



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

TESE DE DOUTORADO

ESTUDOS DO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS BROWNIANAS
INTERAGENTES E DE TRANSIÇÕES DE FASES EM MODELOS DE
SPIN QUÂNTICOS

por

Rogério Mendes da Silva

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Sérgio Galvão Coutinho (Orientador-UFPE)
Prof. Clécio Clemente de Souza Silva (Co-orientador - DF - UFPE)
Prof. Giovani Lopes Vasconcelos (DF-UFPE)
Prof. Mauro Copelli Lopes da Silva (DF-UFPE)
Prof.^a Célia Beatriz A. de Porto (DF-PUC/RJ)
Prof. Múcio Amado Continentino (IF-UFF)

Recife - PE, Brasil
Dezembro - 2008

Silva, Rogério Mendes da

Estudos do transporte de partículas brownianas interagentes e de transições de fases em modelos de spin quânticos / Rogério Mendes da Silva. – Recife : O Autor, 2008.

xix, 126 folhas, il : fig., tab.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Física, 2008.

Inclui bibliografia.

1. Mecânica estatística .2. Catracas brownianas. 3. Modelos de spin quânticos. 4. Método Monte Carlo em tempo contínuo. 5. Grupo de renormalização no espaço real. I. Título.

530.13

CDD (22.ed.)

FQ 2009-004



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física – CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (++ 55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (++ 55 81) 3271-0359
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

Rogério Mendes da Silva

ESTUDOS DO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS BROWNIANAS INTERAGENTES E DE TRANSIÇÕES DE FASES EM MODELOS DE SPIN QUÂNTICOS

A Banca Examinadora composta pelos Professores Sérgio Galvão Coutinho (Presidente e Orientador), Clécio Clemente de Souza Silva (Co-orientador), Giovani Lopes Vasconcelos, Mauro Copelli Lopes da Silva, todos da Universidade Federal de Pernambuco, Célia Beatriz A. de Porto, do Departamento de Física da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro e Múcio Amado Continentino, do Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense, consideram o candidato:

☒ Aprovado

☐ Reprovado

☐ Em exigência

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos dezesesseis dias do mês de dezembro de 2008.

Prof. Sérgio Galvão Coutinho
Presidente e Orientador

Prof. Clécio Clemente de Souza Silva
Co-orientador

Prof. Giovani Lopes Vasconcelos

Prof. Mauro Copelli Lopes da Silva

Prof. Célia Beatriz A. de Porto

Prof. Múcio Amado Continentino

Agradecimentos

Agradeço aos professores Sérgio Coutinho e Clécio de Souza Silva pela orientação e co-orientação, respectivamente.

Agradeço aos meus amigos do Laboratório de Física Teórica e Computacional-DF-UFPE pela ajuda e companheirismo durante todos estes anos de curso.

Agradeço ao professor José Ricardo de Sousa, da Universidade Federal do Amazonas, pela colaboração que resultou em um dos capítulos desta tese.

Agradeço aos meus pais, Paulo e Ana Maria, e a minha irmã, Rosana, pelo apoio as minhas iniciativas.

Agradeço aos professores do Departamento de Física da Universidade Federal do Piauí que também me incentivaram muito.

Agradeço aos órgãos de fomento CNPq, CAPES e FACEPE.

Resumo

Nesta Tese, são investigados dois temas de interesse atual, o transporte de partículas brownianas interagentes e as transições de fase em sistemas magnéticos quânticos. No primeiro, o transporte de partículas brownianas interagentes sujeitas a um potencial de substrato do tipo catraca foi investigado numericamente através da dinâmica de Langevin. Medidas da corrente de partículas, excitadas por uma força externa senoidal, foram analisadas como função da amplitude (A) e frequência (ω) da força externa, do número de ocupação dos poços de potencial (n) e do ruído térmico (T). Em temperatura nula no regime adiabático, múltiplas inversões de corrente ocorrem em função de n , devido ao movimento das partículas que ficam menos presas em um potencial efetivo, o qual não preserva a simetria do potencial original devido à influência de uma certa fração de partículas efetivamente presas ao potencial. Observa-se, também, que o aumento da amplitude promove a deslocalização gradual das partículas presas, alterando a simetria do potencial efetivo, induzindo $n - 1$ oscilações (inversões) da corrente de partículas para um valor de $n > 1$. No regime de altas temperaturas, inversões de corrente são observadas pela ativação térmica das partículas efetivamente presas ao potencial, restabelecendo a sua simetria original e o movimento na sua direção mais suave. No regime de frequências moderadas, a corrente de partículas apresenta um comportamento discretizado em função da amplitude externa, sendo os intervalos ou degraus de corrente dependentes da densidade de partículas. Por fim, o efeito conjunto de altas temperaturas e altas frequências induz o movimento na direção mais íngreme do potencial, invertendo novamente o sentido da corrente de partículas. No segundo tema, foi investigada a criticalidade da cadeia quântica de spins Ising submetida a campo transversal com interações competitivas diluídas entre segundos vizinhos, em $T = 0$. O parâmetro $\kappa = -J_2/J_1$ mede a razão entre os acoplamentos ferromagnéticos entre primeiros vizinhos (J_1) e os antiferromagnéticos entre segundos vizinhos (J_2), e o parâmetro ε mede a diluição (desordem) entre acoplamentos entre segundos vizinhos. O caso $\varepsilon = 0$ cor-

responde ao modelo Ising puro em campo transverso e o caso $\varepsilon = 1$ corresponde ao modelo ANNNI (*Axial Next Nearest Neighbor Ising Model*) em campo transverso. Ambos possuem a mesma classe de universalidade do modelo Ising clássico bidimensional. Foi investigado através da técnica de Monte Carlo quântico, o efeito da desordem sobre a criticalidade deste sistema. A técnica empregada consiste na combinação de um algoritmo de *cluster* em tempo imaginário contínuo adaptado para tratar interações competitivas que emprega o formalismo de Suzuki-Trotter que mapeia o sistema quântico d dimensional em um sistema clássico correspondente em $d + 1$ dimensões, com interações anisotrópicas e com a desordem “congelada” em uma das direções. Foram calculados os expoentes dinâmicos z e o expoente do comprimento de correlação ν no regime de competições fracas $\kappa = 0.1$ em função de ε , utilizando-se o comportamento de escala de tamanho finito anisotrópico apropriado para este sistema. Os resultados obtidos indicam uma mudança da criticalidade quântica do sistema induzida pela desordem entre os acoplamentos, revelando que esta é relevante para este sistema. Outro modelo magnético quântico estudado foi o modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $1/2$, definido na rede hierárquica do tipo diamante com p conexões. Neste caso, foi usada a técnica do grupo de renormalização no espaço real, com fator de escala $b = 2$, dentro da aproximação de Migdal-Kadanoff para sistemas quânticos. Uma relação de recorrência para a magnetização local foi obtida relacionando os valores dos spins internos à rede na geração n com os valores dos spins externos na geração $n - 1$. Os expoentes críticos β foram calculados nos pontos fixos instáveis do tipo Ising e Heisenberg em função da dimensão fractal da rede.

Palavras-chave: Catracas brownianas, dinâmica de Langevin, transições de fases quânticas, modelos de spin quânticos, método Monte Carlo em tempo contínuo, grupo de renormalização no espaço real.

Abstract

In this Thesis two problems of current interest are studied, the transport of interacting Brownian particles and the phase transitions and critical properties of quantum magnetic systems.

First, the transport of chains of interacting Brownian particles submitted to a 2D-periodic ratchet potential is numerically investigated by means of Langevin dynamics. The particles are excited by an external sinusoidal force and the system behaves as a reversible step motor, undergoing multiple sign reversals of the particle current. The resulting current was analyzed as a function of its amplitude (A) and frequency (ω), and as a function of the particle density (n) relative to the potential wells and thermal noise. In the low-temperature adiabatic regime, multiple $(n - 1)$ current inversions occurs as the oscillating drive amplitude is increased. A systematic study of the time-averaged particle density and cumulative mass, calculated at different drive intensities, suggests that such inversions result from the competition between different dynamical states of the chain where a certain fraction of the particles are effectively trapped by the substrate while the others float over the effective potential generated by the substrate and the localized particles. The number of localized particles determines the symmetry of the effective ratchet potential and, consequently, the preferential drift direction. In the non-zero thermal noise regime, the oscillating behavior of the amplitude-dependent mean current observed at small temperatures gives place to a positive-drift phase in the whole amplitude range at a high enough temperature. In the cases where the drift is negative at $T = 0$, the current direction becomes positive at a certain temperature-dependent critical amplitude $A_c(T)$, which decreases linearly. Such a behavior suggests these noise-induced inversions can be associated with thermal activation of localized particles over the substrate barriers. Finally, the high-frequency regime has been addressed for both weak and strong noise. For weak noise, the steps and spikes reminiscent from the well-known lock-in effect have been observed. But here the size of the steps can be fine-tuned by changing the particle density. In the strong noise case, the

interplay between thermal fluctuations and the fast oscillations of the driving force leads to the complete inversion towards the negative drift direction in the whole amplitude range.

The second study deals with the phase transitions and critical properties of two quantum spin models: the diluted anisotropic next-nearest-neighbor Ising (ANNNI) chain submitted to a transverse magnetic field and the $S = \frac{1}{2}$ anisotropic Heisenberg model defined on hierarchical lattices. The diluted ANNNI model was investigated by means of a quantum Monte Carlo numerical simulation method combining a cluster-algorithm in continuous imaginary time with the Suzuki-Trotter formalism, which maps the d -dimensional quantum system onto the corresponding $(d + 1)$ classical system, the latter with anisotropic interactions and frozen disorder in one direction. The dynamical critical exponent (z) and that associated with the correlation length (ν) were calculated in the regime of weak competition as a function of the concentration of second-nearest-neighbor competing interactions using an appropriate finite-size scaling analysis for anisotropic systems. The results indicates a breaking of universality class induced by the (relevant) disorder with respect to both the pure quantum Ising model under transverse field and the quantum ANNNI model, which in their turns belong to same universality class. The quantum anisotropic Heisenberg model was investigated in the framework of the real-space Migdal-Kadanoff renormalization group adapted to quantum systems. The critical temperatures and the exponents associated with the correlation length and magnetization were obtained for fractal dimensions ranging from $d = 2$ to $d = 4$ for both unstable fixed points describing the Ising and the Heisenberg transitions.

Keywords: Brownian ratchets, Langevin dynamics, quantum phase transitions, quantum spin models, continuous time Monte Carlo simulations, real space renormalization group.

Sumário

1	Introdução	1
2	Propriedades de Transporte de Motores Brownianos Interagentes	4
2.1	Movimento browniano e efeito catraca	4
2.2	Motores brownianos	7
2.3	Partículas brownianas interagentes em um potencial periódico assimétrico	15
2.3.1	Sistema e simulações	15
2.3.2	Regime adiabático determinístico	20
2.3.3	Inversões de corrente induzidas por ruído térmico	25
2.3.4	Regime de altas frequências	27
2.3.5	Dinâmica sobremortecida e subamortecida	30
2.4	Conclusões	33
3	Monte Carlo em tempo contínuo aplicado ao modelo ANNNI diluído	35
3.1	Transições de fases quânticas	35
3.1.1	Transições em $T = 0$	35
3.1.2	Efeitos da temperatura	38
3.1.3	Integrais de trajetória e mecânica estatística quântica	40
3.2	O modelo de Ising em campo transversal	43
3.2.1	Mapeamento de Suzuki-Trotter e algoritmo Monte Carlo em tempo discreto	45
3.2.2	Método Monte Carlo em tempo contínuo	47
3.2.2.1	Algoritmo de laço em tempo contínuo	47
3.2.2.2	Algoritmo de Swendsen-Wang em tempo contínuo	49

3.3	Sistemas desordenados e o critério de Harris	54
3.4	Modelos ANNNI clássico e quântico	55
3.5	Algoritmo de Wolff aplicado ao modelo ANNNI	59
3.6	Algoritmo em tempo contínuo aplicado ao modelo ANNNI quântico	62
3.7	Escala de tamanho finito para sistemas anisotrópicos	63
3.8	Expoentes e diagrama de fases no regime de competições fracas	68
3.8.1	Cálculo do expoente dinâmico e do campo crítico	68
3.8.2	Diagrama de fases para competições fracas	76
3.9	Modelo ANNNI quântico $1d$ com interações entre segundos vizinhos diluídas	77
3.10	Conclusões	88
4	O modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $\frac{1}{2}$ na rede diamante	89
4.1	O modelo de Heisenberg	89
4.2	Grupo de renormalização no espaço real - GRER	92
4.2.1	Definições	92
4.2.2	Universalidade, crossover e o expoente do comprimento de correlação ν	95
4.2.3	A aproximação de Migdal-Kadanoff para a rede hipercúbica	97
4.2.3.1	Caso exato: Rede diamante	98
4.3	GRER para sistemas quânticos	101
4.3.1	Aproximação por blocos	101
4.3.2	Equação de renormalização para o modelo de Heisenberg anisotrópico na aproximação de Migdal-Kadanoff	102
4.4	Relação de recorrência para a magnetização local	107
4.5	Relação de recorrência para a correlação spin-spin	111
4.6	Relação de recorrência para a magnetização total e expoente crítico β	112
4.7	Conclusões	115
	Trabalhos decorrentes desta Tese	116

Lista de Figuras

- 2.1 Catracas de Feynman. Figura superior: O mecanismo está sujeito ao bombardeio de um gás em equilíbrio e na média não apresenta movimento de rotação pela segunda lei da termodinâmica. Figura inferior: A catraca e as pás do mecanismo estão sujeitas a banhos térmicos distintos, permitindo desta forma um movimento de rotação. (Figura extraída da referência [1].) 5
- 2.2 Conjunto de partículas brownianas sujeitas a um potencial do tipo dente de serra e a variações cíclicas da temperatura. (a) A energia térmica é menor que a barreira de energia do potencial de substrato, não permitindo a difusão das mesmas. (b) a energia térmica é maior que a barreira de energia do potencial de substrato, permitindo que as partículas se dispersem. (c) Novamente a energia térmica é bem maior que a barreira de energia do potencial prendendo as partículas próximo aos mínimos dos potenciais e permitindo na média um movimento direcional.(Figura extraída da referência [2]) 7
- 2.3 Comportamento da corrente de partículas em função do coeficiente de viscosidade η , obtidos numericamente para um sistema com potencial dado por (2.8) e uma modulação de temperatura dada por (2.9). Figura extraída da referência [3]. 11
- 2.4 Comportamento da corrente de partículas dos *rocking ratchets*, extraído da referência [4]. Parte à esquerda: regime adiabático (linha tracejada) e em uma frequência moderada (linha cheia). Parte à direita: inversão de corrente induzida por altas frequências e altas temperaturas. 12
- 2.5 Potencial catraca (2.11) utilizado nas simulações, para valores de $\beta = 0,25, 0,5, 1,0$ e $1,5$. Estas curvas foram deslocadas verticalmente para uma melhor visualização. 16

- 2.6 Diagrama de fases que mede a assimetria do potencial α em função dos parâmetros β e U_{s0} para $n = 1, 2, 3$ e 4 . Para $\beta > 0,5$ e $U_{s0} < 1,0$ aproximadamente, a direção da corrente é positiva para n ímpar e negativa para n par. 18
- 2.7 Tendência de movimento das partículas menos presas (círculos vermelhos) ao potencial para baixas amplitudes no regime adiabático. O potencial efetivo é uma combinação entre o potencial de substrato e as partículas mais presas ao potencial (círculos azuis). 19
- 2.8 Corrente de partículas em função da amplitude da força oscilante externa para os seguintes parâmetros $\beta = 1,5$ e $U_{s0} = 0,74$. As linhas cheias representam a corrente para $T = 0$ e o conjunto de linhas com símbolos representam a corrente para $T = 0,625$ no regime de altas temperaturas. Para o caso $T = 0$ existe $n - 1$ oscilações (inversões) para $n > 1$. Para $T = 0,625$ a corrente de partículas é sempre positiva. 21
- 2.9 Medida da corrente de partículas ($J(F) = J_+(F) + J_-(F)$), para o caso $n = 3$, a partir da corrente induzida por forças constantes para a direita ($J_+(F)$) e para a esquerda ($J_-(F)$). As setas indicam os valores de força investigados na figura 2.10. 22
- 2.10 Densidade de partículas calculadas para forças de magnitude $F = 9, 17, 5$ e 22 na direção positiva do potencial para o caso $n = 3$. Estes valores de força correspondem a pontos na parte oscilante do gráfico da figura 2.9. (a) Os picos duplos para $F = 9$ indicam que em média tem-se $2N/3$ presas aos mínimos de potencial enquanto $N/3$ partículas, em média, estão livres para o movimento. Isto é comprovado pelo curva da massa acumulada (linha cheia) no painel (b) onde esta integração apresenta saltos de aproximadamente um na região dos mínimos. Para $F = 3$ existe em média $N/3$ partículas presas aos mínimos e para $F = 22$ todas as partículas estão deslocalizadas. 23

- 2.11 Máximos da densidade de partículas em função da magnitude das forças para a direita (painel superior) e para a esquerda (painel inferior), para o caso $n = 3$. $\rho(x_1)$ corresponde aos máximos próximos ao mínimo global e $\rho(x_2)$ corresponde aos máximos próximos ao outro mínimo do potencial (ver cores de fundo da figura 2.10) 24
- 2.12 (a) Diagrama de fases $A - U_{s0}$ para o sentido da corrente de partículas para $n = 2$, $\beta = 1,0$, $\omega = 0,01$ e $T = 0$. (b) Diagrama de fases que mostra o efeito do aumento da temperatura na região retangular destacada na parte (a). A superfície mostra os pontos de inversão de corrente, que separam as regiões de baixas temperaturas (corrente negativa) das regiões de altas temperaturas (corrente positiva). (c) Comportamento linear da amplitude crítica, extraída da superfície de inversão mostrada em (b), como função da temperatura para vários valores de U_{s0} . 26
- 2.13 Corrente de partículas em função da amplitude da força externa para uma frequência moderada $\omega = 0,2$. Os degraus de corrente são discretizados sendo o valor destes intervalos dependente de n . 27
- 2.14 Corrente de partículas em função da amplitude da força externa para $n = 2$, $\beta = 1,0$, $U_{s0} = 0,74$.(a) Para frequências moderadas ($\omega = 0,2$, linha cheia) em $T = 0$, a corrente apresenta um comportamento discretizado. Para uma alta temperatura ($T = 0,625$, linha com símbolos) a corrente é totalmente positiva. (b) Para uma alta frequência ($\omega = 7$) a corrente de partículas é nula (linha cheia) em $T = 0$. Ao se combinar altas frequências e altas temperaturas $T = 0,625$, uma corrente de partículas é induzida no sentido mais íngreme do potencial (linha com símbolos.) 28
- 2.15 Inversões de corrente induzidas por ruído térmico,(a) No regime adiabático $\omega = 0,01$, para $A = 10$, $\beta = 1,0$ e $U_{s0} = 0,74$ onde a corrente originalmente negativa se torna positiva e (b) Em conjunto com altas frequências, que inverte novamente o sentido da corrente. O ponto em vermelho no painel (a) é o ponto de partida para as simulações no painel (b). 29

