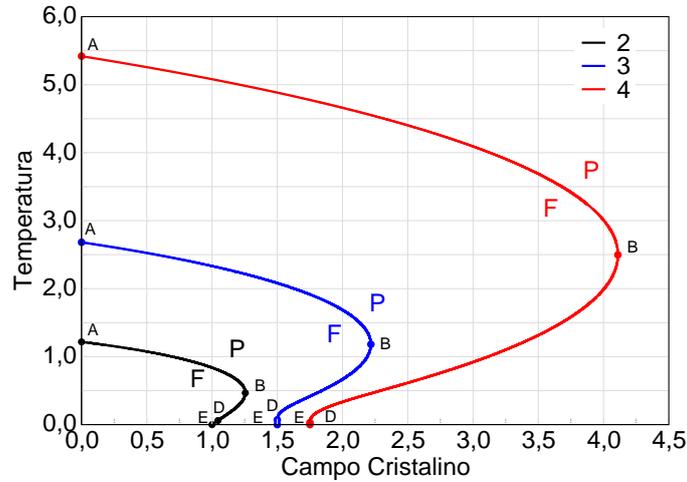


Figura 11 – Diagrama de fases para o modelo Blume-Capel ferromagnético numa rede hierárquica tipo diamante. As cores indicam a dimensão: a preta para $d = 2$, a azul para $d = 3$ e a vermelha para $d = 4$. As letras F e P, com cores diferentes, indicam as regiões ferromagnética e paramagnética, respectivamente. As letras A, B, D e E indicam pontos relevantes, que serão discutidos ao longo desta tese, definidos na Tabela 4.1.

subespaço são reescritas por

$$\alpha' = \begin{cases} \infty & , \alpha \geq 2 \\ \frac{2\alpha}{p(2-\alpha)} & , 1 < \alpha < 2 \\ \frac{2[(1+p)\alpha - p]}{p(2-\alpha)} & , 0 < \alpha < 1 \\ \frac{\alpha - p}{p} & , \alpha < 0. \end{cases} \quad (4.4)$$

Existe um ponto fixo instável $(0, \alpha_d)$ para cada dimensão da rede com $\alpha_d = 2(1 - 2^{1-d})$ separando a fase ferromagnética (F), com configuração $\{S = 1\}$ ou $\{S = -1\}$, governado pelo ponto fixo estável α_F , da fase que denotaremos, nesta tese, de paramagnética ordenada (PO) uma vez que apresenta magnetização zero e todos os sítios ordenados no estado $\{S_i = 0\}$ no estado fundamental e que tem ponto fixo localizado em $(0, \infty)$. Note que pelos diagramas de fases na Figura 11 para um valor de α fixo com $\alpha < \alpha_d$, existe apenas uma transição de fase possível. Enquanto que para um valor de α fixo no intervalo $\alpha_d < \alpha < \alpha_B$, região da reentrância, podem ocorrer duas transições. Partindo de baixa temperatura para altas temperaturas as transições que ocorrem são: paramagnética ordenada \rightarrow ferromagnética seguida por ferromagnética \rightarrow paramagnética. Na região

da reentrância, em baixas temperaturas uma descontinuidade no parâmetro de ordem da fase foi observada, que será explorada mais adiante neste capítulo.

Para facilitar o entendimento e uma melhor compreensão das regiões do diagrama, na Tabela 4.1 são representados os pontos especiais mostrados na Figura 11.

| | | d=2 | | d=3 | | d=4 | | |
|---|----------------|------------|-------|-----------|-------|-----------|-------|-----------|
| I | T_I | $-\infty$ | 1,641 | $-\infty$ | 3,830 | $-\infty$ | 5,888 | $-\infty$ |
| H | T_F | α_F | 0,000 | -2,000 | 0,000 | -1,333 | 0,000 | -1,14 |
| A | T_0 | α_0 | 1,217 | 0,000 | 2,682 | 0,000 | 5,419 | 0,000 |
| B | T_{α_B} | α_B | 0,466 | 1,255 | 1,181 | 2,218 | 2,497 | 4,110 |
| D | T_d | α_d | 0,060 | 1,046 | 0,070 | 1,500 | 0,030 | 1,750 |
| E | $T = 0$ | α_e | 0 | 1,000 | 0 | 1,500 | 0 | 1,750 |

Tabela 1 – Coordenadas de pontos especiais para dimensões 2, 3 e 4: I=($T_I, -\infty$) limite do modelo de Ising de spin 1/2; H=(T_F, α_F) ponto fixo da fase ferromagnética; A=(T_0, α_0) modelo de Ising spin 1, com campo nulo; B=(T_{α_B}, α_B) ponto limite para ausência de fase ferromagnética; D=(T_d, α_d) ponto a partir do qual apresenta uma descontinuidade máxima no parâmetro de ordem e E=($T = 0, \alpha_e$) ponto no estado fundamental que separa as fases ferromagnética e paramagnética ordenada.

4.2 Propriedades locais e globais

Nesta seção, analisamos as propriedades locais e globais do modelo BC ferromagnético para explorar a natureza das fases F, P, PO em torno das transições de fases. O procedimento recursivo exato para as propriedades locais são obtidas usando as condições do modelo BC ferromagnético nas equações (3.47)-(3.56). Deste modo, o conjunto de equações podem ser reescrito na forma

$$\langle \sigma \rangle_{n+1} = W_1 [\langle S_1 \rangle_n + \langle S_2 \rangle_n] - [W_1 - W_2] [\langle S_1^2 S_2 \rangle_n + \langle S_1 S_2^2 \rangle_n], \quad (4.5)$$

$$\langle \sigma S_1^2 \rangle_{n+1} = W_1 \langle S_1 \rangle_n + W_2 \langle S_1^2 S_2 \rangle_n - [W_1 - W_2] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n, \quad (4.6)$$

$$\langle \sigma S_2^2 \rangle_{n+1} = W_1 \langle S_2 \rangle_n + W_2 \langle S_1 S_2^2 \rangle_n - [W_1 - W_2] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n, \quad (4.7)$$

$$\langle \sigma^2 S_1 \rangle_{n+1} = W_3 \langle S_1 \rangle_n + [W_4 - W_3 + W_5] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n - [W_4 - W_5] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n, \quad (4.8)$$

$$\langle \sigma^2 S_2 \rangle_{n+1} = W_3 \langle S_2 \rangle_n + [W_4 - W_3 + W_5] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n - [W_4 - W_5] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n, \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 \rangle_{n+1} &= [W_3 - 2W_4][\langle S_1^2 \rangle_n + \langle S_2^2 \rangle_n] - [W_4 - W_5]\langle S_1 S_2 \rangle_n + \\ &\quad + [3W_4 - 2W_3 + W_5]\langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n + 2W_4, \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\langle \sigma S_1 \rangle_{n+1} = W_2 \langle S_1 S_2 \rangle_n + W_1 \langle S_1^2 \rangle_n - [W_1 - W_2] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (4.11)$$

$$\langle \sigma S_2 \rangle_{n+1} = W_2 \langle S_1 S_2 \rangle_n + W_1 \langle S_2^2 \rangle_n - [W_1 - W_2] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (4.12)$$

$$\langle \sigma^2 S_1^2 \rangle_{n+1} = W_3 \langle S_1^2 \rangle_n - [W_4 - W_5] \langle S_1 S_2 \rangle_n + [W_4 - W_3 + W_5] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (4.13)$$

$$\langle \sigma^2 S_2^2 \rangle_{n+1} = W_3 \langle S_2^2 \rangle_n - [W_4 - W_5] \langle S_1 S_2 \rangle_n + [W_4 - W_3 + W_5] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (4.14)$$

com

$$W_1 = \frac{e^{2J_n} - 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n} + e^{2J_n}}, \quad (4.15)$$

$$W_2 = \frac{1}{2} \frac{e^{4J_n} - 1}{1 + e^{\Delta_n + 2J_n} + e^{4J_n}}, \quad (4.16)$$

$$W_3 = \frac{e^{2J_n} + 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n} + e^{2J_n}}, \quad (4.17)$$

$$W_4 = \frac{1}{2 + e^{\Delta_n}}, \quad (4.18)$$

$$W_5 = \frac{1}{2} \frac{e^{4J_n} + 1}{1 + e^{\Delta_n + 2J_n} + e^{4J_n}}, \quad (4.19)$$

com o índice subscrito n representando a ordem da hierarquia. Com isso, conhecendo as magnetizações locais e pares de correlações entre spins de ordem zero, podemos decorar a rede e calcular as magnetizações e pares de correlações locais entre spins da hierarquia 1, fazendo isso sucessivamente até chegarmos à hierarquia de ordem n .

4.3 Propriedades termodinâmicas e comportamento crítico

Nesta parte da tese apresentamos os resultados obtidos através de cálculos numéricos para o modelo BC ferromagnético na ausência de campo magnético. Em virtude do número de sítios e ligações crescerem exponencialmente com o número de hierarquias, aumentando o custo computacional, ficamos limitados ao tamanho da rede que conseguimos estudar. Trabalhamos com redes de 15 hierarquias para as dimensões $d = 2$ e $d = 3$, e 10 hierarquias para dimensão $d = 4$. Em casos diferentes para o número de hierarquias, explicitamos no texto.

4.3.1 Magnetização

A primeira grandeza física calculada é a magnetização total por sítio,

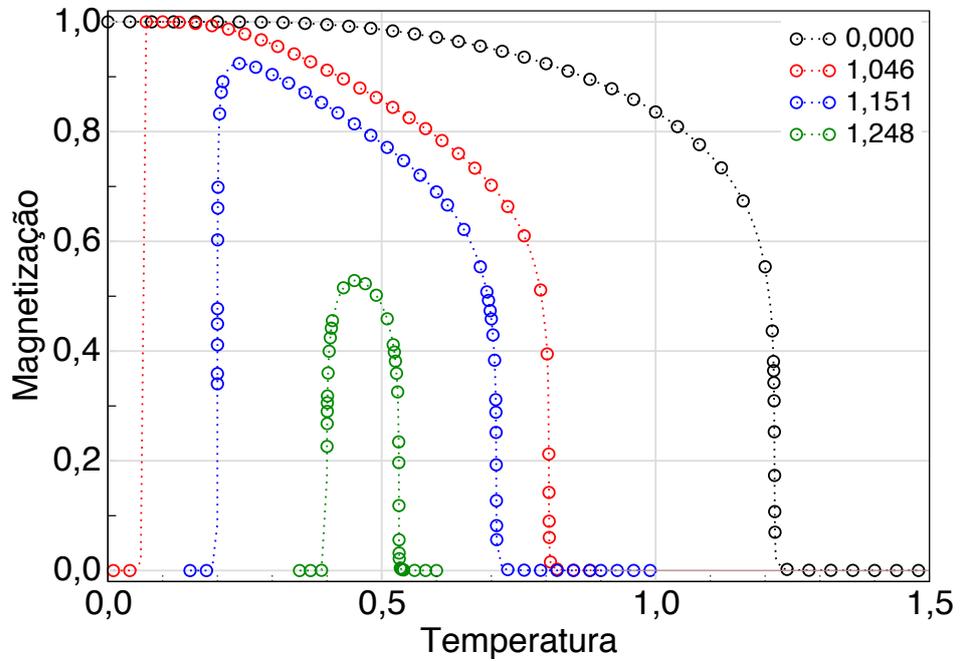
$$m = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \langle \sigma_i \rangle, \quad (4.20)$$

sendo N_s o número de sítios. A magnetização total por sítio é calculada numericamente para cada valor da temperatura e do campo cristalino. Em seguida, obtemos o gráfico que representa a dependência da magnetização pela temperatura para alguns valores de α no intervalo $0 \leq \alpha \leq \alpha_B$, ilustrado na Figura 12. E entre $0 \leq \alpha \leq \alpha^*$ ocorre uma única transição de fase contínua com o parâmetro de ordem decrescendo continuamente até zero na temperatura crítica. Para $\alpha^* < \alpha \leq \alpha_B$ duas transições são observadas, a primeira em baixa temperatura onde ocorre um crescimento abrupto da magnetização e a segunda em temperatura mais alta em que a magnetização decresce suavemente até zero na temperatura crítica. A última corresponde a uma transição contínua que descreve a transição da fase paramagnética (P) desordenada para uma fase ferromagnética (F) partindo de altas temperatura para baixas temperaturas. Na primeira transição, ocorre uma variação abrupta da magnetização entre a fase ferromagnética (F), com magnetização diferente de zero, e a fase paramagnética ordenada (PO), caracterizada por apresentar magnetização zero e configuração de spins predominantemente no estado com $S_i = 0$ quando a temperatura é baixada na região de baixas temperaturas. A fase paramagnética usual, aqui denominada de paramagnética desordenada, também apresenta magnetização nula. Neste caso, $1/3$ dos sítios estão ocupados desordenadamente no pelo estado $S_i = 0$, $1/3$ no estado $S = 1$ e $1/3$ no estado $S = -1$.

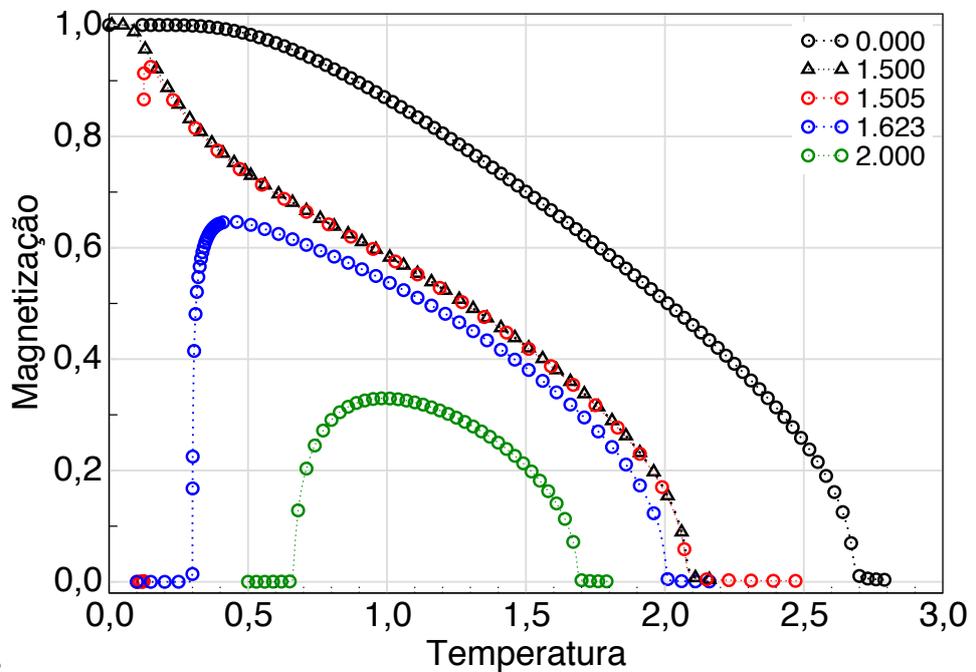
Na Figura 12(a) ilustramos o comportamento da magnetização em função da temperatura para rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 2$. Os círculos pretos representam o caso $\alpha = 0,0$ que descreve o modelo de Ising de spin 1. Como esperado, apresenta apenas uma transição de fase contínua e é utilizado como referência para os demais casos. Os círculos vermelhos obtido para $\alpha = 1,046$ apresentam duas transições distintas, onde a transição em baixa temperatura ocorre à temperatura crítica $T_d = 0,060$. Nesta temperatura, percebemos que ocorre um salto drástico na magnetização desde $m = 0,0$ até $m = 1,0$, característico de uma transição de fase de primeira ordem. Entretanto em altas temperaturas temos uma transição de fase contínua, da fase ferromagnética para a fase paramagnética desordenada. Mais dois valores na região de reentrância, foram usados para ilustrar o comportamento da magnetização: os círculos azuis para $\alpha = 1,151$ e os círculos verdes para $\alpha = 1,248$. Ambos apresentam em baixas temperaturas duas transições descontínuas, cujo salto se reduz à medida que o valor de α se aproxima do valor de α_B . Vale notar também que o valor máximo da magnetização diminui com a aproximação de α para α_B .

Comportamento similar também foi observado para a magnetização versus temperatura para as dimensões $d = 3$, na Figura 12 (b), e para $d = 4$, na Figura 12(c). Em ambos os casos, também está ilustrado o caso $\alpha = 0,000$ que serve de referência para cada dimensão. Entretanto, além de três valores no intervalo da reentrância, adicionamos um valor de α sobre a linha vertical que corresponde a $\alpha = 1,500$ e $\alpha = 1,750$ para $d = 3$ e $d = 4$, respectivamente, representados por triângulos pretos. Sobre estes valores, de

acordo com os diagrama fornecido na Figura 11 em baixas temperaturas, podemos notar uma que transição de fase é separado por uma fronteira vertical, tornando evidente devido a alta sensibilidade da magnetização em relação à pequena variação de α . As propriedades locais serão discutidas e analisadas no próximo capítulo.



(a) $d = 2$



(b) $d = 3$

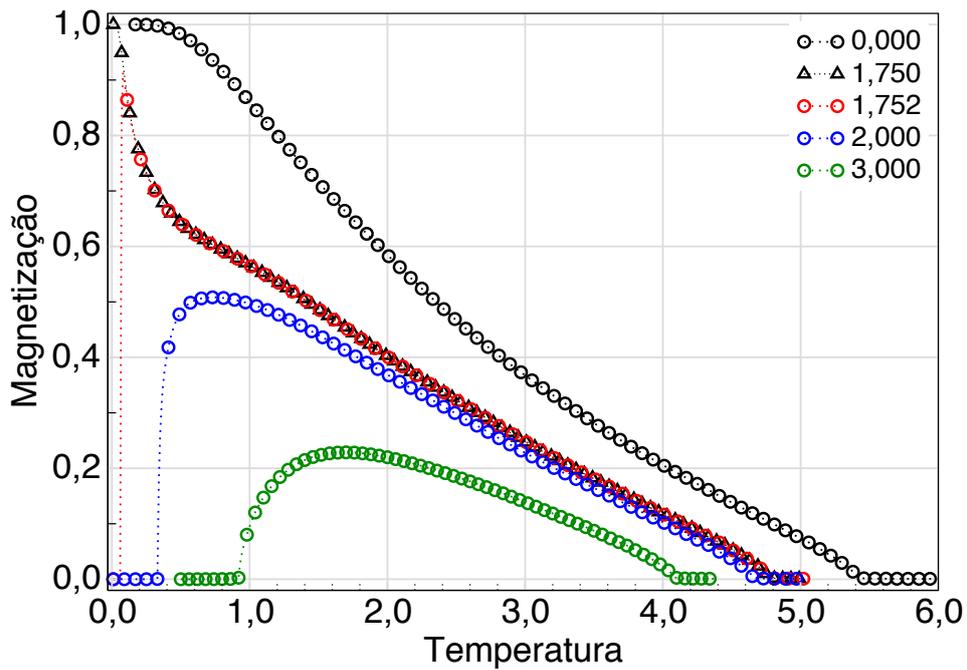

 (c) $d = 4$

Figura 12 – Magnetização total por spin versus temperatura para alguns valores de α de acordo com as cores da legenda antes da reentrância ($\alpha < \alpha^*$) e na região da reentrância ($\alpha^* < \alpha < \alpha_B$) para rede hierárquica tipo diamante para (a) dimensão $d = 2$, (b) dimensão $d = 3$ e (c) dimensão $d = 4$.

4.3.2 Parâmetro Quadrupolar

O parâmetro quadrupolar q por spin é definido por

$$q = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} \langle \sigma_i^2 \rangle, \quad (4.21)$$

que pode ser determinado numericamente em função da temperatura para um valor fixo de α , procedimento análogo ao usado para obter a magnetização total por sítio. Esse parâmetro combinado com o parâmetro de ordem m pode ser utilizado para obter a fração de sítios n_0 , n_+ e n_- nos estados $S_i = 0, 1$ e -1 , respectivamente. A fração de sítios no estado $S_i = 0$ é dada por

$$n_0 = 1 - q. \quad (4.22)$$

É usual considerar essa quantidade como o parâmetro de ordem da fase paramagnética ordenada (21), associada ao campo conjugado $\alpha = \Delta/J$. A magnetização e o parâmetro quadrupolar podem ser reescritos, respectivamente, nas formas

$$m = n_+ - n_-, \quad (4.23)$$

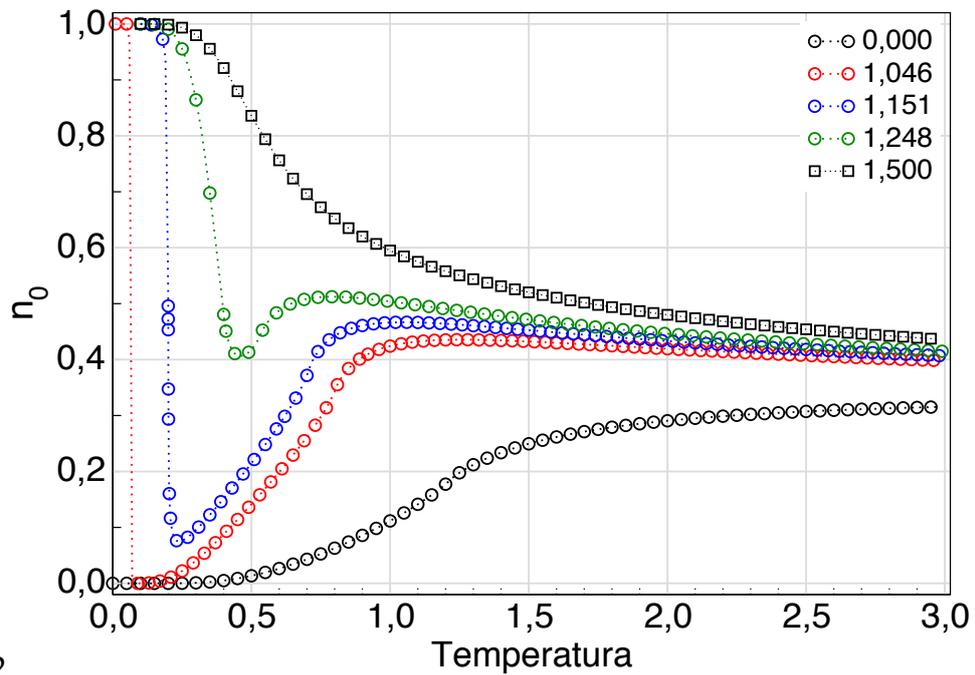
$$q = n_+ + n_-, \quad (4.24)$$

Associando estas equações com a equação (4.21), obtemos que

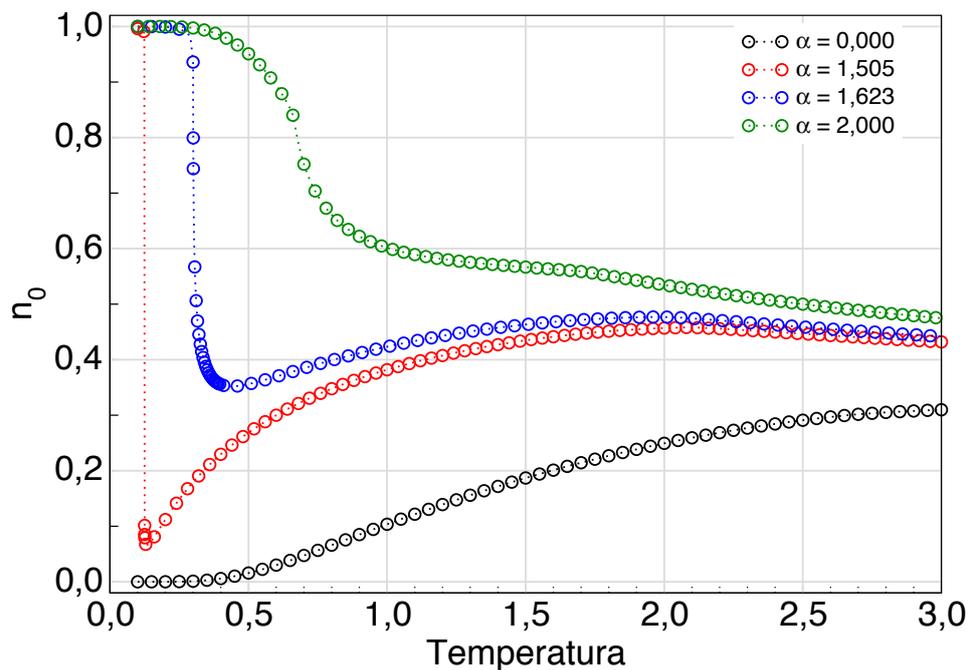
$$n_+ = \frac{1}{2}(q + m), \quad (4.25)$$

$$n_- = \frac{1}{2}(q - m). \quad (4.26)$$

com $n_0 + n_+ + n_- = 1$. Assim, como mostramos a dependência do parâmetro de ordem m com a temperatura, na Figura 13 ilustramos como a densidade de sítios n_0 no estado $S_i = 0$ varia em função da temperatura, para alguns valores de $\alpha \geq 0$ para o caso (a) $d = 2$, (b) $d = 3$ e (c) $d = 4$.



(a) $d = 2$



(b) $d = 3$

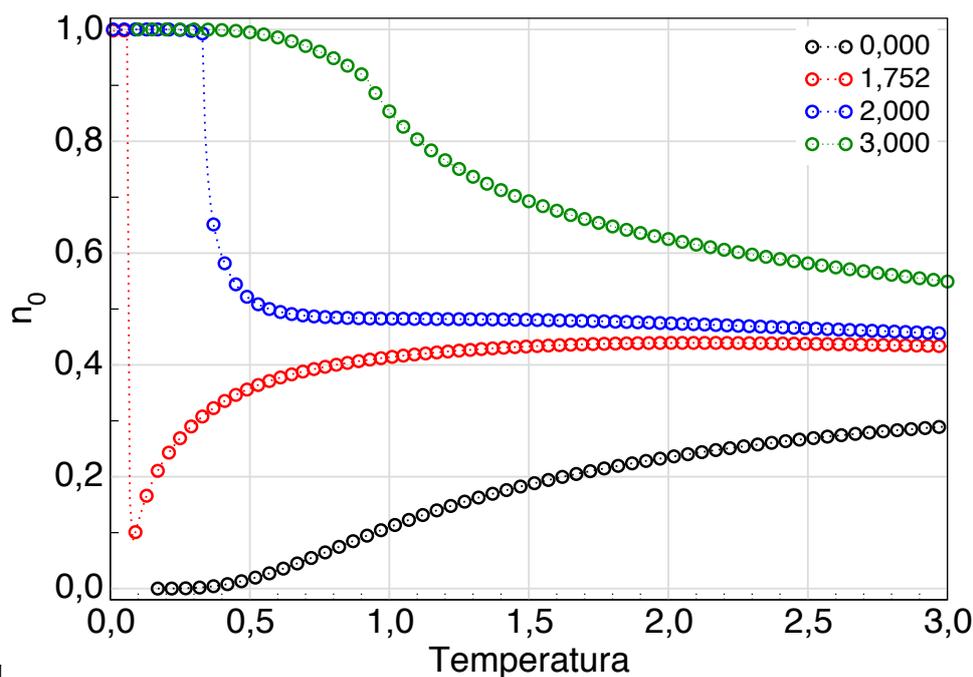
(c) $d = 4$

Figura 13 – Fração de sítios n_0 com configuração de spin $S_i = 0$ em função da temperatura para alguns valores fixos do parâmetro α indicados nas legendas (a) para $d = 2$, (b) $d = 3$ e (c) $d = 4$. Para $d = 2$, adicionamos um valor de $\alpha > \alpha_B$ indicado por quadrados pretos.

Nas Figuras 13 (a), (b) e (c) os círculos pretos representam o caso $\alpha = 0,00$ correspondente ao modelo de Ising spin 1, para ser tomado como resultado de referência. Neste caso, notamos que n_0 cresce continuamente desde zero até $1/3$ (na temperatura crítica ocorre mudança na concavidade) que é atingido na região de altas temperaturas. Para valores de α na região da reentrância ($\alpha^* < \alpha < \alpha_B$) os gráficos são representados por círculos coloridos, neste intervalo na região de baixas temperaturas o parâmetro de ordem possui valor $n_0 = 1$ até chegarmos na temperatura crítica da transição paramagnética ordenada para fase ferromagnética tendo uma queda abrupta e, em seguida, volta a crescer continuamente até um valor máximo, em seguida decresce continuamente até chegar ao valor limite com $n_0 = 1/3$. Este comportamento é observado em todos os três casos, verificando que os valores de mínimo e máximo ocorrem nas temperaturas críticas de transição. Entretanto, analisando também, apenas em (a), um valor de $\alpha > \alpha_B$ representando na figura por quadrados pretos, observamos que o valor de n_0 decresce continuamente de um valor desde 1 até o valor limite de $n_0 = 1/3$ em altas temperaturas. Para completar e melhor explorar o comportamento de n_0 , ilustramos nas Figuras 14 e 15 os gráficos das densidades do parâmetro de ordem n_0 na região relevante correspondente ao diagrama de fase, em todos os casos acrescentamos fronteira de separação da região ferromagnética (magnetização diferente de zero) das regiões paramagnéticas desordenada e ordenada. Vale chamar a atenção para região de baixas temperaturas e próxima a fronteira de separação onde ocorre uma mudança de cor drástica da azul

para vermelha evidenciando uma descontinuidade finita na densidade de sítios n_0 , onde o azul representa maior número de sítios no estado $S = 1$ e vermelho, sítios no estado $S_i = 0$. Na região de altas temperaturas notamos um gradiente na mudança de cor mais suave caracterizando uma transição de segunda ordem.

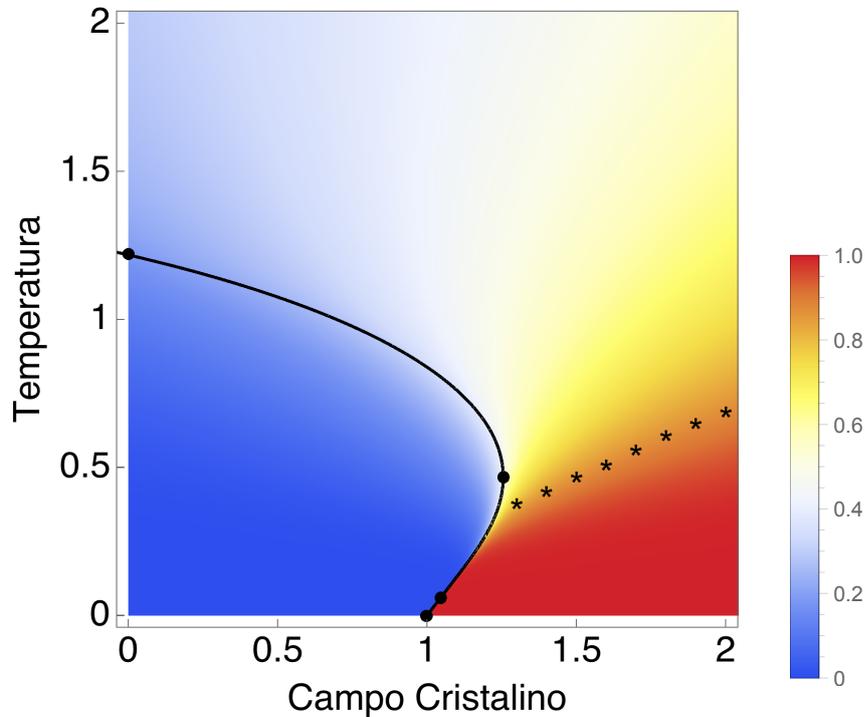


Figura 14 – Gráficos das densidades da fração de spins no estado $S_i = 0$ (n_0) em função da temperatura reduzida ($1/J$) e do campo cristalino reduzido ($\alpha = \Delta/J$) para a rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 2$. A linha contínua indica a fronteira de separação das fases ferromagnética e paramagnética (ordenada e desordenada). As \ast marcam os valores onde as derivadas de n_0 em função da temperatura são mínimos, para um valor de α fixo. Os pontos \bullet representam as coordenadas dos pontos (T_0, α_0) , (T_{max}, α_B) , (T_c, α_c) e $(T = 0, \alpha_d)$. As cores definem as densidades de acordo com a legenda a direita.