- 2.16 Corrente de partículas como função da amplitude A para $n = 2$ (a), $n = 3$ (b) e $n = 4$ (c), calculados para os valores de massa 0, 0,33, 0,5, 1,0, 2,0 e 5,0 . 31
- 2.17 Série temporal da velocidade do centro de massa para o caso $n = 4$, $m = 5$, $\gamma = 16$ e $A = 14,5$ (ver figura 2.16). As irregularidades na parte superior da série, sem uma sequência bem definida, indicam uma dinâmica caótica. 32
- 3.1 (a) Diagrama de fases T vs. Δ de um sistema quântico $d > 1$ dimensional exibindo uma transição clássica em $\Delta = 0$ e em $T = T_c$. A linha cheia $T_c(\Delta)$ separa uma fase ordenada quântica I de uma fase desordenada térmica. Próximo à esta linha as flutuações clássicas dominam de modo que a criticalidade é a mesma de um sistema clássico d dimensional. Entre as regiões II e III existe um “crossover” entre uma fase desordenada quântica e uma fase crítica quântica sob influência de flutuações térmicas ($\Delta \sim \Delta_c$). As transições que ocorrem em $T = 0$ possuem caráter $d + 1$ dimensional. (b) Diagrama de fases apropriado para sistemas quânticos unidimensionais. A fase ordenada quântica dá lugar a uma fase desordenada clássica renormalizada e as transições estão confinadas à linha $T = 0$. 40
- 3.2 Sistema quântico em $T \neq 0$ representado como um sistema clássico em $d + 1$ dimensões sendo a dimensão espacial infinita e dimensão temporal finita com comprimento β . (a) O tempo de correlação é menor que a espessura β implicando na predominância das flutuações quânticas. (b) O tempo de correlação é da mesma ordem de β indicando um “crossover”. (c) O tempo de correlação excede o comprimento β e a criticalidade é a de um sistema d dimensional clássico. 42
- 3.3 Rede discreta de spins que pode ser obtida de um sistema quântico unidimensional através do mapeamento de Suzuki-Trotter. O eixo vertical indica a direção de Trotter ou temporal. Os acoplamentos nas direções temporal e espacial são altamente anisotrópicos tendendo a zero na direção espacial e a infinito na direção temporal para $\delta\tau \rightarrow 0$. 48

- 3.4 Passos de uma atualização do algoritmo de Swendsen-Wang na rede discreta de spins. (a) Estado inicial de spins de Ising com estados +1 (+) e -1 (-). (b) As ligações entre spins do mesmo estado são construídas segundo a probabilidade dada pela equação (3.24), dividindo a rede em *clusters* ou aglomerados. (c) Cada um dos aglomerados é invertido com probabilidade $\frac{1}{2}$. 51
- 3.5 Representação de uma rede de spins em tempo contínuo. As linhas mais espessas indicam segmentos de spins na direção "+" e as outras linhas indicam segmentos de spins na direção "-". O ponto onde os segmentos na direção temporal mudam de estado são chamados de *corte*. Pelas propriedades da função de partição, note que estas linhas de spins exibem condições de contorno periódicas na direção temporal. 52
- 3.6 Passos de uma atualização do algoritmo de Swendsen-Wang em tempo contínuo introduzido por Rieger e Kawashima [5]. (a) Configuração inicial com os traços horizontais indicando os pontos de corte dos segmentos na direção temporal e os novos cortes introduzidos segundo o processo de Poisson com taxa de decaimento h^{-1} . (b) Formação de aglomerados de segmentos segundo a interseção de segmentos vizinhos espacialmente, segundo a probabilidade de não se conectar segmentos dada por (3.29). (c) Inversão dos aglomerados com probabilidade $\frac{1}{2}$. (d) Retirada dos cortes redundantes preparando a configuração para os cálculos das grandezas de interesse e/ou para um novo ciclo Monte Carlo. 53
- 3.7 Representações esquemáticas do modelo ANNNI. (a) Sistema unidimensional com os acoplamentos ferromagnéticos entre primeiros vizinhos J_1 e acoplamentos antiferromagnéticos entre segundos vizinhos J_2 . (b) Representação do sistema bidimensional com as interações competitivas entre camadas e interações ferromagnéticas J_0 dentro das camadas. 57

- 3.8 Passos para uma atualização segundo o algoritmo de Wolff em uma rede discreta. (a) Um sítio semente é escolhido aleatoriamente na rede de spins. (b) Um aglomerado de spins de mesmo sinal é construído segundo a probabilidade de se adicionar spins vizinhos de mesmo sinal (3.24). (c) O aglomerado resultante é invertido. 60
- 3.9 Comparação entre os aglomerados formados segundo o algoritmo de Wolff e o algoritmo proposto por Henkel e Pleimling [6] para sistemas com interações competitivas. (a) Aglomerado segundo o algoritmo de Wolff com elementos de spins de mesmo sinal. (b) Aglomerado segundo o algoritmo adaptado a interações competitivas onde agora foi levado em conta a probabilidade (3.40) de se adicionar ao aglomerado spins segundos vizinhos de sinais opostos. 62
- 3.10 Passos de uma atualização do algoritmo adaptado a interações competitivas em tempo contínuo. (a) Configuração inicial onde os traços horizontais indicam os pontos de corte dos segmentos de spins ou novos cortes introduzidos segundo o processo de Poisson com taxa de decaimento igual a h^{-1} . (b) Escolha aleatória de um ponto da rede de spins. (c) A partir do seguimento que engloba este ponto é construído um aglomerado de segmentos de ambos os sinais segundo as probabilidades de não se conectar segmentos dadas pelas equações (3.42) e (3.43). (d) Inversão deste aglomerado de segmentos. O próximo passo, não mostrado na figura, seria a remoção dos cortes redundantes. 64
- 3.11 Comportamento do cumulante de Binder g em função do comprimento do sistema finito na direção temporal L_τ para campos magnéticos fixos e valores de L iguais a 10, 15, 20 e 25, para o caso Ising em campo transversal unidimensional. (a) Para $h = 1,05$ o valor do máximo de g diminui com o valor de L indicando a fase paramagnética. (b) Para $h = 0,95$ o valor do máximo de g aumenta com o valor de L indicando a fase ferromagnética. (c) O valor do máximo de g independe de L indicando o valor de $h = 1$ como o ponto crítico. 70

- 3.12 (a) Colapso das curvas mostradas na figura 3.11 (c) onde é fixada a razão $\frac{L_\tau}{L^z}$, onde são utilizados os valores L_τ onde ocorrem os máximos de g . (b) Ajuste linear dos logaritmos de L_τ referentes aos máximos de g em função dos logaritmos dos comprimentos L , que fornece o valor de $z = 1$ 71
- 3.13 Comportamento de g em função do campo magnético após ser fixada a razão $\frac{L_\tau}{L^z}$ para os valores de $L = 10, 15, 20$ e 25 . (a) O ponto de interseção das curvas $h = 1,0 \pm 0,015$ indica o valor do ponto crítico para o caso Ising em campo transversal unidimensional. (b) Colapso das curvas mostradas em (a) resultando em um valor de $\nu = 1$. 72
- 3.14 Comportamento do cumulante de Binder g em função do comprimento do sistema finito na direção temporal L_τ para campos magnéticos fixos e valores de L iguais a 10, 15, 20 e 25, para o caso ANNNI em campo transversal unidimensional com $\kappa = 0, 1$. (a) Para $h = 0,84$ o valor do máximo de g diminui com o valor de L indicando a fase paramagnética. (b) Para $h = 0,81$ o valor do máximo de g aumenta com o valor de L indicando a fase ferromagnética. (c) O valor do máximo de g independe de L indicando o valor de $h \approx 0,825$ como o ponto crítico. 73
- 3.15 (a) Colapso das curvas mostradas na figura 3.14 (c) onde é fixada a razão $\frac{L_\tau}{L^z}$, onde são utilizados os valores L_τ onde ocorrem os máximos de g . (b) Ajuste linear dos logaritmos de L_τ referentes aos máximos de g em função dos logaritmos dos comprimentos L , que como no caso Ising em campo transversal fornece o valor de $z = 1$ 74
- 3.16 Comportamento de g em função do campo magnético após ser fixada a razão $\frac{L_\tau}{L^z}$ para os valores de $L = 10, 15, 20$ e 25 para o caso ANNNI em campo transversal com $\kappa = 0, 1$. (a) O ponto de interseção das curvas $h = 0,82 \pm 0,015$ indica o valor do ponto crítico para este caso. (b) Colapso das curvas mostradas em (a) resultando em um valor de $\nu = 1$. 75
- 3.17 Diagrama de fases do modelo ANNNI em campo transversal para $\kappa < 0,5$, obtido através do algoritmo em tempo contínuo aplicado a este modelo. 76

- 3.18 Representação esquemática do modelo de Ising em campo transversal com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos J_1 (linha cheia preta) e interações diluídas antiferromagnéticas entre segundos vizinhos J_2 (linha cheia cinza). 78
- 3.19 Cumulante de Binder em função de $L\tau$ para $\varepsilon = 0, 1, 0, 3, 0, 5, 0, 7$ e $0, 9$, em seus respectivos campos críticos h_c , onde os máximos das curvas não dependem de L . 81
- 3.20 Colapso das curvas mostradas na figura 3.19, a partir dos máximos de g em função de $L\tau$. 82
- 3.21 Cálculo do expoente dinâmico z a partir dos máximos de g em função de $L\tau$. Os valores de h_c correspondentes são: $0,835$ (a), $0,875$ (b), $0,835$ (c), $0,91$ (d), $0,835$ (e), para $\varepsilon = 0, 1, 0, 3, 0, 5, 0, 7$ e $0, 9$ respectivamente. 83
- 3.22 Expoentes dinâmicos em função do parâmetro de diluição ε . Os valores de $z \neq 1$ indicam uma mudança da classe de universalidade com relação aos sistemas Ising e ANNNI puros em campo transversal. 84
- 3.23 Cumulante de Binder em função do campo magnético para $\varepsilon = 0, 1, 0, 3, 0, 5, 0, 7$ e $0, 9$. Os pontos de interseção indicam os campos críticos para cada valor de ε . 85
- 3.24 Colapso das curvas mostradas em 3.23. $\nu \approx 1$ para todos os valores de ε investigados. 86
- 3.25 Diagrama de fases h vs ε para $\kappa = 0, 1$. 87
- 4.1 Exemplo esquemático de uma transformação de renormalização em uma rede quadrada onde os acoplamentos iniciais K são transformados em acoplamentos K' preservando a geometria da rede. 93
- 4.2 Passos da aproximação de Migdal-Kadanoff na rede quadrada. (a) Rede com parte dos acoplamentos na direção y deslocados para formar acoplamentos alternados do tipo $2K_y$. (b) Dizimação unidimensional dos spins na direção x . (c) Deslocamento dos acoplamentos resultantes na direção x . (d) Dizimação unidimensional dos spins na direção y . 99

4.3	Processo de composição da célula básica de uma rede tipo diamante com p conexões a partir de um acoplamento inicial. Ao se continuar o processo para cada acoplamento desta célula básica por um número n de vezes tem-se como resultado uma rede fractal hierárquica do tipo diamante.	100
4.4	Processo de dizimação do bloco básico de renormalização (com fator de escala $b = 2$) segundo a aproximação por blocos utilizada neste capítulo.	103
4.5	Linhas de fluxo para o caso $d = 3$ obtidas por meio da equação (4.40).	104
4.6	Linhas críticas do modelo de Heisenberg anisotrópico segundo a aproximação de Migdal-Kadanoff para a rede diamante com $d = 2$ e $d = 3$. Note que para $d = 2$ esta aproximação está coerente com o teorema de Mermin-Wagner pois esta não apresenta temperatura de transição diferente de zero.	105
4.7	Temperaturas críticas para os pontos fixos do tipo Heisenberg e Ising em algumas dimensões segundo a aproximação de Migdal-Kadanoff.	106
4.8	Porção da rede do tipo diamante sujeita a acoplamentos efetivos que simulam os efeitos do resto da rede neste conjunto de spins.	109
4.9	Expoentes críticos ν e β para algumas dimensões fractais, para os casos Ising e Heisenberg. O expoente β foi calculado segundo a expressão (4.72).	114

Lista de Tabelas

- 3.1 Tabela que compara os valores do campo crítico do modelo ANNNI obtidos pelo método Monte Carlo para $\kappa < 0,5$ com resultados recentes reportados na literatura. Os resultados MC foram obtidos assumindo a priori $z = 1$ e fixando-se a razão $\frac{L_\tau}{L}$ não tão rigorosamente como na seção 3.8.1. 77
- 4.1 Valores de alguns expoentes críticos para o modelo de Heisenberg clássico ($S \rightarrow \infty$) $3d$, bem como seus respectivos valores para o caso Ising calculados segundo a referência [7]. 91
- 4.2 Acoplamentos críticos e expoentes ν para os pontos fixos do tipo Heisenberg e Ising em algumas dimensões segundo a aproximação de Migdal-Kadanoff 108
- 4.3 Valores dos expoentes críticos β calculados nos pontos fixos do tipo Heisenberg e Ising a partir das fórmulas (4.72). 113

CAPÍTULO 1

Introdução

Esta tese está dividida em três partes, cada uma correspondendo a um capítulo. No capítulo 2, foi estudado o transporte de partículas brownianas interagentes em um potencial de substrato periódico e assimétrico (potencial catraca). Em geral, as aplicações e as motivações para o estudo de tais sistemas, podem ir do entendimento do transporte de proteínas em meios celulares, de íons em canais iônicos, de partículas em suspensões coloidais, a aplicações em dispositivos de estado sólido, como em catracas quânticas e no transporte de vórtices em supercondutores nanoestruturados. Nesta tese, foi estudada a resposta de um conjunto de partículas interagentes a uma excitação externa senoidal (*rocking ratchets*) com frequência ω e amplitude A através da dinâmica de Langevin. A influência de outros parâmetros relevantes, como o número de ocupação de partículas por poço de potencial n e a temperatura T , foi também investigada. Nas seções 2.1 e 2.2, uma introdução ao efeito catraca e às inversões de corrente de partículas é apresentada tendo como protótipo as catracas térmicas. Ainda na seção 2.2, serão discutidos brevemente algumas características dos *rocking ratchets* de partículas não-interagentes, como o efeito *lock-in* e inversões devidas ao efeito conjunto de altas frequências e altas temperaturas. A seção 2.3 é reservada aos detalhes da simulação computacional da equação de Langevin e aos resultados, os quais estão divididos da seguinte maneira: regime adiabático determinístico (baixas frequências de excitação em $T = 0$), inversões de corrente induzidas por temperatura e regime de altas frequências. Na subseção 2.3.5, é apresentada uma discussão sobre as dinâmicas sub e sobreamortecidas no caso de partículas interagentes. As conclusões sobre este estudo estão apresentadas na última seção (2.4) deste capítulo.

No Capítulo 3, foi estudado um modelo de spins quânticos com interações competitivas desordenadas utilizando a técnica de Monte Carlo quântico em tempo imaginário contínuo. O modelo considerado tem como base o modelo de Ising ferromagnético em campo transversal, onde interações antiferromagnéticas diluídas entre segundos vizinhos foram introduzidas. O

parâmetro $\varepsilon \in [0, 1]$ mede o grau de diluição das interações sendo que $\varepsilon = 0$ corresponde ao modelo de Ising puro em campo transversal e para $\varepsilon = 1$ tem-se o modelo ANNNI (Axial Next Nearest Neighbor Ising Model) em campo transversal. Os modelos Ising e ANNNI $1d$ em campo transversal possuem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising clássico $2d$. Nesta tese, será investigada a relevância da desordem (diluição) na classe de universalidade da criticalidade quântica desta cadeia de spins utilizando o formalismo de Suzuki-Trotter que mapeia o hamiltoniano quântico do sistema $1d$ em um hamiltoniano de spins clássicos $2d$ anisotrópico, permitindo a simulação Monte Carlo deste sistema mapeado. Nas seções 3.1 e 3.2, serão discutidas as transições de fases quânticas com ênfase no modelo Ising em campo transversal e a metodologia das simulações Monte Carlo em tempo contínuo aplicadas a este modelo. Nas seções 3.4, 3.5 e 3.6, o modelo ANNNI quântico será discutido e alguns resultados de estudos recentes obtidos para este modelo, bem como a técnica de Monte Carlo em tempo contínuo adaptada às interações competitivas, que será utilizada nesta Tese. A análise de escala de tamanho finito para sistemas anisotrópicos, que será utilizada para o tratamento dos dados obtidos via simulação Monte Carlo, será tratada na seção 3.7. Na seção 3.8, serão apresentados alguns resultados para os campos críticos, expoentes dinâmicos e expoentes do comprimento de correlação para os modelos de Ising e ANNNI puros e na seção 3.9 esses resultados serão estendidos para o caso desordenado. Finalmente na seção 3.10 as conclusões serão apresentadas.

Outro modelo de spin estudado nesta Tese foi o modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $1/2$, definido na rede hierárquica do tipo diamante. Através do método do grupo de renormalização no espaço real, na aproximação de Migdal-Kadanoff para sistemas quânticos, a equação de renormalização para o modelo na rede diamante com p conexões, pode ser obtida para várias dimensões fractais. Além disso, foi obtida, uma relação recursiva para a magnetização local, que permitiu o cálculo do expoente crítico da magnetização para algumas dimensões fractais nos pontos fixos mistos de Ising e Heisenberg. Nas seções iniciais do capítulo 4 (4.1, 4.2 e 4.3) o modelo de Heisenberg anisotrópico foi apresentado assim como os conceitos do grupo de renormalização no espaço real (GRER) e da aproximação de Migdal-Kadanoff para sistemas de spins clássicos. Na seção 4.3, a aproximação de Suzuki-Takano estende o GRER para o caso

quântico, utilizando-se da aproximação de Migdal-Kadanoff, que permite a obtenção de uma equação de renormalização para o modelo. Nas seções 4.4 e 4.5, foram calculadas as relações recursivas para a magnetização local e para a correlação entre spins, respectivamente. Na seção 4.6, uma expressão para o expoente β da magnetização foi obtida a partir da relação recursiva para a magnetização e na seção 4.7 as conclusões deste capítulo, foram apresentadas.

Propriedades de Transporte de Motores

Brownianos Interagentes

2.1 Movimento browniano e efeito catraca

Os primórdios da teoria do movimento browniano em Física remontam ao início do século XX em um dos quatro artigos publicados por Einstein no ano de 1905. Neste artigo, Einstein apresentou um estudo de partículas brownianas sobrearmortecidas através de um tratamento estatístico onde utilizou o que hoje é conhecida como equação de Fokker-Planck. Ele obteve o deslocamento quadrático médio destas partículas encontrando uma dependência para o deslocamento proporcional a $\sqrt{t}$ (após um período transiente) com t sendo o tempo. Neste mesmo trabalho, Einstein relacionou o movimento macroscópico de difusão da partícula browniana com um parâmetro de dimensão molecular,

$$D = \frac{kT}{\zeta}. \quad (2.1)$$

O parâmetro de dimensão molecular, que é o raio a de uma esfera sujeita à viscosidade do fluido, entra nesta expressão por meio do coeficiente de fricção ζ que é dado pela lei de Stokes $\zeta = 6\pi\eta a$. Esta relação, chamada de relação de Einstein, também foi a primeira ligação entre grandezas relacionadas a flutuações térmicas e dissipação, sendo posteriormente estabelecida como um caso particular do teorema da flutuação-dissipação.