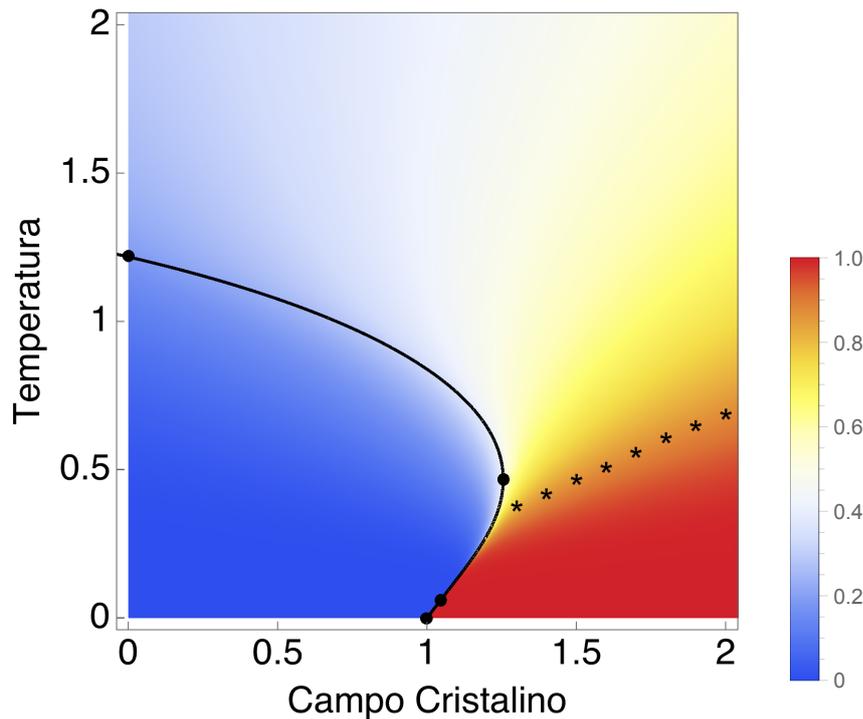


Figura 15 – Gráficos das densidades da fração de spins no estado $S_i = 0$ (n_0) em função da temperatura reduzida ($1/J$) e do campo cristalino reduzido ($\alpha = \Delta/J$) para a rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 3$. A linha contínua indica a fronteira de separação das fases ferromagnética e paramagnética (ordenada e desordenada). As * marcam os valores onde as derivadas de n_0 em função da temperatura são mínimos, para um valor de α fixo. Os pontos • representam as coordenadas dos pontos (T_0, α_0) , (T_{max}, α_B) , (T_c, α_c) e $(T = 0, \alpha_d)$. As cores definem as densidades de acordo com a legenda a direita.

Para determinar a localização do ponto tricrítico analisamos os resultados encontrados e motivados pelo diagrama de fases experimental ilustrado na Figura 1, apresentamos na Figura 16 para (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$ o comportamento n_0 com a temperatura para valores de α imediatamente antes e após a linha de transição e representamos essa análise no gráfico T versus n_0 . Observa-se na região de baixas temperaturas que a densidade n_0 de sítios no estado $S_i = 0$ é maior. À medida que aumentamos a temperatura a diferença na densidade n_0 diminui até que em $T_c = 0,200$, para $d = 2$, e $T_c = 0,250$, para $d = 3$, essa diferença torna-se nula. Esses resultados são compatíveis, como sinalizado pela termodinâmica e pela propriedades multifractais da magnetização local, que serão apresentadas no próximo capítulo. O ponto tricrítico é localizado ao final da linha λ com (a) $T = 0,200$ e $n_0 = 0,511$, para $d = 2$, e (b) $T = 0,250$ e $n_0 = 0,951$, para $d = 3$. As transições de fase ao longo da linha λ são de segunda ordem. As outras duas linhas delimitam a região de coexistência entre a fase ferro ($S = 1$ ou $S = -1$) e a fase paramagnética ordenada com $S = 0$. encontram-se com a linha de transição de segunda ordem no ponto tricrítico.

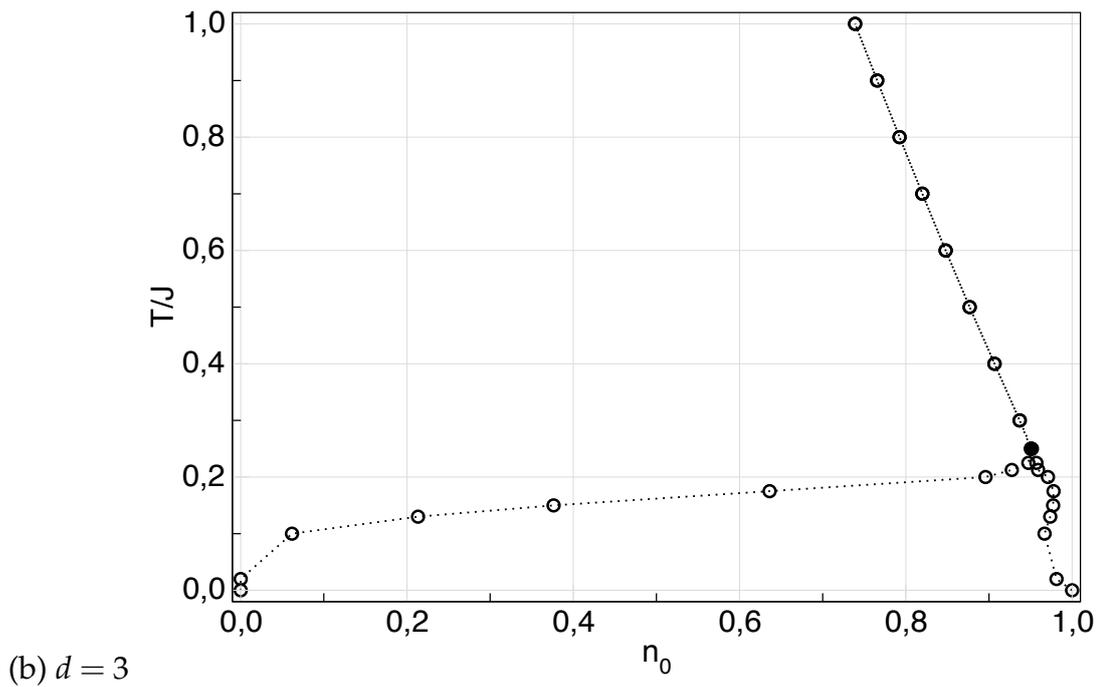
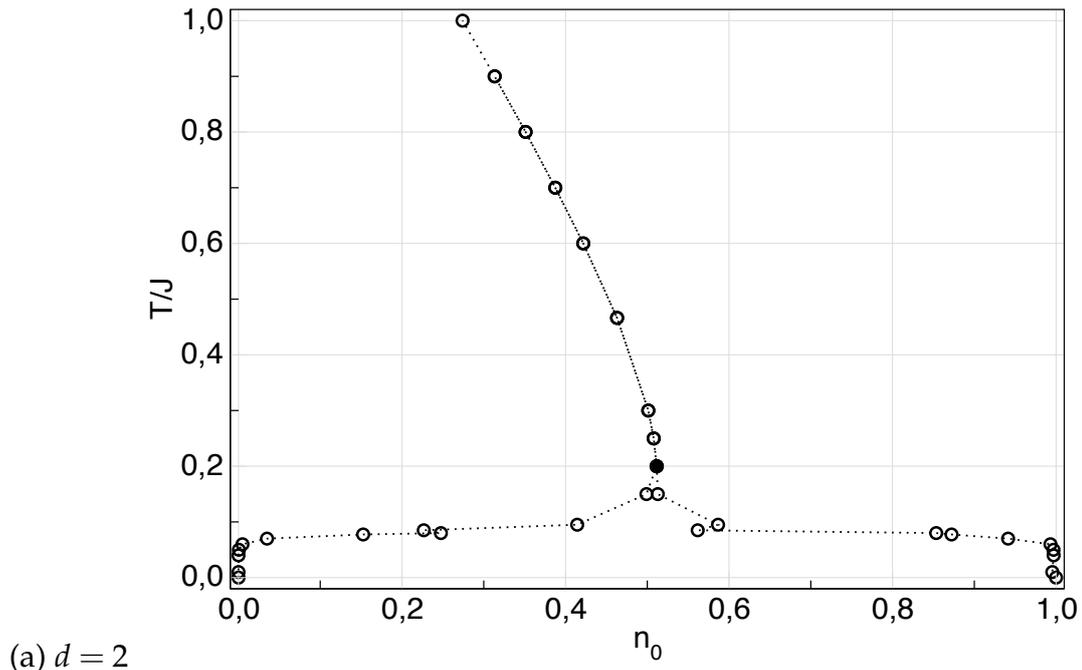


Figura 16 – Diagrama de fases para o modelo BC ferromagnético da temperatura em função da densidade n_0 para (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$.

4.3.3 Energia Interna

A energia interna U para o modelo Blume-Capel ferromagnético a campo nulo é definida por

$$U = \langle \mathcal{H}_{BC} \rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i S_j \rangle + \Delta \sum_i \langle S_i^2 \rangle = E_J + \Delta E_\Delta, \quad (4.27)$$

E_J e ΔE_Δ são as contribuições relativas aos acomplamentos entre spins ligação e campo cristalino sobre spins, respectivamente. Para a rede hierárquica diamante a densidade de energia interna da rede com n hierarquias em unidades J pode ser escrita como:

$$u_{[n]} = -\frac{1}{N_L^{[n]}} \sum_{\langle ij \rangle} \langle S_i S_j \rangle + \frac{\alpha}{N_S^{[n]}} \sum_i \langle S_i^2 \rangle, \quad (4.28)$$

com $N_L^{[n]}$ e $N_S^{[n]}$ representando o número de ligações e sítios da rede diamante com n hierarquias, respectivamente. Os valores $\langle S_i S_j \rangle$ associados a cada ligação e $\langle S_i^2 \rangle$ associados a cada sítio da rede são obtidos numericamente através das equações (4.5)-(4.14). Nas Figuras 17 e 18 representamos a densidade de energia $u_{[n]}$ em função da temperatura para $\alpha = 0,000$ e $\alpha = 1,061$, respectivamente, descrevendo o comportamento da energia interna na região de baixas temperaturas onde o sistema apresenta uma descontinuidade no parâmetro de ordem. A Figura 17 descreve o comportamento da energia para uma transição de segunda ordem. A Figura 18 ilustra que na região de baixas temperaturas e $(\alpha^* < \alpha \leq \alpha_B)$ ocorre uma descontinuidade, isto é, um salto no valor da energia interna. Ambas as figuras foram obtidas para o modelo com $d = 2$ e $n = 21$ hierarquias, uma vez que comportamento análogo é obtido para dimensões superiores.

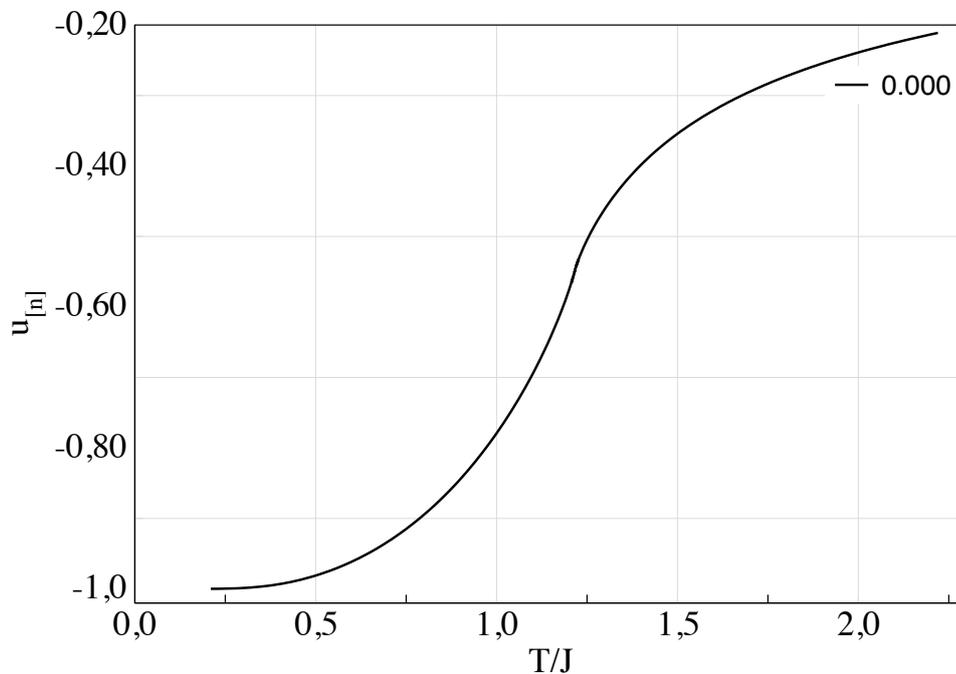


Figura 17 – Energia interna do modelo BC em unidades de J em função da temperatura para valores de α fixo com $\alpha = 0,00$, $d = 2$ e $n = 21$ hierarquias recuperando o modelo de Ising $S = 1$.

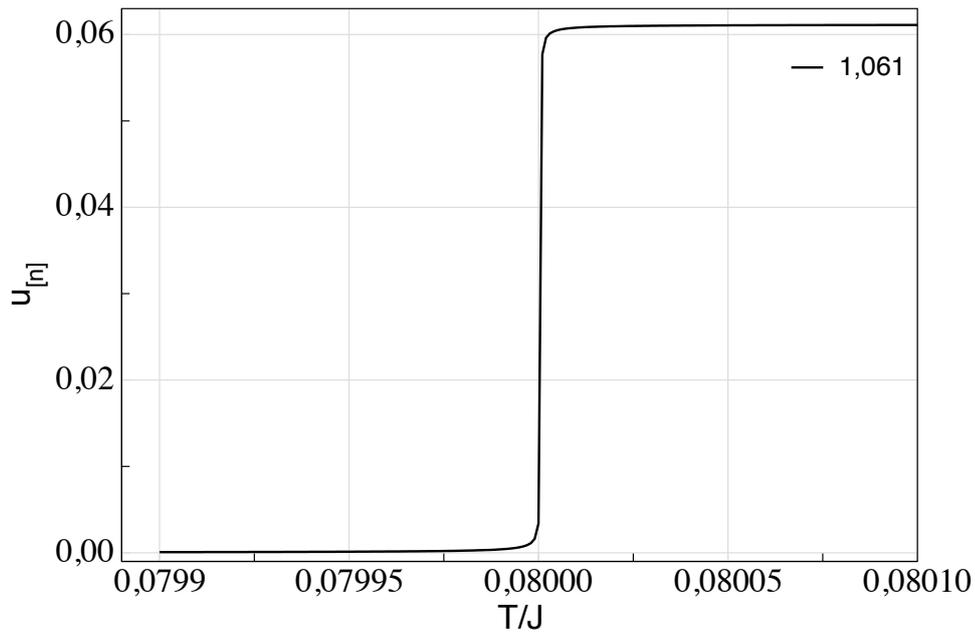


Figura 18 – Energia interna do modelo BC em unidades de J em função da temperatura para valores de α fixo com $\alpha = 1,061$ na região da reentrância ($\alpha^* < \alpha \leq \alpha_B$).

O valor da densidade de energia interna do estado fundamental ($T = 0$) e na região entre ($\alpha \leq \alpha_e$), corresponde à configuração onde os spins estão todos alinhados para cima com $S_i = 1$ (ou para baixo $S_i = -1$), é dada por:

$$u_{[n]} = -1 + \alpha . \quad (4.29)$$

Na região $\alpha_e < \alpha \leq \alpha_B$, em baixas temperaturas, o sistema está na chamada fase paramagnética ordenada. Em $T = 0$ os estados ocupados pelo spins são $S_i = 0$. Deste modo, os pares de correlações entre sítios mais próximos são nulos. Portanto a densidade de energia interna em $T = 0$ deve possuir valor nulo. Na Figura 19 mostramos a densidade de energia interna em função da temperatura normalizada pela temperatura crítica, na região da reentrância e em baixas temperaturas. Observamos que à medida que reduzimos a temperatura sobre a fronteira de transição ferromagnética-paramagnética ordenada, a densidade de energia, à partir da temperatura crítica $T_c = 0,150$ e $\alpha_c = 1,114$ para dimensão $d = 2$ (indicado na Figura 19 por triângulos apontando para direita), a densidade de energia interna sofre saltos mais evidentes na transição.

4.3.4 Calor específico

O calor específico foi obtido numericamente, através da derivada numérica da energia interna em relação à temperatura. Na Figura 20, exibimos o calor específico em função da temperatura para $\alpha = 0,00$ para dimensão $d = 2$. Como usual para uma transição de segunda ordem, observamos um pico agudo em T_c . O calor específico

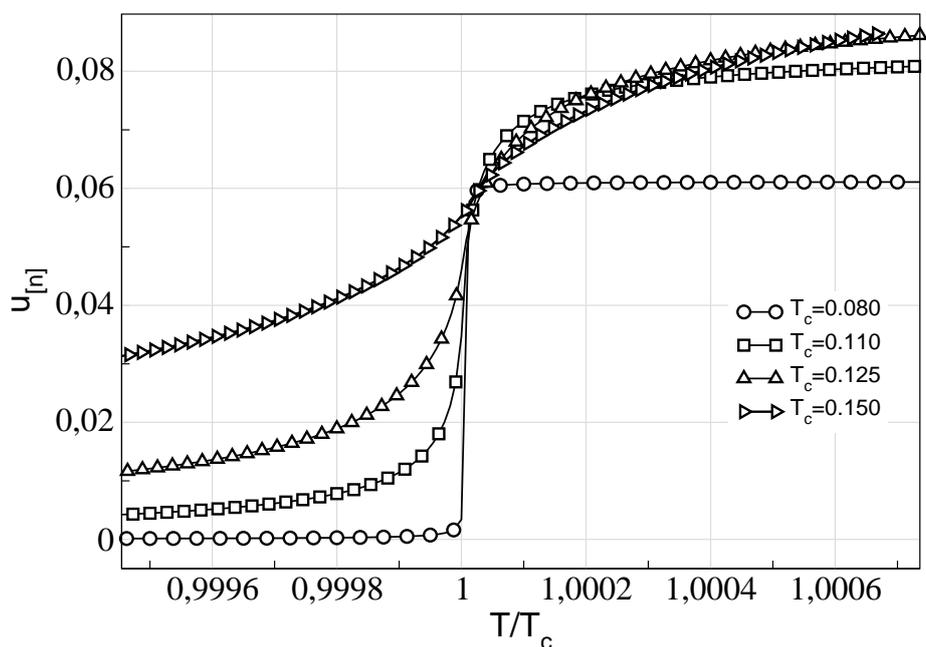


Figura 19 – Densidade de energia interna em função de T/T_c sobre a fronteira de transição F-PO para $d = 2$, evidenciando o aumento no salto da densidade de energia à medida que reduzimos a temperatura. Os símbolos indicam valores das respectivas temperaturas críticas.

da mistura do ^3He - ^4He foi obtido experimentalmente ao longo da transição λ e seu comportamento ilustrado na Figura 2.

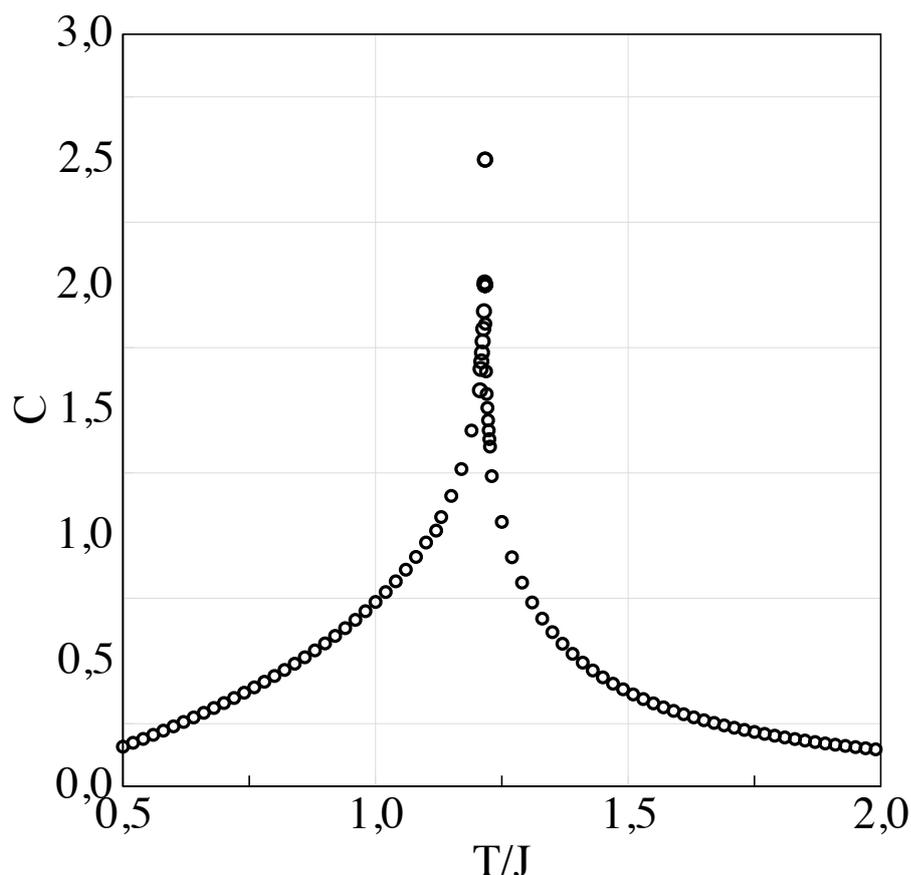


Figura 20 – Calor específico versus temperatura em unidades de J , para $\alpha = 0,00$ para o modelo BC ferromagnético na rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 2$.

Para compreender melhor a transição ferromagnética-paramagnética em baixas temperaturas, cruzamos a linha de transição de fase fixando uma temperatura e variando $\alpha = D/K$. Deste modo, é razoável estudar a derivada na energia interna em relação ao campo cristalino, em vez da temperatura. Sendo E_J uma quantidade de energia mais simples e que também captura o comportamento singular, como apontado por (86), analisaremos a parcela do calor específico, referindo-se à derivada numérica de E_J em função de D . Na Figura 21 exibimos o calor específico em função de α , mostrando o efeito do tamanho finito sobre a rede. Este efeito provoca um deslocamento na posição do pico, além de um aumento deste valor, à medida que aumentamos o número n de hierarquias. A Figura 21 ilustra o comportamento para um valor cruzando a linha de transição F-P à temperatura $T_c = 1,000$ e $\alpha_c = 0,695$.

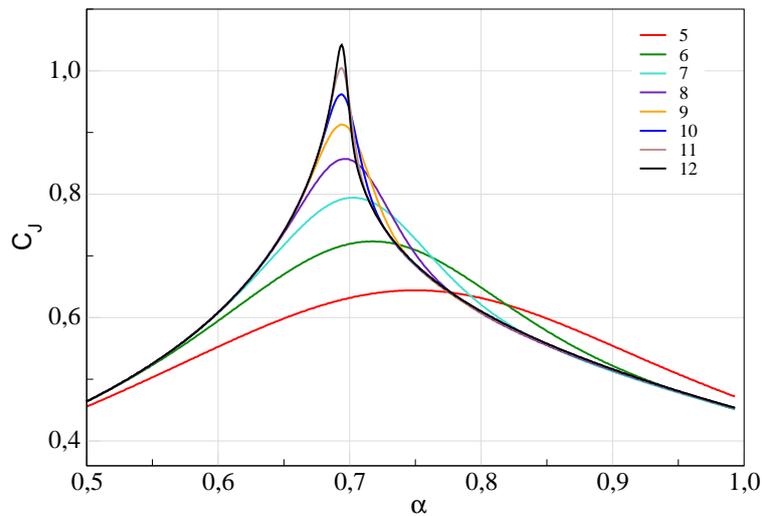
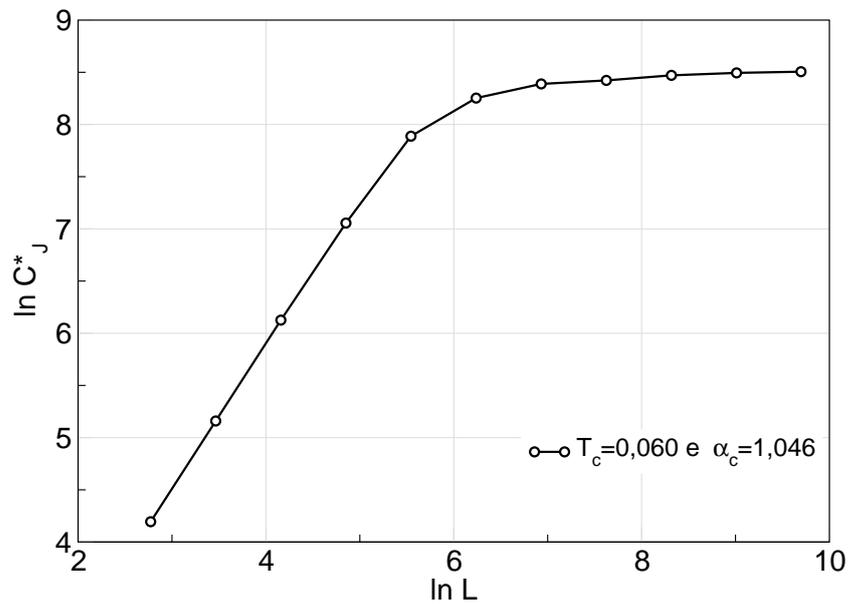
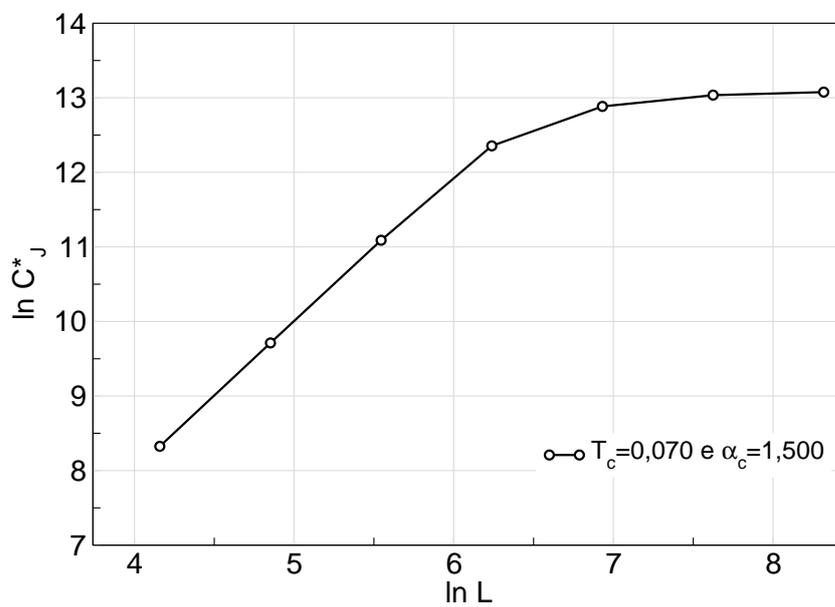


Figura 21 – Calor específico versus α para alguns valores de n de acordo com as cores da legenda com $T_c = 1,000$ para o modelo BC na rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 2$.

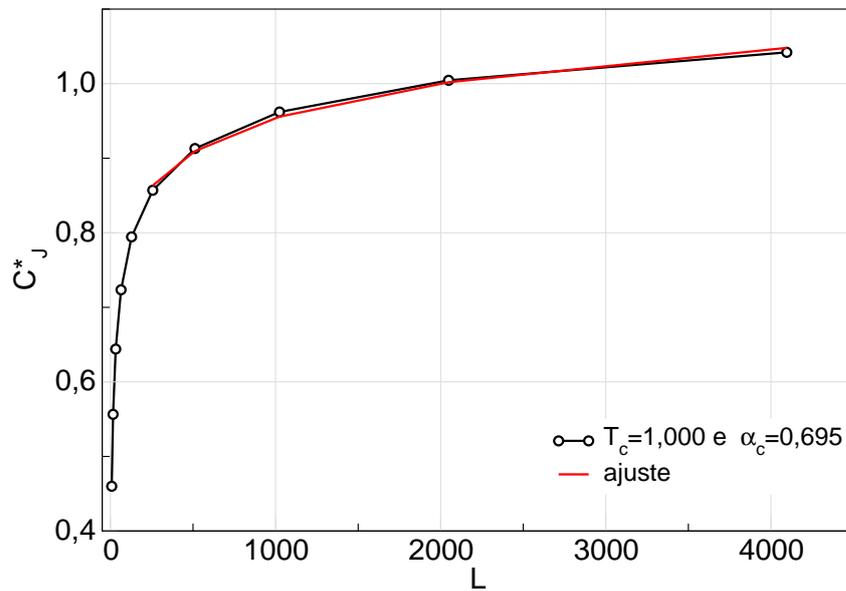
O estudo do efeito de tamanho finito na rede hierárquica para transições de fase permitiu observar como apontado no trabalho (86): (i) um deslocamento no pseudo ponto crítico, como visto na Figura 21, através do deslocamento dos picos, e (ii) uma diferença no comportamento do valor dos picos do calor específico (C_j^*) para diferentes regiões do diagrama. Para transições de primeira ordem, o pico do calor específico é regido por uma lei de potência do tipo $C_L^* \sim L^x$, com $L = 2^n$ em redes hierárquicas e escalando com um valor de x dependendo da dimensão analisada como apontado por (86), como ilustrado nas Figuras 22 (a) e (b). Para a transição de segunda ordem os picos do calor específico mostraram um comportamento logarítmico, como constatado por (86), Figura 22 (c), a linha vermelha representando o ajuste logarítmico a partir $L \geq 256$. Na Figura 22 (a) para $d = 2$ notamos, para o valor de $T_c = 0,060$ na região de primeira ordem e $L \leq 256$ em escala logarítmica, que o pico do calor específico se relaciona com L através de uma lei de potência com expoente $x = 1,3149$. Para dimensão $d = 3$, Figura 22 (b), encontramos uma relação linear até $L \leq 512$ com valor do expoente x associado estimado em $x = 1,9431$.



(a) $d = 2$



(b) $d = 3$



(c) $d = 2$

Figura 22 – Picos do calor específico versus L . Observando em (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$ o comportamento linear para os picos em função na escala logarítmica na região de baixas temperaturas. Enquanto que em (c) observamos um comportamento semelhante a função logarítmica para transições de segunda ordem.

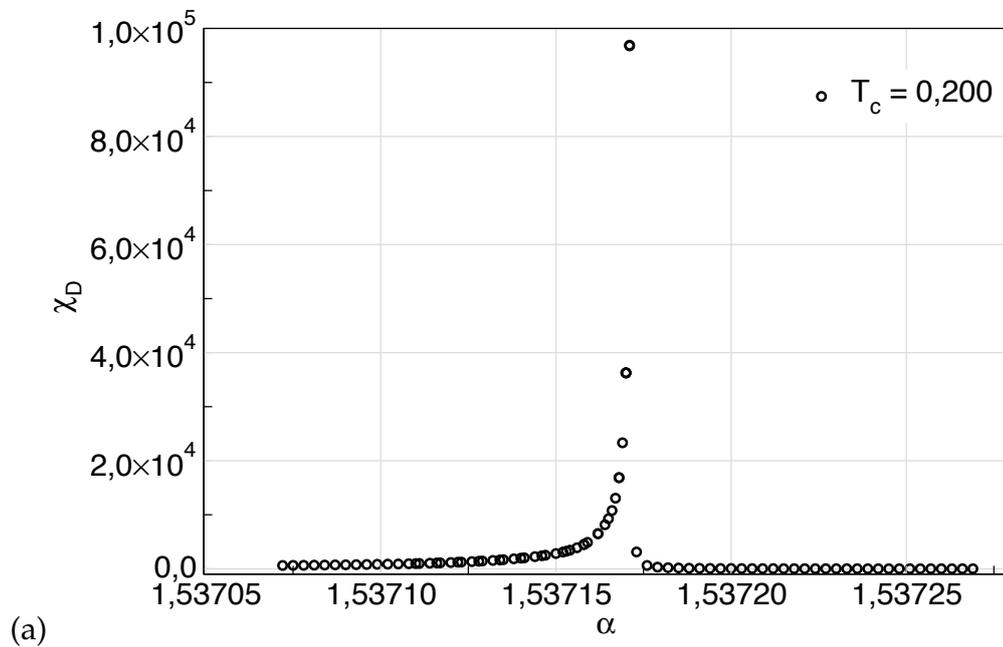
4.3.5 Susceptibilidade associada ao campo cristalino D

Devido à impossibilidade de calcular a susceptibilidade magnética através das propriedades locais, uma vez que as propriedades locais fornecem apenas as correlações entre pares de spins primeiros vizinhos e por tratarmos o modelo na ausência de campo magnético. É razoável investigar como a susceptibilidade da densidade de spins no estado $S_i = 0$, uma espécie de parâmetro de ordem com relação ao campo cristalino. Definimos, assim, a susceptibilidade associada ao campo cristalino D

$$\chi_D = \left. \frac{\partial n_0}{\partial D} \right|_T. \quad (4.30)$$

Na Figura 23 exibimos o comportamento da susceptibilidade χ_D em função de $\alpha = D/K$, para $d = 3$: (a) $T_c = 0,200$ e (b) $T_c = 0,300$. Observamos que há uma mudança qualitativa no comportamento da susceptibilidade relativa ao campo cristalino. Em (a) observa-se, para $\alpha < \alpha_c$, um aumento rápido na susceptibilidade. Em $\alpha = \alpha_c$ ocorre um aumento significativo do pico, seguido de abrupto decréscimo para o um valor nulo, no limite $n \rightarrow \infty$, para valores de $\alpha > \alpha_c$. Em (b) observamos um aumento suave e contínuo, para $\alpha < \alpha_c$, mas em $\alpha = \alpha_c$ não é observado um salto após o pico. Para $\alpha > \alpha_c$ ocorre uma redução da susceptibilidade χ_D , contudo decrescendo continuamente à

zero. Investigamos o comportamento do valor do pico da susceptibilidade χ_D para valores de α imediatamente antes e depois do valor crítico, para vários valores de n . Na Figura 24, representamos os valores dos picos em função do número de hierarquias para os mesmos valores de temperatura da Figura 23. Para (a) $T_c = 0,200$, à medida que aumentamos o valor de n o efeito de tamanho finito é reduzido e o valor do pico para $\alpha < \alpha_c$ estabiliza-se em torno de $1,0 \times 10^5$. Para $\alpha > \alpha_c$ os valores tendem à zero, no limite termodinâmico. Já, para (b) $T_c = 0,300$ os picos imediatamente antes e depois de α_c têm o mesmo valor, dentro da precisão numérica. Esses resultados apresentam uma mudança qualitativa e quantitativa no comportamento da susceptibilidade entre as temperaturas $T_c = 0,200$ e $T_c = 0,300$, sinalizando a possível localização do ponto tricrítico nesse intervalo.



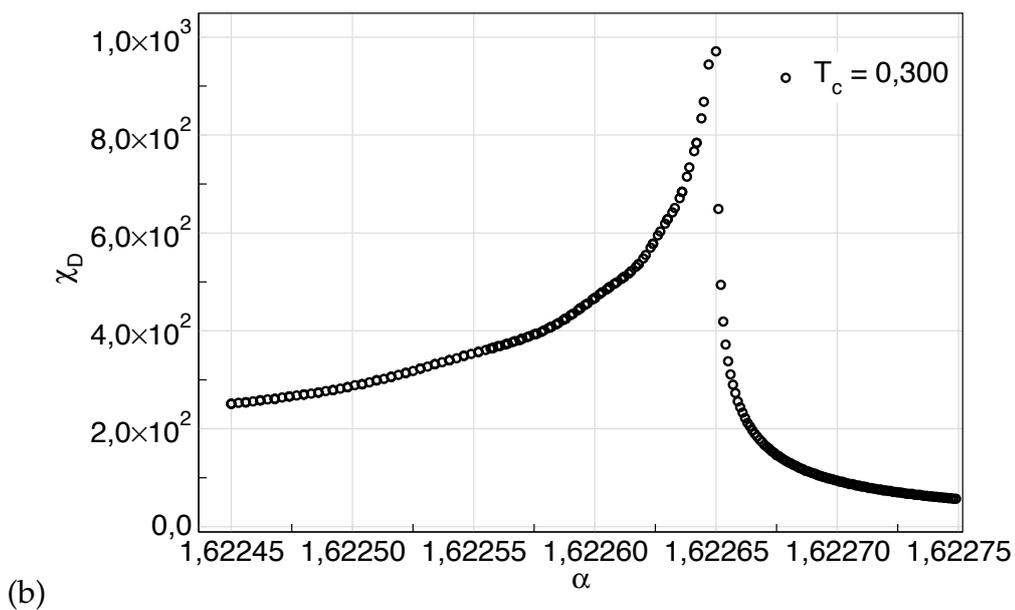
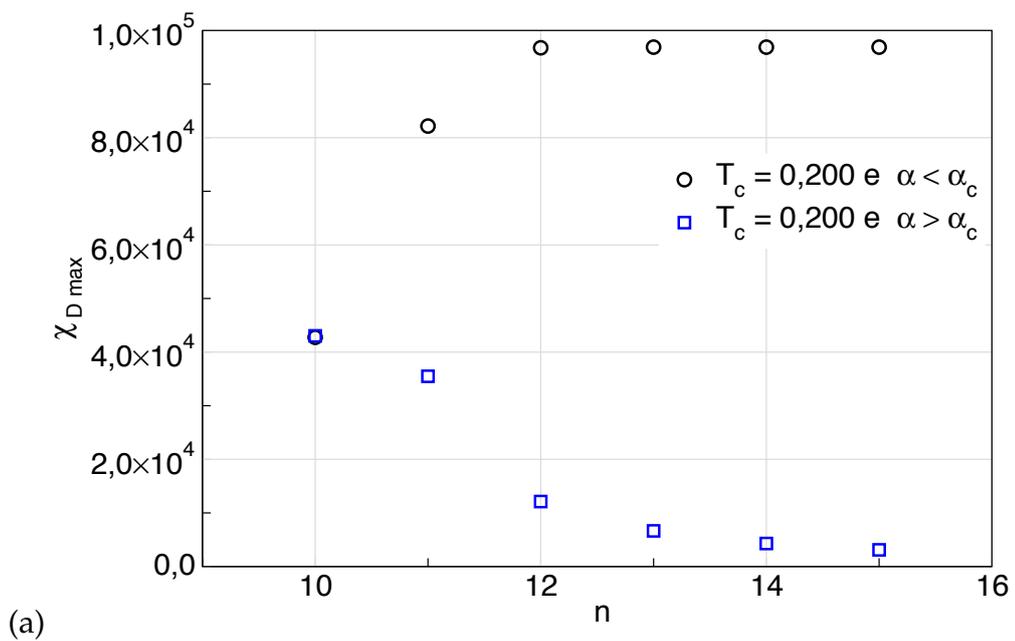


Figura 23 – Susceptibilidade χ_D associada ao campo cristalino D sobre a fronteira de transição para $n = 15$, (a) $T_c = 0,200$, (b) $T_c = 0,300$ e $d = 3$.



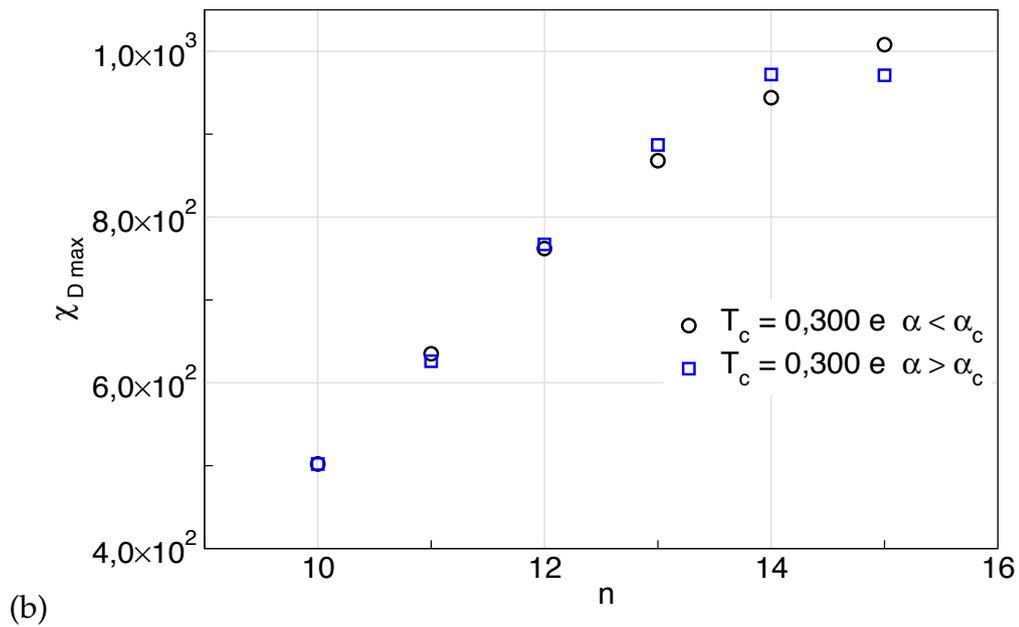


Figura 24 – Valores dos picos da susceptibilidade χ_D em função do número de hierarquias sobre a fronteira de transição para (a) $T_c = 0,200$, (b) $T_c = 0,300$ e $d = 3$.

4.3.6 Entropia

A densidade de entropia foi obtida através da integração numérica do calor específico dividido pela temperatura, isto é

$$C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M. \quad (4.31)$$

Como esperado em uma transição de fase de segunda ordem, ocorre uma mudança gradual no sinal da concavidade de $S \times T$ em T_c . Entretanto, para uma temperatura na região em que ocorrem transições de fase de primeira ordem, semelhante ao que ocorre para o caso da energia interna, percebemos uma variação abrupta na densidade de entropia (s). Na Figura 25, apresentamos a densidade de entropia $s(T)$ em função da temperatura reduzida para alguns valores de temperaturas críticas, indicados na legenda, para uma rede com $n = 21$ hierarquias. Devido ao aumento no valor da descontinuidade, fica evidenciado a natureza da transição em primeira ordem. Notavelmente, à medida que a temperatura da transição é diminuída sobre a fronteira entramos na região das transições de primeira ordem que revelam descontinuidades finitas de $s(T)$. Assim, como observado na dependência da energia interna, em temperaturas de transições mais baixas a descontinuidade fica mais nítida, o que demonstra que o método utilizado permite acessar regiões onde ocorrem transições de primeira ordem no diagrama de fases, não descritas por outros métodos.

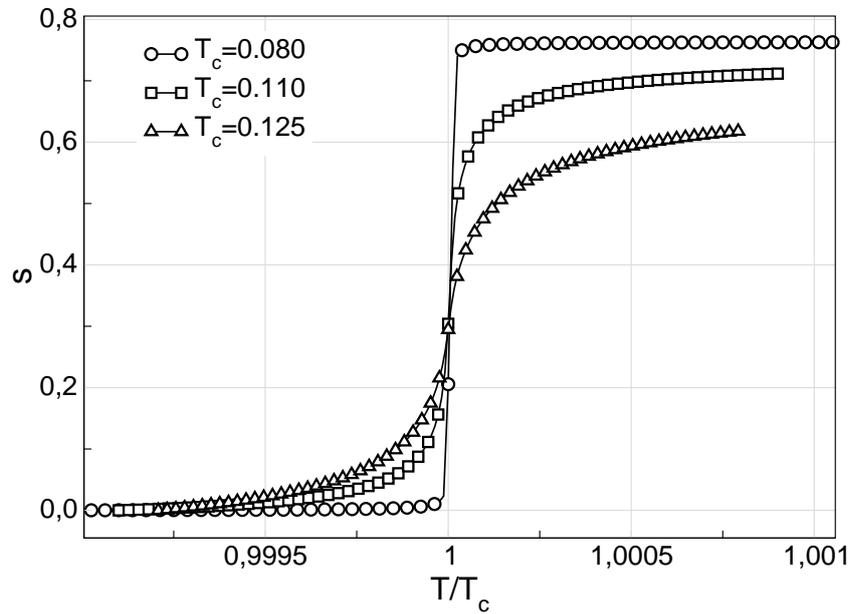


Figura 25 – Densidade de entropia $s(T)$ em unidades de J em função de T/T_c sobre a fronteira de transição F-PO para o modelo BC em redes com $d = 2$, evidenciando o aumento na descontinuidade da densidade de entropia à medida que reduzimos a temperatura. Os símbolos indicam valores das temperaturas críticas.

Numericamente é possível obter diretamente os valores para a diferença de entalpia $\Delta H = T\Delta S$, sobre a transição de primeira ordem, chamado de *calor latente* da transição. Na Figura 26, calculamos a diferença de entalpia em função da temperatura sobre a linha crítica de transição de fase de primeira ordem variando T e α para o modelo BC em redes com $d = 2$. À medida que nos aproximamos do ponto tricrítico o calor latente vai se anulando, caracterizando transição de primeira ordem.

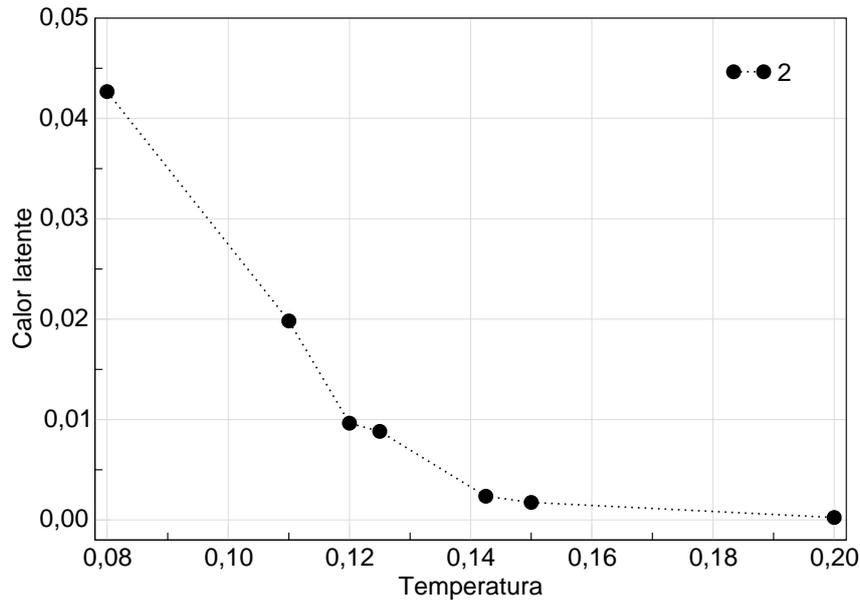


Figura 26 – Calor latente em função da temperatura sobre a linha crítica de transição de fase de primeira ordem. O valor na legenda indica a dimensão da $d = 2$. O calor latente vai se anulando à medida que se aproxima do ponto tricrítico, em $T_c = 0,20$.

4.3.7 Expoentes críticos

Como mencionado na introdução desta tese, no entorno do ponto crítico, certas grandezas termodinâmicas possuem comportamento singular, isto é, se anulam ou crescem sem limites divergindo no ponto crítico. Em transições contínuas verifica-se que as singularidades são bem representadas por uma lei de potência, quando considerados seus desvios em relação ao valor no ponto crítico. Partindo da equação (1.3) é possível estimar, numericamente, o expoente β associado ao parâmetro de ordem. Inicialmente fixamos $\alpha = 0,00$ e $T_c = 1,216848$, $T_c = 2,681640$ e $T_c = 5,418602$ para as dimensões $d = 2, 3$ e 4 , respectivamente. Em seguida fazendo variar T inicial em três intervalos com 100 passos em cada intervalo, por exemplo, no caso com $T_c = 1,216848$

Intervalo₁ = [1,216748; 1,216848] com acréscimos de 0,000001 ,

Intervalo₂ = [1,2067; 1,2167] com acréscimos de 0,0001 ,

Intervalo₃ = [0,20; 1,20] com acréscimos de 0,01 .

Na Figura 27 representamos a magnetização em função de $(|T - T_c|)/T_c$ para $\alpha = 0,00$ e $d = 2$.

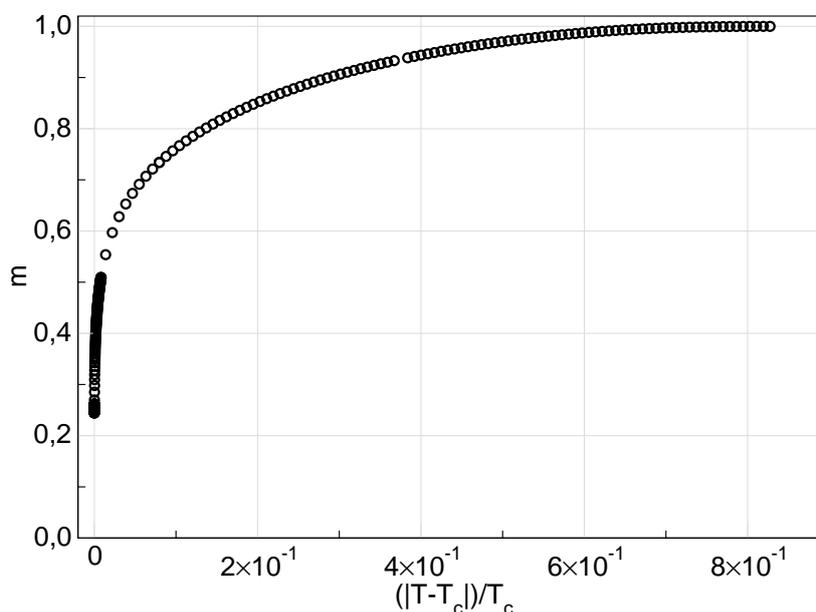


Figura 27 – Magnetização versus temperatura para $d = 2$, com $n = 15$ e calculada em três intervalos.

Em seguida, mostramos na Figura 28 o gráfico da Figura 27 em escala logarítmica. Observe que o gráfico está separado em três segmentos correspondendo a cada intervalo. Na região central onde a magnetização apresenta comportamento de lei de potência, fizemos uma regressão linear e estimamos o expoente $\beta = 0,16100$, para $d = 2$. Este valor está coerente com o valor analítico de $\beta = 0,1617430$ para o modelo de Potts com $q = 2$ estados que descreve o modelo de Ising $S = 1/2$ na rede hierárquica diamante na referência (69). Os valores de β para o modelo BC nas redes com $d = 3$ e 4 foram também obtidos seguindo o mesmo procedimento e seus valores estão expressos na Tabela 4.2.

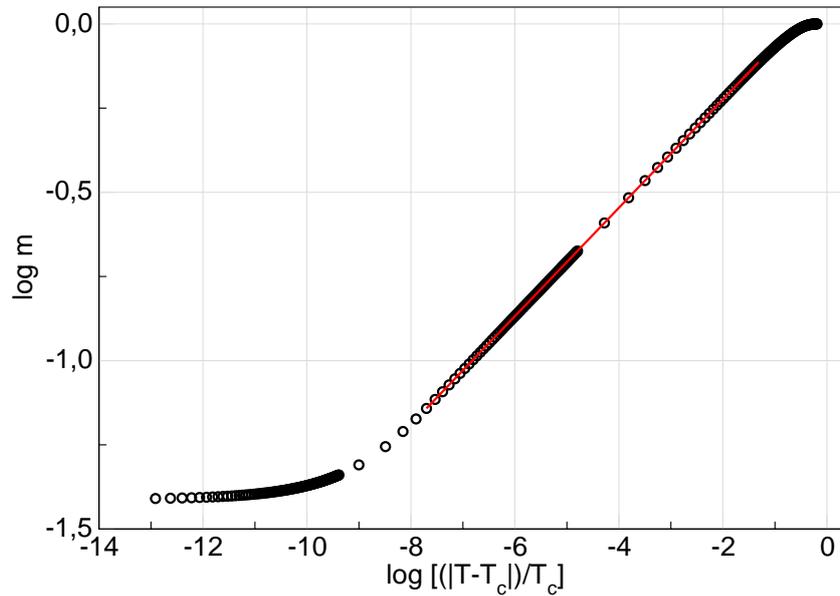


Figura 28 – Gráfico $\log m$ versus $\log[(|T - T_c|)/T_c]$ mostrando o comportamento na vizinhança da transição em $\alpha = 0,00$ e $T = 1,216848$ para rede com $n = 15$, como pode ser observado no gráfico. A linha vermelha indica o ajuste realizado para estimar o valor de $\beta = 0,16100$.

O expoente crítico ν associado ao comprimento de correlação foi estimado utilizando a equação 1.6. O procedimento utilizado foi fixar $\alpha = 0,00$ e $T = 1,216848$, $T = 2,681640$ e $T = 5,418602$ para redes com dimensão $d = 2, 3$ e 4 , respectivamente. Em seguida, calculamos a magnetização para vários valores n de hierarquias. Expressamos os resultados em função de $L = 2^n$. Na Figura 29, mostramos na escala logarítmica, onde estimamos o valor $\beta/\nu = 0,12204$ e a partir dele encontramos o valor do expoente crítico $\nu = 1,31924$. Esses resultados estão de acordo com os encontrados em (78, 69), mostrando que o modelo de Ising spin 1 em redes hierárquicas faz parte da mesma classe de universalidade dos modelos com variáveis de spin $1/2$. Os demais expoentes, são obtidos pelas relações de escala e hiperescala que foi verificada numericamente e comprovada analiticamente para modelos de Ising ferromagnéticos em redes hierárquicas.

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad (4.32)$$

$$\alpha + d\nu = 2. \quad (4.33)$$

Na Tabela 4.2 apresentamos todos os expoentes obtidos nesta tese, incluindo os estimados pelas relações de escala e hiperescala para dimensões $d = 2, 3$ e 4 . Para efeito de comparação, exibimos também alguns resultados exatos estimados em redes hierárquicas nas referências (87, 78, 69)

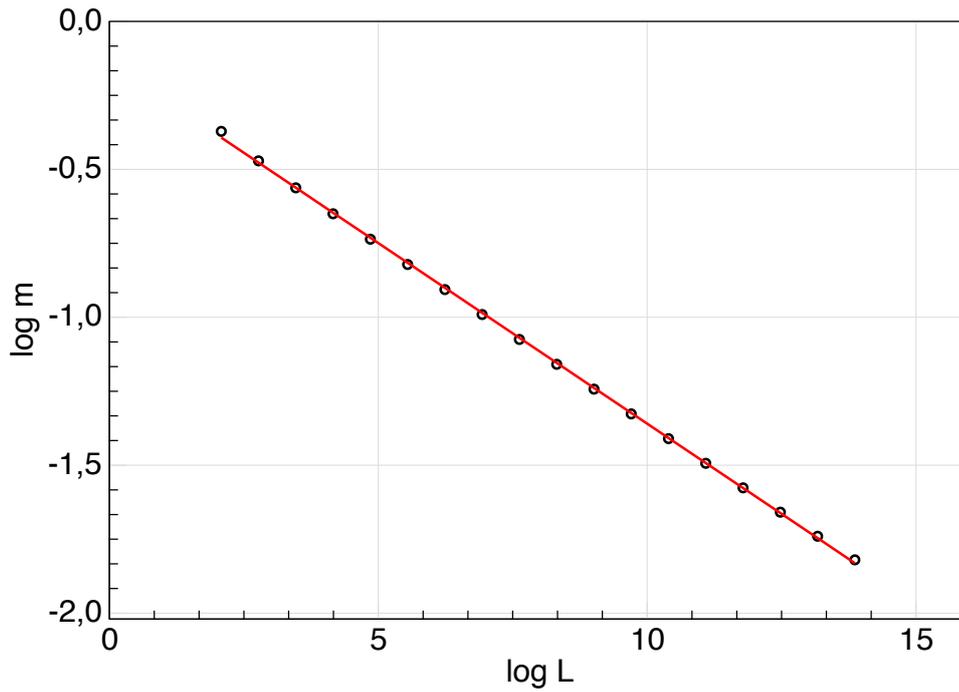


Figura 29 – $\log m$ versus $\log L$ para $d = 2$ para o valor fixo de $T = 1,216848$ com o coeficiente angular igual β/ν .

| Expoente | d=2 | d=3 | d=4 |
|------------------------------|------------|-----------|---------|
| β | 0,16100 | 0,45852 | 0,70009 |
| β/ν | 0,12204 | 0,44056 | 0,68609 |
| ν | 1,31924 | 1,04152 | 1,0204 |
| α | -0,63848 | -1,12456 | -2,0816 |
| γ | 2,31648 | 2,20752 | 2,68142 |
| Resultado exato (β) | 0,1617430 | 0,463241 | - |
| Resultado exato (ν) | 1,33827 | - | - |
| Resultado exato (α) | -0,6765320 | -1,194450 | - |
| Resultado exato (γ) | 2,3530632 | - | - |

Tabela 2 – Expoentes críticos obtidos nesta Tese para dimensões $d = 2, 3$ e 4 , incluindo os valores exatos para redes hierárquicas para efeito de comparação calculados nas referências (78, 69).

5 PROPRIEDADES MULTIFRACTAIS DO MODELO BLUME-CAPEL FERROMAGNÉTICO

Até o momento, os resultados obtidos estão concentrados em propriedades globais ou médias do sistema. Entretanto, neste capítulo estudaremos algumas propriedades locais do parâmetro de ordem, isto é, analisaremos o comportamento da magnetização em cada sítio da rede, em especial, na região crítica. Essa investigação possibilita um melhor entendimento das transições de fases.

Em baixas temperaturas e distantes da região crítica na região ferromagnética, o comportamento esperado para a magnetização é que todos os sítios da rede estejam ocupados por spins orientados para cima (ou para baixo), de modo que as magnetizações locais sejam iguais a um (ou menos um). Entretanto, ao nos aproximarmos da fronteira de transição ferromagnética-paramagnética é esperado, para uma transição de segunda ordem, que o parâmetro de ordem médio se anule sobre a linha. Isto ocorre devido à competição entre as interações de ligação e o campo cristalino local, dando origem a configurações complexas, que não são perceptíveis quando se analisa as propriedades globais.

Na primeira parte do capítulo, estudamos o comportamento da magnetização local ao longo de um *perfil* representativo, que será definido na seção a seguir, para diferentes pontos do diagrama de fase. Em especial, buscamos entender como se comporta o parâmetro de ordem na região de baixas temperaturas próximo da fronteira da transição ferromagnética-paramagnética ordenada. Na segunda parte do capítulo, investigamos como o espectro multifractal dos perfis se comportam à medida que variamos a temperatura crítica do sistema sobre a linha de transição. Essa análise será feita para o modelo BC definido em redes hierárquicas tipo diamante com fator de escala $b = 2$ e número de conexões $p = 2$ e 4 , caracterizando as dimensões fractais $d = 2$ e 3 , respectivamente.

5.1 Perfis das magnetizações locais

Nesta seção investigaremos, em detalhes, o comportamento do modelo BC ferromagnético na região de baixas temperaturas na fronteira de transição ferromagnética para as fases com magnetização nula, observadas no intervalo $\alpha_e \leq \alpha \leq \alpha_B$. Para um valor fixo de α neste intervalo, tanto o parâmetro de ordem m quanto a densidade de spins n_0 no estado $S_i = 0$ exibem uma descontinuidade, quando calculadas ligeiramente acima e abaixo de T_c , sugerindo uma transição de primeira ordem. Essas descontinuidades

des se reduzem até se anularem à medida que, sobre a linha de transição, aumentamos a temperatura sinalizando a presença do ponto tricrítico. Os valores finitos dessas descontinuidades são apresentados na Figura 30. O valor Δm , representado no gráfico por círculos abertos, e o de Δn_0 , por quadrados abertos, variam de um (descontinuidade máxima) para zero dentro do intervalo $\alpha_d \leq \alpha \leq \alpha_c$. Os valores $\alpha_d = 1,046$ e $\alpha_c = 1,151$ para $d = 2$, na figura indicada pela cor preta, e $\alpha_d = 1,500$ e $\alpha_c = 1,555$ para $d = 3$, no gráfico indicado pela cor azul, foram obtidos numericamente e já foram apresentados no capítulo 3, na Tabela 4.1.

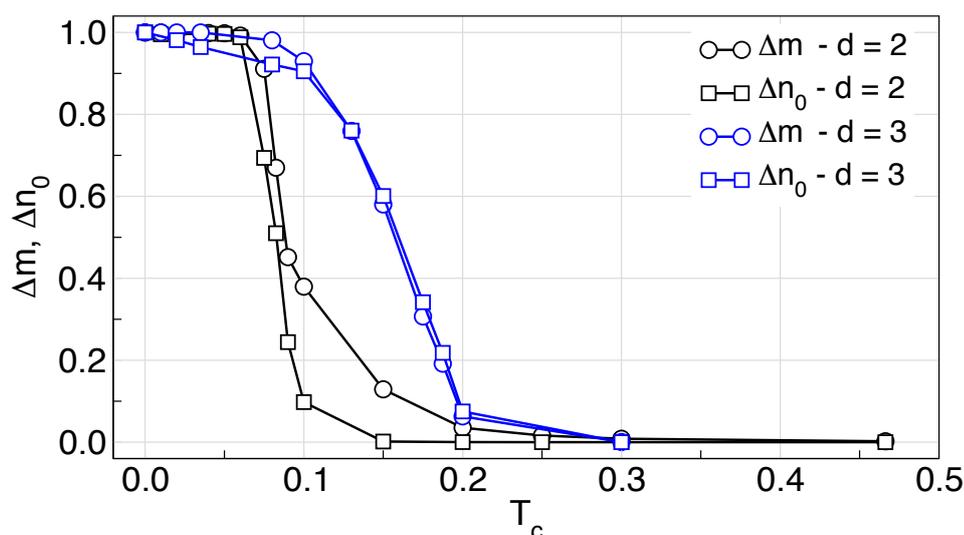


Figura 30 – Descontinuidades de Δm (círculos abertos) e Δn_0 (quadrados abertos) ao longo da fronteira de transição que separa a região com magnetização diferente de zero da região com magnetização nula em baixas temperaturas no intervalo $\alpha_e \leq \alpha < \alpha_B$ para $d = 2$ cores pretas e $d = 3$ cores azuis.

O conjunto de equações (4.5)-(4.14) possibilita analisar a magnetização e os pares de correlações em cada sítio de uma rede hierárquica de ordem n . Para uma melhor análise, podemos estudar como a magnetização, ou alguma propriedade local de interesse, está distribuída ao longo de uma geodésica ligando os sítios externos S_1 e S_2 , o que costuma-se chamar de *perfil* representativo. Para melhor ilustrar observe a Figura 31, nela representamos uma rede hierárquica tipo diamante finita de ordem $n = 3$ e dimensão fractal $d = 2$. A linha tracejada azul representa uma geodésica topológica ligando os sítios externos, representados por **A** e **B**. As sequências de valores obtidas ao longo de qualquer geodésica são idênticas devido à simetria topológica da rede hierárquica tipo diamante. Cada perfil compreende todos os tipos de sítios com número e posição de coordenação distintos em relação às raízes. Um perfil de uma rede hierárquica tipo diamante e fator de escala $b = 2$ com n gerações contém exatamente $2^n + 1$ sítios.

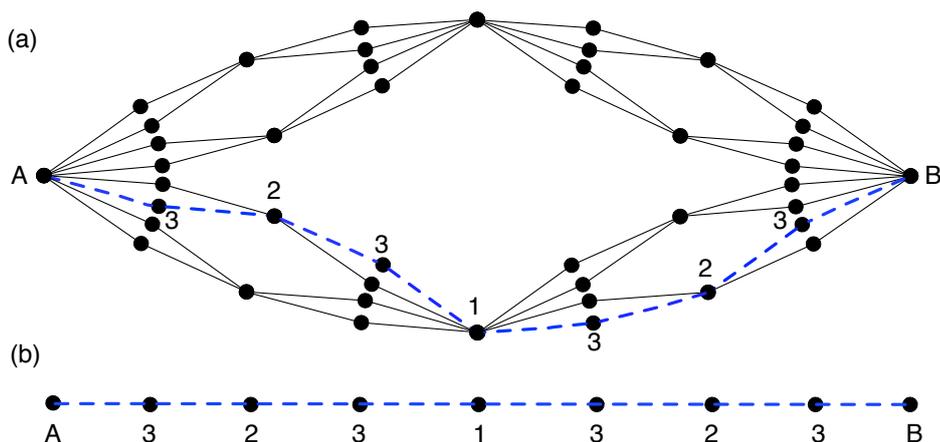


Figura 31 – Rede hierárquica tipo diamante de ordem $n = 3$ e dimensão fractal $d = 2$ (a) e menor caminho que conecta os sítios externos, correspondendo ao perfil. Na Figura (b) a linha tracejada azul corresponde a geodésica que conecta os sítios externos representados nessa figura por **A** e **B**. Os números indicam em que ordem esses sítios foram introduzidos na rede.