Uma questão intrigante que logo surgiu naquela época, foi a possibilidade de transformar o transporte difusivo de partículas brownianas em transporte controlado (direcional) das mesmas com a introdução de alguma quebra de simetria, como por exemplo, uma quebra de simetria espacial. Nomes importantes nesses questionamentos foram Smoluchowski e muito posteriormente Feynman que aperfeiçoou e introduziu novos ingredientes a esse problema. A idéia cen-

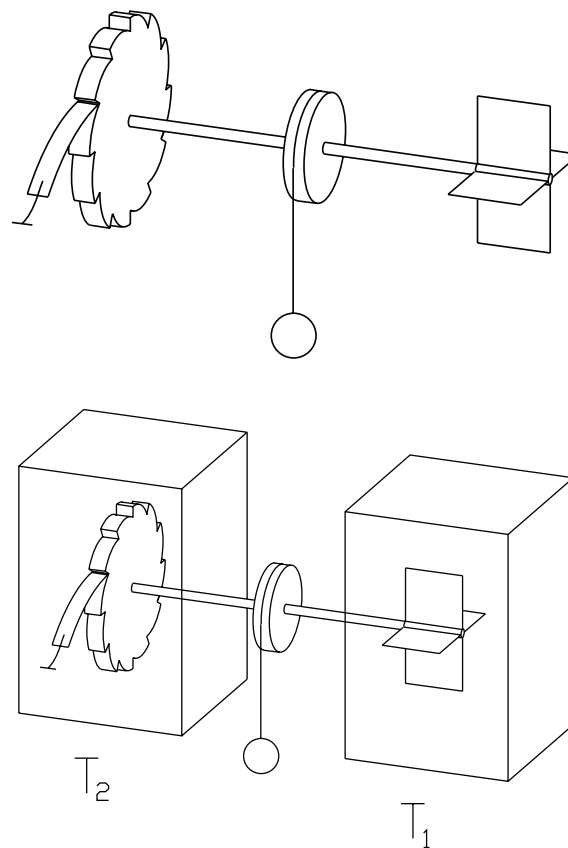


Figura 2.1 Catracas de Feynman. Figura superior: O mecanismo está sujeito ao bombardeio de um gás em equilíbrio e na média não apresenta movimento de rotação pela segunda lei da termodinâmica. Figura inferior: A catraca e as pás do mecanismo estão sujeitas a banhos térmicos distintos, permitindo desta forma um movimento de rotação. (Figura extraída da referência [1].)

tral é a introdução de uma quebra de simetria espacial que favoreça o movimento da partícula ou do mecanismo em uma direção e dificulte o movimento na outra direção. Usualmente este mecanismo é conhecido como *catraca*, e isto fica bem claro na descrição da idéia de Smoluchowski e Feynman para este problema. Um esquema de um mecanismo que supostamente retificaria um movimento difusivo é mostrado na figura 2.1. Este consiste de um conjunto de pás propulsoras ligadas a uma catraca por um eixo. A catraca é uma engrenagem cujos “dentes” são assimétricos, e que com a ajuda de uma trava, permite o movimento somente em um sentido. Tanto as pás quanto a catraca estão envolvidas por um gás em equilíbrio a uma

temperatura T . Primeiro, na ausência da catraca e estando as pás sujeitas ao bombardeio dos constituintes do gás que a envolve, o movimento de rotação destas pás é um movimento browniano sem nenhuma preferência do sentido de rotação. Ao se introduzir a catraca, por conta da assimetria desta, espera-se que as pás se movam na direção “fácil”, de menor resistência, sendo eventualmente travadas, impedindo assim seu retorno. Para o outro lado o movimento seria impedido por causa da geometria deste aparato, que dificulta o movimento na direção oposta. Esta tentativa de retificação do movimento é um aparente paradoxo, pois violaria a segunda lei da termodinâmica, sendo um moto-perpétuo de segunda espécie, embora a primeira lei da termodinâmica, a lei da conservação da energia, fosse satisfeita.

Smoluchowski apresentou e Feynman popularizou [8] a explicação para este aparente paradoxo. Em sua explicação ele argumenta que a catraca deve estar acoplada à trava, e ambas devem ter sua dimensão na mesma ordem de grandeza das pás propulsoras, que por sua vez devem ser pequenas o suficiente para estarem sujeitas ao impacto das partículas do gás. Deste modo, esta trava estaria vulnerável ao bombardeio do gás tanto quanto as pás. Consequentemente as travas liberariam a catraca, permitindo o movimento na direção supostamente proibida. Os efeitos deste movimento com o movimento na direção oposta descrito no parágrafo anterior se cancelariam, não permitindo na média um movimento direcional, o que estaria de acordo com a segunda lei da termodinâmica.

Feynman foi além dessa discussão e mostrou como um movimento direcional poderia ser obtido com esse mecanismo, sem violar a segunda lei da termodinâmica. Nesta explicação ele considerou que se a região das pás estivesse exposta a um gás com temperatura T_1 e a região da catraca em si estivesse exposta ao bombardeio de um gás com temperatura T_2 , com $T_1 \neq T_2$ (ver a figura 2.1), então um movimento direcional é possível. Desta forma uma nova simetria foi quebrada, a simetria do balanceamento detalhado que é uma característica de sistemas em equilíbrio, permitindo então o movimento direcional. No caso $T_1 > T_2$, o movimento é no sentido “fácil” da catraca, o sentido que intuitivamente se espera para o movimento. Já no caso $T_1 < T_2$ o movimento é no sentido onde se espera uma maior resistência à rotação da catraca. Mesmo que essas rotações, tanto para $T_1 > T_2$ quanto para $T_1 < T_2$, estejam de acordo com a segunda lei da termodinâmica, é um fato intrigante que o movimento aleatório nas pás

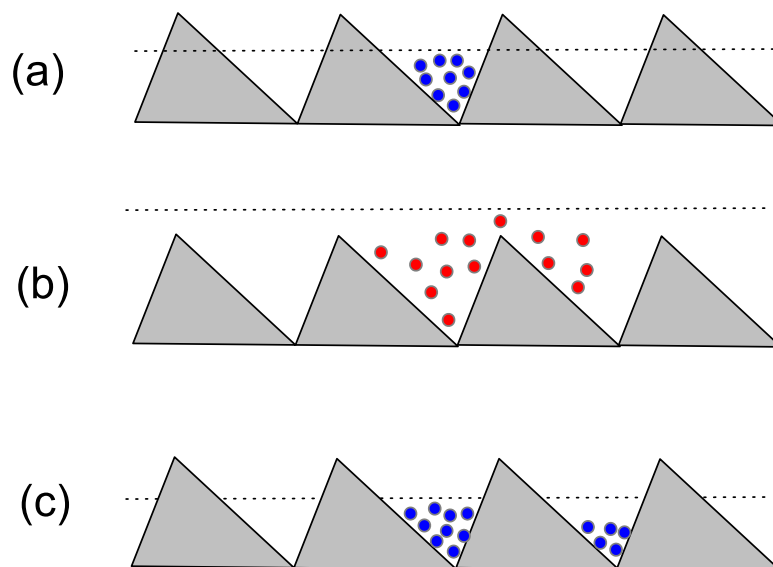


Figura 2.2 Conjunto de partículas brownianas sujeitas a um potencial do tipo dente de serra e a variações cíclicas da temperatura. (a) A energia térmica é menor que a barreira de energia do potencial de substrato, não permitindo a difusão das mesmas. (b) a energia térmica é maior que a barreira de energia do potencial de substrato, permitindo que as partículas se dispersem. (c) Novamente a energia térmica é bem maior que a barreira de energia do potencial prendendo as partículas próximo aos mínimos dos potenciais e permitindo na média um movimento direcional.(Figura extraída da referência [2])

propulsoras possa ser retificado.

2.2 Motores brownianos

Seguindo a mesma linha de idéia de Feynman, os chamados *motores brownianos* [1, 9, 10, 11, 12, 13] podem ser modelados considerando os elementos básicos que foram expostos na seção anterior. Estes elementos foram o ruído térmico (difusão), assimetria de inversão (espacial ou temporal, por exemplo) e a quebra do balanceamento detalhado (como a inserção de uma fonte externa de energia). Os motores brownianos são motores microscópicos que retificam o ruído térmico com o auxílio de uma fonte externa de energia transformando o movimento

difusivo em um movimento direcional. Exemplos de tais motores são os mais variados, como o transporte de enzimas em filamentos protéicos nos meios intracelulares e o transporte de íons por membranas celulares [14].

Um protótipo simples e bastante estudado é a chamada *catraca térmica* [3], onde partículas brownianas não interagentes se movem em um substrato periódico assimétrico (que faz o papel de uma catraca), sujeitas também a receber energia de dois ou mais reservatórios de calor. A temperatura é alternada de uma maneira periódica, sendo o caso mais simples a temperatura ser constante em metade do período τ , com $\frac{k_B T}{\Delta U} \ll 1$, e constante na outra metade do período, com $\frac{k_B T}{\Delta U} \gg 1$. ΔU é a medida da barreira de energia do potencial de substrato. A figura 2.2 (extraída da referência [2]) mostra o comportamento do sistema em um intervalo de tempo $\Delta t = 1,5\tau$. Na parte (a) $\frac{k_B T}{\Delta U} \ll 1$, e as partículas estão presas próximo aos mínimos de potencial. Na parte (b) como $\frac{k_B T}{\Delta U} \gg 1$, as partículas iniciam um processo difusivo, e por causa da assimetria do potencial, estas se aproximam mais do mínimo de potencial à direita do que do mínimo de potencial à esquerda. Na parte (c), o sistema é resfriado, prendendo as partículas brownianas no mínimo de potencial mais próximo de cada uma. Por conta desta assimetria do potencial, a população original das partículas em um único mínimo é redistribuída de uma forma assimétrica, produzindo um movimento direcional no sentido “difícil” (mais íngreme) do potencial. Este sistema realiza trabalho sobre as partículas brownianas e pode então ser considerado como uma pequena máquina térmica.

A modelagem matemática para tais problemas, como o exposto acima para a catraca térmica, pode ser feita, dentre outras maneiras, pela equação de Langevin [15, 16]. Considerando uma partícula de massa m suficientemente grande, para considerar-se a interação com o fluido que a envolve descrita pela hidrodinâmica de meios contínuos, e suficientemente pequena, para a mesma estar sujeita a flutuações de força, a equação de movimento para esta partícula pode ser escrita como

$$m\ddot{x} = -\gamma\dot{x} + \xi(t). \quad (2.2)$$

Esta é a equação de Langevin, onde $-\gamma\dot{x}$ representa a força viscosa e $\xi(t)$ é um termo de força

aleatória associado ao ruído térmico, neste caso o ruído branco, que é definido pelas relações,

$$\begin{aligned}\langle \xi(t) \rangle &= 0, \\ \langle \xi(t)\xi(s) \rangle &= 2\gamma k_B T \delta(t-s).\end{aligned}\quad (2.3)$$

k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura de equilíbrio do banho térmico. Para sistemas no regime sobreamortecido o termo $m\ddot{x}$ pode ser desprezado. A equação (2.2) pode ser modificada com a introdução de um potencial de substrato periódico e assimétrico (potencial catraca) $U(x+a) = U(x)$. Com estas modificações a equação (2.2) torna-se

$$\gamma \dot{x} = -U'(x) + \xi(t). \quad (2.4)$$

A equação de Langevin (2.4) tem como variável $x(t)$, que em grande parte dos casos de estudo é a própria coordenada espacial da partícula browniana, mas também em alguns casos pode indicar uma coordenada generalizada ou grau de liberdade de algum sistema sujeito a flutuações e restrições do tipo “catraca”. A equação de Langevin (2.4) é o modelo mínimo de uma catraca em equilíbrio, pois o ruído é um ruído branco gaussiano associado a flutuações de equilíbrio, não permitindo, de acordo com a segunda lei da termodinâmica, o movimento em uma direção preferencial. Este eventual movimento pode ser medido através da corrente de partículas definida como

$$J(t) = \langle \dot{x}(t) \rangle. \quad (2.5)$$

Para o sistema em equilíbrio, como esperado, a corrente de partículas correspondente a equação (2.4) é nula,

$$\langle \dot{x}(t) \rangle = 0. \quad (2.6)$$

Isto pode ser mostrado com o auxílio da equação de Fokker-Planck correspondente a equação (2.4) no espaço das densidades de probabilidade periódicas (condições de contorno periódicas). Este cálculo é feito, em detalhes, na referência [1]. Para ser induzida uma corrente estacionária, podem ser introduzidas modulações periódicas na temperatura do banho térmico. Para a catraca térmica mostrada na figura 2.2, um ruído apropriado pode ser definido como

$$\langle \xi(t)\xi(s) \rangle = 2\gamma k_B T(t) \delta(t-s). \quad (2.7)$$

Onde agora o fator de temperatura não é mais constante, mas periódico, $T(t) = T(t + \tau)$, sendo τ o período da modulação de temperatura. Esta definição para o ruído induz o sistema para estados de não-equilíbrio permitindo portanto $\langle \dot{x} \rangle \neq 0$, como foi mostrado esquematicamente na figura 2.2.

Uma outra característica importante dos motores brownianos, ao lado deste movimento coletivo unidirecional, é a possibilidade das inversões de corrente por meio do ajuste de algum ou alguns parâmetros dos sistema [3, 1]. A própria direção original ou inicial do movimento das partículas quase sempre é de difícil previsão. Tomemos como exemplo novamente a catraca térmica exposta nos parágrafos acima. Os resultados e a discussão aqui apresentados têm como base a referência [3]. Considerando um potencial catraca periódico da forma

$$U(x) = U_0 \{ \sin(2\pi x/a) + 0.2 \sin[4\pi(x/a - 0,45)] + 0.1 \sin[6\pi(x/a - 0,45)] \} \quad (2.8)$$

e uma modulação de temperatura sendo

$$T(t) = \bar{T} [1 + A \sin(2\pi t/\tau)]^2, \quad (2.9)$$

a equação (2.4) pode ser integrada numericamente e o valor da corrente $\langle \dot{x}(t) \rangle$ pode ser obtido em função de alguns parâmetros relevantes ao problema. A figura 2.3 mostra o comportamento da corrente em função do coeficiente de viscosidade η (nesta figura, extraída da referência [3], o coeficiente de viscosidade é representado por η) ao se fixar $a = k_B = 1$, $U_0 = 1/2\pi$, $\bar{T} = 0,1$, $A = 0,7$ e $\tau = 0,17$. Para valores baixos de η a corrente é positiva, sendo o mecanismo de deslocamento semelhante àquele mostrado na figura 2.2. A corrente mostrada nesta figura é uma média no tempo e no ensemble. Ao se aumentar gradualmente o valor de η , a corrente inverte seu sentido passando de positiva para negativa. Isto indica que partículas com diferentes coeficientes de viscosidade se movimentam em sentidos opostos, mesmo estando sujeitas ao mesmo banho térmico e ao mesmo potencial de substrato. Partículas esféricas com raios diferentes podem ser separadas por este mecanismo, bem como partículas com massas diferentes. Uma generalização desta inversão de corrente seriam as inversões múltiplas de corrente, onde os sentidos da mesma são controlados por mais de um parâmetro. Partículas sensíveis a uma certa “janela” característica em um parâmetro podem ser separadas das demais.

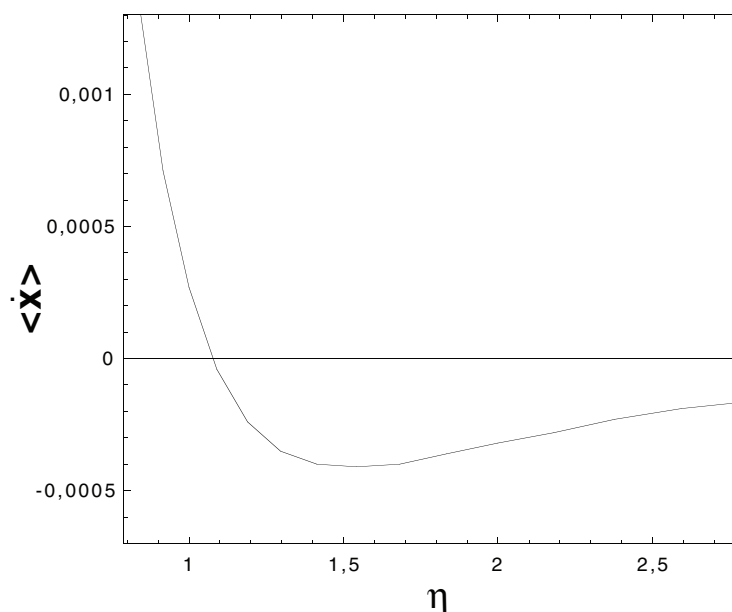


Figura 2.3 Comportamento da corrente de partículas em função do coeficiente de viscosidade η , obtidos numericamente para um sistema com potencial dado por (2.8) e uma modulação de temperatura dada por (2.9). Figura extraída da referência [3].

Dentre tantas outras formas de fontes externas que induzem o sistema para estados de não-equilíbrio, uma bastante utilizada e de grande aplicação experimental é a perturbação externa periódica $F(t) = F(t + \tau)$, onde esta apresenta uma média temporal nula. Estas perturbações dão origem aos *rocking ratchets* [4, 1]. Um exemplo bastante estudado é a força senoidal,

$$F(t) = A \sin(\omega t). \quad (2.10)$$

Estes diferem das catracas térmicas em vários aspectos, como por exemplo apresentar o efeito catraca mesmo para $T = 0$. No limite adiabático (frequência de oscilação ω tendendo a zero) o sentido da corrente é sempre na direção do eixo fácil do potencial. O valor da corrente em função da amplitude A , para $T = 0$, apresenta um valor máximo para um certo valor de amplitude da força externa, sendo que tanto para baixas amplitudes como para altas amplitudes a corrente é nula. Estas características dos *rocking ratchets* podem ser vistas na figura 2.4 que foi extraída da referência [4]. O regime adiabático corresponde à linha tracejada da figura à esquerda. Na mesma figura (linha cheia) é mostrado o efeito lock-in, onde a partir de um

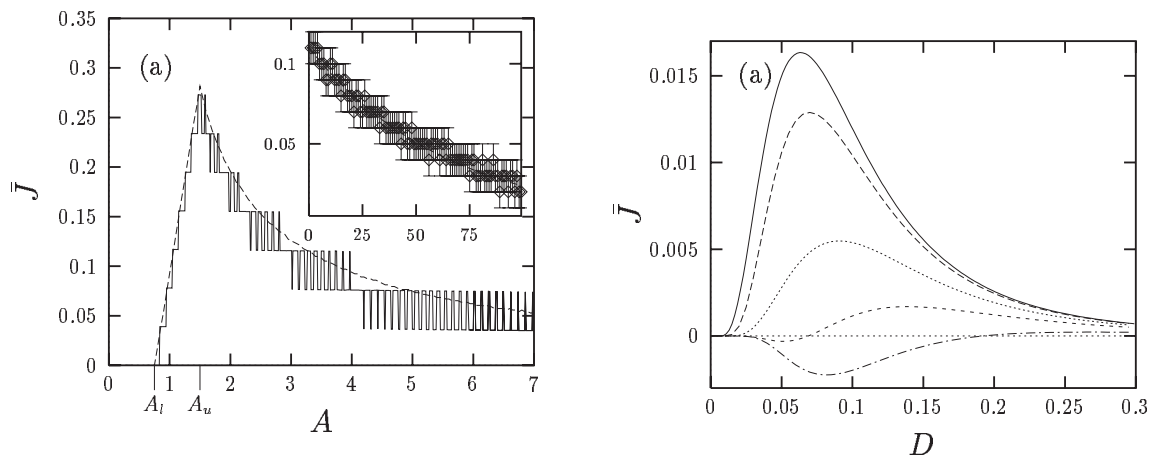


Figura 2.4 Comportamento da corrente de partículas dos *rocking ratchets*, extraído da referência [4]. Parte à esquerda: regime adiabático (linha tracejada) e em uma frequência moderada (linha cheia). Parte à direita: inversão de corrente induzida por altas frequências e altas temperaturas.

certo valor da frequência externa, o comportamento da corrente de partículas com a amplitude apresenta degraus separados por saltos, indicando um efeito de “casamento” de fases com o potencial do substrato [4]. Precisamente os valores da corrente são discretizados em intervalos de valor $a\omega/2\pi$. Com a introdução do ruído térmico este efeito é suavizado e tende a desaparecer.

Para o caso onde o sistema está fora do regime adiabático (regime de altas frequências) e está sujeito a uma quantidade suficiente de ruído térmico, ocorrem as inversões de corrente [4, 17], com esta sendo na direção do eixo difícil do potencial. A figura 2.4 (parte à direita) mostra várias curvas de corrente em função do ruído térmico, onde cada curva corresponde a um valor de frequência ω . O regime adiabático corresponde à curva superior, que é totalmente positiva. A curva inferior é em parte negativa e corresponde à inversão de corrente citada acima. Este é um efeito conjunto entre o ruído térmico e altas frequências.

Ao se considerar efeitos de inércia moderados (dinâmica sem caos), o comportamento da corrente de partículas com a amplitude é modificado com relação ao caso sobreamortecido. A corrente é praticamente restrita à janela de retificação (ou seja, entre as amplitudes de desprendimento para a direita e esquerda) com a eficiência da catraca sendo superior ao caso sobremortecido. Para sistemas onde o efeito de inércia é ainda mais relevante, a corrente de

partículas pode apresentar, no limite de longos períodos, comportamentos complexos (devido à dinâmica caótica apresentada por tais sistemas) incluindo dependência com as condições iniciais e múltiplas inversões de corrente [18, 19, 20].