Para um maior entendimento, denotaremos por $m(n,d)$ e $m_p(n,d)$ as médias da magnetização da rede e do perfil, respectivamente, de uma rede com n hierarquias e dimensão d . Para ilustrar o perfil típico de uma transição de segunda ordem, investigamos o caso do modelo de Ising de spin 1 com campo cristalino nulo, isto é, $\alpha = 0,00$ sobre T_c , para a rede hierárquica tipo diamante com $d = 2$, Figura 32 e $d = 3$, Figura 33, com $T_c = 1,217$ e $T_c = 2,682$, respectivamente. Nas Figuras 32 e 33, mostramos como os perfis variam com o número de hierarquias na rede. As Figuras 32 e 33 ilustram os casos para (a) $n = 8$, (b) $n = 10$ e (c) $n = 12$.

As magnetizações médias dos perfis possuem os seguintes valores $m_p(8,2) = 0,477$, $m_p(10,2) = 0,402$, $m_p(12,2) = 0,339$, $m_p(8,3) = 0,088$, $m_p(10,3) = 0,047$ e $m_p(12,3) = 0,025$. Os valores das magnetizações calculadas para toda a rede são iguais a $m(8,2) = 0,440$, $m(10,2) = 0,371$, $m(12,2) = 0,314$, $m(8,3) = 0,056$, $m(10,3) = 0,031$ e $m(12,3) = 0,017$. Note que os valores das magnetizações médias em toda a rede são menores que os do perfil correspondente. Essa diminuição ocorre devido às contribuições dos sítios gerados em ordem maiores possuírem um valor de magnetização menor e apresentarem frequência maior, contribuindo com maior peso na média. No entanto, espera-se que o parâmetro de ordem se anule numa transição contínua (segunda ordem), o que não fica evidenciado no caso $d = 2$, mostrado na Figura 32. Percebe-se que a magnetização diminui lentamente à medida que aumentamos a ordem da rede, porém no limite termodinâmico ($n \rightarrow \infty$) o valor esperado é $m \rightarrow 0$, como demonstrado analiticamente na referência (78) para o modelo de Ising com spin $1/2$ na rede hierárquica tipo diamante.

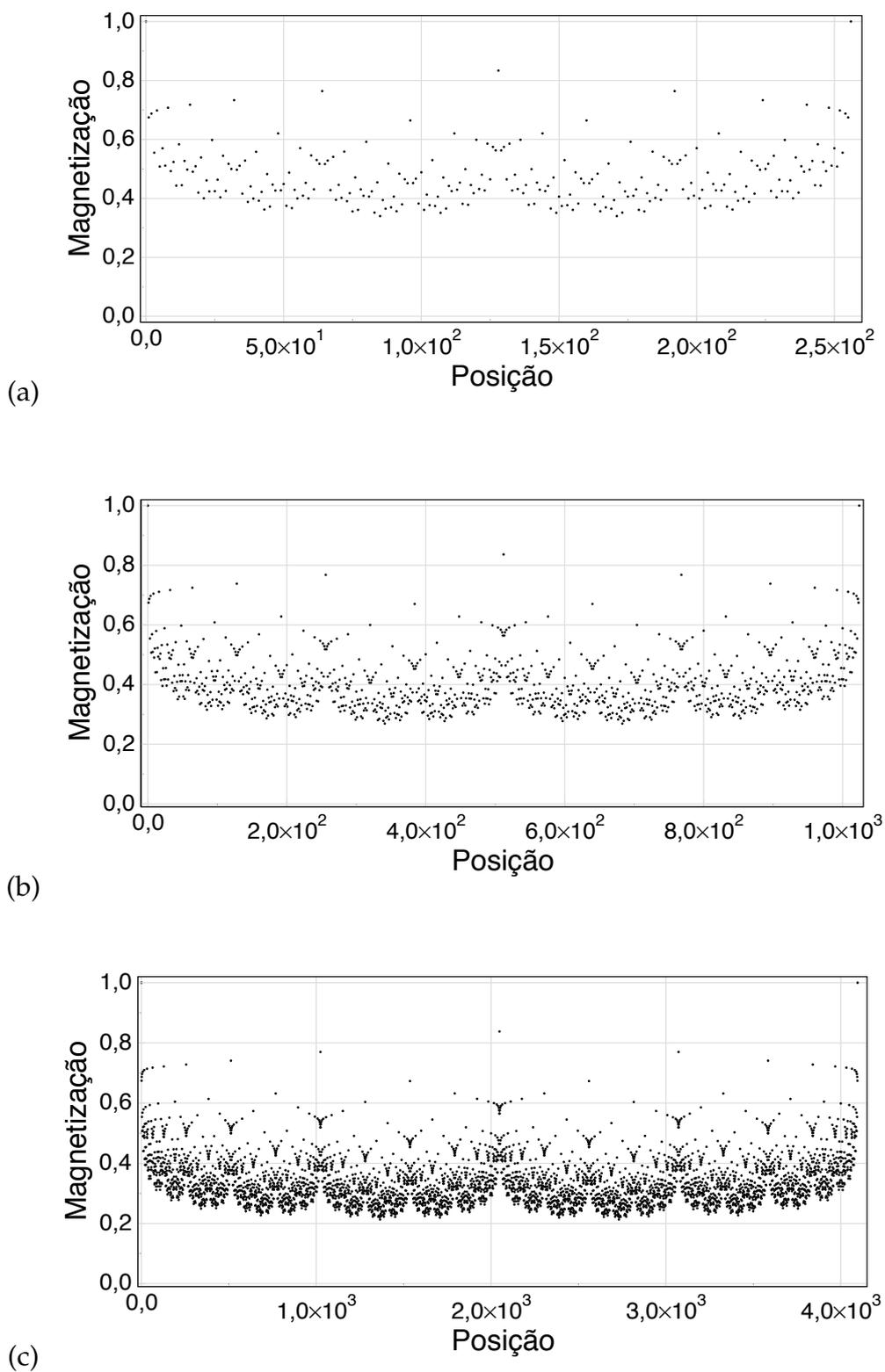


Figura 32 – Perfis típicos de uma transição contínua com campo cristalino nulo $\alpha = 0,000$ e $T_c = 1,217$ para $d = 2$ para redes de ordem (a) $n = 8$, (b) $n = 10$ e (c) $n = 12$.

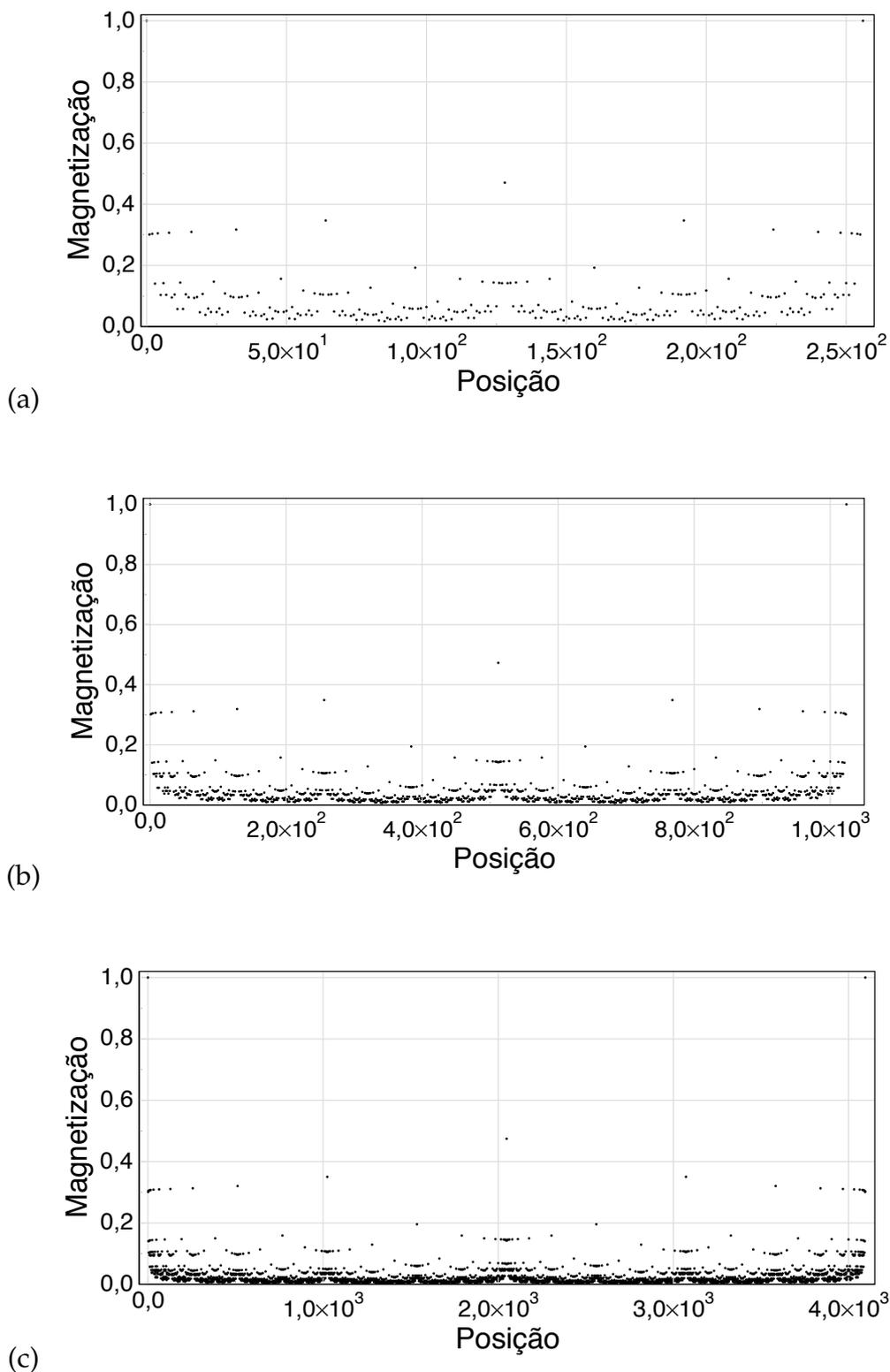


Figura 33 – Perfis típicos de uma transição contínua com campo cristalino nulo $\alpha = 0,000$ e $T_c = 2,682$ para $d = 3$ para redes de ordem (a) $n = 8$, (b) $n = 10$ e (c) $n = 12$

Na região de baixas temperaturas e fronteira de transição das fases ferromagnéticas-paramagnética ordenada, os perfis exibem uma estrutura bem diferente dos relatados acima, como observado nas Figuras 34 e 35. Nesses perfis, a estrutura torna-se menos

irregular, embora ainda apresentem características fractais, como ser invariante por transformação de escala. As Figuras 34 e 35 ilustram como o perfil se modifica ao longo da fronteira. Os casos mostrados na Figura 34 (a) $T_c = 0,100$ e $\alpha = 1,076$ e (b) $T_c = 0,150$ e $\alpha = 1,114$, para $d = 2$. Na Figura 35 (a) $T_c = 0,150$, $\alpha = 1,512$ e (b) $T_c = 0,200$, $\alpha = 1,537$ para $d = 3$. Percebemos que a magnetização média do perfil é finita e não será nula no limite termodinâmico $n \rightarrow \infty$. Para confirmar essa afirmação apresentamos um gráfico, ver Figura 36, da magnetização média em função do número de hierarquias (n) para rede com dimensão (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. Para isto, calculamos a magnetização imediatamente antes e depois do α_c , na sétima casa decimal. Em ambos os casos o valor imediatamente antes se estabiliza num valor finito para magnetização, enquanto que imediatamente depois de α_c o valor da magnetização tende a zero. Os casos são calculados na região que apresentou descontinuidade no parâmetro de ordem (a) $T_c = 0,100$ e (b) $T = 0,150$.

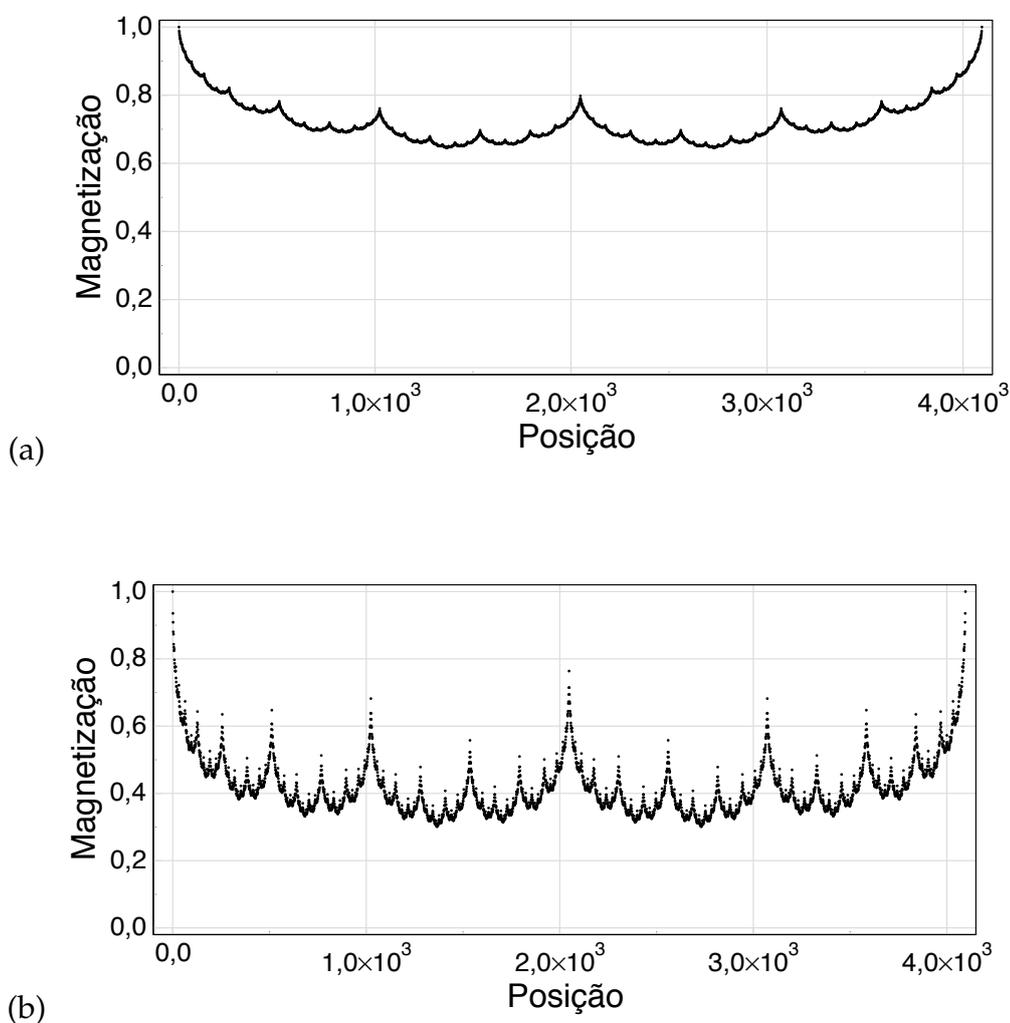


Figura 34 – Perfis típicos de uma transição de fase descontínua com $n = 12$ e dimensão $d = 2$ para (a) $\alpha = 1,076$ e $T_c = 0,100$ e (b) $\alpha = 1,114$ e $T_c = 0,150$.

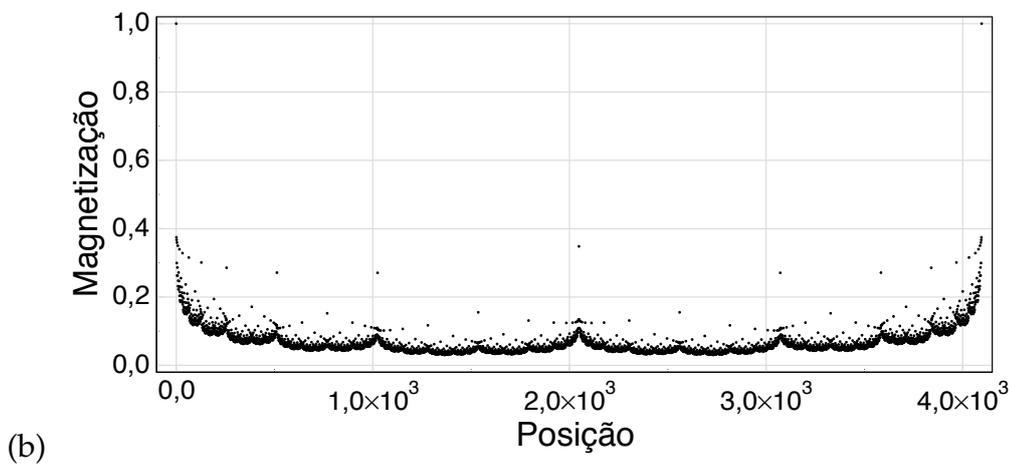
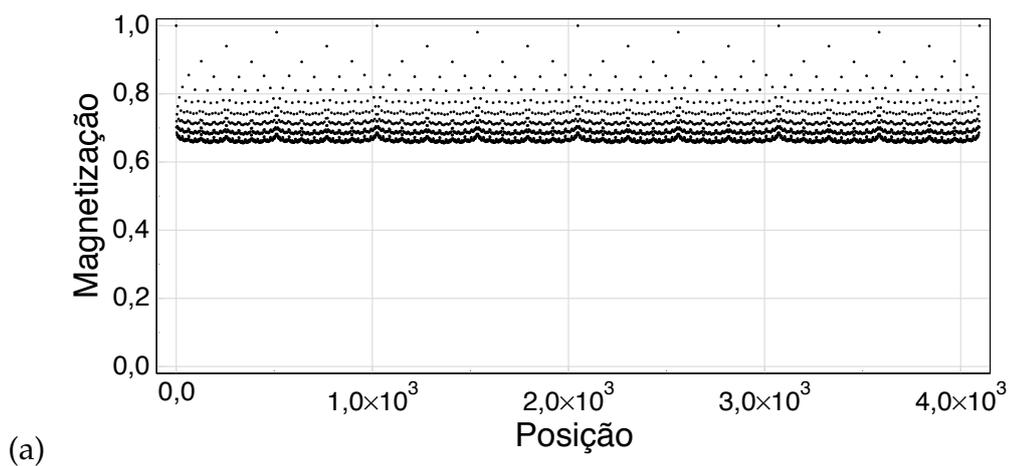
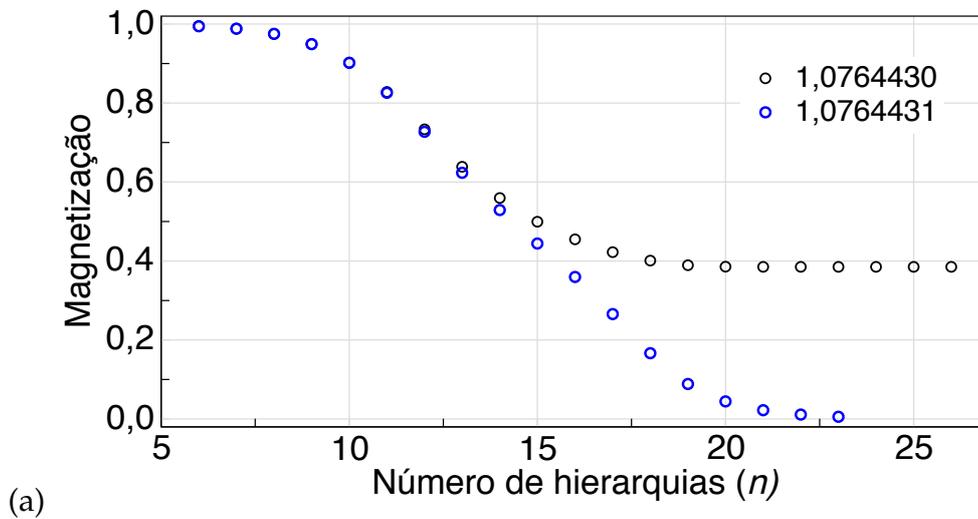
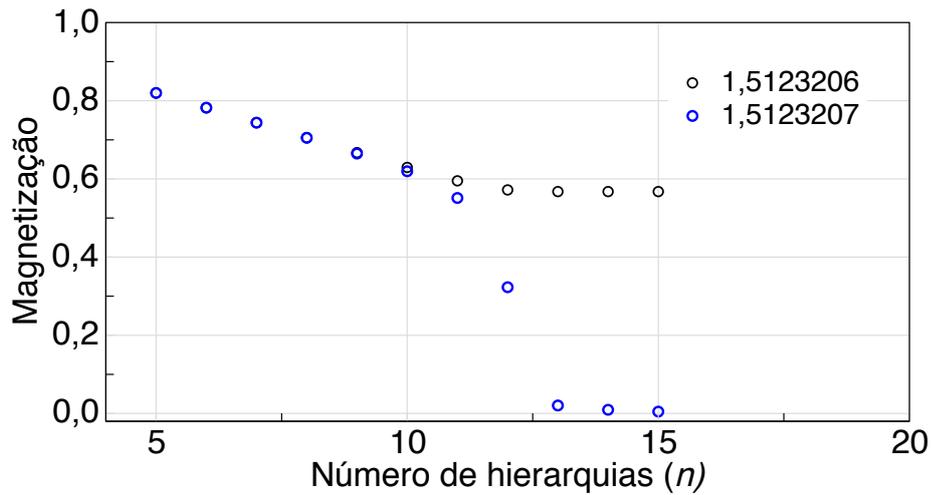


Figura 35 – Perfis típicos de uma transição de fase descontínua com $n = 12$ e dimensão $d = 3$ para (a) $\alpha = 1,512$ e $T_c = 0,150$ e (b) $\alpha = 1,537$ e $T_c = 0,200$.





(b)

Figura 36 – Magnetização média da rede *versus* número de hierarquias calculado para um valor fixo de T_c com valor de α indicado nas legendas, ligeiramente antes e depois da fronteira entre as fases ferromagnética e a região com magnetização nula para (a) $T_c = 0,100$, $d = 2$ e (b) $T_c = 0,150$ e $d = 3$.

5.2 Espectro multifractal

A abordagem multifractal é a técnica mais utilizada para investigarmos como a medida renormalizada, construída atribuindo-se valores aos elementos de um conjunto pertencente a um suporte geométrico (linha, superfície, volume ou um fractal), se distribui nas diferentes partições do suporte. Para isso, inicialmente, realiza-se uma partição de tamanho fixo (caixas) sobre o suporte. Em seguida, define-se medida de probabilidade normalizada $\mu_i(\ell)$ para medidas na i -ésima caixa

$$\mu_i(\ell) = \frac{N_i(\ell)}{N} \quad (5.1)$$

onde $N_i(\ell)$ é o número de pontos na i -ésima caixa. Esta probabilidade escala com o comprimento através de uma lei de potência do tipo

$$\mu_i(\ell) \sim \ell^{\bar{\alpha}} \quad (5.2)$$

onde $\bar{\alpha}$ é conhecido como expoente de Hölder e pode assumir vários valores em um intervalo. Embora $\bar{\alpha}$ dependa da posição, existe um subconjunto de caixas que apresentam o mesmo valor para $\bar{\alpha}$. De modo geral, o número de caixas deste subconjunto com mesmo valor de $\bar{\alpha}$ ($N_{\bar{\alpha}}(\ell)$) escala com ℓ na forma

$$N_{\bar{\alpha}}(\ell) \sim \ell^{-f(\bar{\alpha})} \quad (5.3)$$

onde $f(\bar{\alpha})$ é conhecida como espectro de singularidade e nada mais é que a dimensão fractal (dimensão de Hausdorff) do conjunto de medidas que possui expoente de Hölder

($\bar{\alpha}$) entre $[\bar{\alpha}_{min}, \bar{\alpha}_{max}]$. A forma de $f(\bar{\alpha})$ é côncava com apenas um máximo, cujo valor é a dimensão fractal do conjunto suporte.

Em resumo, a função $f(\bar{\alpha})$ permite visualizar como as singularidades da medida estão distribuídas ao longo do suporte.

Na maioria dos problemas em que se deseja medir $f(\bar{\alpha})$, aplicando as equações (5.2) e (5.3) não conduz rapidamente a bons resultados, isto ocorre devido à lenta convergência dos valores de $\bar{\alpha}$ e $f(\bar{\alpha})$. Neste caso, uma alternativa para superar essa dificuldade é usar o método desenvolvido por Chhabra e Jensen (88), que consiste em calcular a dimensão de Hausdoff separadamente de cada subconjunto. O procedimento padrão é "cobrir" a medida experimental com as caixas de tamanhos iguais e calcular a probabilidade p_i . Em seguida define-se uma família de medidas normalizadas $\mu_i(q)$, cujo valor na i -ésima caixa será dado por

$$\mu_i(q, \ell) = \frac{p_i^q(\ell)}{\sum_i p_i^q(\ell)}. \quad (5.4)$$

Como o parâmetro q pode variar, possibilitando investigar regiões com expoente $\bar{\alpha}$ distintos, quando $q > 1$ a equação (5.4) seleciona regiões onde $p_i(\ell)$ é mais singular, enquanto que para $q < 1$ as regiões selecionadas são menos singulares e $q = 1$ a medida $\mu(1)$ replica a medida original. Com isso, conseguimos calcular a função $f(\bar{\alpha})$ e o valor médio $\bar{\alpha}$ na forma parametrizada pelo parâmetro q

$$\begin{aligned} \mu_i(q, \ell) &= \frac{p_i^q(\ell)}{\sum_i p_i^q(\ell)}, \\ \bar{\alpha}(q) &= - \lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{1}{\log \ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mu_i(q, \ell) \log \mu_i(q, \ell), \\ f(q) &= - \lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{1}{\log \ell} \sum_{i=1}^{\ell} \mu_i(q, \ell) \log p_i(\ell). \end{aligned}$$

A grande vantagem de usarmos a parametrização de $f(q)$ e $\alpha(q)$ é a rápida convergência do limite aplicados a dados experimentais ou computacionais.

5.3 Propriedades multifractais das magnetizações locais

Os perfis das magnetizações locais, conforme discutido na seção 5.1, quando observamos em diferentes posições ao longo da geodésica que liga os sítios externos da rede, apresentam um comportamento típico das estruturas fractais denominado invariância de escala. Essa propriedade sugere que a distribuição heterogênea dos valores das magnetizações locais, em função da temperatura e outros parâmetros do modelo, deve ser analisada com a técnica multifractal, como realizado em estudos anteriores (89, 80).

Para uma melhor distinção entre os padrões dos perfis das magnetizações, apresentados nas Figuras 32, 33, 34 e 35, é necessário caracterizar a multifractalidade através do espectro multifractal $f(\bar{\alpha})$. Isto será feito a partir do método desenvolvido por Chhabra e Jensen (88), acima definido. Exibimos o comportamento do espectro $f(\bar{\alpha})$ para diversas temperaturas: $T > T_{\alpha_B}$, para $d = 2$, ver Figura 37, e $T < T_{\alpha_B}$, ver Figura 38 para (a) $d = 2$ e (b) $d = 3$. Incluímos nesses gráficos, o espectro do perfil que representa o modelo de Ising $S = 1$ com campo nulo indicado, nas figuras, pela linha tracejada preta que é utilizado para efeito de comparação. Notamos que para $T > T_{\alpha_B}$ observa-se um lento aumento da largura nas $f(\bar{\alpha})$ à medida que a temperatura é reduzida. Este comportamento foi observado tanto para redes com $d = 2$ quanto para redes com $d = 3$, embora a largura em todos casos fique próxima da largura do modelo de Ising a campo nulo. Enquanto que para $T < T_{\alpha_B}$ observamos inicialmente comportamento análogo ao percebido na região $T > T_{\alpha_B}$. Por volta da temperatura $T_c = 0,30$, em ambas dimensões, as larguras dos espectros nas $f(\bar{\alpha})$ começam a diminuir. Para transições de fases contínuas é possível caracterizar um comportamento multifractal, através das aberturas dos espectros $f(\bar{\alpha})$ calculando os valores de $\bar{\alpha}_{\min}$ (maiores valores de q) e de $\bar{\alpha}_{\max}$ (menores valores de q .) A partir de $T_c = 0,30$ a abertura ($\Delta\bar{\alpha} = \bar{\alpha}_{\max} - \bar{\alpha}_{\min}$) vai se estreitando à medida que reduzimos a temperatura, convergindo para um único ponto (monofractal), isto é, um único $\bar{\alpha}$ para todo q . Desta maneira o espectro $f(\bar{\alpha})$ pode ser utilizado como critério para decidir a natureza da transição e assim auxiliar na delimitação do comportamento do ponto tricrítico.

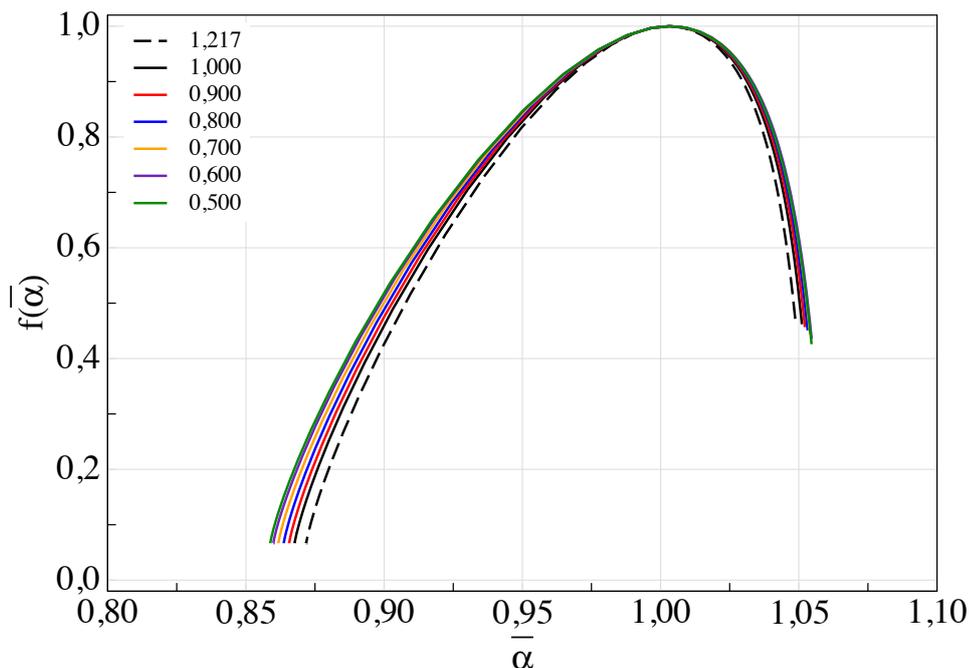
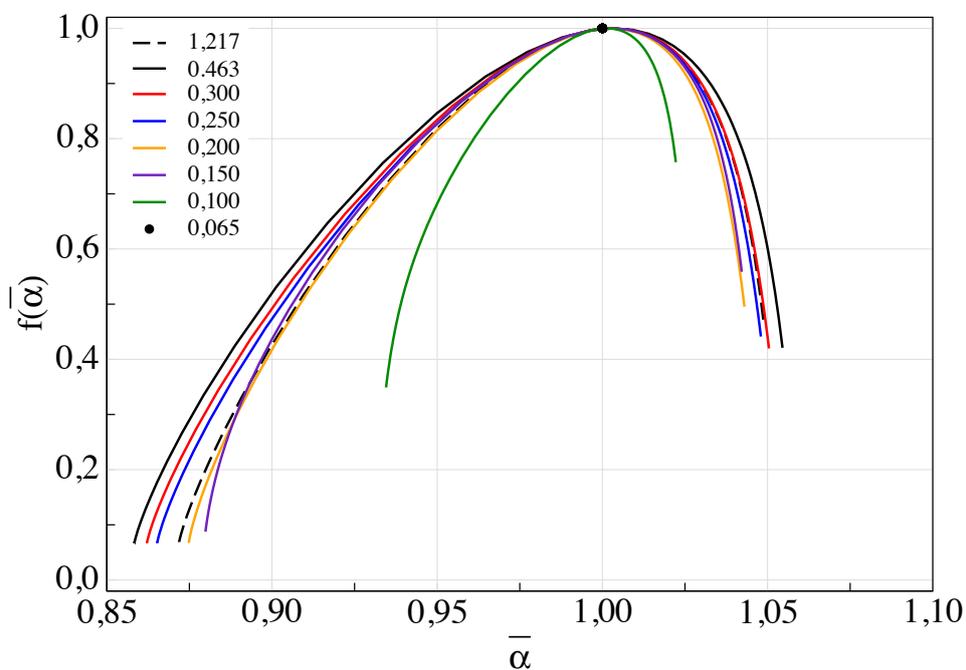


Figura 37 – Espectro multifractal de perfis típicos da magnetização com $d = 2$ sobre pontos na linha de transição para diversas temperaturas com $T > T_{\alpha_B}$. A linha tracejada preta para $(\alpha = 0,000, T_c = 1,217)$ é utilizada para efeito comparativo. A largura aumenta com a redução da temperatura.



(a) $d = 2$

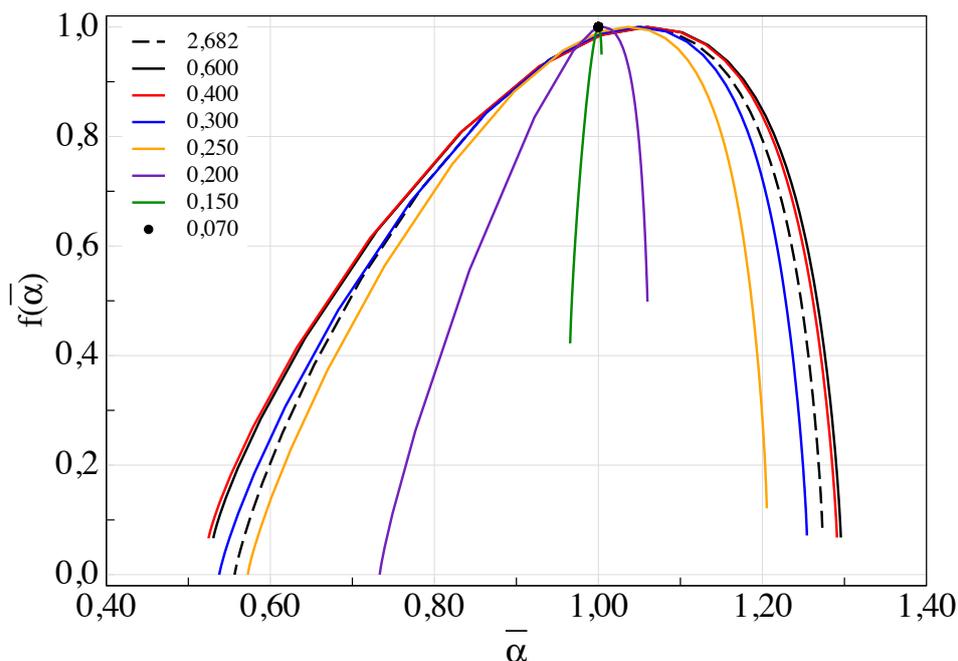

 (b) $d = 3$

Figura 38 – Espectro multifractal de perfis padrão da magnetização sobre pontos na linha de transição para diversas temperaturas com $T < T_{\alpha_B}$. A linha tracejada preta para (a) ($\alpha = 0,00, T_c = 1,217$), $d = 2$, (b) ($\alpha = 0,00, T_c = 2,682$) e $d = 3$, utilizadas para efeitos comparativos. Inicialmente, a largura aumenta com a redução da temperatura, em seguida percebe-se um estreitamento da largura até convergir para um ponto (monofractal).

A transição de fase de primeira ordem na fronteira de separação ferromagnética-paramagnética ordenada para o modelo BC ferromagnético é mostrada, para melhor visualizar, na Figura 39. Baseado nas propriedades globais e na descontinuidade do parâmetro de ordem encontramos o ponto D, que representa o início da descontinuidade máxima, ($T_d = 0,060, \alpha_d = 1,046$) para o caso $d = 2$ e ($T_d = 0,070, \alpha_d = 1,500$) para $d = 3$, e o ponto C, possível localização do ponto tricrítico, com ($T_c = 0,200, \alpha_d = 1,151$) para o caso $d = 2$ e ($T_c = 0,250, \alpha_d = 1,575$) para $d = 3$. O intervalo entre (C-D) delimita a região onde a descontinuidade é máxima (ponto D) e diminui até zero (ponto C). A linha sólida indica uma transição de fase contínua, enquanto que os X's, intervalo de (D-E), marcam uma transição de primeira ordem caracterizada por uma descontinuidade máxima no parâmetro de ordem. A linha tracejada (C-D) delimita, uma transição de fase de primeira ordem caracterizada por uma descontinuidade finita no parâmetro de ordem que vai a zero ao longo da linha de transição à medida em que a temperatura é aumentada. Além disso, neste intervalo, o perfil multifractal para a magnetização local aumenta a largura do seu espectro desde (monofractal) até uma largura finita, como observado em transições de fase de segunda ordem.

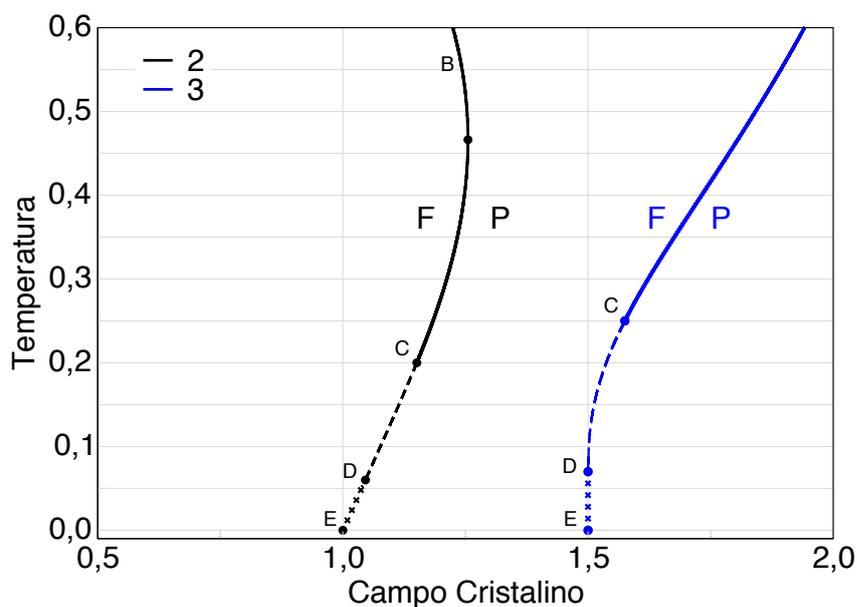


Figura 39 – Temperatura ($1/J$) em relação campo cristalino reduzido ($\alpha = \Delta/J$) em baixas temperaturas para modelo BC definido na rede hierárquica com dimensões $d = 2$ (linhas pretas) e $d = 3$ (linhas azuis). F e P indicam as regiões ferromagnéticas e paramagnéticas correspondentes, respectivamente. B , C , D e E são os pontos relatados na Tabela ?? . A linha contínua indica uma transição de fase contínua. Os X's (trecho D-E) marcam uma linha de transição de fase de primeira ordem com uma descontinuidade completa no parâmetro da ordem e um perfil fractal da magnetização. A linha tracejada delimita uma transição de fase descontínua com uma descontinuidade do parâmetro de ordem finita e um perfil multifractal da magnetização.

6 MODELO BLUME-CAPEL DESORDENADO NA REDE HIERÁRQUICA

Vidros de spins são sistemas magnéticos desordenados, onde os momentos magnéticos, ou spins, em baixas temperaturas estão “congelados” em direções aleatórias (90, 91). Diferente do ferromagneto ou antiferromagneto, não apresentam uma estrutura magnética ordenada com simetria de longo alcance. Um material típico que apresenta propriedades dos vidros de spins são as misturas magnéticas formadas a partir de impurezas magnéticas, como *Fe* e *Mn*, distribuídas aleatoriamente na rede de um metal nobre (*Au, Ag, Cu, Pt*) formando, assim, ligas metálicas diluídas como *AuFe, CuMn* e *AuMn*.

Como os spins estão fixos e são espacialmente distribuídos aleatoriamente (desordem *congelada*), podem ocorrer algumas interações positivas ou negativas entre pares de spins. Por causa disto, um determinado spin poderá sofrer interações competitivas oriundas de outros pares de spins e nenhuma configuração será capaz de, simultaneamente, atender ao estado de mínima energia para todos os pares de interação. Este fenômeno é chamado de *frustração* (92). Desta forma, estão presentes as duas características necessárias para o comportamento típico de vidros de spin (VS) que são: desordem e frustração.

Tipicamente, as amostras das ligas metálicas com impurezas magnéticas diluídas são preparadas em altas temperaturas e rapidamente resfriadas em um processo chamado de temperado (*quenching*). Neste processo, as impurezas magnéticas apresentam um “congelamento” local espacialmente desordenado. O processo de resfriamento também pode ser feito lentamente, sendo chamado de recozimento (*annealing*), nesse caso as impurezas magnéticas relaxam para estados cuja energia livre alcança um mínimo global.

Sistemas de vidros de spins são de grande interesse em física da matéria condensada e passaram a receber maior atenção por volta de 1970. Do ponto de vista experimental, um vidro de spin é caracterizado por apresentar algumas propriedades típicas (90, 91). Por exemplo, uma cúspide na susceptibilidade linear a.c. (campo alternado), que muda de posição quando a frequência do campo externo varia como foi observada por Cannella e Mydosh em 1972 (93, 94). Um máximo arredondado no calor específico e efeitos de irreversibilidade também foram observados nas medidas da magnetização em baixas temperaturas na presença de campo magnético externo (95). Em geral, nenhuma das medidas citadas anteriormente são suficientes para caracterizar uma transição de

fase vidro de spin. Somente após a análise de medidas da susceptibilidade não linear χ_{nl} , definida como o coeficiente do termo de ordem cúbica na expansão da magnetização em potências do campo externo,

$$m = \chi h - \chi_{nl} h^3 + \dots \quad (6.1)$$

foi possível assegurar a existência de uma genuína transição de fase (96). A susceptibilidade não linear χ_{nl} é uma função bem comportada no tempo, apresentando uma divergência pronunciada em $T = T_c$, comparável à divergência observada na susceptibilidade linear χ em sistemas ferromagnéticos.

Abordagens teóricas para descrever as propriedades dos vidros de spins levaram Edward e Anderson (EA) (97), em 1975, a propor um modelo (modelo EA), no qual é definido numa rede regular com N sítios com spins S_i em cada sítio i . As interações entre pares de spins primeiros vizinhos são fornecidas por uma distribuição de probabilidades que introduz interações positivas e negativas, portanto o modelo EA incorpora as duas características básicas para vidros de spin, desordem e frustração. Além disso, propuseram o parâmetro de ordem de vidro de spin q_{EA} para caracterizar a fase vidro de spin fornecido por:

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\langle S_i \rangle^2 \right]_J, \quad (6.2)$$

onde $\langle \dots \rangle$ e $[\dots]_J$ representam as médias térmicas e sobre a desordem, respectivamente.

O modelo de Edwards-Anderson (EA) (97) e um modelo denominado de Sherington-Kirkpatrick (SK) (98) são os primeiros modelos a investigar o comportamento de materiais com características de vidro de spin. O modelo SK considera as variáveis de spin de Ising e investiga as interações de longo alcance através da solução de campo médio.

Uma vez que a solução no regime de campo médio para modelos de VS é bem compreendida, muitos esforços têm sido feito na busca de soluções que representem sistemas físicos reais, onde as interações entre spins tem alcance finito. As redes hierárquicas se tornam uma ferramenta poderosa na investigação da fase VS combinada com o método do grupo de renormalização que permite o acesso a grandes escalas de comprimento com baixo custo computacional. A maior parte dos trabalhos sobre vidro de spin em redes hierárquicas utilizam redes da família de Migdal-Kadanoff (99, 100, 101, 102, 89, 80, 81, 103, 104, 105, 106).

Neste capítulo, investigamos a transição de vidro de spin-paramagnética do modelo Blume-Capel desordenado definido na rede hierárquica tipo diamante com dimensão $d = 3$ e 4 . Para isso, utilizamos as equações de renormalização obtidas no Apêndice A e apresentadas na seção a seguir. Neste caso, o processo de renormalização é feito partindo-se de uma distribuição de probabilidades inicial gaussiana simétrica para interações de troca entre os pares de spins e para os campos cristalinos, como será desenvolvido na seção 6.2, abaixo.

6.1 Equação de renormalização do modelo BC desordenado

O hamiltoniano para o modelo BC desordenado foi definido na equação (3.2). Aqui estudamos o modelo BC com campo magnético externo nulo, de modo que

$$\mathcal{H}_{BC} = - \sum_{\langle ij \rangle} K_{ij} S_i S_j + \sum_i D_i S_i^2, \quad (6.3)$$

com $\{K_{ij}\}$ denotando as constantes de acoplamento aleatórias entre pares de spins primeiros vizinhos e $\{D_i\}$ os valores para o campo cristalino aleatório em cada sítio da rede. Neste tese, ambas as variáveis aleatórias seguem distribuições de probabilidades gaussianas independentes, fornecidas por

$$P(K_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi K^2}} \exp \left[-\frac{(K_{ij} - K_0)^2}{2K^2} \right], \quad (6.4)$$

$$P(D_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_D^2}} \exp \left[-\frac{(D_i - D_0)^2}{2\sigma_D^2} \right], \quad (6.5)$$

com K_0 e D_0 representando as médias das distribuições de ligações e campo cristalino, respectivamente. J e σ_D são as variâncias de cada distribuição respectivamente. Para a presente análise adotamos $K_0 = 0$ e $D_0 = 0$ e $J = 1$ e $\sigma_D = 1$. Definindo $J_{ij} = \beta K_{ij}$ e $\Delta_i = \beta D_i$, com $\beta = 1/\kappa_B T$, o procedimento usual para obtenção das equações de renormalização para as ligações e para os campos cristalinos foram obtidos no Apêndice A, a partir das equações (A.31), (A.33) e (A.34), isto é

$$J' = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^l \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[-1,-1]}{Z_i[1,-1]Z_i[-1,1]} \right], \quad (6.6)$$

$$\Delta'_1 = \Delta_1 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \ln \left[\frac{Z_i[1,0]Z_i[-1,0]}{Z_i[0,0]^2} \right], \quad (6.7)$$

$$\Delta'_2 = \Delta_2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \ln \left[\frac{Z_i[0,1]Z_i[0,-1]}{Z_i[0,0]^2} \right], \quad (6.8)$$

$$(6.9)$$

com

$$Z_i[S_1, S_2] = \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \exp [J_{1S_1} \sigma_i S_1 + J_{1S_2} \sigma_i S_2 - \Delta_{1j} \sigma_i^2], \quad (6.10)$$

6.2 Temperatura crítica e dimensão crítica inferior

As equações (6.6), (6.7) e (6.8) obtidas Apêndice A, de forma analítica exata, são as responsáveis pela evolução das constantes de interações entre os spins da rede

sob renormalização. Para determinar as possíveis transições de fase do modelo BC com interações competitivas aleatórias devemos utilizar um método que atribua às variáveis J_{ij} , Δ_i valores aleatórios que obedecem a uma função de distribuição de probabilidades. Utilizaremos um método conhecido como *método dos reservatórios* para iterar a equações (6.6) - (6.8) e analisar numericamente a evolução das distribuições dos acoplamentos renormalizados (99).

Inicialmente devemos escolher uma função de distribuição de probabilidades para os campos e acoplamentos a partir da qual construiremos dois bancos iniciais um para os acoplamentos e outro para os campos com N entradas cada um. Em seguida selecionamos, de forma aleatória, alguns desses bancos, para aplicá-los nas equações (6.6), (6.7) e (6.8) gerando assim novos valores para ligações e campos cristalinos. Aplicamos esse procedimento N vezes até que o número de acoplamentos e campos renormalizadas dos novos bancos contenha N entradas. Chegamos assim a novos bancos constituído por acoplamentos e campos renormalizados, cujas propriedades (momentos) são mensuradas.

Após concluir a primeira etapa de renormalização o próximo passo é substituir os bancos iniciais pelos bancos dos acoplamentos e campos renormalizados e repetir o processo de escolha aleatória dos acoplamentos e efetuar novamente as equações de renormalização, até obter novos bancos que, no próximo passo da renormalização, servirão de reservatório. As propriedades estatísticas dos bancos renormalizados são calculados e armazenadas a cada passo do processo. (Para uma definição formal do método dos reservatórios, ver (102)). A Figura (40) esquematiza o método dos reservatórios.

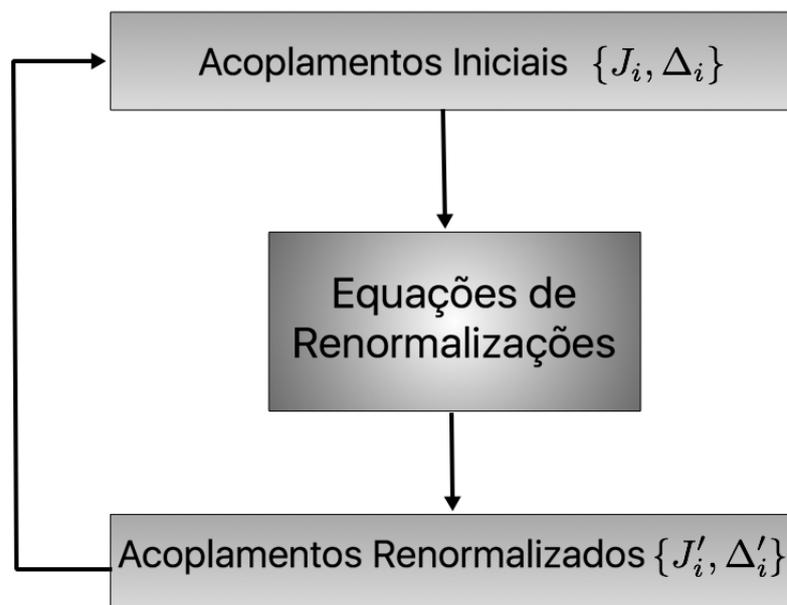


Figura 40 – Representação ilustrativa do processo de renormalização usando o *método dos reservatórios*

Esse processo pode ser repetido n -vezes se necessário. O fluxo da renormalização pode ser acompanhado, ao longo das n iterações do grupo de renormalização, através da evolução das distribuições de probabilidades dos acoplamentos adimensionais, $\{J_{ij}\}$ e $\{\Delta_i\}$, calculando-se os momentos das distribuições de probabilidades em cada passo (80), a partir dos quais é possível obter:

$$\text{Média : } \sigma_1^{(J)} = \langle J_{ij} \rangle , \quad (6.11)$$

$$\text{Média : } \sigma_1^{(\Delta)} = \langle \Delta_{ij} \rangle , \quad (6.12)$$

$$\text{Desvio padrão : } \sigma_2^{(J)} = \langle (J_{ij} - \langle J_{ij} \rangle)^2 \rangle^{1/2} , \quad (6.13)$$

$$\text{Desvio padrão : } \sigma_2^{(\Delta)} = \langle (\Delta_i - \langle \Delta_i \rangle)^2 \rangle^{1/2} , \quad (6.14)$$

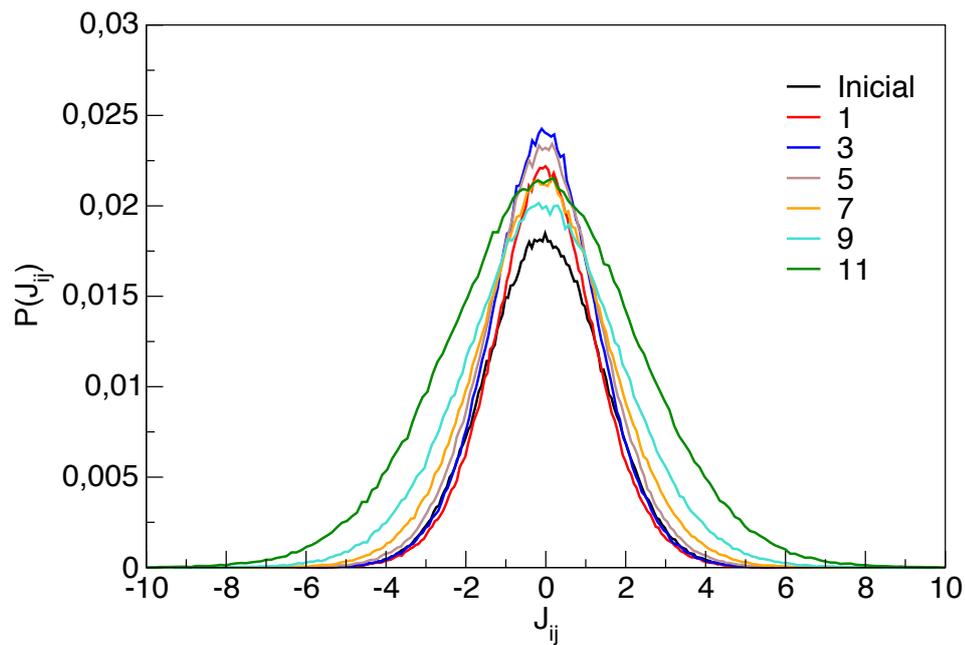
As médias correspondem aos primeiros momentos e os desvios padrão (ou larguras) estão associadas aos segundos momentos. Ao longo do processo de renormalização é possível identificar as diferentes fases de acordo com o "fluxo" dos momentos das distribuições renormalizadas. As configurações de cada fase podem ser caracterizadas de acordo com os respectivos momentos das distribuições de probabilidades de suas interações e campos, isto é:

$$\text{Ferromagnética : } \sigma_1^{(J)} \rightarrow \infty , \sigma_2^{(J)} \rightarrow 0 , \sigma_1^{(\Delta)} \rightarrow -\infty , \quad (6.15)$$

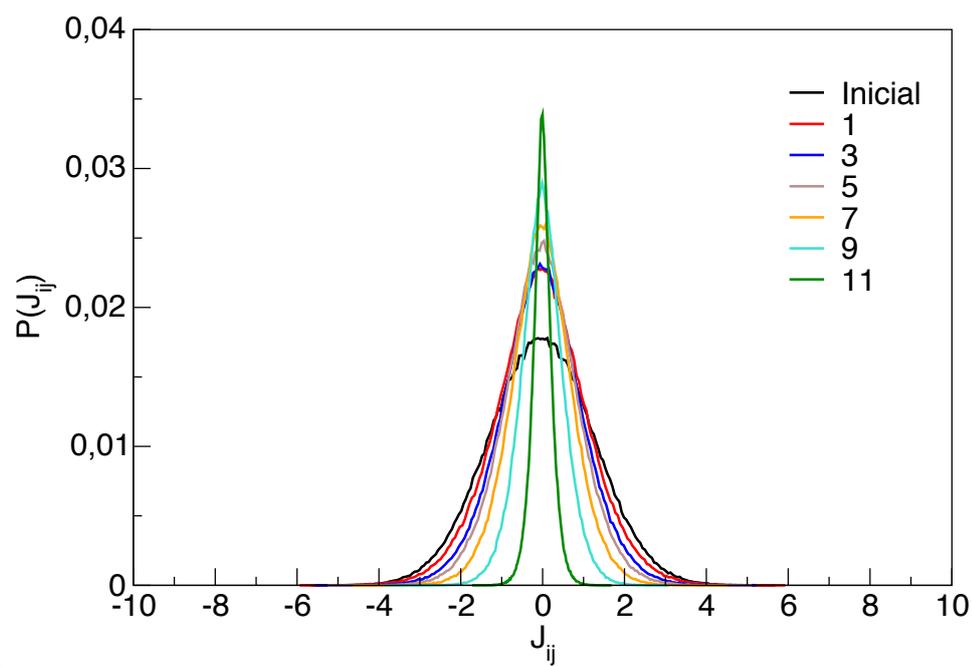
$$\text{Vidro de Spins : } \sigma_1^{(J)} \rightarrow 0 , \sigma_2^{(J)} \rightarrow \infty , \sigma_1^{(\Delta)} \rightarrow -\infty , \quad (6.16)$$

$$\text{Paramagnética : } \sigma_1^{(J)} \rightarrow 0 , \sigma_2^{(J)} \rightarrow 0 , \sigma_1^{(\Delta)} \rightarrow \pm\infty . \quad (6.17)$$

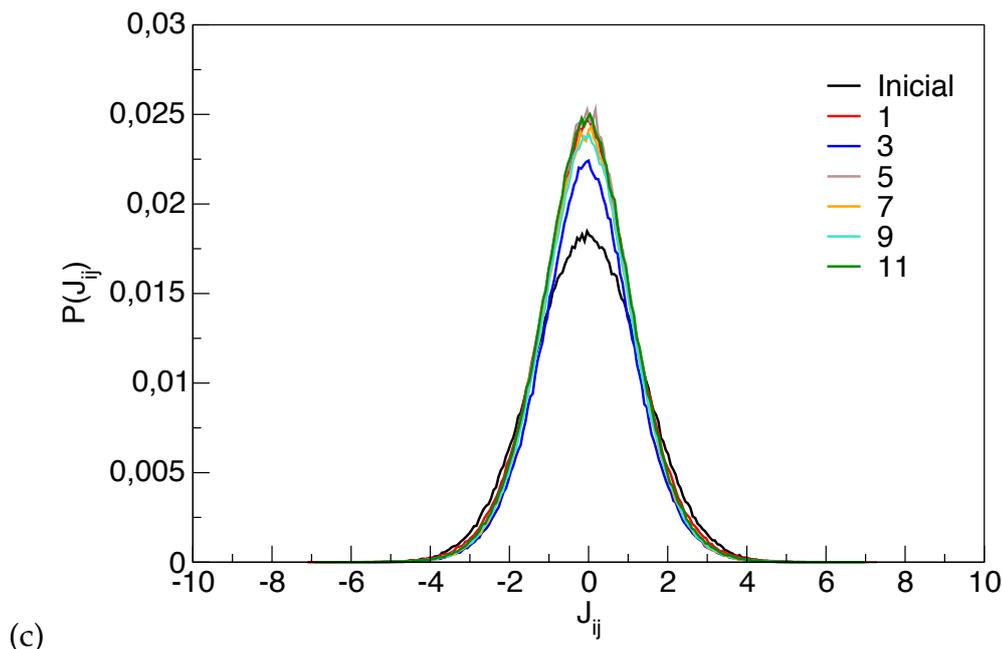
Na Figura 41 acompanhamos a evolução das funções densidades de probabilidades sob a aplicação do grupo de renormalização, a partir de uma distribuição inicial gaussiana simétrica ao longo de seis iterações. Vale destacar que as funções densidades de probabilidades estão normalizadas de modo que a soma das probabilidades seja um e não pela área total. A fase vidro de spins tende a aumentar a dispersão das constantes de acoplamentos J_{ij} , ocasionando um alargamento da distribuição de probabilidade como mostrado na Figura 41 (a), enquanto que, para a fase paramagnética a dispersão das interações diminuem a cada passo, causando um estreitamento da distribuição de probabilidades que tende a uma função delta no limite $n \rightarrow \infty$ como mostrado na Figura 41 (b). Assim, a distribuição de probabilidades associada ao ponto fixo instável será aquela cuja largura permanece inalterada dentro da precisão numérica, após n iterações. Para encontrar a temperatura crítica T_c , investigamos a temperatura para a qual a distribuição de probabilidades fique invariante, isto é $P^*(J_{ij}^{(n+1)}) = P^*(J_{ij}^{(n)})$, como mostrado na Figura 41 (c).



(a)



(b)



(c) Figura 41 – Exibimos o comportamento da função densidade de probabilidades ao longo de 11 iterações do grupo de renormalização para o modelo BC na rede com dimensão $d = 3$, para três valores de temperatura (a) $T = 0,685$, (b) $T = 0,785$ e (c) $T = 0,735$. Em (a), para um valor menor que T_c , a cada iteração a largura aumenta mantendo-se sempre com média nula. Em (b), temperatura maior que T_c , a cada iteração a largura diminui levando a uma função δ no limite $n \rightarrow \infty$. Em (c), temperatura crítica, a cada iteração a largura tende a se permanecer invariante, dentro da precisão numérica e estão normalizadas de modo que a soma de todas as probabilidades seja um.

Na Figura 42, acompanhamos o fluxo do desvio padrão da distribuição renormalizada, passo a passo, para rede com dimensão $d = 3$. Esse fluxo é mostrado para três valores de temperatura, sugerindo a existência de uma transição de fase em $T_c = 0,735$, indicada pela mudança no comportamento do fluxo do desvio padrão.

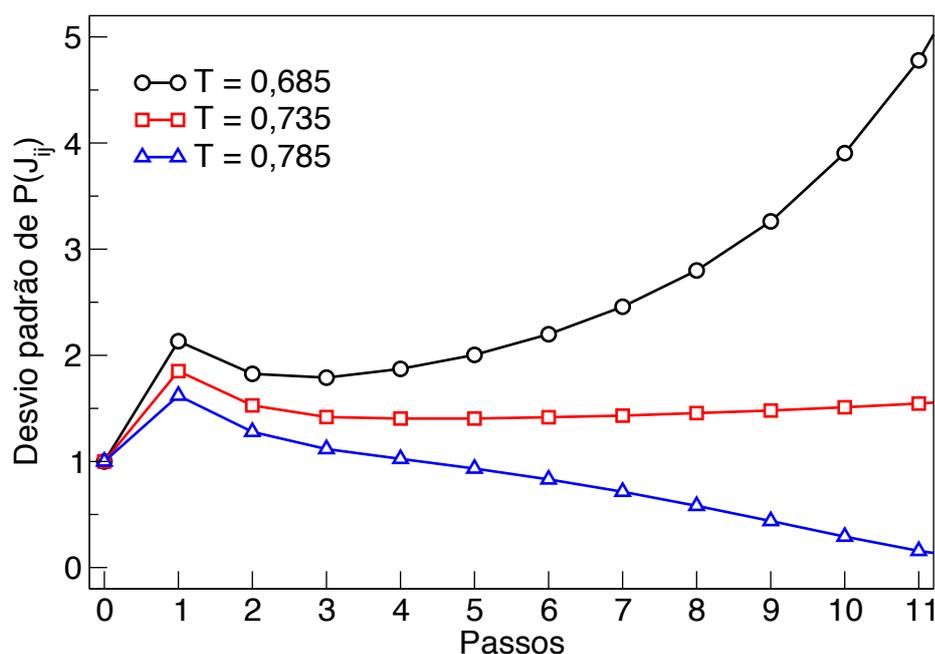


Figura 42 – Fluxo do desvio padrão da distribuição das constantes de acoplamentos J_{ij} para as várias distribuições geradas no processo de renormalização da rede para três valores de temperaturas indicadas na legenda.

Investigamos a temperatura crítica da transição VS-P para distribuições de probabilidades iniciais gaussianas com média nula e largura unitária para valores de $p = 2$ a $p = 10$. Para temperaturas $T > 0,1$ não há transição de fase vidro de spin-paramagnética para o caso $p = 2$ ($d = 2$). Para determinar a dimensão crítica inferior é necessário investigar o sistema à temperatura nula através da expansão no limite de baixas temperaturas. A partir de $p \geq 3$ ($d \geq 2,585\dots$) observamos a transição da fase vidro de spin para a fase paramagnética em temperaturas finitas. As temperaturas críticas da transição de fase VS-P para as dimensões $2,585 \leq d \leq 4,32$ foram estimadas e estão representadas na Figura 43, considerando reservatórios contendo $N = 100.000$ entradas e médias sobre 100 amostras da desordem, evidenciando que a dimensão crítica (d_f) inferior encontra-se no intervalo $2 < d_f < 2,585$. Este resultado é compatível com os valores encontrados para o modelo vidro de spin de Ising com spin $1/2$ nas redes hierárquicas (107) e também para os valores obtidos para rede de Bravais (108), onde a dimensão crítica inferior é $D_f \simeq 2,5$, nestes trabalhos.