Exemplos de mecanismos que usam os princípios dos motores brownianos são os mais variados. Como por exemplo os motores moleculares [11, 12, 9], que são dispositivos imersos em meios intracelulares, sujeitos a flutuações térmicas e à viscosidade do meio aquoso intracelular. O substrato no qual este motor se move, consiste de microtubos formados pela proteína tubulina. Estes microtubos formam “vias” que se distribuem por toda a célula para o transporte de nutrientes, rejeitos, etc. O motor em si, é formado basicamente por um corpo ligado a duas partes que se prendem ao substrato por meio de forças elétricas. O efeito desta força é o mesmo daquele ao se considerar um potencial periódico com uma assimetria dentro de um período, ou seja, um potencial catraca. A fonte externa de energia, que torna o movimento unidirecional possível, vem por meio de um potencial químico de não equilíbrio, onde moléculas de ATP (trifosfato de adenosina) são fornecidas em uma densidade bem acima daquela de equilíbrio. Estas moléculas de ATP se prendem ao motor, e são transformadas em ADP (difosfato de adenosina) liberando energia. Neste processo, o potencial efetivo “sentido” pelo motor browniano é modificado tornando-se mais tênue, permitindo uma maior ação do ruído térmico que tende a dispersar o motor. Quando a molécula de ADP se desprende do motor, a afinidade entre o motor e o substrato é restabelecida, restaurando o potencial inicial, e desta forma, prendendo a partícula em um novo período do potencial, promovendo então o transporte. Este mecanismo, descrito aqui de uma forma simplificada, possui semelhanças com a catraca térmica. A grande diferença é que no caso dos motores moleculares a fonte externa de energia atua deformando o potencial sentido pelo motor browniano. Ainda no ambiente molecular, pode-se encontrar outra forma de motores brownianos que são as bombas moleculares [14, 21, 22], que bombeiam íons e permitem que gradientes indispensáveis à vida possam ser mantidos entre o meio intracelular e o meio externo.

Os motores brownianos e o efeito catraca têm também impulsionado a pesquisa deste efeito em muitos dispositivos de estado sólido, como a pesquisa em transporte de vórtices em filmes finos de supercondutores [23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. A aplicação do efeito catraca em filmes

supercondutores foi inicialmente proposta por Lee *et al* [23]. Neste trabalho foi apresentado um modelo, onde um potencial de substrato do tipo “dente de serra”, periódico na direção x e translacionalmente invariante na direção y , eventualmente construído em um filme supercondutor, retifica a voltagem no filme fino por meio do efeito catraca. Com esse dispositivo a densidade de vórtices pode ser reduzida minimizando assim os efeitos de dissipação causado pelos vórtices. Alguns trabalhos experimentais se sucederam, onde, para a construção das redes periódicas de armadilhas, foram empregadas modernas técnicas de litografia [24, 26, 27, 28, 30]. Nestes trabalhos, basicamente foram observadas retificações e/ou inversões de corrente em algumas geometrias de armadilhas, como triangulares[24] e quadradas assimétricas em uma célula unitária [26, 27, 28], e até mesmo em redes formadas por micromagnetos[31]. O transporte de vórtices onde a interação entre os mesmos é relevante, também tem sido estudado [28, 29, 30]. Neste contexto de forte interação, na referência [28], De Souza Silva *et al* investigaram as múltiplas inversões de corrente associadas ao número de ocupação de um período do potencial de substrato. Os resultados apresentados nesta tese têm como ponto de partida esta referência.

Outra aplicação em dispositivos de estado sólido são as catracas quânticas. Nestes dispositivos os efeitos quânticos como tunelamento e reflexão por barreiras, assumem um papel relevante a baixas temperaturas. A reversão de corrente em *rocking ratchets* quânticos induzidas por temperatura foi prevista teoricamente por Hänggi *et al* [32] e comprovada experimentalmente por Linke *et al* [33]. Neste experimento um gás de elétrons bidimensional é confinado em uma interface GaAl/AlGaAs, onde por litografia são construídas trilhas de períodos assimétricos, aproximadamente triangulares. A altas temperaturas o ruído térmico predomina e uma excitação alternada é retificada na direção do eixo “fácil” da amostra, como no caso dos *rocking ratchets* clássicos. Mas a baixas temperaturas, os efeitos de tunelamento entre poços predominam, invertendo o sentido da corrente.

2.3 Partículas brownianas interagentes em um potencial periódico assimétrico

2.3.1 Sistema e simulações

Nesta seção serão apresentados os resultados do estudo de um sistema de partículas em um potencial assimétrico sujeitas a uma força senoidal, na mesma linha de estudo dos *rocking ratchets*. Neste estudo será levado em consideração a interação entre as partículas, que é relevante em sistemas com altas densidades das mesmas. Serão analisadas as inversões de corrente ao se variar alguns parâmetros, como amplitude e frequência da força externa, densidade e temperatura.

O trabalho que serviu como ponto de partida para o estudo que foi desenvolvido e será apresentado nesta tese é a referência [28]. Nesse trabalho foram observadas múltiplas inversões de corrente sem a presença de algum agente de ruído, seja ele térmico ou caótico. O transporte de vórtices em filmes supercondutores foi investigado, onde armadilhas periódicas assimétricas foram construídas, considerando-se a interação entre os vórtices. O resultado principal deste trabalho foi a observação de múltiplas inversões de corrente de vórtices, no limite adiabático, que dependem da densidade de vórtices no filme supercondutor, ou posto de outra maneira, do número de ocupação n de vórtices por período do potencial. No experimento, esta variável pode ser controlada pelo campo magnético que atravessa a amostra. Para o número de ocupação $n = 1$, não existe inversão de corrente, e as partículas (ou vórtices, que são considerados partículas na modelagem teórica apresentada na ref. [28]) se movem na direção “fácil” do potencial. Ao se aumentar a densidade de vórtices, os mínimos locais tendem a prender mais fortemente alguns vórtices estando os outros sujeitos a um potencial efetivo com uma forma diferente daquela do potencial original. Para n par, o sentido fácil é invertido com relação ao potencial original, ocasionando as inversões de corrente. Para o caso n ímpar, o sentido fácil é o mesmo daquele do potencial original.

Nesta seção apresentaremos alguns resultados relacionados ao transporte de partículas interagentes, com os ingredientes básicos expostos nas seções anteriores. Como fonte externa

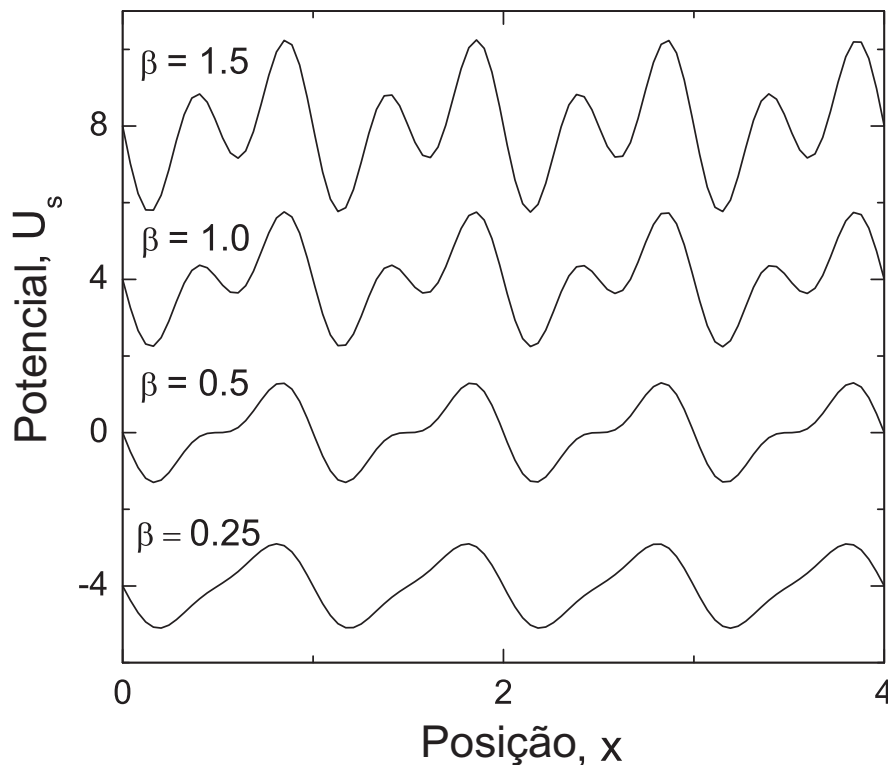


Figura 2.5 Potencial catraca (2.11) utilizado nas simulações, para valores de $\beta = 0,25, 0,5, 1,0$ e $1,5$. Estas curvas foram deslocadas verticalmente para uma melhor visualização.

de energia será utilizada uma força senoidal (*rocking ratchets*, eq. (2.10)) e como ruído será utilizado o ruído branco definido em (2.3). Como potencial catraca será utilizado o potencial

$$U_s(x) = -U_{s0} (\sin(kx/a) + \beta \sin(2kx/a)). \quad (2.11)$$

O parâmetro β está relacionado ao número de mínimos locais por período que pode ser um ou dois, dependendo do valor deste parâmetro. Diferentes formas destes potenciais, para diferentes valores de β , são mostradas na figura 2.5. Para a interação entre as partículas consideramos um potencial de interação logarítmico repulsivo,

$$U_{ij} = -E_0 \ln(|x_i - x_j|). \quad (2.12)$$

As equações de Langevin acopladas para este sistema são,

$$m\dot{v}_i = -\partial_{x_i} \left(U_s + \sum_j U_{ij} \right) - \gamma v_i + F(t) + \xi_i(t), \quad (2.13)$$

Para as simulações, foi utilizado um método de diferenças finitas adaptado ao termo estocástico que aparece em (2.13). A equação (2.13) foi discretizada segundo o algoritmo de Verlet [34], onde para a atualização das posições e velocidades em um tempo $t + h$ são utilizadas as posições e velocidades nos tempos t e $t - h$ e o erro envolvido é da ordem de $\mathcal{O}(h^4)$. Na discretização do termo estocástico foi utilizado

$$\xi^n(t) h = (2\gamma k_B T h)^{1/2} w_n \quad (2.14)$$

onde n , neste caso, é relacionado a discretização da equação do movimento, w é uma variável estocástica gaussiana com variância unitária, e a igualdade é uma igualdade em distribuições. A forma discretizada da equação de movimento é dada por

$$\begin{aligned} V_{n+1/2}^i &= \left(1 - \frac{\gamma h}{2m}\right) V_n^i + \frac{1}{2m} \left(\mathcal{F}_n + A \sin \omega t_n + (2\gamma k_B T)^{1/2} h^{-1/2} w_n \right) h, \\ X_{n+1}^i &= X_n^i + V_{n+1/2}^i h, \\ V_{n+1}^i &= \left(1 - \frac{\gamma h}{2m}\right)^{-1} \left\{ V_{n+1/2}^i + \frac{1}{2m} \left(\mathcal{F}_{n+1} + A \sin \omega t_{n+1} + (2\gamma k_B T)^{1/2} h^{-1/2} w_{n+1} \right) \right\} h, \end{aligned} \quad (2.15)$$

sendo $\mathcal{F}_n$ menos a soma do gradiente de U_s e U_{ij} no ponto x_n .

O número de partículas usado na simulação foi 10, 20, 30 e 40 para os valores de $n = 1, 2, 3$ e 4 respectivamente. O sistema interagente foi simulado confinado em um comprimento $L_x = 10$, onde foram utilizadas condições de contorno periódicas considerando-se o potencial de longo alcance (2.12). Para isto, foi utilizado um método que soma a contribuição da interação de partículas pertencentes às imagens, sendo a forma final uma série convergente (no caso bidimensional) [35]. Para o caso unidimensional, que é o caso aqui estudado, a expressão é simplificada para,

$$U_{ij} = E_0 \ln \left(\sin \left(\frac{\pi}{L_x} x \right) \right) + C(L_x). \quad (2.16)$$

Após um período de aproximadamente 10^6 passos de tempo (com $h = 0,01$ para o regime adiabático sem ruído térmico e $h = 0,00025$ para o caso de altas frequências e temperaturas), sendo alcançado um regime estacionário, a corrente ou a média, no tempo e nas amostras, da velocidade do centro de massa $v_{cm} = \frac{1}{N} \sum_i v_i$ (onde N é o número total de partículas) foi calculada nas simulações. Para o estudo dos estados dinâmicos do sistema em $T = 0$, a densidade

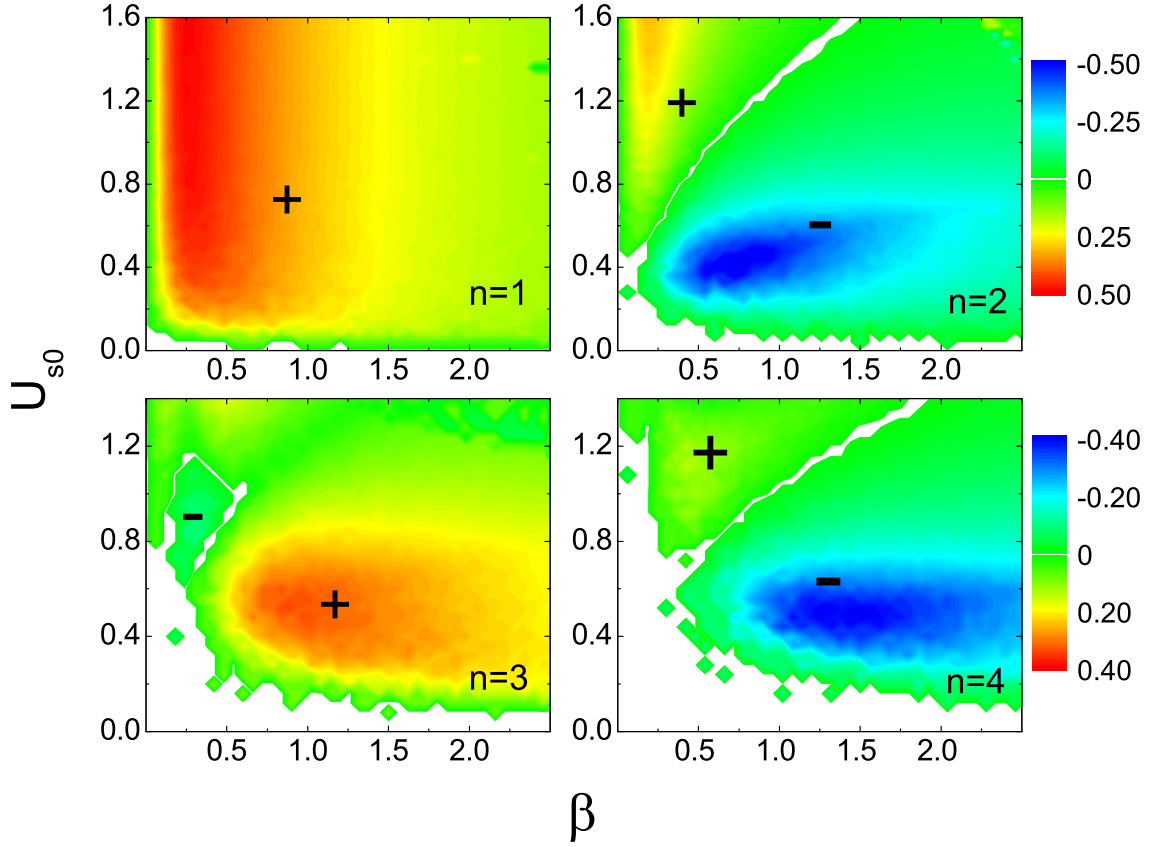


Figura 2.6 Diagrama de fases que mede a assimetria do potencial α em função dos parâmetros β e U_{s0} para $n = 1, 2, 3$ e 4 . Para $\beta > 0,5$ e $U_{s0} < 1,0$ aproximadamente, a direção da corrente é positiva para n ímpar e negativa para n par.

de partículas e a massa acumulada,

$$\rho(x) = \langle \sum_i \delta(x_i) \rangle, \quad (2.17)$$

$$m(x) = \int_0^x \rho(x') dx' \quad (2.18)$$

também foram calculadas, sendo a média uma média temporal. Nas simulações foram fixados $\gamma = 16$ e $m = 1$. Uma discussão sobre os regimes subamortecido e sobreamortecido é feita na seção 2.3.5.

Para fixar alguns parâmetros foi obtido um diagrama de fases que mede a assimetria do potencial efetivo a que estão sujeitas as partículas. Nesse diagrama (figura 2.6) o parâmetro

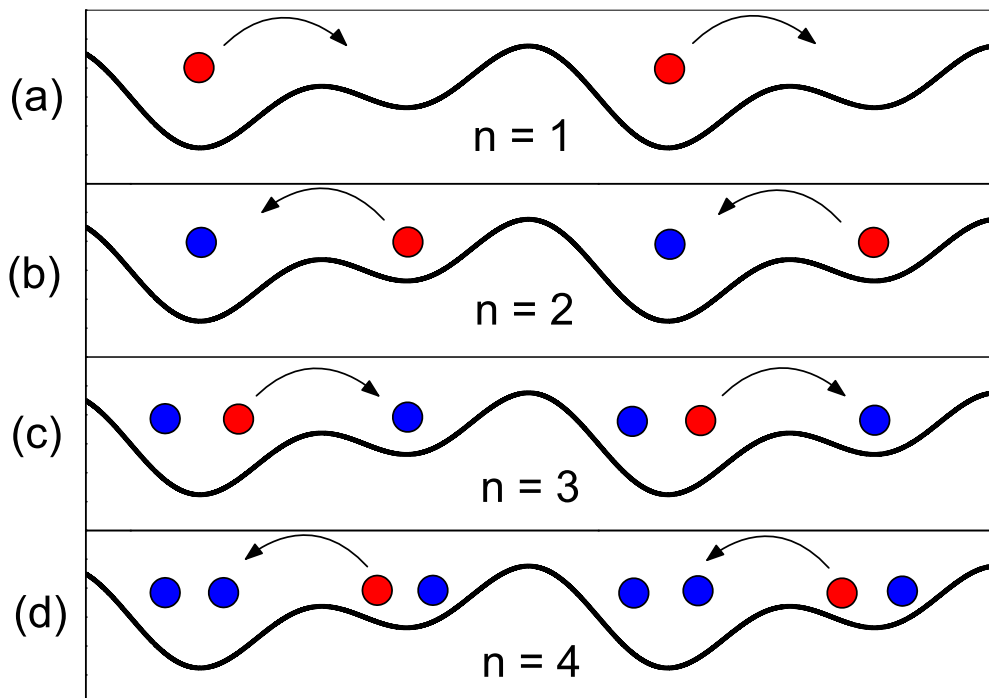


Figura 2.7 Tendência de movimento das partículas menos presas (círculos vermelhos) ao potencial para baixas amplitudes no regime adiabático. O potencial efetivo é uma combinação entre o potencial de substrato e as partículas mais presas ao potencial (círculos azuis).

$\alpha = 1 - F_d/F_e$ é obtido em função de β e do valor associado à barreira de energia U_{s0} normalizado por E_0 (ver equação (2.12)). Os valores de F_d e F_e são as forças críticas de desprendimento das partículas ao se aplicar uma força constante, por um tempo suficientemente longo, para a direita e esquerda respectivamente. Estas forças críticas são identificadas ao se constatar um movimento coletivo das partículas a partir de um certo limiar da força, que é aplicada de uma forma adiabática. O valor de α positivo (negativo) indica um movimento para a direita (esquerda). Deste diagrama de fases, pode-se ver que, para uma região entre $\beta > 0,5$ e $U_{s0}/E_0 < 1,0$ aproximadamente, o sentido da corrente de partículas depende do valor de n , sendo positiva para um valor de n ímpar e negativa para um valor de n par, em concordância com os resultados obtidos na referência [28].