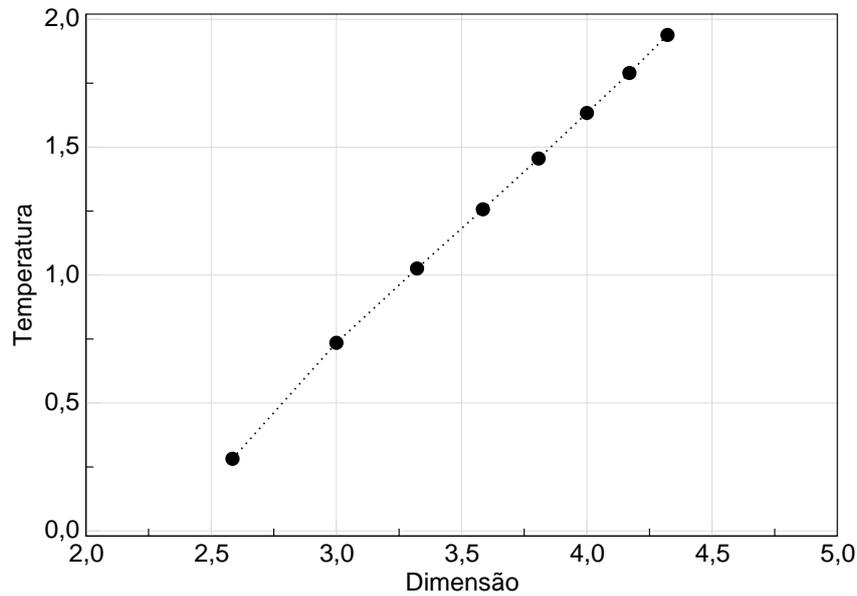


Figura 43 – Temperatura crítica da transição de fase VS-P em função da dimensão.

6.3 Propriedades locais

Nesta seção, analisaremos as propriedades locais do modelo BC desordenado para explorar a natureza das fases em torno das transições de fases. O procedimento recursivo é exato para a rede hierárquica e as propriedades locais são obtidas considerando as condições do modelo BC para o caso desordenado nas equações (3.47)-(3.56). Deste modo o conjunto de equações pode ser reescrito na forma

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle_{n+1} = & R_1 \langle S_1 \rangle_n + R_2 \langle S_2 \rangle_n + [R_3 + R_4 - R_2] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + \\ & + [R_3 - R_4 - R_1] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (6.18)$$

$$\langle \sigma S_1^2 \rangle_{n+1} = R_1 \langle S_1 \rangle_n + [R_3 - R_4 - R_1] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + [R_4 + R_3] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n, \quad (6.19)$$

$$\langle \sigma S_2^2 \rangle_{n+1} = R_2 \langle S_2 \rangle_n + [R_3 - R_4] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + [R_3 + R_4 - R_2] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n, \quad (6.20)$$

$$\langle \sigma^2 S_1 \rangle_{n+1} = R_5 \langle S_1 \rangle_n + [R_8 + R_7 - R_5] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n - [R_8 - R_7] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n, \quad (6.21)$$

$$\langle \sigma^2 S_2 \rangle_{n+1} = R_6 \langle S_2 \rangle_n + [R_8 - R_7] \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + [R_8 + R_7 - R_6] \langle S_1^2 S_2 \rangle_n, \quad (6.22)$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 \rangle_{n+1} &= [R_5 - 2R_9] \langle S_1^2 \rangle_n + [R_6 - 2R_9] \langle S_2^2 \rangle_n + [R_8 - R_7] \langle S_1 S_2 \rangle_n + \\ &+ [2R_9 - R_5 - R_6 + R_7 + R_8] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n + 2R_9, \end{aligned} \quad (6.23)$$

$$\langle \sigma S_1 \rangle_{n+1} = [R_3 + R_4] \langle S_1 S_2 \rangle_n + R_1 \langle S_1^2 \rangle_n + [R_3 - R_4 - R_1] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (6.24)$$

$$\langle \sigma S_2 \rangle_{n+1} = [R_3 - R_4] \langle S_1 S_2 \rangle_n + R_2 \langle S_2^2 \rangle_n + [R_3 + R_4 - R_2] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (6.25)$$

$$\langle \sigma^2 S_1^2 \rangle_{n+1} = R_5 \langle S_1^2 \rangle_n + [R_8 - R_7] \langle S_1 S_2 \rangle_n + [R_8 + R_7 - R_5] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (6.26)$$

$$\langle \sigma^2 S_2^2 \rangle_{n+1} = R_6 \langle S_2^2 \rangle_n + [R_8 - R_7] \langle S_1 S_2 \rangle_n + [R_8 + R_7 - R_6] \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \quad (6.27)$$

com

$$R_1 = \frac{e^{2J_n^{(1)}} - 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n^{(1)}} + e^{2J_n^{(1)}}}, \quad (6.28)$$

$$R_2 = \frac{e^{2J_n^{(2)}} - 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n^{(2)}} + e^{2J_n^{(2)}}}, \quad (6.29)$$

$$R_3 = \frac{1}{2} \frac{e^{2J_n^{(1)} + 2J_n^{(2)}} - 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n^{(1)} + J_n^{(2)}} + e^{2J_n^{(1)} + 2J_n^{(2)}}}, \quad (6.30)$$

$$R_4 = \frac{1}{2} \frac{-e^{2J_n^{(1)}} + e^{2J_n^{(2)}}}{e^{2J_n^{(1)}} + e^{2J_n^{(2)}} + e^{\Delta_n + J_n^{(1)} + J_n^{(2)}}}, \quad (6.31)$$

$$R_5 = \frac{e^{2J_n^{(1)}} + 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n^{(1)}} + e^{2J_n^{(1)}}}, \quad (6.32)$$

$$R_6 = \frac{e^{2J_n^{(2)}} + 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n^{(2)}} + e^{2J_n^{(2)}}}, \quad (6.33)$$

$$R_7 = \frac{1}{2} \frac{e^{2J_n^{(1)}} + e^{2J_n^{(2)}}}{e^{2J_n^{(1)}} + e^{2J_n^{(2)}} + e^{\Delta_n + J_n^{(1)} + J_n^{(2)}}}, \quad (6.34)$$

$$R_8 = \frac{1}{2} \frac{e^{2J_n^{(1)} + 2J_n^{(2)}} + 1}{1 + e^{\Delta_n + J_n^{(1)} + J_n^{(2)}} + e^{2J_n^{(1)} + 2J_n^{(2)}}}, \quad (6.35)$$

$$R_9 = \frac{1}{2 + e^{\Delta_n}}, \quad (6.36)$$

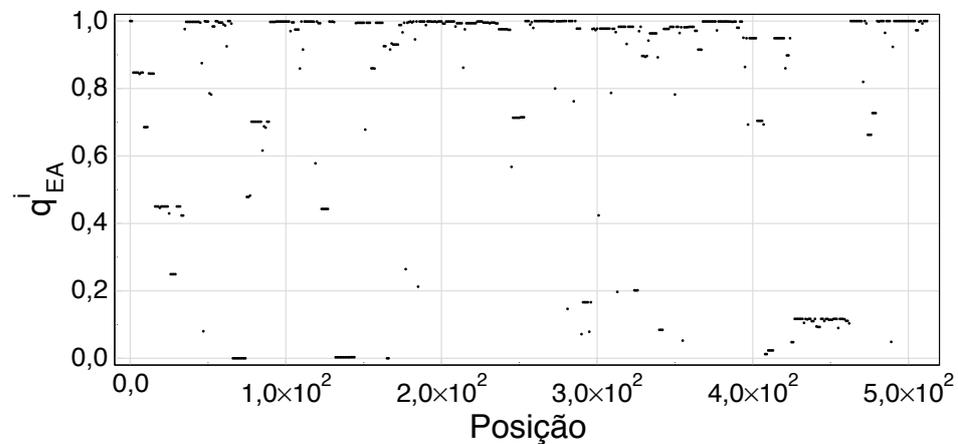
$$(6.37)$$

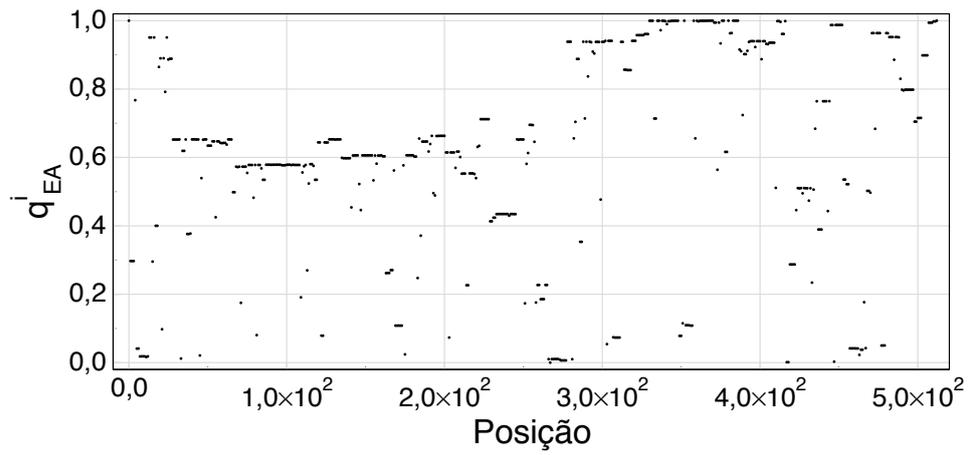
com o índice subscrito n representando a ordem da hierarquia e o índice sobrescrito (1) indica as ligações associadas ao sítio raiz S_1 da unidade básica (Figura 8, enquanto (2) indica a ligação envolvendo o sítio raiz S_2 . Com isso, conhecendo as magnetizações locais e pares de correlações entre spins de ordem zero, podemos fazer o procedimento de decoração da rede e calcular as magnetizações e pares de correlações locais entre spins de ordem um, fazendo isso sucessivamente até chegarmos à hierarquia de ordem n .

Para analisar o comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson local q_{EA}^i devemos iterar as equações (6.18) – (6.27), tal como procedido no capítulo 4 para a magnetização local. No entanto o conjunto dos acoplamento de ligações e campos cristalinos $\{J_{ij}, \Delta_i\}$ é formado por variáveis aleatórias e o processo de renormalização ocorre como discutido na seção anterior. Para estudar as propriedades locais, devemos dispor das distribuições renormalizadas, para cada geração da rede, isto é, armazenarmos esses valores que serão utilizados no processo de inflação da rede. O parâmetro de ordem EA local associado ao i -ésimo sítio é definido por

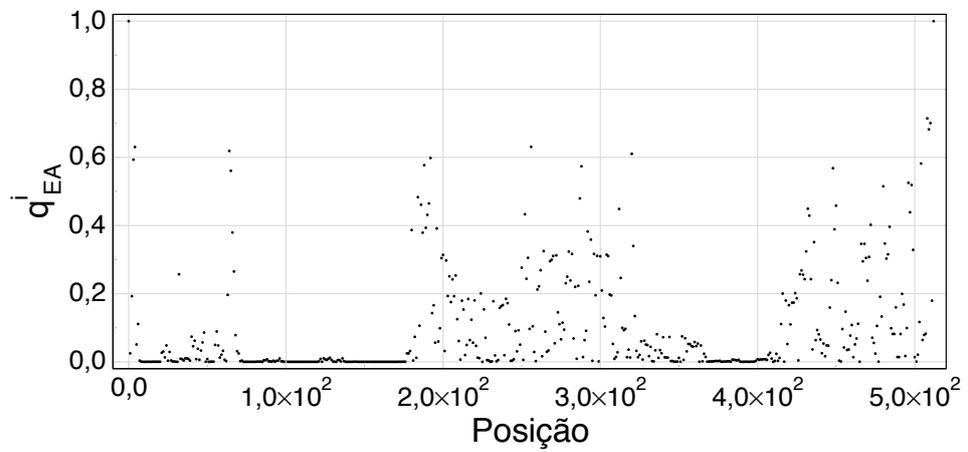
$$q_{EA}^i = \frac{1}{N_a} \sum_{\alpha=1}^{N_a} \langle S_i^{(\gamma)} \rangle^2, \quad (6.38)$$

com γ identificando a amostra e N_a o número de amostras. A partir das distribuições de probabilidades iniciais geramos o perfil do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson para alguns valores de temperatura, incluindo T_c . Isto está feito para uma rede com $n = 9$ hierarquias para $N_a = 400$ amostras e dimensão $d = 3$. Na Figura 44, apresentamos os perfis para a distribuição de probabilidades gaussiana nas temperaturas (a) $T = 0,300$, (b) $T = 0,400$, (c) $T = 0,735$ e (d) $T = 0,800$ para o caso de apenas uma amostra. Na Figura 45, o perfil é feito para a média sobre 400 amostras. Fica claro na Figura 44 que a desordem na estrutura do parâmetro de ordem local de Edwards-Anderson aumenta à medida em que reduzimos a temperatura e nos aprofundamos na fase VS. Entretanto, quando tomamos a média configuracional sobre a desordem, os perfis na Figura 45 apresentam um padrão auto-similar semelhante ao que acontece no caso do modelo BC ferromagnético. Observa-se também que o valor médio por sítio diminui com o aumento da temperatura até que em $T_c = 0,735$ se anula, como o comportamento esperado para parâmetro de ordem. Para dimensões $d \geq 2,585$, observamos o mesmo comportamento qualitativo.

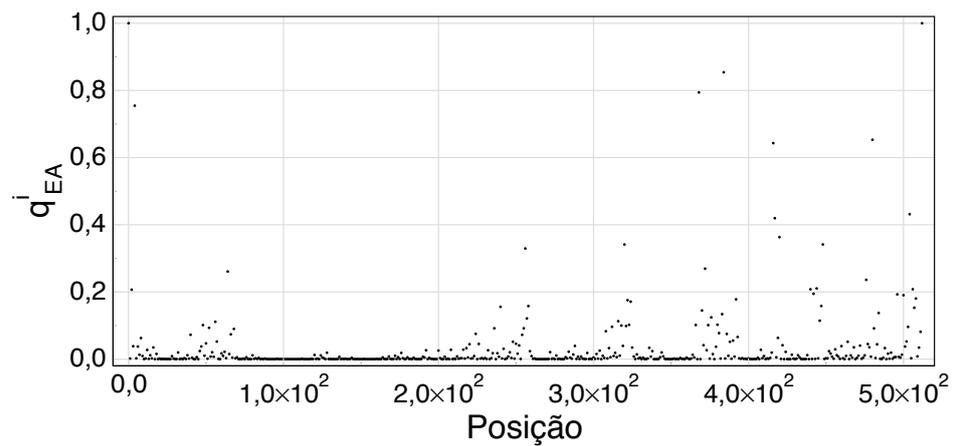




(b) $T < T_c$

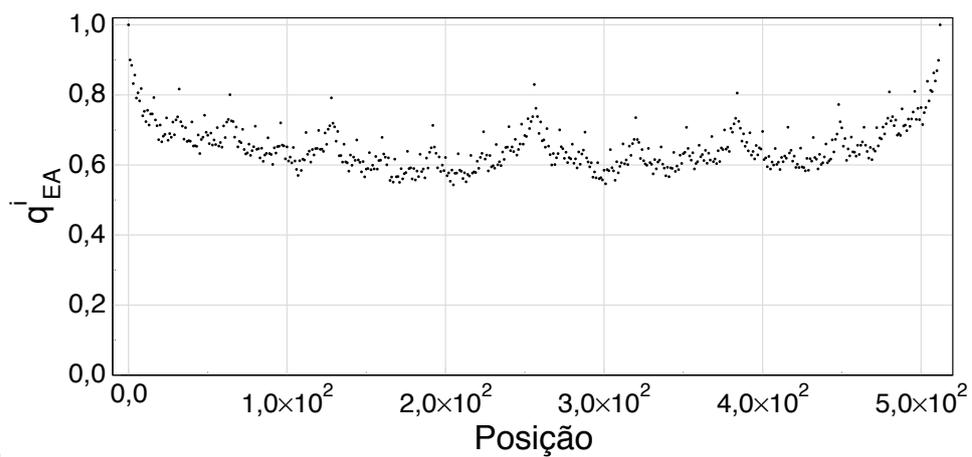


(c) $T \simeq T_c$

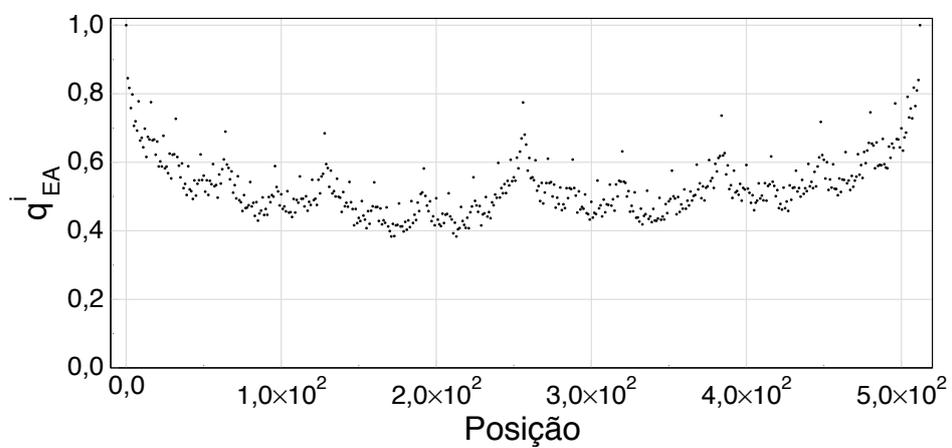


(d) $T > T_c$

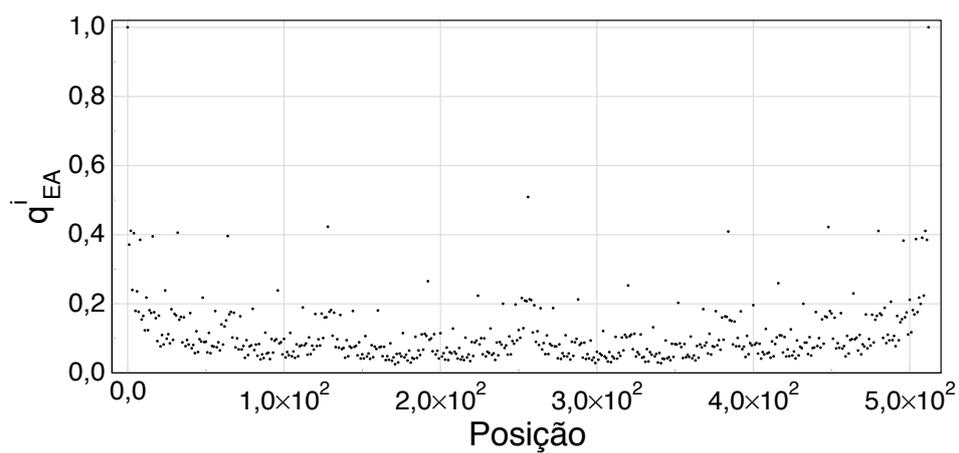
Figura 44 – Perfil do parâmetro de ordem local de EA para uma amostra da rede com dimensão $d = 3$ e $n = 9$ hierarquias para (a) $T = 0,300$, (b) $T = 0,400$, (c) $T = T_c \simeq 0,735$ e (d) $T = 0,800$.



(a) $T \ll T_c$



(b) $T < T_c$



(c) $T \simeq T_c$

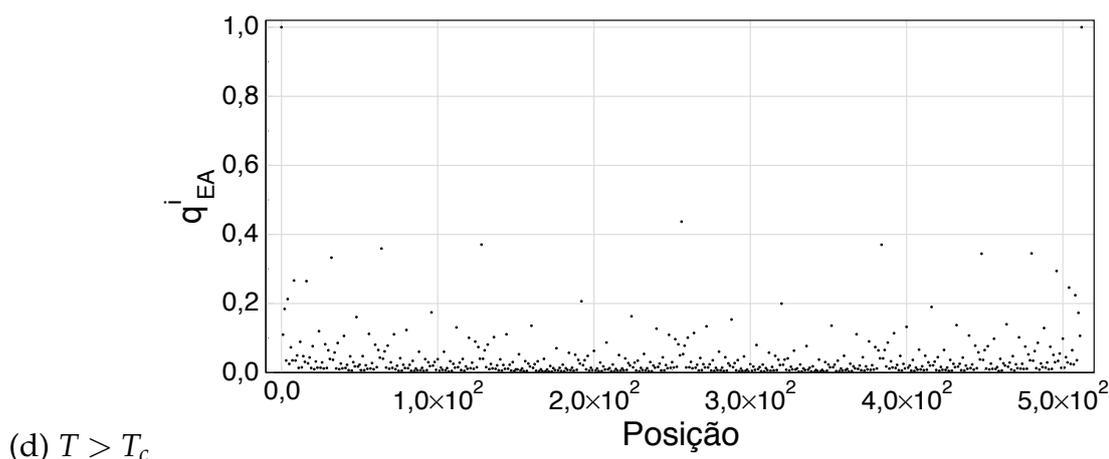


Figura 45 – Perfil do parâmetro de ordem local de EA para 400 amostras das interações e campos para rede com dimensão $d = 3$ e $n = 9$ hierarquias para (a) $T = 0,300$, (b) $T = 0,400$, (c) $T = T_c \simeq 0,735$ e (d) $T = 0,800$.

O espectro multifractal $f(\bar{\alpha})$ dos perfis apresentados na Figura 45, obtido pelo método de Chhabra e Jesen (88) está mostrado na Figura 46. Observamos um comportamento multifractal no parâmetro de ordem local de Edwards-Anderson. Para valores de $T < T_c$, notamos uma diminuição na largura do espectro à medida que a temperatura é reduzida, convergindo para um monofractal no limite $T \rightarrow 0$. Esse comportamento é esperado uma vez que, em $T \rightarrow 0$, as correlações estão mais fortes e os valores do parâmetro de ordem local de EA apresentam valores unitários. Entretanto para temperaturas acima, mas próximas da temperatura crítica é observado um alargamento dos espectros $f(\bar{\alpha})$. Quando a temperatura é aumentada na fase paramagnética o parâmetro de ordem se anula localmente inviabilizando a obtenção de $f(\bar{\alpha})$ nessa região.

Para investigar melhor o comportamento de $f(\bar{\alpha})$, na Figura 47 apresentamos a dependência dos valores máximo ($\bar{\alpha}_{max}$) e mínimo ($\bar{\alpha}_{min}$) do espectro em função da temperatura. Observamos que abaixo de T_c , os valores de $\bar{\alpha}_{max}$ e $\bar{\alpha}_{min}$ tendem para um valor constante. No entanto, para um valor imediatamente acima de T_c , observa-se uma mudança abrupta no comportamento de $\bar{\alpha}_{max}$, crescendo numa taxa muito maior que a observada em baixas temperaturas, sinalizando a transição vidro de spin. Na fase paramagnética, o parâmetro de ordem de EA tende a se anular na maior parte dos sítios, sendo eliminado do cálculo do espectro. Assim, para uma rede finita é esperado um valor finito porém grande de $\bar{\alpha}_{max}$ que é o expoente que caracteriza as singularidades do conjunto de medidas menores ainda presentes no perfil. Isto é evidenciado pelo rápido aumento de $\bar{\alpha}_{max}$ com a temperatura para $T > T_c$. Por outro lado, $\bar{\alpha}_{min}$ é o expoente que caracteriza o conjunto das maiores medidas e decai lentamente. Este comportamento está associado ao fato de que sítios próximos aos sítios raízes são influenciados pela condição de contorno, com valores diferentes de zero. Vale destacar que comportamento semelhante foi observado para o modelo de vidro de spin de Ising 1/2 e dimensão $d = 3$

(80).

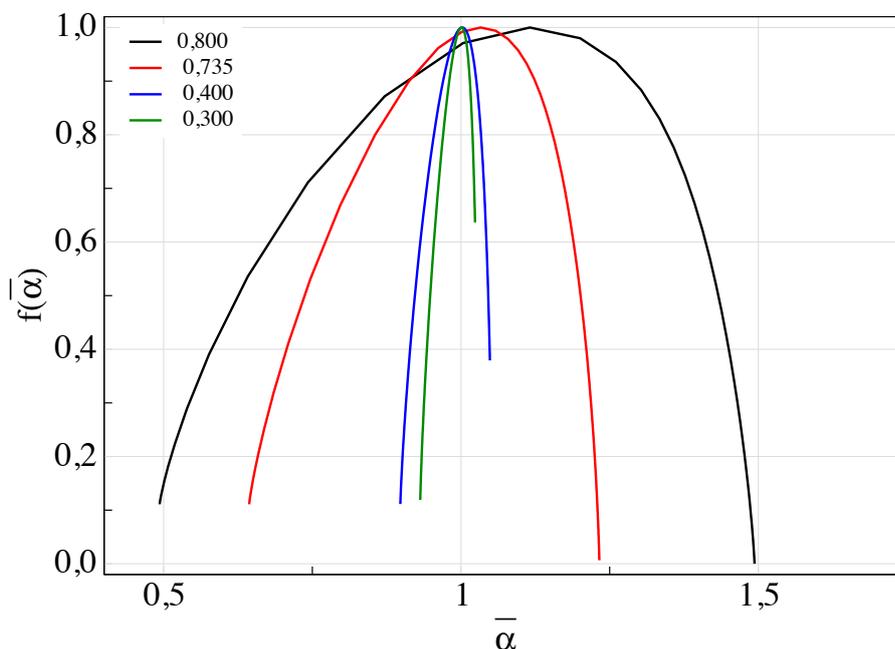


Figura 46 – Função $f(\bar{\alpha})$ para várias temperaturas indicadas na legenda. A curva vermelha está associada à temperatura crítica $T_c = 0,735$. Para valores menores que T_c observa-se um estreitamento das curvas enquanto que, para temperaturas acima de T_c é observado um alargamento da curva.

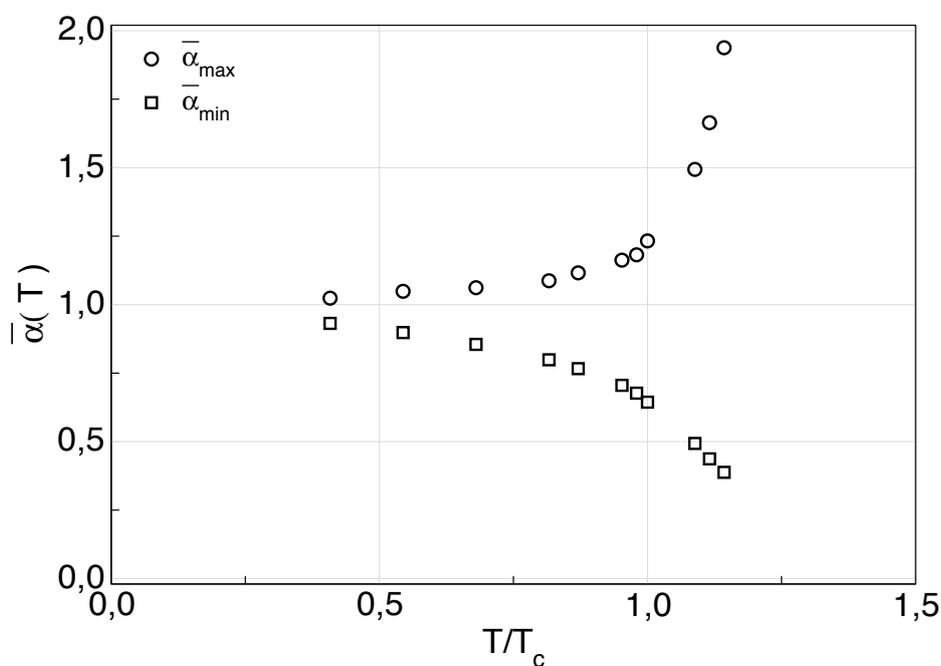


Figura 47 – α_{max} e α_{min} do espectro $f(\bar{\alpha})$ do parâmetro de EA em função da temperatura.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Ao longo desta tese, estudamos as propriedades locais do modelo de Ising com spin 1 sob ação de campos de anisotropia e calculamos, através de um procedimento exato, as relações de recorrência para as magnetizações e pares de correlações locais do modelo definido numa rede hierárquica tipo diamante com fator de escala $b = 2$ e dimensão d arbitrária.

Obtivemos resultados analíticos e numéricos calculados através do método do grupo de renormalização combinado com as relações de recorrência, para o caso particular do modelo BC ferromagnético (109). Essa metodologia possibilitou a determinação da magnetização local, do parâmetro quadrupolar, da energia interna, do calor específico, da susceptibilidade associada ao campo cristalino e da entropia. As grandes vantagens do método utilizado são o baixo custo computacional quando comparado com métodos mais sofisticados e a possibilidade de acessar e observar o comportamento em regiões de baixa temperatura onde a descontinuidade do parâmetro de ordem fica mais evidentes. Estimamos os expoentes críticos β e ν , através do parâmetro de ordem e os demais expoentes α , γ estimados foram extraídos de relações de escala e hiperescala.

Os resultados foram analisados para diferentes regiões do diagrama de fases dependendo do valor de $\alpha = \Delta/J$ que mede força do acoplamento de campo cristalino em relação ao acoplamento entre pares de spins primeiros vizinhos. Os intervalos estudados foram $\alpha < \alpha^*$, $\alpha^* \leq \alpha < \alpha_{\max}$ e $\alpha \geq \alpha_{\max}$. No intervalo $\alpha < \alpha^*$ o modelo BC ferromagnético para $d \geq 2$ apresenta uma transição de fase contínua, partindo de baixas temperaturas da fase ferromagnética para a fase paramagnética desordenada, nesta região o estudo das propriedades locais sobre a linha de transição exibiram um no perfil do parâmetro de ordem com espectro multifractal. No intervalo $\alpha^* \leq \alpha \leq \alpha_{\max}$ o diagrama de fases apresenta o fenômeno da reentrância. Quanto partimos de temperaturas mais altas e vamos abaixando a temperatura o sistema apresenta uma transição ferromagnética-paramagnética desordenada, onde a magnetização é nula e a configuração é um terço dos spins no estado $S_i = 0$, um terço no estado $S_i = 1$ e um terço no estado $S_i = -1$. Quando a temperatura continua sendo abaixada, percebemos uma diminuição abrupta na magnetização, ocasionando uma transição inesperada da fase ferromagnética para a fase paramagnética ordenada, com magnetização nula e a maioria dos spins no estado $S_i = 0$, isto é, com densidade $n_0 \approx 1$. Nesta transição observamos que o parâmetro de ordem e a densidade n_0 sofrem uma descontinuidade finita, caracterizando uma transição de primeira ordem. Essa descontinuidade em m e n_0 variam de um valor máximo caracterizado no diagrama pelo ponto D até se anularem no ponto C , caracterizado como um ponto tricrítico. Investigamos o comportamento de m ao longo desse intervalo

tanto através das propriedades termodinâmicas quanto através das propriedades locais. Essa mudança na natureza da transição foi sinalizada na vizinhança do ponto tricrítico através de variações abruptas na energia interna e na entropia, na divergência do calor específico e da susceptibilidade associada ao campo cristalino. Além disso, os perfis das magnetizações dos sítios apresentaram uma estrutura multifractal nas transições de segunda ordem, enquanto que entre o intervalo (α_c, T_c) à (α_D, T_D) , os perfis tornam-se menos irregulares e o espectro multifractal converge para um ponto, caracterizado como um monofractal.

No intervalo $\alpha \geq \alpha_{\max}$ não foi observada nenhuma transição de fase. Entretanto o modelo apresenta uma fase ordenada e um estado fundamental não degenerado em $T = 0$ caracterizado por todos os spin estarem no estado $S_i = 0$, isto é, $n_0 = 1$. Para um valor fixo de α a densidade n_0 decai continuamente quando aumentamos a temperatura até que na região de altas temperaturas n_0 corresponde a um terço dos sítios.

Para o modelo BC desordenado com interações e campos cristalinos competitivos investigamos a transição de fase vidro de spins - paramagnética, para variáveis aleatórias independentes que seguem uma distribuição de probabilidades gaussiana simétrica. Acompanhamos a evolução dos momentos das distribuições sob renormalização para determinar temperatura crítica. Delimitamos a possível dimensão crítica inferior ($2 < D_f < 2,58$) para transição vidro de spins - paramagnética. Por fim, investigamos as propriedades locais e multifractais do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson na vizinhança da transição de fase VS-P.

Futuramente, pretendemos explorar, outras regiões do diagrama de fases, do modelo BC desordenado, considerando distribuições de probabilidades para as interações e campos com médias não-nulas e larguras variáveis, e investigar as propriedades locais, globais, multifractais e termodinâmica do modelo. Além disso, com a determinação das relações de recorrência para obtenção das magnetizações e pares de correlações locais, para o caso geral, do modelo de Ising com spin 1 em redes hierárquicas tipo diamante e fator de escala $b = 2$ e dimensão d arbitrária, programamos estudar o modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) ferromagnético e desordenado. Planejamos encontrar uma generalização do modelo de Ising com spin 1 em redes hierárquica para um fator de escala b e dimensão d qualquer. Além disso, podemos generalizar o método recursivo desenvolvido nesta tese para investigar modelos de Ising com variáveis de spins, mais gerais, incluindo os modelos de spins mistos.