A explicação para estas inversões está na relação entre o movimento das partículas menos

presas ao potencial em um potencial efetivo formado pelo potencial de substrato original e pelas partículas presas nos mínimos do potencial. A figura 2.7 mostra esquematicamente o movimento das partículas menos presas para os casos $n = 1, 2, 3$ e 4 . Esta é a tendência de movimento no regime adiabático, para uma amplitude da força externa baixa, mas suficiente para desprender as partículas num dos sentidos. As partículas mais presas estão representadas em azul e as partículas menos presas em vermelho. Para o caso de uma única partícula, a simetria do potencial de substrato é preservada, não havendo portanto inversões determinísticas de corrente. Para o caso de $n > 1$ partículas por período de potencial, existe em média, $n - 1$ partículas presas aos mínimos, se distribuindo de forma alternada entre os mínimos locais. Para o caso de n ímpar a simetria do potencial de substrato é preservada não invertendo o sentido da corrente. Para o caso de n par a simetria do potencial é invertida, promovendo as inversões de corrente. Nas seções posteriores será visto como outros parâmetros, tais como amplitude da força externa e temperatura, estão relacionados com o desprendimento destas partículas mais presas e conseqüentemente, com a simetria do potencial efetivo.

2.3.2 Regime adiabático determinístico

Fixado o valor de $\beta = 1,5$ e $U_{s0} = 0,74$, que corresponde a um ponto na região onde ocorrem as múltiplas inversões de sinal com n (ver figura 2.6), foi analisado o comportamento da corrente de partículas J com a amplitude da força externa A no regime adiabático com $T = 0$. A frequência desta mesma força externa foi fixada em $\omega = 0,01$ que corresponde a este regime. A curva $J(A)$ apresenta oscilações que dependem do valor de n . Isto pode ser visto na figura 2.8 (curvas cheias, sem os símbolos) para $n = 1, 2, 3$ e 4 . Estas são $n - 1$ oscilações ou inversões de corrente para um dado valor de $n > 1$. Para baixas amplitudes, com valores acima da amplitude crítica correspondente, o sentido da corrente é o mesmo daquele obtido nos diagramas 2.6: corrente positiva para n ímpar e negativa para n par, como esperado. As inversões apresentadas para amplitudes maiores são uma competição entre estados dinâmicos de movimentos para a esquerda e para a direita. Das formas das curvas mostradas na figura 2.8 nota-se que parte da curva $J(A)$ para $n = 2$, é similar a curva $J(A)$ para $n = 1$ e que parte da curva para $J(A)$ para

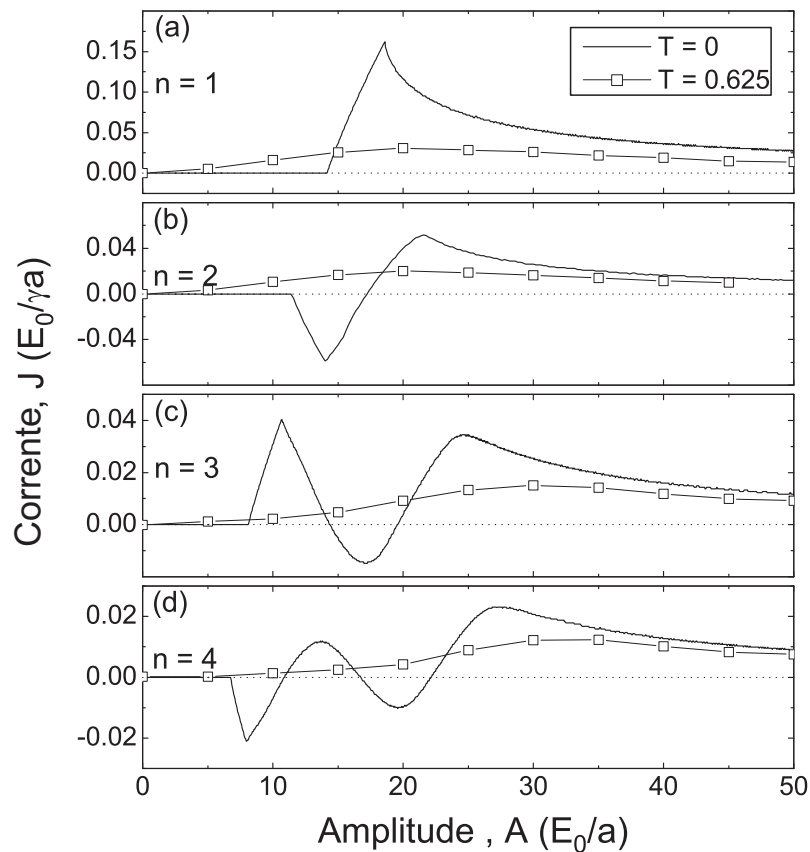


Figura 2.8 Corrente de partículas em função da amplitude da força oscilante externa para os seguintes parâmetros $\beta = 1,5$ e $U_{s0} = 0,74$. As linhas cheias representam a corrente para $T = 0$ e o conjunto de linhas com símbolos representam a corrente para $T = 0,625$ no regime de altas temperaturas. Para o caso $T = 0$ existe $n - 1$ oscilações (inversões) para $n > 1$. Para $T = 0,625$ a corrente de partículas é sempre positiva.

$n = 3$ é similar a curva $J(A)$ para $n = 2$, etc. ou seja o comportamento de $J(A)$ para um dado n está contido no comportamento $J(A)$ para um valor de $n - 1$, indicando que a dinâmica para um dado valor de n pode estar associada ao desprendimento gradual das partículas dos poços de potencial. Cada desprendimento estaria associado à inversão no sentido fácil do potencial efetivo experimentado pelas partículas menos presas ao potencial.

Para estudar estes estados dinâmicos, simulamos o sistema sob o efeito de uma força constante F tanto no sentido positivo quanto no sentido negativo, para vários valores de F . Este procedimento permite uma caracterização dos estados dinâmicos de uma maneira mais uni-

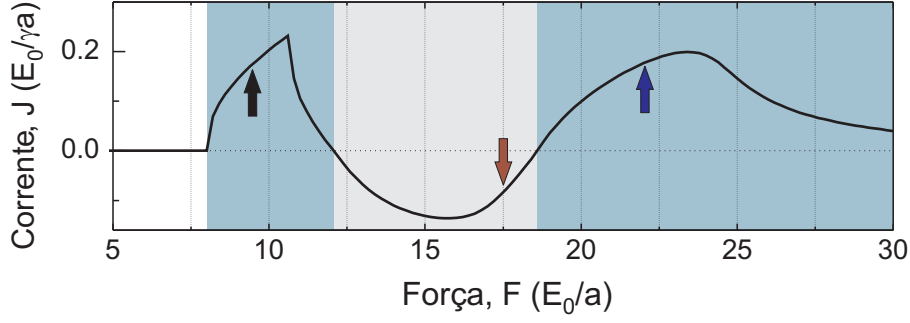


Figura 2.9 Medida da corrente de partículas ($J(F) = J_+(F) + J_-(F)$), para o caso $n = 3$, a partir da corrente induzida por forças constantes para a direita ($J_+(F)$) e para a esquerda ($J_-(F)$). As setas indicam os valores de força investigados na figura 2.10.

forme ao considerarmos a força F aplicada em um tempo suficientemente longo, tomando as médias neste intervalo de tempo. A corrente resultante ao se considerar a soma da corrente induzida pela força positiva com a corrente induzida pela força negativa, $J(F) = J_+(F) + J_-(F)$, pode ser comparada àquela de uma força oscilante quadrada adiabática.

A forma de $J(F)$ mostrada na figura 2.9 para $n = 3$, é semelhante àquela obtida com a força senoidal 2.8-c, apresentando o mesmo comportamento qualitativo de oscilações. Nesta figura, as cores de fundo realçam as regiões com corrente positiva e negativa que serão úteis na discussão do estado dinâmico apresentado em grande parte destas regiões. As setas indicam os valores de força, $F = 9, 17, 5$ e 22 , na direção positiva, onde foram medidas a densidade média de partículas $\rho(x)$ e a massa acumulada $m(x)$ que são mostradas na figura 2.10. Nesta figura a cor de fundo indica o potencial catraca de substrato, que neste caso possui dois mínimos locais.

Para o valor de força $F = 9$ os picos duplos situados próximos aos mínimos locais dos potenciais indicam que $2N/3$ partículas, em média, permanecem presas ao potencial, enquanto $N/3$ partículas estão deslocalizadas, a provocar colisões com as demais partículas e eventualmente tomando suas posições nos mínimos de potencial. Esta conclusão pode ser ratificada pela figura 2.10-(b) (linha cheia) que mostra que a massa acumulada em um período apresenta um salto de aproximadamente zero para um, ao se integrar a região próxima aos mínimos de potencial. Isto favorece a manutenção do movimento preferencial no sentido fácil do potencial original, pois o movimento das $N/3$ partículas pode ser considerado como sendo em um poten-

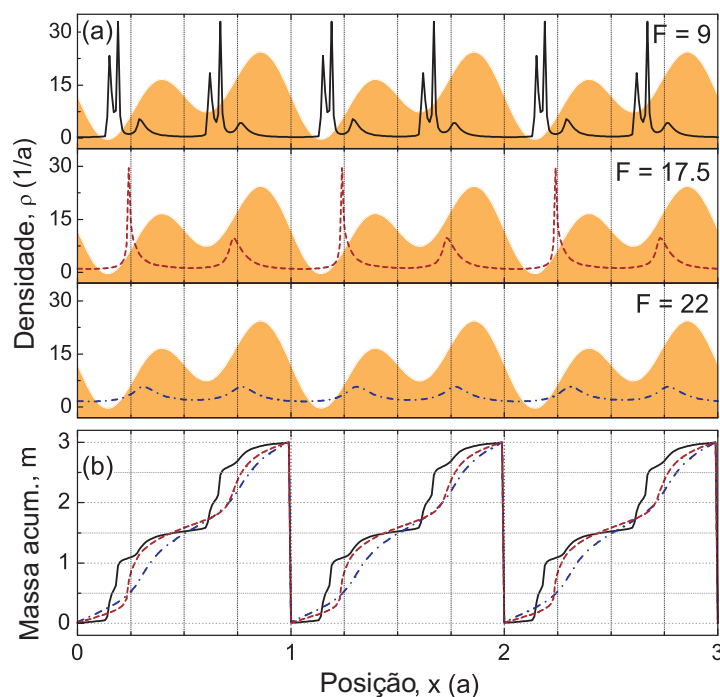


Figura 2.10 Densidade de partículas calculadas para forças de magnitude $F = 9, 17,5$ e 22 na direção positiva do potencial para o caso $n = 3$. Estes valores de força correspondem a pontos na parte oscilante do gráfico da figura 2.9. (a) Os picos duplos para $F = 9$ indicam que em média tem-se $2N/3$ presas aos mínimos de potencial enquanto $N/3$ partículas, em média, estão livres para o movimento. Isto é comprovado pelo curva da massa acumulada (linha cheia) no painel (b) onde esta integração apresenta saltos de aproximadamente um na região dos mínimos. Para $F = 3$ existe em média $N/3$ partículas presas aos mínimos e para $F = 22$ todas as partículas estão deslocalizadas.

cial efetivo formado pelo potencial de substrato mais $2N/3$ partículas presas em seus mínimos locais. Para $F = 17,5$ existe em média $N/3$ partículas localizadas enquanto as outras estão deslocalizadas, e isto por sua vez, favorece o movimento preferencial no sentido mais íngreme do potencial original. Para $F = 22$ todas as partículas estão deslocalizadas, interagindo com o potencial de substrato sem a influência de partículas presas, favorecendo novamente a simetria original.

Para a força na direção negativa, as forças em que as partículas se desprendem são diferentes daquelas para a força positiva. Isto pode ser identificado na figura 2.11 que mostra o valor dos máximos locais de $\rho(x)$ (ver figura 2.10), para vários valores de F , próximo aos mínimos

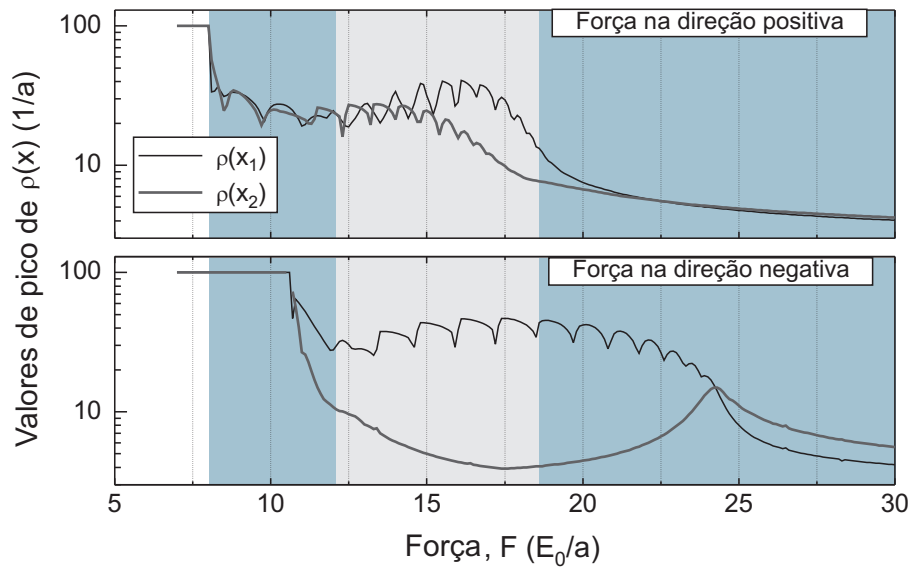


Figura 2.11 Máximos da densidade de partículas em função da magnitude das forças para a direita (painel superior) e para a esquerda (painel inferior), para o caso $n = 3$. $\rho(x_1)$ corresponde aos máximos próximos ao mínimo global e $\rho(x_2)$ corresponde aos máximos próximos ao outro mínimo do potencial (ver cores de fundo da figura 2.10)

loais. As curvas $\rho(x_1)$ e $\rho(x_2)$ se referem aos valores de pico próximo ao primeiro e ao segundo mínimo de potencial, medindo portanto a transição entre a localização nestes mínimos e a delocalização das partículas. As cores de fundo indicam as regiões com corrente positiva e negativa mostradas na figura 2.8. Comparando em conjunto as curvas tanto para a força positiva quanto para a força negativa, grosso modo, a primeira parte da oscilação pode ser caracterizada pelo movimento de $N/3$ partículas deslocalizadas estando as outras partículas localizadas, a segunda parte da oscilação pode ser considerada, em grande parte do intervalo de amplitudes, como resultado do movimento de $2N/3$ partículas deslocalizadas e por fim a parte final da oscilação está relacionada ao movimento de todas as N partículas deslocalizadas, que preserva a simetria do potencial original.

2.3.3 Inversões de corrente induzidas por ruído térmico

Na seção anterior foi discutido o comportamento da corrente de partículas interagentes no potencial catraca no regime determinístico em função da amplitude externa, que é mostrado na figura 2.8. Desta mesma figura pode-se notar regiões onde a simetria original do potencial do substrato é alterada pois a corrente de partículas é invertida, passando de positiva para negativa para os valores $n = 2, 3$ e 4 . Estas inversões têm como agente principal a interação entre as partículas como já foi mostrado nas seções anteriores. O que será discutido nesta seção é o papel da temperatura no restabelecimento da simetria original do potencial de substrato nesta região onde a corrente de partículas é negativa, ou seja, será estudada a relação entre a interação entre as partículas e o ruído térmico.

Ainda na figura 2.8, o efeito da temperatura é mostrado no gráfico A vs J para os parâmetros $\beta = 1,5$, $U_{s0} = 0,74$ e $n = 1, 2, 3$ e 4 . Na temperatura $T = 0,625$ (que corresponde ao regime de altas temperaturas), a curva $J(A)$ é totalmente positiva para qualquer valor de n , sendo restabelecida a simetria do potencial original. Consequentemente, para o intervalo de parâmetros onde a corrente é negativa para $T = 0$, existe uma inversão de corrente, para o sentido positivo, a uma temperatura finita.

Para entender a origem destas inversões, estendemos este estudo para uma região no espaço de parâmetros U_{s0} vs A , para $n = 2$, $\beta = 1,0$ e $\omega = 0,01$ (regime adiabático). Na figura 2.12-(a), pode ser localizada a região onde a corrente é negativa no plano $U_{s0} - A$ para $T = 0$. A partir disso foi delimitada uma região (mostrada em vermelho em 2.12-(a)), que foi o ponto de partida para a investigação do efeito do ruído térmico no transporte de partículas. A temperatura foi lentamente variada nesta região para alguns valores de U_{s0} e A , e o resultado foi compilado no diagrama de fases mostrado na figura 2.12-(b). A superfície indica as temperaturas de inversão de corrente que separam as regiões de corrente positiva e negativa.

A figura 2.12-(c) mostra a dependência da amplitude crítica, A_c , para vários valores de U_{s0} , em função da temperatura. A_c é a amplitude da força externa no qual para um dado U_{s0} e T , ocorre a inversão de corrente induzida por ruído térmico. Esta amplitude crítica decresce com o aumento da temperatura de uma forma linear. Como foi visto na seção anterior, no caso $n = 2$,

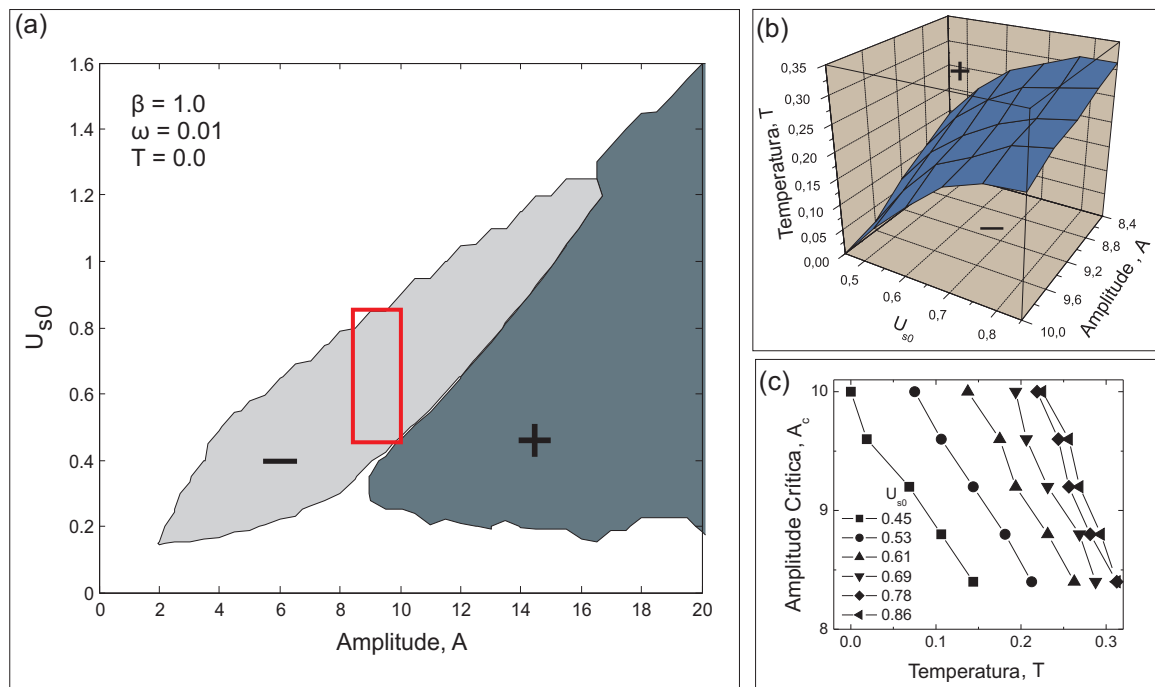


Figura 2.12 (a) Diagrama de fases $A - U_{s0}$ para o sentido da corrente de partículas para $n = 2$, $\beta = 1,0$, $\omega = 0,01$ e $T = 0,0$. (b) Diagrama de fases que mostra o efeito do aumento da temperatura na região retangular destacada na parte (a). A superfície mostra os pontos de inversão de corrente, que separam as regiões de baixas temperaturas (corrente negativa) das regiões de altas temperaturas (corrente positiva). (c) Comportamento linear da amplitude crítica, extraída da superfície de inversão mostrada em (b), como função da temperatura para vários valores de U_{s0} .