REFERÊNCIAS

- [1] REICHL, L. E. *A modern course in statistical physics*. Wiley, 2009.
- [2] SANTOS, J. P.; BARRETO, F. S.; ROSA, D. Tri-critical behavior of the Blume Capel model on a diamond lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. 423, n. Supplement C, p. 175 – 182, 2017.
- [3] LANDAU, L.; LIFSHITZ, E. *Statistical physics*. Number v. 5. Elsevier Science, 2013.
- [4] FRAZER, B. C.; SHIRANE, G.; COX, D. E.; OLSEN, C. E. Neutron-Diffraction Study of Antiferromagnetism in UO_2 . *Phys. Rev.*, v. 140, p. A1448–A1452, Nov 1965.
- [5] BLUME, M. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 . *Phys. Rev.*, v. 141, p. 517–524, Jan 1966.
- [6] CAPEL, H. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, v. 32, n. 5, p. 966 – 988, 1966.
- [7] BLUME, M.; EMERY, V. J.; GRIFFITHS, R. B. Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He^3 - He^4 Mixtures. *Phys. Rev. A*, v. 4, p. 1071–1077, Sep 1971.
- [8] PLASCAK, J.; MOREIRA, J.; SáBARRETO, F. Mean field solution of the general spin Blume-Capel model. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 173, n. 4, p. 360 – 364, 1993.
- [9] SIQUEIRA, A.; FITTIPALDI, I. New effective-field theory for the Blume-Capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 138, n. 3, p. 592 – 611, 1986.
- [10] BONFIM, O. D. A. Mean field renormalization group analysis of the Blume-Capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 130, n. 1, p. 367 – 373, 1985.
- [11] POLAT, H.; AKINCI, U.; SOKMEN, I. A method for phase diagrams of spin-1 Ising ferromagnetic systems. *physica status solidi (b)*, v. 240, n. 1, p. 189–200, 2003.
- [12] COSTABILE, E.; AMAZONAS, M. A.; VIANA, J. R.; DE SOUSA, J. R. Study of the first-order transition in the spin-1 Blume–Capel model by using effective-field theory. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 376, n. 45, p. 2922 – 2925, 2012.

- [13] COSTABILE, E.; VIANA, J. R.; DE SOUSA, J. R.; PLASCAK, J. The general-spin Blume–Capel model: A study of the multicritical behavior using effective-field theory. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 393, n. Supplement C, p. 297 – 303, 2014.
- [14] BUZANO, C.; PELIZZOLA, A. New topologies in the phase diagram of the semi-infinite Blume-Capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 216, n. 1, p. 158 – 168, 1995.
- [15] BALCERZAK, T.; TUCKER, J. The spin 1 Blume Capel model with RKKY interactions. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. 278, n. 1, p. 87 – 95, 2004.
- [16] ALBAYRAK, E. Spin-1 Blume–Capel model with random crystal field effects. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 392, n. 4, p. 552 – 557, 2013.
- [17] OITMAA, J. High temperature series expansions for Griffiths' model of He³ - He⁴ mixtures. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 33, n. 4, p. 230 – 231, 1970.
- [18] OITMAA, J. Critical behaviour of a generalized Ising model. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 5, n. 4, p. 435, 1972.
- [19] SAUL, D. M.; WORTIS, M.; STAUFFER, D. Tricritical behavior of the Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, v. 9, p. 4964–4980, Jun 1974.
- [20] BARRETO, C. S. High Temperature Dynamics of the Linear Chain Spin-One Model in a Transverse Field. *Brazilian Journal of Physics*, Saulo, v. 24, n. 4, p. 343–355, 1994.
- [21] JAIN, A. K.; LANDAU, D. P. Monte Carlo study of the fcc Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, v. 22, p. 445–452, Jul 1980.
- [22] LANDAU, D. P.; SWENDSEN, R. H. Monte Carlo renormalization-group study of tricritical behavior in two dimensions. *Phys. Rev. B*, v. 33, p. 7700–7707, Jun 1986.
- [23] KIMEL, J. D.; BLACK, S.; CARTER, P.; WANG, Y.-L. Monte Carlo study of the antiferromagnetic two-dimensional Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, v. 35, p. 3347–3353, Mar 1987.
- [24] PUHA, I.; DIEP, H. Random-bond and random-anisotropy effects in the phase diagram of the Blume–Capel model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. 224, n. 1, p. 85 – 92, 2001.
- [25] SILVA, C. J.; CAPARICA, A. A.; PLASCAK, J. A. Wang-Landau Monte Carlo simulation of the Blume-Capel model. *Phys. Rev. E*, v. 73, p. 036702, Mar 2006.

- [26] KWAK, W.; JEONG, J.; LEE, J.; KIM, D.-H. First-order phase transition and tricritical scaling behavior of the Blume-Capel model: A Wang-Landau sampling approach. *Phys. Rev. E*, v. 92, p. 022134, Aug 2015.
- [27] BRAGA, G. A.; FERREIRA, S. J.; BARRETO, C. S. Correlation Inequalities and Upper Bounds on the Critical Temperature for Some Spin Models. *Brazilian Journal of Physics*, Saulo, v. 24, n. 4, p. 343–355, 1993.
- [28] BRAGA, G. A.; FERREIRA, S. J.; BARRETO, F. C. S. Upper Bounds on the Critical Temperature for the Two Dimensional Blume-Emery-Griffiths Model. *J. Stat. Phys.*, v. 76, p. 819 – 834, 1994.
- [29] BARRETO, F. C. S.; MOTA, A. L. Correlation equalities and upper bounds for the transverse Ising model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2012, n. 05, p. P05006, 2012.
- [30] BARRETO, F. S.; MOTA, A. L. Correlations equalities and some upper bounds for the critical temperature for spin one systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 391, n. 23, p. 5908 – 5917, 2012.
- [31] SANTOS, J. P.; BARRETO, F. S. Correlation identities and rigorous upper bounds on the critical temperature for the spin-1 blume–capel model on a kagome lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 421, p. 548 – 561, 2015.
- [32] SANTOS, J. P.; BARRETO, F. S. Tri-critical behavior of the Blume–Emery–Griffiths model on a Kagomé lattice: Effective-field theory and Rigorous bounds. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 442, p. 22 – 35, 2016.
- [33] WEGNER, F. J.; RIEDEL, E. K. Logarithmic Corrections to the Molecular-Field Behavior of Critical and Tricritical Systems. *Phys. Rev. B*, v. 7, p. 248–256, Jan 1973.
- [34] BURKHARDT, T. W. Application of Kadanoff’s lower-bound renormalization transformation to the Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, v. 14, p. 1196–1201, Aug 1976.
- [35] YEOMANS, J. M.; FISHER, M. E. Three-component model and tricritical points: A renormalization-group study. II. General dimensions and the three-phase monohedron. *Phys. Rev. B*, v. 24, p. 2825–2840, Sep 1981.
- [36] S. MOSS DE OLIVEIRA, P. M. C. D. O.; DE Sá BARRETO, F. C. The Spin-S Blume-Capel RG Flow Diagram. *J. Stat. Phys.*, v. 78, p. 1619–1627, 1995.
- [37] BRANCO, N. S.; BOECHAT, B. M. Real-space renormalization-group study of the two-dimensional Blume-Capel model with a random crystal field. *Phys. Rev. B*, v. 56, p. 11673–11677, Nov 1997.

- [38] BOUZIANI, M. E.; GAYE, A.; JELLAL, A. Position space renormalization group study of the spin-1 random semi-infinite Blume–Capel model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 392, n. 4, p. 689 – 701, 2013.
- [39] JR, A. A.; NOBRE, F. D.; DA COSTA, F. A. The spin-1 Ising spin glass: a renormalization-group approach. *Journal of Physics: Condensed Matter*, Bristol, v. 12, n. 26, p. 5713, 2000.
- [40] EKIZ, C.; KESKIN, M.; YALÇIN, O. Metastable and unstable states of the Blume–Capel model obtained by the cluster variation method and the path probability method. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 293, n. 1, p. 215 – 232, 2001.
- [41] OZKAN, A.; SEFEROGLU, N.; KUTLU, B. Critical exponents of the three-dimensional Blume–Capel model on a cellular automaton. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 362, n. 2, p. 327 – 337, 2006.
- [42] SNOWMAN, D. P. A Blume–Capel spin glass with competing crystal-field interactions on a hierarchical lattice. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 390, n. 9, p. 1505 – 1515, 2011.
- [43] YUKSEL, Y.; AKINCI, U.; POLAT, H. Critical behavior and phase diagrams of a spin-1 Blume–Capel model with random crystal field interactions: An effective field theory analysis. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 391, n. 9, p. 2819 – 2832, 2012.
- [44] MADANI, M.; GAYE, A.; BOUZIANI, M. E.; ALRAJHI, A. Migdal–Kadanoff solution of the mixed spin-1 and spin-3/2 Blume–Capel model with different single-ion anisotropies. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 437, n. Supplement C, p. 396 – 404, 2015.
- [45] ALBAYRAK, E. $\pm J$ Blume–Capel model in the cluster variation method. *Chinese Journal of Physics*, v. 54, n. 6, p. 978 – 982, 2016.
- [46] ZIERENBERG, J.; FYTAS, N. G.; WEIGEL, M.; JANKE, W.; MALAKIS, A. Scaling and universality in the phase diagram of the 2D Blume–Capel model. *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, v. 226, n. 4, p. 789–804, 2017.
- [47] STANLEY, H. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. International series of monographs on physics. Oxford University Press, 1971.
- [48] MCCOMB, W. *Renormalization methods, a guide for beginners*. Oxford University Press, 2004.

- [49] RIEDEL, E. K.; WEGNER, F. J. Tricritical Exponents and Scaling Fields. *Phys. Rev. Lett.*, v. 29, p. 349–352, Aug 1972.
- [50] RIEDEL, E. K.; WEGNER, F. J. Effective critical and tricritical exponents. *Phys. Rev. B*, v. 9, p. 294–315, Jan 1974.
- [51] STEPHEN, M.; MCCAULEY, J. Feynman graph expansion for tricritical exponents. *Physics Letters A*, Amsterdam, v. 44, n. 2, p. 89 – 90, 1973.
- [52] WANG, Y.-L.; LEE, F. Linked-cluster series analysis of the Blume-Capel model. *Phys. Rev. B*, v. 29, p. 5156–5164, May 1984.
- [53] ONSAGER, L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Phys. Rev.*, v. 65, p. 117–149, Feb 1944.
- [54] BAXTER, R. J. Eight-Vertex Model in Lattice Statistics. *Phys. Rev. Lett.*, v. 26, p. 832–833, Apr 1971.
- [55] KADDANOFF, L. P. Notes on Migdal’s recursion formulas. *Annals of Physics*, New York, v. 100, n. 1-2, p. 359 – 394, 10 September 1976 1977.
- [56] WILSON, K. G. Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture. *Phys. Rev. B*, v. 4, p. 3174–3183, Nov 1971.
- [57] WILSON, K. G.; KOGUT, J. The renormalization group and the ϵ expansion. *Physics Reports*, v. 12, n. 2, p. 75 – 199, 1974.
- [58] INDEKEU, J. O.; MARITAN, A.; STELLA, A. L. Renormalisation group recursions by mean-field approximations. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 15, n. 6, p. L291, 1982.
- [59] LYRA, M.; COUTINHO, S. Phase diagrams for random-bond D-vector models. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 155, n. 2, p. 232 – 253, 1989.
- [60] CONTINENTINO, M.; COUTINHO, S. The planar random anisotropy model: a mean-field renormalization group approach. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Amsterdam, v. 125, n. 1, p. 49 – 56, 1993.
- [61] J.J BINNEY, N. J. DOWRICK, A. J. F. M. E. J. N. *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalisation Group*. Oxford University Press, 1992.
- [62] NELSON, D. R.; FISHER, M. E. Soluble renormalization groups and scaling fields for low-dimensional Ising systems. *Annals of Physics*, New York, v. 91, n. 1, p. 226 – 274, 1975.

- [63] DHAR, D. Lattices of effectively nonintegral dimensionality. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 18, n. 4, p. 577–585, 1977.
- [64] GEFEN; YUVAL; MANDELBROT; B., B.; AHARONY; AMNON. Critical Phenomena on Fractal Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 45, p. 855–858, Sep 1980.
- [65] RUNNELS, L. K. Phase Transition of a Bethe Lattice Gas of Hard Molecules. *Journal of Mathematical Physics*, New York, v. 8, n. 10, p. 2081–2087, 1967.
- [66] MULLER-HARTMANN, E.; ZITTARTZ, J. New Type of Phase Transition. *Phys. Rev. Lett.*, v. 33, p. 893–897, Oct 1974.
- [67] BERKER, A. N.; OSTLUND, S. Renormalisation-group calculations of finite systems: order parameter and specific heat for epitaxial ordering. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 12, n. 22, p. 4961, 1979.
- [68] KAUFMAN, M.; GRIFFITHS, R. B. Exactly soluble Ising models on hierarchical lattices. *Phys. Rev. B*, v. 24, p. 496–498, Jul 1981.
- [69] DA SILVA, L.; CURADO, E. M. M. C. F.; COUTINHO, S.; MORGADO, W. A. M. Criticality and multifractality of the Potts ferromagnetic model on fractal lattices. *Phys. Rev. B*, v. 53, p. 6345–6354, Mar 1996.
- [70] GRIFFITHS, R. B.; KAUFMAN, M. Spin systems on hierarchical lattices. Introduction and thermodynamic limit. *Phys. Rev. B*, v. 26, p. 5022–5032, Nov 1982.
- [71] MELROSE, J. R. Hierarchical lattices: some examples with a comparison of intrinsic dimension and connectivity and Ising model exponents. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 16, n. 13, p. 3077, 1983.
- [72] MELROSE, J. R. Duality on planar fractal and hierarchical lattices. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 16, n. 12, p. L407, 1983.
- [73] MELROSE, J. R. The Migdal-Kadanoff approximation: optimisation, generalisation, Ising model in external fields and the Migdal-Kadanoff hierarchies. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 16, n. 5, p. 1041, 1983.
- [74] HU, B. Problem of Universality in Phase Transitions on Hierarchical Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 55, p. 2316–2319, Nov 1985.
- [75] TSALLIS, C.; DE MAGALHÃES, A. Pure and random Potts-like models: real-space renormalization-group approach. *Physics Reports*, v. 268, n. 5, p. 305 – 430, 1996.
- [76] MANDELBROT, B. *Fractals: Form, chance, and dimension*. Mathematics Series. W. H. Freeman, 1977.

- [77] MORGADO, W. A. M. *Magnetização Multifractal em Redes Hierárquicas*. 1991. Dissertação (Mestrado em Física) - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - CBPF, 1991.
- [78] MORGADO, W. A. M.; COUTINHO, S.; CURADO, E. M. F. Multifractal magnetization on hierarchical lattices. *Journal of Statistical Physics*, New York, v. 61, n. 3, p. 913–921, 1990.
- [79] THOULESS, D. J. Spin-Glass on a Bethe Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, v. 56, p. 1082–1085, Mar 1986.
- [80] NOGUEIRA JR., E.; COUTINHO, S.; NOBRE, F. D.; CURADO, E. M. F.; DE ALMEIDA, J. R. L. Short-range Ising spin glass: Multifractal properties. *Phys. Rev. E*, v. 55, n. 4, p. 3934–3941, Apr 1997.
- [81] JR, E. N.; COUTINHO, S.; NOBRE, F.; CURADO, E. Short-range Ising spin glasses: a critical exponent study. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 257, n. 1–4, p. 365 – 370, 1998.
- [82] CAMELO-NETO, G.; DE LIMA, W.; COUTINHO, S.; MORGADO, W. Potts spin glass: a renormalization group approach. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 342, n. 1, p. 83 – 89, 2004. Proceedings of the VIII Latin American Workshop on Nonlinear Phenomena.
- [83] ROSAS, A.; COUTINHO, S. Random-field Ising model on hierarchical lattices: thermodynamics and ground-state critical properties. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 335, n. 1–2, p. 115 – 142, 2004.
- [84] FISHER, M. E. Transformations of Ising Models. *Phys. Rev.*, v. 113, p. 969–981, Feb 1959.
- [85] BANAVAR, J. R.; BRAY, A. J. Heisenberg and Potts spin glasses: A renormalization-group study. *Phys. Rev. B*, v. 38, n. 4, p. 2564–2569, Aug 1988.
- [86] ZIERENBERG, J.; FYTAS, N. G.; JANKE, W. Parallel multicanonical study of the three-dimensional Blume-Capel model. *Phys. Rev. E*, v. 91, p. 032126, Mar 2015.
- [87] BLEHER, M.; ZALLYS, E. Asymptotics of the susceptibility for the Ising model on the hierarchical lattices. *Commun. Math. Phys.*, v. 120, n. 3, p. 409–436, 1989.
- [88] CHHABRA, A.; JENSEN, R. V. Direct determination of the $f(\alpha)$ singularity spectrum. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 1327–1330, Mar 1989.
- [89] COUTINHO, S.; NETO, O. D.; DE ALMEIDA, J.; CURADO, E.; MORGADO, W. Multifractality of Ising models on hierarchical lattices: pure and spin glass cases. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 185, n. 1, p. 271 – 277, 1992.

- [90] FISHER, K. H.; HERTZ, J. A. *Spin glasses*. Cambridge University Press, 1991.
- [91] BINDER, K.; YOUNG, A. P. Spin glasses: Experimental and open questions facts, theoretical concepts. *Review of Modern Physics*, v. 58, p. 801–976, 1986.
- [92] TOULOUSE, G. Theory of Frustration Effect in Spin Glasses 1. *Commun. Phys.*, v. 2, p. 115, 1977.
- [93] CANNELLA, V.; MYDOSH, J. A. Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys. *Phys. Rev. B*, v. 6, p. 4220–4237, Dec 1972.
- [94] GUNNARSSON, K.; SVEDLINDH, P.; NORDBLAD, P.; LUNDGREN, L.; ARUGA, H.; ITO, A. Static scaling in a short-range Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, v. 43, p. 8199–8203, Apr 1991.
- [95] YOSHIKAWA, H.; MORI, H.; KAWANO, H.; ARUGA-KATORI, H.; MITUTA, S.; ITO, A. Phase Diagram of a Reentrant Ising Spin Glass $\text{Fe}_{0.6}\text{Mn}_{0.4}\text{TiO}_3$ on the Magnetic Field-Temperature Plane. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 63, n. 8, p. 3145–3157, 1994.
- [96] NORDBLAD, P.; SVEDLINDH, P. *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, 1998. Cap. Experiments on Spin Glasses.
- [97] EDWARDS, S. F.; W., A. P. Theory of spin glasses. *J. Phys. F: Met. Phys.*, v. 5, p. 965, 1975.
- [98] SHERRINGTON, D.; KIRKPATRICK, S. Solvable Model of a Spin-Glass. *Phys. Rev. Lett.*, v. 35, n. 26, p. 1792–1796, Dec 1975.
- [99] SOUTHERN, B. W.; YOUNG, A. P. Real space rescaling study of spin glass behaviour in three dimensions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 10, n. 12, p. 2179, 1977.
- [100] Gardner, E. A spin glass model on a hierarchical lattice. *J. Phys. France*, v. 45, n. 11, p. 1755–1763, 1984.
- [101] BANAVAR, J. R.; BRAY, A. J. Chaos in spin glasses: A renormalization-group study. *Phys. Rev. B*, v. 35, n. 16, p. 8888–8890, Jun 1987.
- [102] CURADO, E. M. F.; MEUNIER, J. L. Spin-glass in low dimensions and the Migdal-Kadanoff approximation. *Physica A: Statistical and Theoretical Physics*, v. 149, n. 1-2, p. 164 – 181, 1988.
- [103] NOBRE, F. D. Real-space renormalization-group approaches for two-dimensional Gaussian Ising spin glass. *Physics Letters A, Amsterdam*, v. 250, n. 1, p. 163 – 169, 1998.

- [104] CURADO, E. M. F.; NOBRE, F. D.; COUTINHO, S. Ground-state degeneracies of Ising spin glasses on diamond hierarchical lattices. *Phys. Rev. E*, v. 60, p. 3761–3770, Oct 1999.
- [105] JR, E. N.; COUTINHO, S.; NOBRE, F.; CURADO, E. Universality in short-range Ising spin glasses. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 271, n. 1, p. 125 – 132, 1999.
- [106] SALMON, O.; D NOBRE, F. Spin-Glass Attractor on Tridimensional Hierarchical Lattices in the Presence of an External Magnetic Field. v. 79, p. 051122, 06 2009.
- [107] DEMIRTA Şs, M.; TUNCER, A. I. E. I. F.; BERKER, A. N. Lower-critical spin-glass dimension from 23 sequenced hierarchical models. *Phys. Rev. E*, v. 92, p. 022136, Aug 2015.
- [108] SINGH, R. R. P.; FISHER, M. E. Short range Ising spin glasses in general dimensions. *J. Appl. Phys.*, v. 63, p. 3994, 1988.
- [109] ROCHA-NETO, M. J.; CAMELO-NETO, G.; JR., E. N.; COUTINHO, S. The Blume–Capel model on hierarchical lattices: Exact local properties. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 494, p. 559 – 573, 2018.

APÊNDICE A – RELAÇÕES DE RECORRÊNCIA: LIGAÇÕES E CAMPOS LOCAIS

Com a finalidade de obter as relações de recorrência para as ligações e campos locais, utilizamos o processo de dizimação dos sítios internos que corresponde, em certo sentido, a uma deflação da rede hierárquica com geração n para outra com $(n - 1)$ gerações com um novo conjunto de constantes de acoplamento. Sob tal procedimento de renormalização, o novo conjunto de constantes de acoplamento será indicado por um apóstrofo. Neste procedimento o hamiltoniano do modelo original (cela completa) ilustrado na Figura 48 (a) é descrito por

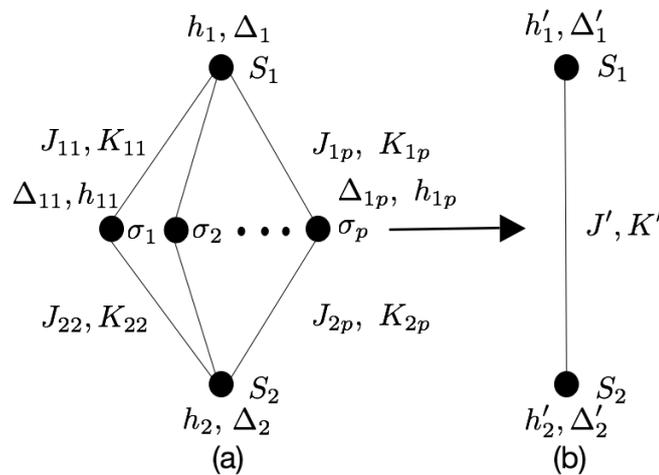


Figura 48 – Ilustração do processo de deflação da rede, por simplicidade, de ordem (a) $n = 1$ para (b) $n = 0$. Todos os sítios internos em (a) são dizimados até que apenas reste uma ligação efetiva entre os sítios externos S_1 e S_2 como pode ser observado em (b) .

$$\begin{aligned}
 -\beta\mathcal{H} = & h_1 S_1 + h_2 S_2 - \Delta_1 S_1^2 - \Delta_2 S_2^2 + \sum_{i=1}^p [J_{iS_1} \sigma_i S_1 + J_{iS_2} \sigma_i S_2 + K_{iS_1} \sigma_i^2 S_1^2 + \\
 & + K_{iS_2} \sigma_i^2 S_2^2 - \Delta_{ij} \sigma_i^2 + h_{ij} \sigma_i], \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

de forma que a função de partição pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{S_1 S_2\}} \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \exp[-\beta\mathcal{H}] \quad (\text{A.2})$$

$$\mathcal{Z}[S_1, S_2] = \text{Tr}_{\{S_1, S_2\}} \exp[h_1 S_1 + h_2 S_2 - \Delta_1 S_1^2 - \Delta_2 S_2^2] \prod_i^p \mathcal{Z}_i[S_1, S_2], \quad (\text{A.3})$$

com

$$\mathcal{Z}_i[S_1, S_2] = \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \exp[J_{1S_1} \sigma_i S_1 + J_{1S_2} \sigma_i S_2 + K_{1S_1} \sigma_i^2 S_1^2 + K_{1S_2} \sigma_i^2 S_2^2 - \Delta_{1j} \sigma_i^2 + h_{1j} \sigma_i]. \quad (\text{A.4})$$

Realizando o $\text{Tr}_{\{\sigma_i\}}$, na equação (A.4), resulta:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_i[S_1, S_2] &= 1 + \exp[J_{1S_1} S_1 + J_{1S_2} S_2 + K_{1S_1} S_1^2 + K_{1S_2} S_2^2 - \Delta_{1j} + h_{1j}] + \\ &+ \exp[-J_{1S_1} S_1 - J_{1S_2} S_2 + K_{1S_1} S_1^2 + K_{1S_2} S_2^2 - \Delta_{1j} - h_{1j}]. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Por outro lado, o hamiltoniano renormalizado, Figura 48 (b), pode ser escrito da seguinte forma

$$-\beta \mathcal{H}' = J' S_1 S_2 + K' S_1^2 S_2^2 - \Delta'_1 S_1^2 - \Delta'_2 S_2^2 + h'_1 S_1 + h'_2 S_2. \quad (\text{A.6})$$

Portanto a função de partição renormalizada é fornecida por,

$$\mathcal{Z}'[S_1, S_2] = \text{Tr}_{\{S_1, S_2\}} \exp[J' S_1 S_2 + K' S_1^2 S_2^2 - \Delta'_1 S_1^2 + \Delta'_2 S_2^2 + h'_1 S_1 + h'_2 S_2]. \quad (\text{A.7})$$

Como discutido no Capítulo 2, para preservar as propriedades originais da rede é necessário que a função de partição seja invariante por transformação do grupo de renormalização a menos de uma constante multiplicativa, i.e,

$$\mathcal{Z}[S_1, S_2] = \mathcal{C} \mathcal{Z}'[S_1, S_2], \quad (\text{A.8})$$

As configurações possíveis dos estados para S_1 e S_2 , são:

$$\mathcal{Z}'[1, 1] = \exp[J' + K' - \Delta'_1 - \Delta'_2 + h'_1 + h'_2], \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{Z}'[-1, -1] = \exp[J' + K' - \Delta'_1 - \Delta'_2 - h'_1 - h'_2], \quad (\text{A.10})$$

$$\mathcal{Z}'[1, -1] = \exp[-J' + K' - \Delta'_1 - \Delta'_2 + h'_1 - h'_2], \quad (\text{A.11})$$

$$\mathcal{Z}'[-1, 1] = \exp[-J' + K' - \Delta'_1 - \Delta'_2 - h'_1 + h'_2], \quad (\text{A.12})$$

$$\mathcal{Z}'[1, 0] = \exp[-\Delta'_1 + h'_1], \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{Z}'[-1, 0] = \exp[-\Delta'_1 - h'_1], \quad (\text{A.14})$$

$$\mathcal{Z}'[0, 1] = \exp[-\Delta'_1 + h'_2], \quad (\text{A.15})$$

$$\mathcal{Z}'[0, -1] = \exp[-\Delta'_1 - h'_2], \quad (\text{A.16})$$

$$\mathcal{Z}'[0, 0] = 1. \quad (\text{A.17})$$

Para determinarmos as relações de recorrência para as ligações e campos, manipulamos as equações (A.9)-(A.17). De modo que, ao multiplicarmos (A.9) por (A.10) e dividirmos pelo produto das equações (A.11) e (A.12) encontramos a equação para J' , e usando que $\mathcal{Z}'[S_1, S_2] = \mathcal{Z}[S_1, S_2] / \mathcal{C}$

$$\exp(4J') = \frac{\mathcal{Z}[1, 1] \mathcal{Z}[-1, -1]}{\mathcal{Z}[1, -1] \mathcal{Z}[-1, 1]}, \quad (\text{A.18})$$

Para determinar K' , devemos multiplicar as equações (A.9), (A.10), (A.11) e (A.12), em seguida dividir pelo produto dos quadrados de (A.13), (A.14), (A.15) e (A.16) e obter

$$\exp(4K') = \frac{\mathcal{Z}[1,1]\mathcal{Z}[-1,-1]\mathcal{Z}[1,-1]\mathcal{Z}[-1,1]\mathcal{Z}[0,0]^4}{\mathcal{Z}[1,0]^2\mathcal{Z}[-1,0]^2\mathcal{Z}[0,1]^2\mathcal{Z}[0,-1]^2}. \quad (\text{A.19})$$

As equações de renormalização para os campos cristalinos são obtidas multiplicando as equações (A.13) e (A.14) para Δ'_1 , e (A.15) e (A.16) para Δ'_2 , i.e.

$$\exp(-2\Delta'_1) = \frac{\mathcal{Z}[1,0]\mathcal{Z}[-1,0]}{\mathcal{Z}[0,0]^2}, \quad (\text{A.20})$$

e, analogamente,

$$\exp(-2\Delta'_2) = \frac{\mathcal{Z}[0,1]\mathcal{Z}[0,-1]}{\mathcal{Z}[0,0]^2}. \quad (\text{A.21})$$

Por fim, as equações de renormalização para os campos magnéticos são encontradas multiplicando as equações (A.9) e (A.11) e dividindo pelo produto de (A.10) e (A.12) para h'_1 . Analogamente para h'_2 multiplicamos as equações (A.9) e (A.12) e dividimos pelo produto de (A.10) e (A.11), assim

$$\exp(4h'_1) = \frac{\mathcal{Z}[1,1]\mathcal{Z}[1,-1]}{\mathcal{Z}[-1,-1]\mathcal{Z}[-1,1]}, \quad (\text{A.22})$$

$$\exp(4h'_2) = \frac{\mathcal{Z}[1,1]\mathcal{Z}[-1,1]}{\mathcal{Z}[-1,-1]\mathcal{Z}[1,-1]}. \quad (\text{A.23})$$

Substituindo (A.3) nas equações (A.18)-(A.23) resulta,

$$\exp(4J') = \prod_{i=1}^p \left[\frac{\mathcal{Z}_i[1,1]\mathcal{Z}_i[-1,-1]}{\mathcal{Z}_i[1,-1]\mathcal{Z}_i[-1,1]} \right], \quad (\text{A.24})$$

$$\exp(4K') = \prod_{i=1}^p \left[\frac{\mathcal{Z}_i[1,1]\mathcal{Z}_i[-1,-1]\mathcal{Z}_i[1,-1]\mathcal{Z}_i[-1,1]\mathcal{Z}_i[0,0]^4}{\mathcal{Z}_i[1,0]^2\mathcal{Z}_i[-1,0]^2\mathcal{Z}_i[0,1]^2\mathcal{Z}_i[0,-1]^2} \right], \quad (\text{A.25})$$

$$\exp(-2\Delta'_1) = \exp(-2\Delta_1) \prod_{i=1}^p \left[\frac{\mathcal{Z}_i[1,0]\mathcal{Z}_i[-1,0]}{\mathcal{Z}_i[0,0]^2} \right], \quad (\text{A.26})$$

$$\exp(-2\Delta'_2) = \exp(-2\Delta_2) \prod_{i=1}^p \left[\frac{\mathcal{Z}_i[0,1]\mathcal{Z}_i[0,-1]}{\mathcal{Z}_i[0,0]^2} \right], \quad (\text{A.27})$$

$$\exp(4h'_1) = \exp(4h_1) \prod_{i=1}^p \left[\frac{\mathcal{Z}_i[1,1]\mathcal{Z}_i[1,-1]}{\mathcal{Z}_i[-1,-1]\mathcal{Z}_i[-1,1]} \right], \quad (\text{A.28})$$

$$\exp(4h'_2) = \exp(4h_2) \prod_{i=1}^p \left[\frac{\mathcal{Z}_i[1,1]\mathcal{Z}_i[-1,1]}{\mathcal{Z}_i[-1,-1]\mathcal{Z}_i[1,-1]} \right]. \quad (\text{A.29})$$

$$(\text{A.30})$$

Como a prescrição do grupo de renormalização de Migdal-Kadanof determina que as constantes de acoplamento renormalizadas na rede diamante incorporam as

contribuições de todas as p-ligações, e os campos renormalizados, somam um termo que reproduz as contribuições de todas as ligações conectadas ao par do sítio dado, de modo que as equações de recorrência para as ligações e campos resumem-se a

$$J' = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[-1,-1]}{Z_i[1,-1]Z_i[-1,1]} \right], \quad (\text{A.31})$$

$$K' = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[-1,-1]Z_i[1,-1]Z_i[-1,1]Z_i[0,0]^4}{Z_i[1,0]^2Z_i[-1,0]^2Z_i[0,1]^2Z_i[0,-1]^2} \right], \quad (\text{A.32})$$

$$\Delta'_1 = \Delta_1 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,0]Z_i[-1,0]}{Z_i[0,0]^2} \right], \quad (\text{A.33})$$

$$\Delta'_2 = \Delta_2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[0,1]Z_i[0,-1]}{Z_i[0,0]^2} \right], \quad (\text{A.34})$$

$$h'_1 = h_1 + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[1,-1]}{Z_i[-1,-1]Z_i[-1,1]} \right], \quad (\text{A.35})$$

$$h'_2 = h_2 + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^p \ln \left[\frac{Z_i[1,1]Z_i[-1,1]}{Z_i[-1,-1]Z_i[1,-1]} \right]. \quad (\text{A.36})$$

APÊNDICE B – RELAÇÕES DE RECORRÊNCIA PARA A MAGNETIZAÇÃO E PARES DE CORRELAÇÕES LOCAIS

Calculando o traço $\text{Tr}_{\{S_1, S_2\}}$ da equação (3.15), a função de partição pode ser expandida em nove termos possíveis, deste modo

$$\mathcal{Z} = A_0 + \sum_{j=1}^8 A_j \Phi_j, \quad (\text{B.1})$$

onde definimos as novas variáveis

$$A_0 = \frac{a_6}{a_5} + \frac{1}{a_5 a_6} + 1, \quad (\text{B.2})$$

$$A_1 = \frac{a_3 a_6 a_8}{a_1 a_5 a_7} + \frac{a_1 a_3}{a_5 a_6 a_7 a_8} + 1, \quad (\text{B.3})$$

$$A_2 = \frac{a_1 a_3 a_6 a_7 a_8}{a_5} + \frac{a_3 a_7}{a_1 a_5 a_6 a_8} + 1, \quad (\text{B.4})$$

$$A_3 = \frac{a_{10} a_4 a_6}{a_2 a_5 a_9} + \frac{a_2 a_4}{a_{10} a_5 a_6 a_9} + 1, \quad (\text{B.5})$$

$$A_4 = \frac{a_{10} a_2 a_4 a_6 a_9}{a_5} + \frac{a_4 a_9}{a_{10} a_2 a_5 a_6} + 1, \quad (\text{B.6})$$

$$A_5 = \frac{a_1 a_{10} a_3 a_4 a_6 a_7 a_8}{a_2 a_5 a_9} + \frac{a_2 a_3 a_4 a_7}{a_1 a_{10} a_5 a_6 a_8 a_9} + 1, \quad (\text{B.7})$$

$$A_6 = \frac{a_{10} a_2 a_3 a_4 a_6 a_8 a_9}{a_1 a_5 a_7} + \frac{a_1 a_3 a_4 a_9}{a_{10} a_2 a_5 a_6 a_7 a_8} + 1, \quad (\text{B.8})$$

$$A_7 = \frac{a_{10} a_3 a_4 a_6 a_8}{a_1 a_2 a_5 a_7 a_9} + \frac{a_1 a_2 a_3 a_4}{a_{10} a_5 a_6 a_7 a_8 a_9} + 1, \quad (\text{B.9})$$

$$A_8 = \frac{a_1 a_{10} a_2 a_3 a_4 a_6 a_7 a_8 a_9}{a_5} + \frac{a_3 a_4 a_7 a_9}{a_1 a_{10} a_2 a_5 a_6 a_8} + 1, \quad (\text{B.10})$$

e

$$\Phi_1 = u^{-1}x^{-1}, \quad (\text{B.11})$$

$$\Phi_2 = u^{-1}x, \quad (\text{B.12})$$

$$\Phi_3 = v^{-1}y^{-1}, \quad (\text{B.13})$$

$$\Phi_4 = v^{-1}y, \quad (\text{B.14})$$

$$\Phi_5 = (ruvyz)^{-1}twx, \quad (\text{B.15})$$

$$\Phi_6 = (uvwxz)^{-1}rty, \quad (\text{B.16})$$

$$\Phi_7 = (ruvwyx)^{-1}tz, \quad (\text{B.17})$$

$$\Phi_8 = (uv)^{-1}rtwxyz, \quad (\text{B.18})$$

onde

$$\begin{aligned} a_1 &= e^{J_1}, \\ a_2 &= e^{J_2}, \\ a_3 &= e^{K_1}, \\ a_4 &= e^{K_2}, \\ a_5 &= e^{\Delta_\sigma}, \\ a_6 &= e^{h_\sigma}, \\ a_7 &= e^{L_1}, \\ a_8 &= e^{L_2}, \\ a_9 &= e^{L_3}, \\ a_{10} &= e^{L_4}. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

São parâmetros conhecidos, equanto

$$\begin{aligned} x &= e^{h'_1}, \\ y &= e^{h'_2}, \\ z &= e^{J'}, \\ u &= e^{\Delta'_1}, \\ v &= e^{\Delta'_2}, \\ r &= e^{L'_2}, \\ w &= e^{L'_1}, \\ t &= e^{K'}. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

São parâmetros a determinar. Para eliminar as variáveis desconhecidas Φ_j é necessário calcular as médias térmicas do sistema, as quais podem ser calculadas através das

derivadas a seguir, associadas os sítios externos

$$\mathcal{Z}\langle S_1 \rangle = x \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial x} = -A_1 \Phi_1 + A_2 \Phi_2 + A_5 \Phi_5 - A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.21})$$

$$\mathcal{Z}\langle S_2 \rangle = y \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial y} = -A_3 \Phi_3 + A_4 \Phi_4 - A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.22})$$

$$\mathcal{Z}\langle S_1 S_2 \rangle = z \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial z} = -A_5 \Phi_5 - A_6 \Phi_6 + A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.23})$$

$$\mathcal{Z}\langle S_1^2 \rangle = -u \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial u} = A_1 \Phi_1 + A_2 \Phi_2 + A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 + A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.24})$$

$$\mathcal{Z}\langle S_2^2 \rangle = -v \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial v} = A_3 \Phi_3 + A_4 \Phi_4 + A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 + A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.25})$$

$$\mathcal{Z}\langle S_1^2 S_2 \rangle = t \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial t} = -A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.26})$$

$$\mathcal{Z}\langle S_1 S_2^2 \rangle = w \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial w} = A_5 \Phi_5 - A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.27})$$

$$\mathcal{Z}\langle S_1^2 S_2^2 \rangle = r \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial r} = A_5 \Phi_5 + A_6 \Phi_6 - A_7 \Phi_7 + A_8 \Phi_8, \quad (\text{B.28})$$

com os coeficientes A_i , $i = 1 \dots 8$, dados pelas equações (B.2)-(B.10). As quantidades envolvendo os sítios internos σ_i são calculadas a partir de:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}\langle \sigma \rangle = a_6 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_6} = & \tilde{A}_0 + \tilde{A}_1 \Phi_1 + \tilde{A}_2 \Phi_2 + \tilde{A}_3 \Phi_3 + \tilde{A}_4 \Phi_4 + \tilde{A}_5 \Phi_5 + \\ & + \tilde{A}_6 \Phi_6 + \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8, \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

$$\mathcal{Z}\langle \sigma S_1 \rangle = a_1 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_1} = -\tilde{A}_1 \Phi_1 + \tilde{A}_2 \Phi_2 + \tilde{A}_5 \Phi_5 - \tilde{A}_6 \Phi_6 - \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8, \quad (\text{B.30})$$

$$\mathcal{Z}\langle \sigma S_2 \rangle = a_2 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_2} = -\tilde{A}_3 \Phi_3 + \tilde{A}_4 \Phi_4 - \tilde{A}_5 \Phi_5 + \tilde{A}_6 \Phi_6 - \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8, \quad (\text{B.31})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}\langle \sigma^2 \rangle = -a_5 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_5} = & B_0^+ + (A_1 - 1)\Phi_1 + (A_2 - 1)\Phi_2 + (A_3 - 1)\Phi_3 + (A_4 - 1)\Phi_4 + \\ & + (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 + (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8, \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}\langle \sigma^2 S_1 \rangle = a_7 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_7} = & -(A_1 - 1)\Phi_1 + (A_2 - 1)\Phi_2 + (A_5 - 1)\Phi_5 - (A_6 - 1)\Phi_6 - \\ & - (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8, \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

$$\mathcal{Z}\langle\sigma S_1^2\rangle = a_8 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_8} = \tilde{A}_1 \Phi_1 + \tilde{A}_2 \Phi_2 + \tilde{A}_5 \Phi_5 + \tilde{A}_6 \Phi_6 + \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8, \quad (\text{B.34})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}\langle\sigma^2 S_2\rangle = a_9 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_9} = & - (A_3 - 1)\Phi_3 + (A_4 - 1)\Phi_4 - (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 - \\ & - (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8, \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

$$\mathcal{Z}\langle\sigma S_2^2\rangle = a_{10} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_{10}} = \tilde{A}_3 \Phi_1 + \tilde{A}_4 \Phi_2 + \tilde{A}_5 \Phi_5 + \tilde{A}_6 \Phi_6 + \tilde{A}_7 \Phi_7 + \tilde{A}_8 \Phi_8, \quad (\text{B.36})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}\langle\sigma^2 S_1^2\rangle = a_3 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_3} = & (A_1 - 1)\Phi_1 + (A_2 - 1)\Phi_2 + (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 + \\ & + (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8, \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}\langle\sigma^2 S_2^2\rangle = a_4 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial a_4} = & (A_3 - 1)\Phi_3 + (A_4 - 1)\Phi_4 + (A_5 - 1)\Phi_5 + (A_6 - 1)\Phi_6 + \\ & + (A_7 - 1)\Phi_7 + (A_8 - 1)\Phi_8, \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

com,

$$B_0^+ = \frac{a_6}{a_5} + \frac{1}{a_5 a_6}, \quad (\text{B.39})$$

$$\tilde{A}_0 = \frac{a_6}{a_5} - \frac{1}{a_5 a_6}, \quad (\text{B.40})$$

$$\tilde{A}_1 = \frac{a_3 a_6 a_8}{a_1 a_5 a_7} - \frac{a_1 a_3}{a_5 a_6 a_7 a_8}, \quad (\text{B.41})$$

$$\tilde{A}_2 = \frac{a_1 a_3 a_6 a_7 a_8}{a_5} - \frac{a_3 a_7}{a_1 a_5 a_6 a_8}, \quad (\text{B.42})$$

$$\tilde{A}_3 = \frac{a_{10} a_6 a_4}{a_2 a_5 a_9} - \frac{a_2 a_4}{a_{10} a_5 a_6 a_9}, \quad (\text{B.43})$$

$$\tilde{A}_4 = \frac{a_{10} a_2 a_4 a_6 a_9}{a_5} - \frac{a_4 a_9}{a_{10} a_2 a_5 a_6}, \quad (\text{B.44})$$

$$\tilde{A}_5 = \frac{a_1 a_{10} a_3 a_4 a_6 a_7 a_8}{a_2 a_5 a_9} - \frac{a_2 a_3 a_4 a_7}{a_1 a_{10} a_5 a_6 a_8 a_9}, \quad (\text{B.45})$$

$$\tilde{A}_6 = \frac{a_{10} a_2 a_3 a_4 a_6 a_8 a_9}{a_1 a_5 a_7} - \frac{a_1 a_3 a_4 a_9}{a_{10} a_2 a_5 a_6 a_7 a_8}, \quad (\text{B.46})$$

$$\tilde{A}_7 = \frac{a_{10} a_3 a_4 a_6 a_8}{a_1 a_2 a_5 a_7 a_9} - \frac{a_1 a_2 a_3 a_4}{a_{10} a_5 a_6 a_7 a_8 a_9}, \quad (\text{B.47})$$

$$\tilde{A}_8 = \frac{a_1 a_{10} a_2 a_3 a_4 a_6 a_7 a_8 a_9}{a_5} - \frac{a_3 a_4 a_7 a_9}{a_1 a_{10} a_2 a_5 a_6 a_8}. \quad (\text{B.48})$$

Observe que todos os coeficientes dados pelas equações (B.2)-(B.10) e (B.39)-(B.48) são grandezas com valores conhecidos. O passo seguinte é resolver o sistema de equações (B.21)-(B.28) para os sítios externos, correspondente a um sistema linear 8×8 com quantidades desconhecidas Φ_j ($j = 1, 2, 3, \dots, 8$), as soluções, obtidas através do *software*

mathematica, desse sistema linear possui as seguintes soluções

$$\Phi_1 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_1} \left[-\langle S_1 \rangle + \langle S_1^2 \rangle + \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (\text{B.49})$$

$$\Phi_2 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_2} \left[\langle S_1 \rangle + \langle S_1^2 \rangle - \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (\text{B.50})$$

$$\Phi_3 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_3} \left[-\langle S_2 \rangle + \langle S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (\text{B.51})$$

$$\Phi_4 = \frac{\mathcal{Z}}{2A_4} \left[\langle S_2 \rangle + \langle S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2 \rangle - \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (\text{B.52})$$

$$\Phi_5 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_5} \left[-\langle S_1 S_2 \rangle + \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (\text{B.53})$$

$$\Phi_6 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_6} \left[-\langle S_1 S_2 \rangle - \langle S_1 S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (\text{B.54})$$

$$\Phi_7 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_7} \left[\langle S_1 S_2 \rangle - \langle S_1 S_2^2 \rangle - \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right], \quad (\text{B.55})$$

$$\Phi_8 = \frac{\mathcal{Z}}{4A_8} \left[\langle S_1 S_2 \rangle + \langle S_1 S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle \right]. \quad (\text{B.56})$$

com,

$$\mathcal{Z} = \frac{A_0}{[1 - \langle S_1^2 \rangle - \langle S_2^2 \rangle + \langle S_1^2 S_2^2 \rangle]} \quad (\text{B.57})$$

Substituindo as equações (B.49)-(B.57) em (B.29)-(B.38), encontramos as seguintes equações de recorrência, calculadas de maneira exata, para as magnetizações e pares de correlações locais, i.e.

$$\begin{aligned} \langle \sigma \rangle_{n+1} &= M_0 + M_1 \langle S_1 \rangle_n + M_2 \langle S_2 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_4 \langle S_1^2 \rangle_n + M_5 \langle S_2^2 \rangle_n + \\ &+ M_6 \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_7 \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + M_8 \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n, \end{aligned} \quad (\text{B.58})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_1^2 \rangle_{n+1} &= M_1 \langle S_1 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_9 \langle S_1^2 \rangle_n + M_{10} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_7 \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ &+ M_{11} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.59})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_2^2 \rangle_{n+1} &= M_2 \langle S_2 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{12} \langle S_2^2 \rangle_n + M_6 \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{13} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ &+ M_{14} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_1 \rangle_{n+1} &= M_{15} \langle S_1 \rangle_n + M_{16} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{17} \langle S_1^2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{19} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ &+ M_{20} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.61})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_2 \rangle_{n+1} &= M_{21} \langle S_2 \rangle_n + M_{22} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{23} \langle S_2^2 \rangle_n + M_{24} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ &+ M_{25} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.62})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 \rangle_{n+1} = & M_{26} + M_{27} \langle S_1 \rangle_n + M_{28} \langle S_2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{29} \langle S_1^2 \rangle_n + \\ & + M_{30} \langle S_2^2 \rangle_n + M_{31} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{20} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + M_{32} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_1 \rangle_{n+1} = & M_{33} \langle S_1 \rangle_n + M_{10} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_1 \langle S_1^2 \rangle_n + M_3 \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{11} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_7 \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.64})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma S_2 \rangle_{n+1} = & M_{34} \langle S_2 \rangle_n + M_{13} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_2 \langle S_2^2 \rangle_n + M_{14} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_3 \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_4 \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.65})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_1^1 \rangle_{n+1} = & M_{27} \langle S_1 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{15} \langle S_1^2 \rangle_n + M_{16} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{20} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{19} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.66})$$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 S_2^2 \rangle_{n+1} = & M_{28} \langle S_2 \rangle_n + M_{18} \langle S_1 S_2 \rangle_n + M_{21} \langle S_2^2 \rangle_n + M_{25} \langle S_1^2 S_2 \rangle_n + M_{22} \langle S_1 S_2^2 \rangle_n + \\ & + M_{24} \langle S_1^2 S_2^2 \rangle_n \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

com os coeficientes descritos a seguir

$$M_0 = \frac{\tilde{A}_0}{A_0}, \quad (\text{B.68})$$

$$M_1 = \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} - \frac{\tilde{A}_1}{2A_1}, \quad (\text{B.69})$$

$$M_2 = \frac{\tilde{A}_4}{2A_4} - \frac{\tilde{A}_3}{2A_3}, \quad (\text{B.70})$$

$$M_3 = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} + \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} - \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} - \frac{\tilde{A}_5}{4A_5}, \quad (\text{B.71})$$

$$M_4 = \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} + \frac{\tilde{A}_1}{2A_1} - \frac{\tilde{A}_0}{A_0}, \quad (\text{B.72})$$

$$M_5 = \frac{\tilde{A}_4}{2A_4} + \frac{\tilde{A}_3}{2A_3} - \frac{\tilde{A}_0}{A_0}, \quad (\text{B.73})$$

$$M_6 = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} - \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} + \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} - \frac{\tilde{A}_5}{4A_5} - \frac{\tilde{A}_4}{2A_4} + \frac{\tilde{A}_3}{2A_3}, \quad (\text{B.74})$$

$$M_7 = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} - \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} - \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} + \frac{\tilde{A}_5}{4A_5} - \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} + \frac{\tilde{A}_1}{2A_1}, \quad (\text{B.75})$$

$$M_8 = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} + \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} + \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} + \frac{\tilde{A}_5}{4A_5} - \frac{\tilde{A}_4}{2\tilde{A}_4} - \frac{\tilde{A}_3}{2\tilde{A}_3} - \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} - \frac{\tilde{A}_1}{2A_1} + \frac{\tilde{A}_0}{A_0}, \quad (\text{B.76})$$

$$M_9 = \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} + \frac{\tilde{A}_1}{2A_1}, \quad (\text{B.77})$$

$$M_{10} = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} - \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} + \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} - \frac{\tilde{A}_5}{4A_5}, \quad (\text{B.78})$$

$$M_{11} = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} + \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} + \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} + \frac{\tilde{A}_5}{4A_5} - \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} - \frac{\tilde{A}_1}{2A_1}, \quad (\text{B.79})$$

$$M_{12} = \frac{\tilde{A}_4}{2A_4} + \frac{\tilde{A}_3}{2A_3}, \quad (\text{B.80})$$

$$M_{13} = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} - \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} - \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} + \frac{\tilde{A}_5}{4A_5}, \quad (\text{B.81})$$

$$M_{14} = \frac{\tilde{A}_8}{4A_8} + \frac{\tilde{A}_7}{4A_7} + \frac{\tilde{A}_6}{4A_6} + \frac{\tilde{A}_5}{4A_5} - \frac{\tilde{A}_4}{2A_4} - \frac{\tilde{A}_3}{2A_3}, \quad (\text{B.82})$$

$$M_{15} = 1 - \frac{1}{2A_2} - \frac{1}{2A_1}, \quad (\text{B.83})$$

$$M_{16} = -\frac{1}{4A_8} + \frac{1}{4A_7} - \frac{1}{4A_6} + \frac{1}{4A_5}, \quad (\text{B.84})$$

$$M_{17} = -\frac{1}{2A_2} + \frac{1}{2A_1}, \quad (\text{B.85})$$

$$M_{18} = -\frac{1}{4A_8} - \frac{1}{4A_7} + \frac{1}{4A_6} + \frac{1}{4A_5}, \quad (\text{B.86})$$

$$M_{19} = -\frac{1}{4A_8} - \frac{1}{4A_7} - \frac{1}{4A_6} - \frac{1}{4A_5} + \frac{1}{2A_2} + \frac{1}{2A_1}, \quad (\text{B.87})$$

$$M_{20} = -\frac{1}{4A_8} + \frac{1}{4A_7} + \frac{1}{4A_6} - \frac{1}{4A_5} + \frac{1}{2A_2} - \frac{1}{2A_1}, \quad (\text{B.88})$$

$$M_{26} = \frac{\tilde{B}_0}{A_0}, \quad (\text{B.89})$$

$$M_{27} = -\frac{1}{2A_2} + \frac{1}{2A_1}, \quad (\text{B.90})$$

$$M_{28} = -\frac{1}{2A_4} + \frac{1}{2A_3}, \quad (\text{B.91})$$

$$M_{29} = 1 - \frac{1}{2A_2} - \frac{1}{2A_1} - \frac{\tilde{B}_0}{A_0}, \quad (\text{B.92})$$

$$M_{30} = 1 - \frac{1}{2A_4} - \frac{1}{2A_3} - \frac{\tilde{B}_0}{A_0}, \quad (\text{B.93})$$

$$M_{31} = -\frac{1}{4A_8} + \frac{1}{4A_7} - \frac{1}{4A_6} + \frac{1}{4A_5} + \frac{1}{2A_4} - \frac{1}{2A_3}, \quad (\text{B.94})$$

$$M_{32} = -1 - \frac{1}{4A_8} - \frac{1}{4A_7} - \frac{1}{4A_6} - \frac{1}{4A_5} + \frac{1}{2A_4} + \frac{1}{2A_3} + \frac{1}{2A_2} + \frac{1}{2A_1} + \frac{\tilde{B}_0}{A_0}, \quad (\text{B.95})$$

$$M_{33} = \frac{\tilde{A}_2}{2A_2} + \frac{\tilde{A}_1}{2A_1}, \quad (\text{B.96})$$

$$M_{34} = \frac{\tilde{A}_4}{2A_4} + \frac{\tilde{A}_3}{2A_3}. \quad (\text{B.97})$$

APÊNDICE C – RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA PARA AS INTERAÇÕES E CAMPOS CRISTALINOS NO REGIME DE BAIXAS TEMPERATURAS PARA O MODELO BLUME-CAPEL FERROMAGNÉTICO

Neste apêndice vamos escrever o conjunto de equações de renormalização no regime de baixas temperaturas. Partindo das equações (4.2)-(4.3)

$$J' = \frac{p}{2} \ln \left[\frac{1 + 2e^{-\Delta} \cosh(2J)}{1 + 2e^{-\Delta}} \right], \quad (\text{C.1})$$

$$\Delta' = \Delta - p \ln \left[\frac{1 + 2e^{-\Delta} \cosh(J)}{1 + 2e^{-\Delta}} \right], \quad (\text{C.2})$$

podemos escrever $2 \cosh(2J) = e^{2J} + e^{-2J}$ e $2 \cosh(J) = e^J + e^{-J}$, assim as equações (C.1) e (C.2) são reescritas da seguinte maneira

$$J' = \frac{p}{2} \ln \left[\frac{1 + e^{-(\Delta-2J)} + e^{-(\Delta+2J)}}{1 + 2e^{-\Delta}} \right] \quad (\text{C.3})$$

$$\Delta' = \ln[e^\Delta] - p \ln \left[\frac{1 + e^{-(\Delta-J)} + e^{-(\Delta+J)}}{1 + 2e^{-\Delta}} \right] \quad (\text{C.4})$$

No regime de baixas temperaturas $T \rightarrow 0$ ($J \rightarrow \infty$) as equações de renormalização são obtidas para os seguintes valores: (i) $\Delta > 2J$, (ii) $J < \Delta < 2J$, (iii) $0 < \Delta < J$ e (iv) $-2J < \Delta < 0$, (v) $-4J < \Delta < -2J$ e (vi) $\Delta < -4J$.

Assim para (i) $\Delta > 2J$, definimos

$$\begin{aligned} A &\equiv e^{-(\Delta-2J)} + e^{-(\Delta+2J)}, \\ B &\equiv 2e^{-\Delta}, \\ A_1 &\equiv e^{-(\Delta-J)} + e^{-(\Delta+J)}, \end{aligned}$$

e as equações (C.3) e (C.4) podem ser manipulada e reescritas da seguinte forma

$$\begin{aligned} J' &= \frac{p}{2} \ln \left[\frac{1+A}{1+B} \right] \\ J' &= \frac{p}{2} \ln \left[(1+A)(1+B)^{-1} \right] \\ J' &= \frac{p}{2} \ln \left[(1+A)(1-B+\dots) \right], \end{aligned} \quad (C.5)$$

e

$$\begin{aligned} \Delta' &= \ln[e^\Delta] - p \ln \left[\frac{1+A_1}{1+B} \right] \\ \Delta' &= \ln[e^\Delta] - p \ln \left[(1+A_1)(1+B)^{-1} \right] \\ \Delta' &= \ln[e^\Delta] - p \ln \left[(1+A)(1-B+\dots) \right]. \end{aligned} \quad (C.6)$$

Considerando o regime de baixas temperaturas apenas para os termos em 1° ordem em T , obtemos

$$J' \approx \frac{p}{2} \ln [1 + A - B], \quad (C.7)$$

$$\Delta' \approx \Delta - p \ln [1 + A_1 - B], \quad (C.8)$$

sendo para $|A - B| < 1$ e $|A_1 - B_1| < 1$ podemos usar a seguinte aproximação $\ln[1+x] \approx x$ para $|x| < 1$, logo

$$J' \approx \frac{p}{2}(A - B) \approx \frac{p}{2}e^{-(\Delta-2J)}, \quad (C.9)$$

$$\Delta' \approx \Delta - p(A_1 - B_1) \approx \Delta - pe^{-(\Delta-J)}. \quad (C.10)$$

Desta maneira, podemos escrever as equações de renormalização no espaço dos parâmetros ($T = 1/J, \alpha = \Delta/J$) na forma,

$$T' \approx \frac{2}{p}e^{(\alpha-2)/T}, \quad (C.11)$$

$$\alpha' = \frac{\Delta'}{J'} \approx \frac{2(\alpha/T - pe^{-(\alpha-1)/T})}{pe^{-(\alpha-2)/T}}. \quad (C.12)$$

Para os demais casos realizamos procedimento análogo ao caso (i). Deste modo, para o caso (ii) $J < \Delta < 2J$, nota-se que na equação (C.3) o termo dominante da fração é $e^{-(\Delta-2J)}$, enquanto que para Δ' , a equação é a mesma para o caso (i). Considerando apenas o termo que decai mais lentamente, ficamos com

$$J' \approx \frac{p}{2} \left[-(\Delta - 2J) + e^{(\Delta-2J)} \right], \quad (C.13)$$

$$\Delta' \approx \Delta - pe^{-(\Delta-J)}, \quad (C.14)$$

que podem ser reescritas em função dos parâmetros ($T = 1/J, \alpha = \Delta/J$), na forma

$$T' \approx \frac{2T}{p[-(\alpha - 2) + Te^{(\alpha-2)/T}]}, \quad (C.15)$$

$$\alpha' = \frac{\Delta'}{J'} \approx \frac{2(\alpha - pTe^{-(\alpha-1)/T})}{p[2 - \alpha + Te^{(\alpha-2)/T}]}. \quad (C.16)$$

Para (iii), $0 < \Delta < J$, a equação para J' será a mesma que no caso (ii). Enquanto que para Δ' o termo dominante é $e^{-(\Delta-J)}$. Assim,

$$J' \approx -(\Delta - 2J) + e^{(\Delta-2J)}, \quad (C.17)$$

$$\Delta' \approx [(1 + p)\Delta - pJ] + pe^{-\Delta}, \quad (C.18)$$

e as equações de renormalização para os parâmetros ($T = 1/J, \alpha = \Delta/J$) neste caso, ficam

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - \alpha + Te^{(\alpha-2)/T}]}, \quad (C.19)$$

$$\alpha' \approx \frac{2[(1 + p)\alpha - p + pTe^{-\alpha/T}]}{p[2 - \alpha + Te^{(\alpha-2)/T}]}. \quad (C.20)$$

Para (iv), $-2J < \Delta < 0$. Para J' , os termos dominantes na equação são $e^{(2J-\Delta)}$ e $2e^{-\Delta}$. Enquanto que para equação de Δ' , os termos dominantes são $2e^{-\Delta}$ e $e^{-(\Delta-J)}$, logo

$$J' \approx \frac{p}{2} \left[2J - \ln 2 - \frac{e^\Delta}{2} \right], \quad (C.21)$$

$$\Delta' \approx \Delta - p[J - \ln 2 - e^{(\Delta)}/2]. \quad (C.22)$$

ou simplesmente,

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]}, \quad (C.23)$$

$$\alpha' \approx \frac{2[\alpha - p + pT \ln 2 + pTe^{\alpha/T}/2]}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]}. \quad (C.24)$$

Para (v), $-4J < \Delta < -2J$ a equação de J' será a mesma (iv), enquanto que para Δ' a equação é diferente

$$J' \approx \frac{p}{2} \left[2J - \ln 2 - \frac{e^\Delta}{2} \right], \quad (C.25)$$

$$\Delta' \approx \Delta - p[J - \ln 2 + e^{-2J}]. \quad (C.26)$$

e

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]}, \quad (C.27)$$

$$\alpha' \approx \frac{2[\alpha - p + pT \ln 2 - pTe^{-2/T}]}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]}. \quad (C.28)$$

Para (vi), $\Delta < -4J$ a equação de Δ' será a mesma de (v), enquanto que para J' a equação é diferente

$$J' \approx \frac{p}{2}[2J - \ln 2 + e^{-4J}] , \quad (\text{C.29})$$

$$\Delta' \approx \Delta - p[J - \ln 2 + e^{-2J}] . \quad (\text{C.30})$$

e

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - T \ln 2 + Te^{-4/T}]}, \quad (\text{C.31})$$

$$\alpha' \approx \frac{2[\alpha - p + pT \ln 2 - pTe^{-2/T}]}{p[2 - T \ln 2 + Te^{-4/T}]} . \quad (\text{C.32})$$

Em resumo, no regime de baixas temperaturas as equações no espaço de parâmetros ($T = 1/J, \alpha = \Delta/J$) são fornecidas por

(i) $\alpha > 2$:

$$T' \approx \frac{2}{p}e^{(\alpha-2)/T} , \quad (\text{C.33})$$

$$\alpha' = \frac{\Delta'}{J'} \approx \frac{2(\alpha/T - pe^{-(\alpha-1)/T})}{pe^{-(\alpha-2)/T}} . \quad (\text{C.34})$$

(ii) $1 < \alpha < 2$:

$$T' \approx \frac{2T}{p[-(\alpha-2) + Te^{(\alpha-2)/T}]} , \quad (\text{C.35})$$

$$\alpha' = \frac{\Delta'}{J'} \approx \frac{2(\alpha - pTe^{-(\alpha-1)/T})}{p[2 - \alpha + Te^{(\alpha-2)/T}]} . \quad (\text{C.36})$$

(iii) $0 < \alpha < 1$:

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - \alpha + Te^{(\alpha-2)/T}]} , \quad (\text{C.37})$$

$$\alpha' \approx \frac{2[(1+p)\alpha - p + pTe^{-\alpha/T}]}{p[2 - \alpha + Te^{(\alpha-2)/T}]} . \quad (\text{C.38})$$

(iv) $-2 < \alpha < 0$:

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]} , \quad (\text{C.39})$$

$$\alpha' \approx \frac{2[\alpha - p + pT \ln 2 + pTe^{\alpha/T}/2]}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]} . \quad (\text{C.40})$$

(v) $-4 < \alpha < -2$:

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]} , \quad (\text{C.41})$$

$$\alpha' \approx \frac{2[\alpha - p + pT \ln 2 - pTe^{-2/T}]}{p[2 - T \ln 2 - Te^{\alpha/T}/2]} . \quad (\text{C.42})$$

(vi) $\alpha < -4$:

$$T' \approx \frac{2T}{p[2 - T \ln 2 + Te^{-4/T}]}, \quad (\text{C.43})$$

$$\alpha' \approx \frac{2[\alpha - p + pT \ln 2 - pTe^{-2/T}]}{p[2 - T \ln 2 + Te^{-4/T}]}. \quad (\text{C.44})$$