o movimento pode ser considerado, em primeira análise, como o movimento de $n/2$ partículas deslocalizadas, sob o efeito de um potencial efetivo formado pelo potencial de substrato e por $n/2$ partículas localizadas. Esta dinâmica inverte o sentido do movimento produzindo uma corrente negativa. Para se restabelecer o sentido da dinâmica original seria preciso, de alguma forma, deslocalizar estas partículas. A forma $A_c = a - bT$, mostrada na figura 2.12-(c) sugere uma ativação térmica das partículas localizadas sobre a barreira de energia do potencial de substrato, sendo A_c o ponto de transição para um regime de *arrastamento* (creep motion). Esta mesma dependência linear é encontrada por exemplo no movimento de linhas de fluxo em supercondutores duros [36] e de paredes de domínio em materiais ferromagnéticos [37]. Nestes casos a condição para o movimento de arrastamento é a independência de ΔU_s com relação a

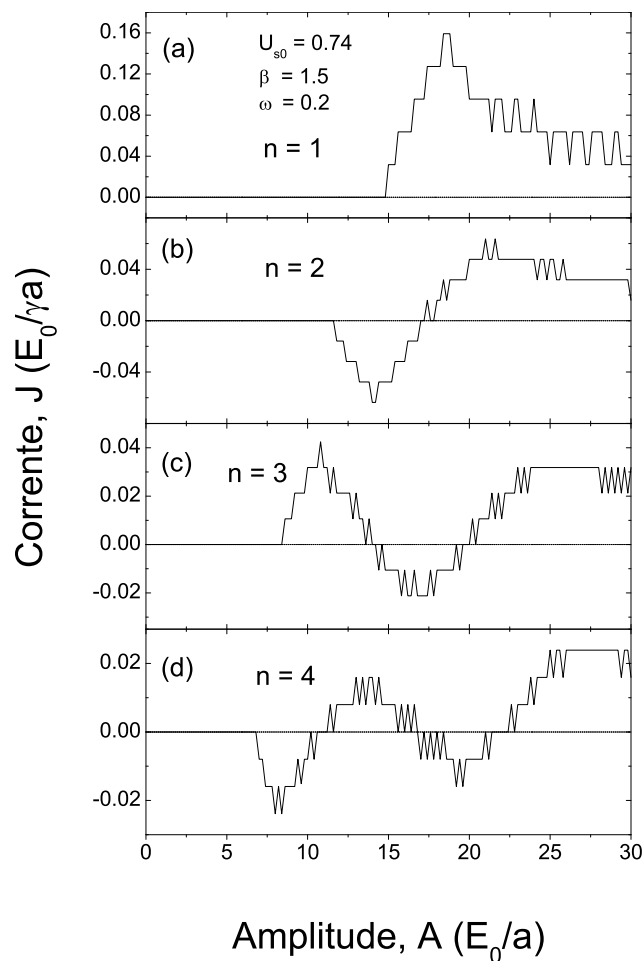


Figura 2.13 Corrente de partículas em função da amplitude da força externa para uma frequência moderada $\omega = 0,2$. Os degraus de corrente são discretizados sendo o valor destes intervalos dependente de n .

T e que $k_B T \ll \Delta U_s$, que é o caso aqui considerado, pois $\Delta U_s \sim 4U_{s0}$ é muito maior do que as temperaturas de transição como pode ser visto de 2.12-(c).

2.3.4 Regime de altas frequências

Antes da discussão do regime de altas frequências é mostrado na figura 2.13, a forma de $J(A)$ para $n = 1, 2, 3$ e 4 , em um valor de frequência intermediária $\omega = 0,2$, para os seguintes parâmetros $\beta = 1,5$, $U_{s0} = 0,74$ e $T = 0$. Neste gráfico, pode-se notar a diferença em relação à

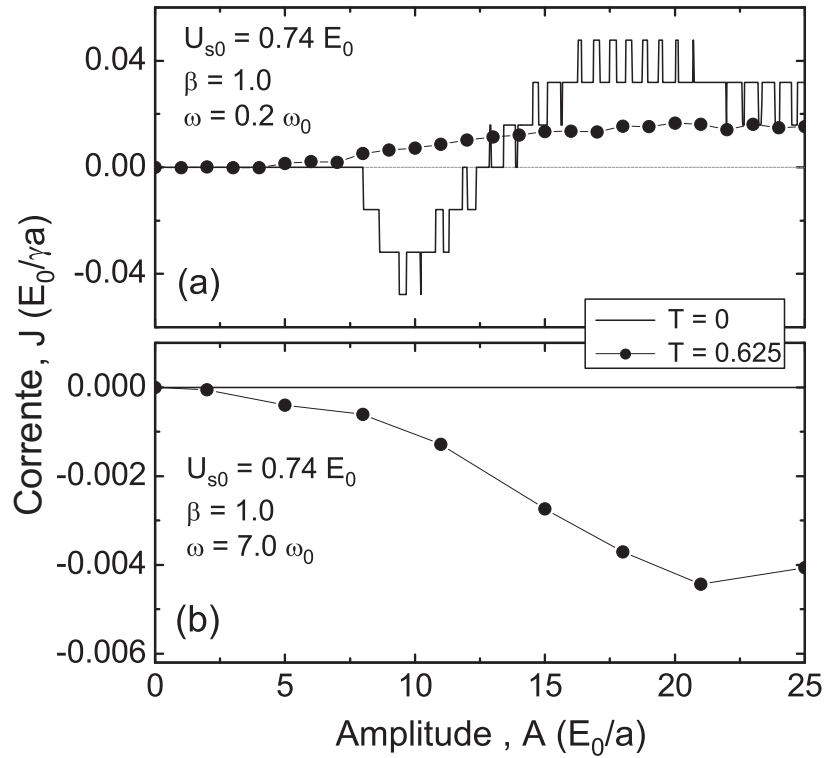


Figura 2.14 Corrente de partículas em função da amplitude da força externa para $n = 2$, $\beta = 1,0$, $U_{s0} = 0,74$.(a) Para frequências moderadas ($\omega = 0,2$, linha cheia) em $T = 0$, a corrente apresenta um comportamento discretizado. Para uma alta temperatura ($T = 0,625$, linha com símbolos) a corrente é totalmente positiva. (b) Para uma alta frequência ($\omega = 7$) a corrente de partículas é nula (linha cheia) em $T = 0$. Ao se combinar altas frequências e altas temperaturas $T = 0,625$, uma corrente de partículas é induzida no sentido mais íngreme do potencial (linha com símbolos.)

curva correspondente no regime adiabático 2.8. As oscilações de corrente ainda estão presentes, mas $J(A)$ apresenta um comportamento discretizado com intervalos ou degraus de corrente que dependem de n . No caso de partículas não-interagentes este efeito é observado, com o valor da corrente sendo um múltiplo de $v_0 = \omega a / 2\pi$ (o que daria $v_0 \approx 0,03183$ para $\omega = 0,2$) devido ao deslocamento das partículas por um número inteiro de períodos do potencial de substrato, a cada ciclo da força externa. No caso interagente mostrado na figura 2.13, estes degraus são aproximadamente $v_0 = 0,3183, 0,1592, 0,01061, 0,00796$ para $n = 1, 2, 3$ e 4 respectivamente. Isto corresponde a $v_0 = \omega a / 2n\pi$ ou seja a um deslocamento das partículas por um múltiplo de a/n por ciclo da força externa.

Ao se introduzir o ruído térmico neste valor intermediário de frequências, os degraus são suavizados e no regime de altas temperaturas a corrente de partículas é totalmente positiva, como no caso adiabático. Existe portanto a inversão do sentido da corrente nos casos onde a simetria do potencial original foi alterada. Isto é mostrado para $n = 2$, $\beta = 1,0$ e $U_{s0} = 0,74$, na figura 2.14-(a) em $T = 0,625$ (círculos pretos) que corresponde a uma alta temperatura.

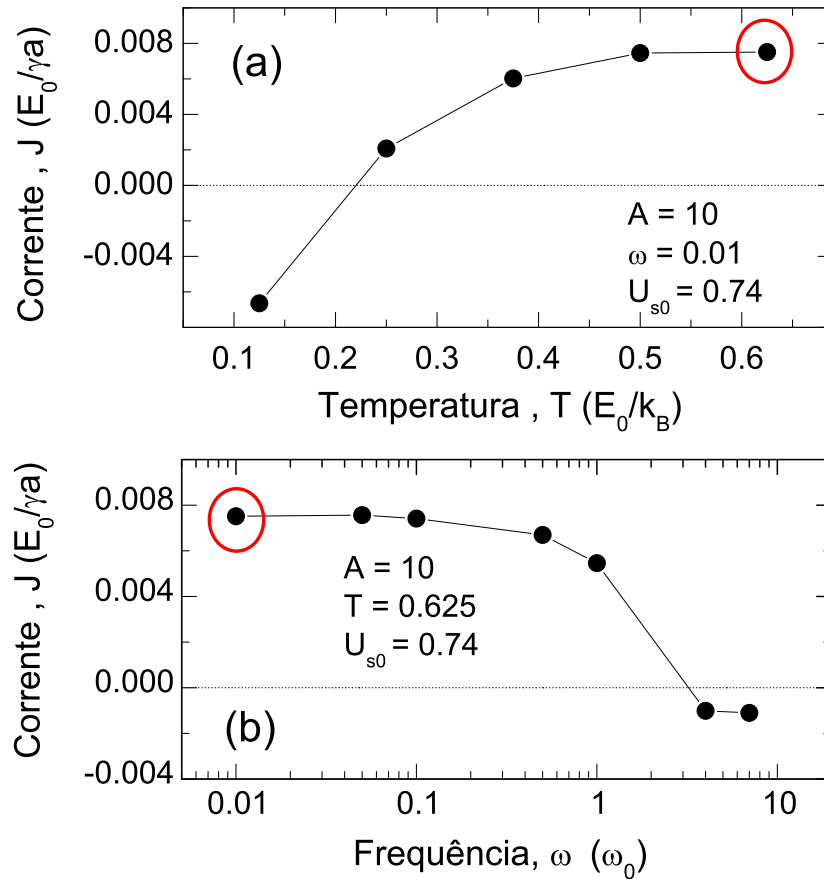


Figura 2.15 Inversões de corrente induzidas por ruído térmico, (a) No regime adiabático $\omega = 0,01$, para $A = 10$, $\beta = 1,0$ e $U_{s0} = 0,74$ onde a corrente originalmente negativa se torna positiva e (b) Em conjunto com altas frequências, que inverte novamente o sentido da corrente. O ponto em vermelho no painel (a) é o ponto de partida para as simulações no painel (b).

No regime de alta frequência de oscilação ($\omega = 7,0$), sem a ativação térmica, as partículas permanecem presas oscilando no potencial de substrato, ($\langle v \rangle = 0$) como mostra a figura 2.14-(b) (linha cheia). Com a introdução do ruído térmico a corrente assume valores negativos, ou seja, o movimento é na direção mais íngreme do potencial, como no caso não-interagente de

altas frequências e com ruído [4]. A figura 2.15 sintetiza as inversões de corrente onde o ruído térmico tem um papel importante. A parte (a) da figura mostra uma inversão de corrente tendo como agente principal o ruído térmico no regime adiabático ($\omega = 0,01$), para os parâmetros $\beta = 1,0$, $U_{s0} = 0,74$ e $A = 10$. O círculo vermelho que aparece nesta mesma figura é o ponto de partida para a simulação que resultou na figura 2.15-(b). Nesta parte, a frequência foi variada do regime adiabático para o regime de altas frequências em uma temperatura alta $T = 0,625$. O efeito conjunto de altas frequências e altas temperaturas inverte novamente o sentido da corrente, pois neste regime as interações perdem importância e para sistemas não-interagentes estas inversões são observadas [4] [17].

2.3.5 Dinâmica sobremortecida e subamortecida

Neste estudo do transporte de partículas brownianas interagentes confinadas em um potencial de substrato do tipo catraca unidimensional, foram utilizados nas simulações os valores $\gamma = 16$ e $m = 1$, para o coeficiente de viscosidade e massa respectivamente. Nesta seção serão discutidos alguns resultados para outros valores de m , no regime adiabático em $T = 0$, explorando alguns aspectos qualitativos e quantitativos dos regimes sobre e subamortecido para este sistema.

No caso de partículas não-interagentes no regime sobreamortecido, a corrente de partículas $J(A)$ é sempre no sentido menos íngreme do potencial de substrato e não depende das condições iniciais. A curva $J(A)$ para o caso subamortecido moderado é mais robusta quanto à forma do potencial, variando de uma maneira abrupta após a amplitude de desprendimento das partículas e praticamente limitada ao intervalo de amplitude das janelas de retificação, ou seja os valores de amplitudes onde ocorrem o desprendimento de partículas. O regime subamortecido pode também ser caótico, com $J(A)$ dependendo das condições iniciais e exibindo múltiplas inversões de corrente em função da amplitude da força externa [18]. Uma maneira de se identificar a que regime (sobre ou subamortecido) corresponde o movimento das partículas no potencial periódico, é calculando a constante elástica k relativa a um movimento harmônico próximo aos mínimos do potencial em questão. A partir da constante elástica k , pode-se obter uma estimativa da massa crítica m^* que corresponde a transição entre o movimento sub ou

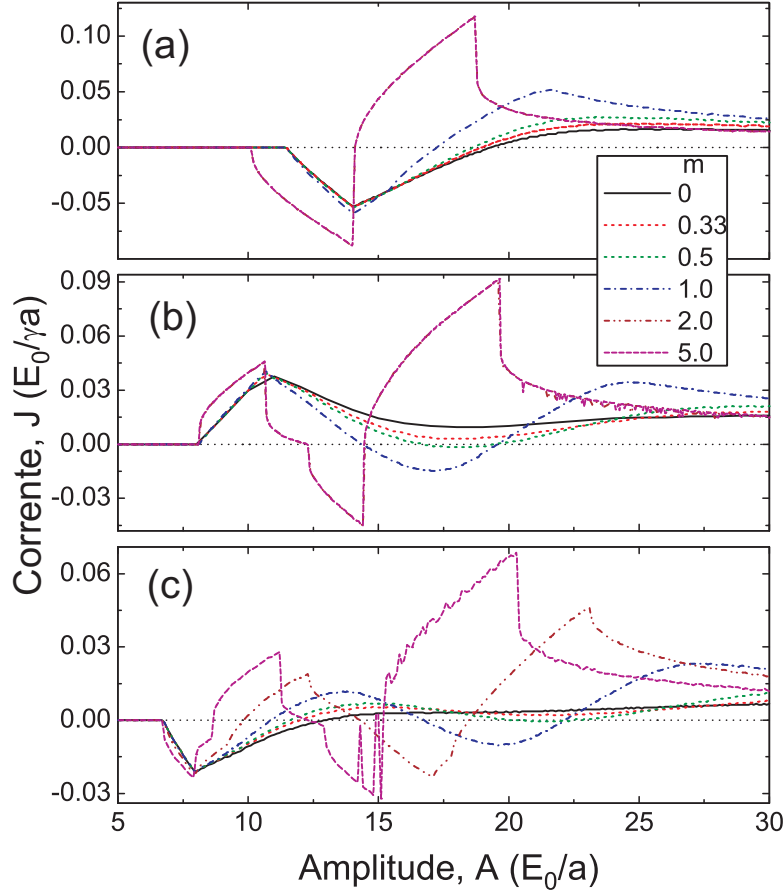


Figura 2.16 Corrente de partículas como função da amplitude A para $n = 2$ (a), $n = 3$ (b) e $n = 4$ (c), calculados para os valores de massa 0, 0,33, 0,5, 1,0, 2,0 e 5,0.

sobreamortecido.

Para o valor de $\beta = 1,5$, que foi o valor utilizado por exemplo no gráfico da figura 2.8, k é igual a $262U_{s0}/a^2$. Para se obter a estimativa da massa crítica ou de transição entre os regimes sobre e subamortecido m^* , deve-se comparar a frequência $\omega = \sqrt{k/m}$ com a razão γ/m . Para $\omega = \sqrt{k/m} \approx \gamma/m$, o valor de m^* é aproximadamente 1,32. Para valores de $m > 1,32$, aproximadamente, o sistema está no regime subamortecido. Na figura 2.16 são apresentadas curvas $J(A)$ para os parâmetros $\beta = 1,5$, $\gamma = 16$ e $n = 3, 4, 5$. A massa é restrita ao intervalo $0 \leq m \leq 5$. As curvas para $m = 2$ e $m = 5$, apresentam transições abruptas e estão restritas a intervalos bem definidos de amplitude, em um comportamento que se assemelha ao caso subamortecido não interagente [20]. Para valores ainda maiores de m , a dinâmica apresenta características que

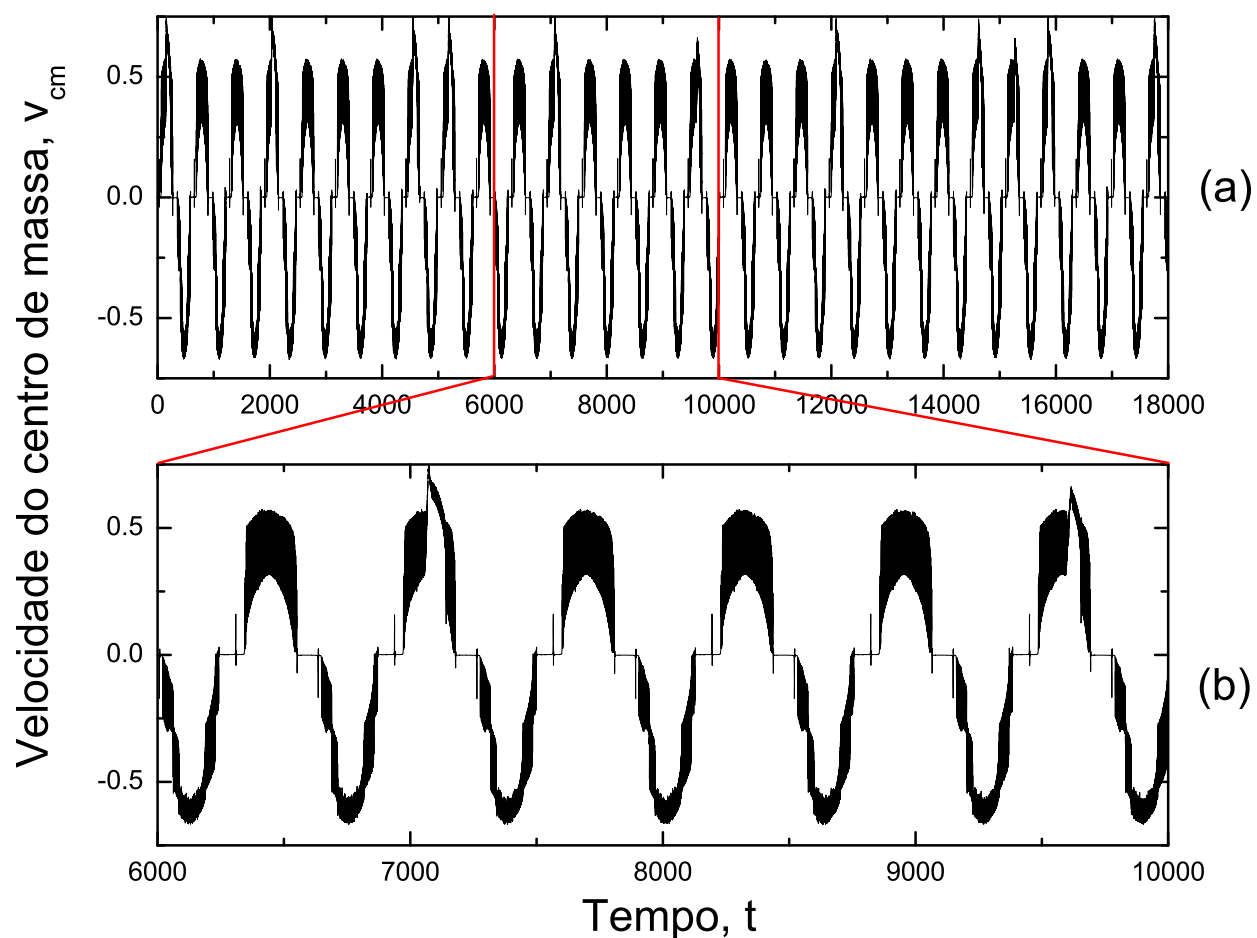


Figura 2.17 Série temporal da velocidade do centro de massa para o caso $n = 4$, $m = 5$, $\gamma = 16$ e $A = 14,5$ (ver figura 2.16). As irregularidades na parte superior da série, sem uma sequência bem definida, indicam uma dinâmica caótica.

sugerem um comportamento caótico. Isto pode ser visto mesmo no caso $m = 5$ para amplitudes $A > 14$ (painel inferior da figura 2.16) onde a curva apresenta ruídos devido a esta dinâmica caótica. A figura 2.17 mostra a série temporal da velocidade do centro de massa para alguns períodos da força externa em $A = 14,5$. Nesta série podemos identificar “saltos” eventuais na parte superior da curva, que aparecem sem obedecer uma sequência bem definida. Foi observado ainda que a resposta $v_{cm}(t)$ do sistema é muito sensível as condições iniciais. Estes fatos sugerem um regime caótico.

Na seção 2.3.2 foi visto que, grosso modo, as oscilações de corrente podem ser explicadas pelo desprendimento gradual das partículas, sendo o estado dinâmico para um caso de

n partículas por período de potencial, reduzido para um caso de $n - 1$ partículas por poço de potencial. Para o caso subamortecido, isto pode ser visualmente inferido das formas de $J(A)$ para o caso $m = 5$, onde a forma $J(A)$ para $n = 4$ e $A > 8,7$ (painel inferior da figura 2.16) é bastante semelhante à forma de $J(A)$ para $n = 3$. O mesmo se verifica para a comparação entre as formas de $J(A)$ para $n = 3$ e $n = 2$. Para o caso $m < m^*$ as oscilações de corrente, devido ao desprendimento gradual das partículas, ainda existem, mas menor intensidade. Para $m < 0,5$, aproximadamente, não há mais as inversões de corrente, como as observadas para os outros valores de m .

2.4 Conclusões

Apresentamos neste capítulo um estudo de partículas brownianas interagentes sujeitas a um potencial periódico do tipo catraca unidimensional e a uma força externa oscilante com amplitude A e frequência ω . Utilizando a dinâmica de Langevin, calculamos grandezas relevantes para a caracterização do movimento coletivo como a corrente de partículas J , variando alguns parâmetros importantes do sistema como a densidade de partículas, amplitude da força externa, frequência de oscilação e temperatura. No regime adiabático a corrente de partículas apresenta $n - 1$ oscilações (para $n > 1$) ao se aumentar o valor da amplitude da força externa, devido ao desprendimento gradual das partículas. O movimento destas partículas menos presas pode ser aproximado como sendo em um potencial efetivo formado pelo potencial de substrato e as partículas mais presas. A simetria deste potencial efetivo depende do número de partículas presas (que diminui com o aumento da amplitude), ocasionando as oscilações de corrente. Os efeitos de temperatura foram estudados, e para uma temperatura suficientemente alta a corrente de partículas para qualquer n é positiva. Para intervalos de amplitude, em $T = 0$, onde a corrente de partículas assume um valor negativo devido a interação entre as mesmas, existem inversões de corrente em função da temperatura. O comportamento linear da amplitude crítica $A_c(T)$, que é a amplitude onde ocorre a inversão de corrente para um dado T , sugere uma inversão de corrente induzida pela ativação térmica das partículas presas nos mínimos do potencial sobre as

barreiras de energia. No regime de frequências de oscilação moderadas ocorre o efeito lock-in, onde $J(A)$ apresenta um caráter discretizado, com os intervalos de corrente sendo dependendos da densidade de partículas. Por fim, o efeito conjunto de altas frequências e altas temperaturas promove uma nova inversão de corrente, sendo esta na direção mais íngreme do potencial, como observado no caso de partículas não-interagentes. O artigo correspondente aos resultados apresentados neste capítulo foi aceito para publicação no *Physical Review E*-EU10340/daSilva com o título *Reversible transport of interacting brownian ratchets*.

Monte Carlo em tempo contínuo aplicado ao modelo ANNNI diluído

3.1 Transições de fases quânticas

3.1.1 Transições em $T = 0$

Nas últimas décadas, ao lado do interesse por transições de fases clássicas onde a criticalidade é regida por flutuações induzidas por temperatura, surgiu o interesse em se estudar transições de fases quânticas [38] [39] [40] que são induzidas pela variação de algum parâmetro em um hamiltoniano quântico. Os exemplos e as realizações experimentais são diversas indo das transições metal-isolante [41] do tipo Anderson-Mott passando por transições entre fases de Hall em sistemas eletrônicos bidimensionais [39] e sistemas magnéticos puros ou desordenados, como é o caso das transições ordem-desordem no composto $LiHoF_4$ [42], a qual consiste na flutuação dos íons de Ho entre dois estados de spins que são alinhados paralelos ou antiparalelos a um eixo cristalino particular, cuja ordem é destruída por um campo magnético perpendicular a tal eixo. Um modelo magnético relacionado às transições neste composto é o modelo de Ising em campo transversal [43] que será discutido mais adiante. Tal modelo serviu como base para o modelo que investigamos nesta tese que é um modelo do tipo Ising com interações competitivas diluídas.

As transições de fases clássicas [44] [45] constituem uma área da física estatística bastante sólida, sendo seus pilares as teorias ou conceitos de parâmetro de ordem, *scaling*, renormalização e universalidade, sendo então natural que as transições de fases quânticas se utilizem de toda esta base teórica em sua descrição. Apesar de tantas similaridades as transições de fases quânticas possuem certas particularidades que serão evidenciadas na discussão que se segue.

Nas transições de fases clássicas de equilíbrio, a dinâmica geralmente é desacoplada das variáveis não dinâmicas. Podemos constatar isto ao escrever a função de partição para um sistema clássico geral descrito por um hamiltoniano $\mathcal{H} = H_{cin} + H_{pot}$, onde H_{cin} descreve a energia cinética e H_{pot} a energia potencial, isto é

$$Z = \int dp \exp\left(-\frac{H_{cin}}{k_B T}\right) \int dq \exp\left(-\frac{H_{pot}}{k_B T}\right). \quad (3.1)$$

onde T é a temperatura absoluta e k_B é a constante de Boltzmann. A parte cinética do hamiltoniano pode ser fatorada e eventualmente integrada e não apresenta qualquer singularidade. As contribuições singulares para a função de partição e consequentemente para a energia livre provêm do segundo fator que corresponde à parte na energia potencial do hamiltoniano. As singularidades referentes às transições de segunda ordem dão origem a divergências nas funções resposta e no comprimento de correlação. Ao comportamento assintótico de cada grandeza podemos associar um expoente crítico, os quais são grandezas *universais* que não dependem dos detalhes microscópicos mas apenas de características bem gerais como a dimensionalidade, o número de componentes do parâmetro de ordem e o alcance das interações. Para o caso de sistemas magnéticos temos como exemplo,

$$\begin{aligned} \xi &\sim |\delta|^{-\nu} && \text{(comprimento de correlação),} \\ m|_{H=0} &\sim |\delta|^\beta && \text{(magnetização a campo nulo),} \\ \chi &\sim |\delta|^{-\gamma} && \text{(susceptibilidade magnética),} \\ c &\sim |\delta|^{-\alpha} && \text{(calor específico),} \\ m|_{(H,\delta=0)} &\sim H^{\frac{1}{\delta}} && \text{(magnetização crítica),} \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $\delta = (T - T_C)/T_C$ é uma medida da temperatura relativa ao valor crítico, ξ é o comprimento de correlação associado ao parâmetro de ordem mencionado acima, m se refere à magnetização que é o parâmetro de ordem, χ é a susceptibilidade magnética, c é o calor específico e H é o campo magnético externo. ν , β , γ , α , δ são os respectivos expoentes críticos associados que não são independentes entre si segundo a *hipótese de escala*. Esta relação, de início uma hipótese fenomenológica [46] [47], foi depois deduzida por primeiros princípios através do grupo de renormalização introduzido por Wilson [48]. Esta hipótese propõe leis de homo-

geneidade próximas a região crítica. Para um sistema magnético clássico acoplado a um campo externo, por exemplo, tem-se para a parte singular da energia livre,

$$f(\delta, H) = b^{-d} f(\delta b^{\frac{1}{\nu}}, H b^{y_H}). \quad (3.3)$$

O fator de escala b é um número positivo arbitrário e y_H é um outro expoente crítico. Esta forma homogênea se estende a outras grandezas termodinâmicas que estão relacionadas às derivadas de f . Em decorrência, os expoentes em (3.2) não são independentes e dão origem às leis de escala. Uma relação que resulta e envolve diretamente a dimensionalidade d é a equação de *hiperescala*,

$$2 - \alpha = d\nu \quad (3.4)$$

Nas transições de fases quânticas, diferentemente das transições de fases clássicas, a dinâmica é parte importante na descrição do fenômeno crítico. O hamiltoniano que engloba os graus de liberdade microscópicos, agora possui termos que não comutam entre si, implicando que a dinâmica deve ser considerada desde o início no estudo destes fenômenos. A não comutatividade dos operadores, através da relação de incerteza de Heisenberg, produz flutuações quânticas que podem ser controladas por um parâmetro Δ no hamiltoniano, o qual também controla a energia do estado fundamental. Próximo à transição esta energia é não analítica e ocorrem flutuações do parâmetro de ordem em todas as escalas do sistema, tanto espacialmente quanto temporalmente. Neste contexto, é importante juntarmos ao conjunto de comportamentos assintóticos (3.2), o tempo de correlação,

$$\xi_\tau \sim \xi^z, \quad (3.5)$$

onde z é o expoente dinâmico que é também uma grandeza universal como ν , β , χ , α e δ . Como mostra sua definição, z é uma medida de como se relacionam as escalas das correlações no espaço e no tempo. A origem deste termo “expoente dinâmico” está relacionado ao estudo dos fenômenos críticos clássicos onde é associado ao “critical slowing down” [49]. Nas transições clássicas o expoente dinâmico não é universal.

A lei de homogeneidade (3.3) [38] [50] pode ser generalizada para o caso quântico,

$$f(\delta, H, \tau) = b^{-(d+z)} f(\delta b^{\frac{1}{\nu}}, H b^{y_H}, \tau b^z) \quad (3.6)$$

com a respectiva lei de escala correspondente a (3.4) sendo [40],

$$2 - \alpha = (d + z)\nu \quad (3.7)$$

Das expressões acima podemos identificar uma dimensão efetiva $d_{ef} = d + z$. Nos casos de sistemas onde o tempo e o espaço participam da criticalidade de uma forma simétrica, como por exemplo em sistemas magnéticos puros, $z = 1$. Em sistemas desordenados, z pode ser diferente de um. A dinâmica então, para transições puramente quânticas ($T = 0$), introduz dimensões extras com relação aos sistemas clássicos e conseqüentemente mudam sua classe de universalidade.

3.1.2 Efeitos da temperatura

O estudo do efeito da temperatura nas transições quânticas é bastante relevante, mesmo porque os experimentos são sempre realizados em temperaturas finitas. O efeito da temperatura é drástico em tais transições havendo até um “crossover” de comportamentos críticos mesmo para temperaturas extremamente baixas. Podemos ver isto comparando as energias quânticas e clássicas próximo à região crítica. Na transição o tempo de correlação diverge e, então, a frequência característica das oscilação dos sistemas, $\omega_c \sim \xi_\tau^{-1}$, tende a zero implicando que para uma temperatura finita,

$$\hbar\omega_c \ll k_B T \quad (3.8)$$

Deste modo, para temperaturas finitas a criticalidade é essencialmente clássica, mesmo a descrição microscópica sendo dada por um hamiltoniano quântico.

Na figura 3.1 (a), é apresentado um esboço de um diagrama de fases, T vs. Δ , de um sistema quântico, mostrando a dependência da temperatura crítica com o parâmetro Δ do hamiltoniano quântico, e as regiões sob influência das flutuações clássicas e/ou quânticas. Neste exemplo, consideramos que, para $\Delta = 0$, existe uma transição ordem-desordem puramente clássica, com uma temperatura crítica T_c , sendo que, para $\Delta \neq 0$, o valor desta temperatura decresce até zero, pois o aumento das flutuações quânticas favorece a desordem. Este poderia ser, por exemplo, o esboço do diagrama de fases do modelo de Ising em campo transversal para $d > 1$. Como

foi discutido acima, a região próxima à linha crítica possui comportamento crítico clássico, indicado na figura pela região entre as linhas tracejadas. Esta região torna-se cada vez mais estreita ao se aproximar de Δ_c onde, em $T = 0$, a transição é puramente quântica e a criticalidade é diferente daquela a temperaturas finitas devido à divergência do tempo de correlação neste ponto. Abaixo desta linha de *crossover* (região *I*), onde $\hbar\omega_c \sim k_B T$, as flutuações quânticas dominam, portanto a ordem magnética tem predominância quântica, ou seja, apresentam certa coerência de fases (interferência) mesmo que não sejam por um tempo infinito pois agora estas estão limitadas pela temperatura. Para a região *II*, $\Delta > \Delta_c$, a ordem magnética é destruída principalmente por flutuações quânticas. Este é um estado desordenado embora haja certa coerência de fases e é isto que o difere de um estado clássico desordenado. Finalmente para a região *III*, próximo à linha $T = 0$, o sistema é crítico com relação a Δ e as singularidades são “arredondadas” quase que exclusivamente pela temperatura. Por isso um experimento que ocorra próximo a esta linha pode explorar propriedades de *scaling* com a temperatura na análise dos dados.

Um diagrama apropriado para sistemas unidimensionais é mostrado na figura 3.1 (*b*). Para um sistema magnético unidimensional, por exemplo, não existe ordem de longo alcance para $T \neq 0$ e a ordem só é possível exatamente em $T = 0$. A transição ordem-desordem é então limitada ao eixo $T = 0$ e é puramente quântica. A linha crítica presente no diagrama 3.1 (*a*) não existe mais e para $\Delta < \Delta_c$ a fase ordenada dá lugar a uma fase desordenada clássica renormalizada [38]. A origem desta região clássica é causada pela divergência exponencial de ξ quando $T \rightarrow 0$, pois o sistema está na iminência de se alinhar em $T = 0$. Este comprimento de correlação é, então, maior que o comprimento de de Broglie das excitações térmicas, que variam com o inverso de uma potência de T [38]. Desse modo, estes aglomerados possuem uma comportamento clássico. O sistema que abordamos nesta tese, e que será apresentado no próximo capítulo, se enquadra na descrição deste diagrama. Estudamos as propriedades críticas deste modelo sobre a linha $T = 0$.

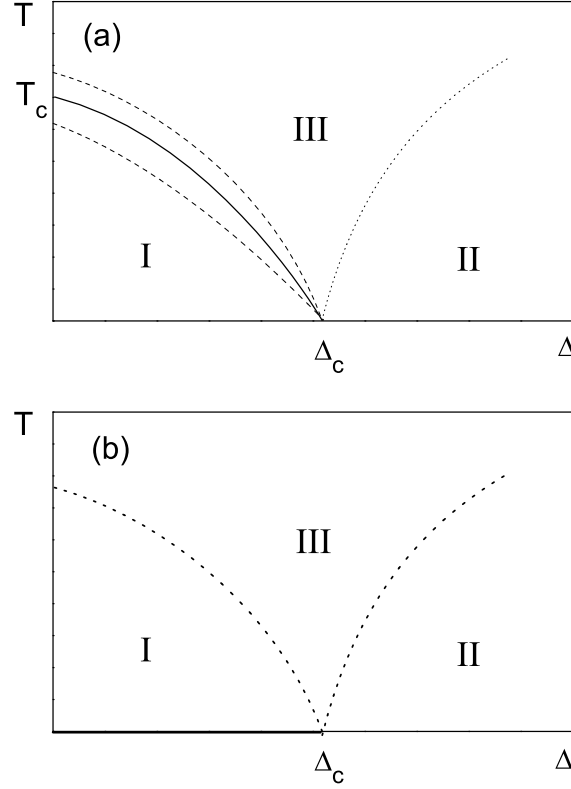


Figura 3.1 (a) Diagrama de fases T vs. Δ de um sistema quântico $d > 1$ dimensional exibindo uma transição clássica em $\Delta = 0$ e em $T = T_c$. A linha cheia $T_c(\Delta)$ separa uma fase ordenada quântica I de uma fase desordenada térmica. Próximo à esta linha as flutuações clássicas dominam de modo que a criticalidade é a mesma de um sistema clássico d dimensional. Entre as regiões II e III existe um “crossover” entre uma fase desordenada quântica e uma fase crítica quântica sob influência de flutuações térmicas ($\Delta \sim \Delta_c$). As transições que ocorrem em $T = 0$ possuem caráter $d + 1$ dimensional. (b) Diagrama de fases apropriado para sistemas quânticos unidimensionais. A fase ordenada quântica dá lugar a uma fase desordenada clássica renormalizada e as transições estão confinadas à linha $T = 0$.

3.1.3 Integrais de trajetória e mecânica estatística quântica

Uma abordagem bastante conveniente que ajuda a entender a natureza das transições de fases quânticas, tanto em $T = 0$ como para $T \neq 0$, e que introduz idéias que são úteis na descrição da teoria que utilizamos nesta tese é a técnica de integrais das trajetória ou de Feynman [8] [51] [52]. Nesta abordagem da mecânica quântica, a amplitude de probabilidade (propagador) entre dois estados quânticos $|\phi, 0\rangle$ e $|\phi', t'\rangle$, pode ser escrita como a soma de trajetórias ou

sobre todas as amplitudes de probabilidades entre esses dois estados. O operador evolução temporal $\exp\{\frac{-i\mathcal{H}}{\hbar}t\}$ é então decomposto em operadores de evolução em tempos infinitesimais $[\exp\{\frac{-i\mathcal{H}}{\hbar}\delta t\}]^N$, onde são inseridas em cada intervalo de tempo uma base ou conjunto completo de estados. A integral de trajetória ou propagador para os graus de liberdade de um campo quântico pode então ser escrito como:

$$\langle \phi'', t'' | \phi', t' \rangle = C \int_{\phi'}^{\phi''} D\phi \exp(iS[\phi; t'', t']) \quad (3.9)$$

onde C é uma constante de normalização e,

$$S[\phi; t'', t'] = \int_{t'}^{t''} dt \int d^D \mathbf{x} L(\mathbf{x}, t) \quad (3.10)$$

é a ação do campo clássico correspondente. A integral de trajetória, escrita desta forma, é conhecida como integral de trajetória do espaço de configurações. A partir deste ponto podemos obter informação sobre a termodinâmica do sistema ao levarmos em conta que a construção da função de partição pode ser obtida da dinâmica do sistema ao considerarmos a analogia entre o operador evolução temporal e a matriz densidade,

$$\exp(\frac{-i\mathcal{H}}{\hbar}t) \longleftrightarrow \exp(-\beta\mathcal{H}), \quad (3.11)$$

ou colocando, de outra forma, o operador densidade pode ser considerado como um operador evolução temporal em tempo complexo $\tau = it$. A função de partição de um campo quântico a uma temperatura *equivalente* $\beta = \tau/\hbar$ é dada por,

$$Z = \int D\psi \langle \psi | \exp(-\beta\mathcal{H}) | \psi \rangle \quad (3.12)$$

onde $\psi(x)$ é um campo independente do tempo e $|\psi\rangle$ representa os auto-estados do campo. Da expressão acima vemos que a função de partição é uma integral sobre amplitudes de probabilidades com os mesmos estados inicial e final. Ou seja, calcular grandezas termodinâmicas é equivalente a se calcular amplitudes de probabilidades em tempo complexo, sendo que o intervalo de propagação $\Delta\tau$ é dado pela temperatura equivalente β^{-1} .

Combinando (3.9) e (3.12) a função de partição adquire a forma,

$$Z = \int_{\psi(\mathbf{x}, \beta) = \psi(\mathbf{x}, 0)} D\psi \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int_\Omega d^d \mathbf{x} \mathcal{H}(\psi(\mathbf{x}, \tau)) \right\}, \quad (3.13)$$

onde por causa da introdução do tempo complexo a ação lagrangeana (3.10) torna-se uma ação hamiltoniana, com uma densidade de hamiltoniano clássico em $d + 1$ dimensões (d espaciais e uma temporal). Esta é, então, a função de partição de um campo clássico com $d + 1$ dimensões sendo a dimensão temporal com “espessura” β , como pode ser visto na integral da ação hamiltoniana. No limite $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) temos um sistema com a dimensão temporal infinita. Vale lembrar que, das propriedades da função de partição, este sistema é periódico na dimensão temporal.

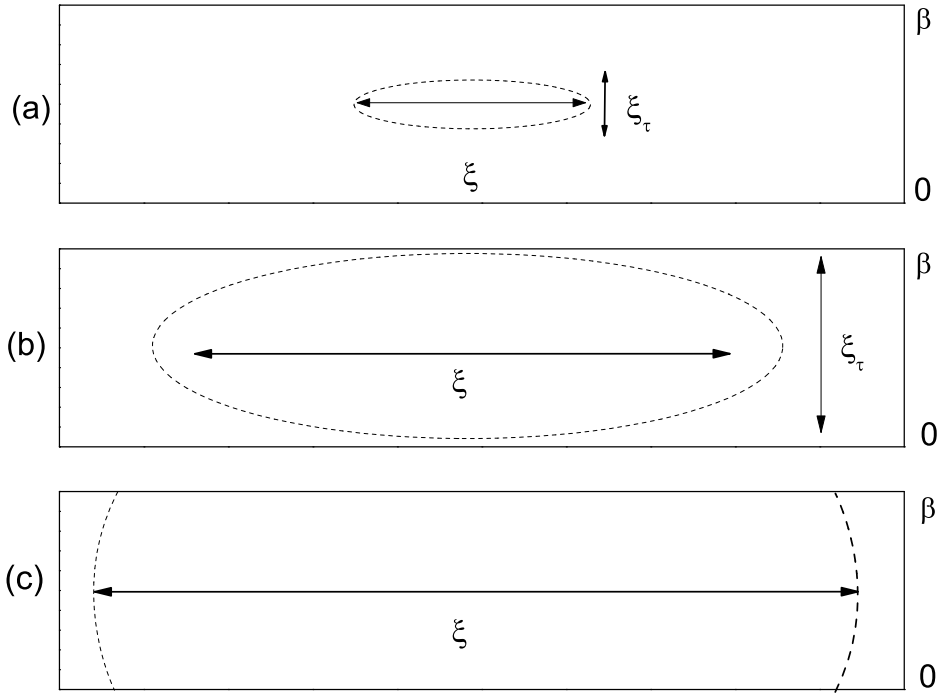


Figura 3.2 Sistema quântico em $T \neq 0$ representado como um sistema clássico em $d + 1$ dimensões sendo a dimensão espacial infinita e dimensão temporal finita com comprimento β . (a) O tempo de correlação é menor que a espessura β implicando na predominância das flutuações quânticas. (b) O tempo de correlação é da mesma ordem de β indicando um "crossover". (c) O tempo de correlação excede o comprimento β e a criticalidade é a de um sistema d dimensional clássico.

Na figura 3.2 é apresentado um esquema que mostra o efeito da temperatura nas propriedades críticas de sistemas quânticos. Para temperaturas diferentes de zero tem-se um sistema infinito em d dimensões mas finito na dimensão temporal. Para tempos de correlação que não excedem esta espessura as flutuações são predominantemente quânticas. Como o tempo

de correlação diverge com a distância δ do acoplamento crítico, existe então um “crossover” quântico-clássico quando $\delta \rightarrow 0$, onde o tempo de correlação excede a espessura do sistema. Neste caso o sistema é puramente d dimensional e tem comportamento crítico clássico. O comprimento de correlação onde ocorre este saturamento é aproximadamente $\xi^z \sim \xi_\tau \sim \beta$.

3.2 O modelo de Ising em campo transversal

O modelo de Ising em campo transversal [43] e suas variantes (campo randômico, vidros de spins, interações competitivas) são os modelos magnéticos quânticos mais simples a exibir as propriedades básicas das transições de fases quânticas. Este modelo foi proposto por volta do início da década de sessenta como protótipo para o estudo de transições ordem-desordem em sistemas ferroelétricos [53] e como um caso limite do modelo de Heisenberg anisotrópico em campo transversal [54], sendo que o caso unidimensional puro foi exatamente resolvido e o espectro de excitações elementares obtido. Logo, em seguida, surgiram estudos de campo médio [55] para dimensões superiores a um. O espectro do caso unidimensional pode ser obtido através da transformação de Jordan-Wigner [56] [54] que mapeia o sistema de spins em um sistema de férmions livres. Este modelo também foi intensamente estudado [43] através de técnicas Monte Carlo, expansão em séries, grupos de renormalização de teoria de campos e no espaço real, entre outras. O seu hamiltoniano é dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^x \quad (3.14)$$

Este modelo é definido em uma rede d -dimensional onde cada sítio é ocupado por um spin $\frac{1}{2}$ quântico representado pelas matrizes de Pauli. A interação é ferromagnética (caso puro) entre vizinhos mais próximos, $J_{ij} > 0$, e está confinada na direção z . O campo magnético é acoplado à componente x do spin que não comuta com a parte cooperativa, induzindo transições entre os estados desta última. Para $J > 0$ e $h < h_c$, o sistema se encontra numa fase ordenada e ao se aumentar o termo de campo além do valor crítico h_c o sistema é conduzido à fase desordenada. Na descrição de modelos ferroelétricos [53] por exemplo, as componentes de spin $\sigma^z = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$ representam estados de prótons localizados na região de um dos mínimos de um

poço de potencial duplo. O termo de campo representa o tunelamento entre as duas partes do poço de potencial. Para $h < h_c$ têm-se estados localizados (ferroelétricos) e para $h > h_c$ estados delocalizados dentro do poço duplo.

O modelo de Ising em campo transversal puro em d dimensões possui a mesma classe de universalidade do modelo de Ising clássico em $d + 1$ dimensões. O expoente dinâmico z é igual a um. Para $d > 3$ o sistema puro exibe comportamento de campo médio. Com a introdução de desordem entre os acoplamentos a classe de universalidade do modelo clássico equivalente pode ser diferente daquela do caso puro, implicando em $z \neq 1$.

Para o caso do modelo de Ising ferromagnético randômico em campo transversal, os acoplamentos J_{ij} e o campo h_i são dados por distribuições. Fisher [57], utilizando grupo de renormalização no espaço real, mostrou que o tempo de correlação comporta-se sob mudança de escala de uma forma não convencional implicando em $z = \infty$. Neste trabalho, também foi mostrado que o expoente dinâmico varia com um parâmetro δ que mede o desvio da região crítica na forma $z = \frac{1}{2\delta}$. Esta dependência do expoente dinâmico está relacionada com as singularidades de Griffiths-McCoy [47] [58], que são induzidas por regiões localmente ordenadas que se formam na fase desordenada e que são mais correlacionadas do que a média. Isto provoca uma não analiticidade na função energia livre mesmo para pontos diferentes do ponto crítico. Young e Rieger [59] estudaram este mesmo modelo mapeando o hamiltoniano (3.14) em um sistema de férmions interagentes utilizando a transformação de Jordan-Wigner e diagonalizando o hamiltoniano correspondente usando técnicas de diagonalização numéricas. Esses autores confirmaram as previsões de Fisher, dentre elas o comportamento assintótico de z . Rieger e Kawashima [5] [60] investigaram este modelo em $1d$ e $2d$ através de simulações Monte Carlo que tem por base o formalismo de Suzuki-Trotter [61] [62] e o algoritmo de *cluster* de Swendsen-Wang [63]. Através dessas simulações eles verificaram que as propriedades anômalas de z na fase de Griffiths persistem no modelo $2d$. O mapeamento de Suzuki-Trotter e o algoritmo de Swendsen-Wang em tempo contínuo serão discutidos nas seções seguintes e servirão como base para o algoritmo que desenvolvemos para investigar um modelo magnético com interações competitivas diluídas.

3.2.1 Mapeamento de Suzuki-Trotter e algoritmo Monte Carlo em tempo discreto

A equivalência entre sistemas quânticos e sistemas clássicos mostrada na seção 3.1.3 pode ser o ponto de partida para a simulação de sistemas quânticos, por exemplo, através de métodos Monte Carlo. Para o caso de sistemas magnéticos, Suzuki [61], por meio da fórmula de Trotter [64], mostrou a equivalência de um sistema magnético quântico d -dimensional com um sistema clássico de spins em $d + 1$ dimensões, onde a dimensão extra corresponde ao tempo imaginário. O procedimento é semelhante àquele da seção 3.1.3. Para o modelo de Ising em campo transverso, com $\mathcal{H}$ dado pelo hamiltoniano (3.14), a função de partição

$$Z = \text{Tr} \exp \left\{ -\frac{(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2)}{kT} \right\} \quad (3.15)$$

não pode ser fatorada, pois os termos $H_1 = -\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$ e $H_2 = -\sum_i h_i \sigma_i^x$ não comutam entre si. Desta forma a função de partição não pode ser diretamente decomposta em uma parte decorrente da interação e uma outra devido ao campo transverso. Para contornar esta situação pode-se utilizar a fórmula de Trotter,

$$\exp[-\beta(\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2)] = \lim_{\delta\tau \rightarrow 0} [\exp(-\delta\tau \mathcal{H}_1) \exp(-\delta\tau \mathcal{H}_2)]^{L\tau}, \quad (3.16)$$

sendo $\delta\tau = \frac{\beta}{L\tau}$. Desta maneira é possível fatorizar o operador densidade em um produtório de infinitos operadores sendo, agora, a propagação dada em intervalos infinitesimais de tempo complexo. Utilizando um conjunto completo de autoestados do operador $\mathcal{H}_1$ em cada intervalo de tempo complexo e com a ajuda da relação,

$$\langle S | \exp(\gamma \sigma^x) | S' \rangle = \left[\left(\frac{1}{2} \right) \sinh(2\gamma) \right]^{\frac{1}{2}} \exp\left[\left(\frac{1}{2} \right) \ln(\coth \gamma) S S' \right], \quad (3.17)$$

a função de partição torna-se,

$$Z = \lim_{\delta\tau \rightarrow 0} A(\delta\tau) \text{Tr} \exp \left[\sum_{\langle ij \rangle, \tau} K_{ij} S_i(\tau) S_j(\tau) + \sum_{i, \tau} K'_i S_i(\tau) S_i(\tau + \delta\tau) \right] \quad (3.18)$$

onde,

$$A(\delta\tau) = \prod_i \prod_{\tau} \left[\frac{1}{2} \sinh(2\delta\tau h_i) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.19)$$

$$K_{ij} = \delta\tau J_{ij}, \quad (3.20)$$

$$K'_i = \frac{1}{2} \ln \coth(\delta\tau h_i), \quad (3.21)$$

e $S = \pm 1$ são spins clássicos. Da expressão (3.18) pode-se ver que a função de partição do sistema quântico em d dimensões transforma-se na função de partição de um sistema clássico de spins de Ising com $N \times L_\tau$ spins, sendo L_τ referente à dimensão de Trotter. O sistema resultante é altamente anisotrópico. Para temperaturas finitas a interação na direção de Trotter K'_i tem uma divergência logarítmica, enquanto o acoplamento espacial K_{ij} tende a zero. É importante enfatizar que a temperatura no sistema quântico não é a mesma daquela no sistema clássico correspondente. De (3.18) o hamiltoniano efetivo é dado por,

$$\mathcal{H}_{ef} = - \sum_{\langle ij \rangle, \tau} K_{ij} S_i(\tau) S_j(\tau) - \sum_{i, \tau} K'_i S_i(\tau) S_i(\tau + \delta\tau) \quad (3.22)$$

onde é válido reforçar que este mapeamento é válido para um sistema de spins de Ising em campo transverso de qualquer dimensão. Para sistemas puros a anisotropia não desempenha nenhum papel importante de modo que a classe de universalidade do sistema quântico em $T = 0$ corresponde à classe de universalidade do sistema clássico em $d + 1$ dimensões, sendo portanto o expoente dinâmico igual a um. Para $d = 1$, o modelo clássico equivalente é o modelo de Ising $2d$ que possui solução exata [65] e cujos expoentes críticos são:

$$\alpha = 0, \quad \beta = \frac{1}{8}, \quad \gamma = \frac{7}{4}, \quad \delta = 15, \quad \nu = 1, \quad \eta = \frac{1}{4}.$$

Para sistemas com desordem, da expressão (3.22) tem-se que a desordem do sistema quântico corresponde a uma desordem completamente correlacionada no eixo temporal. Tais tipos de modelos estão relacionados à classe dos modelos estudados por Wu e McCoy [66] [67] no final da década de sessenta. Desta maneira, o sistema clássico anisotrópico correspondente não necessariamente possui a mesma classe de universalidade do sistema puro, podendo agora o expoente z ser diferente de um, mas finito, para leis de escala convencionais e até mesmo ser infinito para leis de escala ativadas, como já foi discutido na seção 3.2 para o caso do modelo de Ising randômico. O papel da desordem, bem como o critério que prediz a mudança ou não da classe de universalidade nestes sistemas será discutido adiante na seção 3.3.

O mapeamento de Suzuki-Trotter exposto acima é o ponto de partida para simulações Monte Carlo clássicas do hamiltoniano efetivo de um sistema quântico. Para o caso de sistemas puros pode-se obter informações sobre este ao se considerar o sistema clássico correspondente

que eventualmente já pode ter sido estudado por vários métodos. Para o caso desordenado, que é menos usual e o hamiltoniano efetivo pode ter uma forma não “convencional”, pode-se obter informações com a simulação direta deste hamiltoniano.

Ao considerarmos $\delta\tau$ finito, introduzimos obviamente a discretização na rede de spins clássicos. Um esboço de uma configuração deste tipo é mostrado na figura 3.3. Um grande inconveniente desta discretização é que ela apresenta um erro da ordem de $\delta\tau^2$, pois,

$$\exp(-\delta\tau \mathcal{H}_1) \exp(-\delta\tau \mathcal{H}_2) = \exp[-\delta\tau (\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2)] [1 + \mathcal{O}(\delta\tau^2 |[\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2]|)] \quad (3.23)$$

A solução para este problema é considerarmos o limite $\delta\tau \rightarrow 0$ diretamente nas simulações computacionais, o que leva a representação dos spins em linhas contínuas no eixo temporal. Esta metodologia será discutida na próxima seção, dando ênfase ao algoritmo de Swendsen-Wang em tempo contínuo.

3.2.2 Método Monte Carlo em tempo contínuo

3.2.2.1 Algoritmo de laço em tempo contínuo

O mapeamento de Suzuki-Trotter, mostrado na seção anterior, pode ser aplicado a vários esquemas de decomposição do hamiltoniano segundo a conveniência de cada problema. A idéia central é a de decompor o hamiltoniano em partes facilmente diagonalizáveis. A decomposição (3.16) é um caso apropriado ao modelo de Ising em campo transverso. Para o modelo de Heisenberg, por exemplo, uma decomposição largamente utilizada é a decomposição alternada ou *tabuleiro de damas* – do inglês, *checkerboard decomposition* – onde o hamiltoniano é separado em duas partes com interações de spins pares e ímpares, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{par}} + \mathcal{H}_{\text{ímpar}}$. Da mesma maneira que para o caso anterior, a dimensão temporal é “fatiada”, e uma base completa (geralmente a base de autoestados de σ^z) é inserida em cada fatia de tempo complexo. Diferente da abordagem para o modelo de Ising, a propagação no intervalo de tempo $\Delta\tau$ é alternada entre as partes pares e ímpares do hamiltoniano, daí a origem do nome *checkerboard decomposition*. O sistema quântico em d dimensões é agora mapeado em um sistema de spins clássicos com interações entre quatro spins e este problema está estreitamente ligado aos modelos do tipo

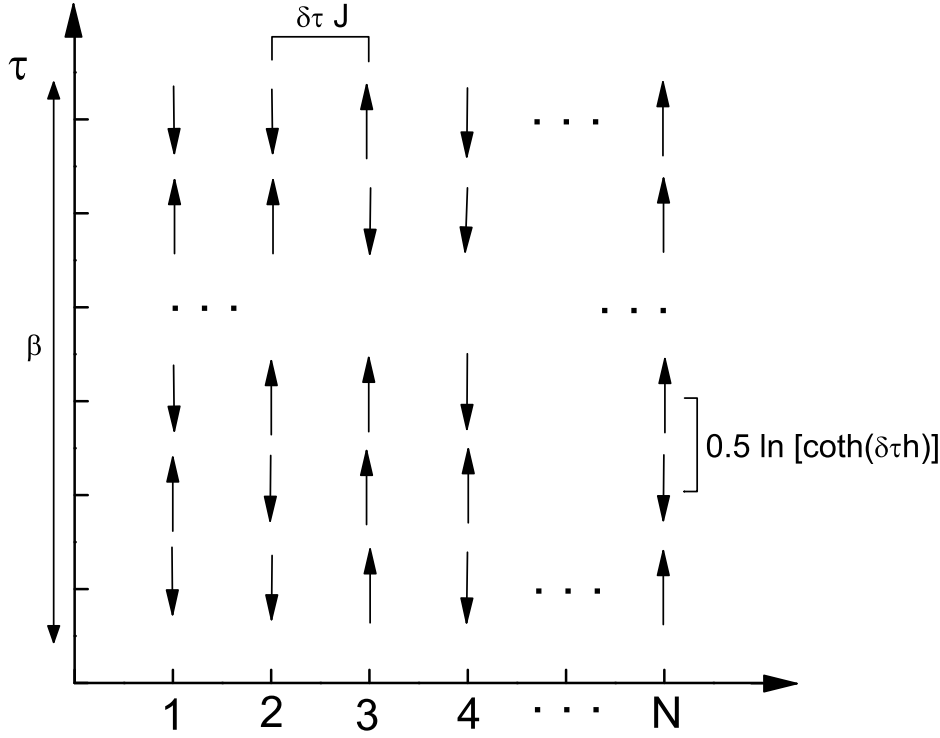


Figura 3.3 Rede discreta de spins que pode ser obtida de um sistema quântico unidimensional através do mapeamento de Suzuki-Trotter. O eixo vertical indica a direção de Trotter ou temporal. Os acoplamentos nas direções temporal e espacial são altamente anisotrópicos tendendo a zero na direção espacial e a infinito na direção temporal para $\delta\tau \rightarrow 0$.

vértice. Nos casos em que o hamiltoniano do modelo de Heisenberg comuta com o operador magnetização total na direção z , tem-se que esta magnetização é conservada de modo que a configuração do sistema pode ser vista como um conjunto de linhas mundo (*world lines*) que só conectam, por exemplo, spins positivos. Neste contexto, podem-se ter algoritmos que se utilizam de atualizações locais nestas linhas mundo com a desvantagem de não serem apropriados próximos ao regime crítico devido ao alentecimento crítico (*critical slowing down*) como no caso do algoritmo Metropolis. Para sanar esta deficiência, Evertz, Lana e Marcu [68] [69] introduziram um algoritmo do mesmo tipo que o algoritmo de Swendsen-Wang [63], ou seja, um algoritmo de *cluster* com atualizações não locais das configurações. Devido a conservação do spin total na direção z colocada acima, os *clusters* são objetos unidimensionais ou laços de spins fechados. O termo em inglês para estes algoritmos é *loop algorithms*.

Apesar desta sofisticação, o problema da discretização do tempo imaginário, como discutido para o modelo de Ising na seção anterior, ainda não pode ser contornado. Isto motivou a introdução do modelo de laço em tempo contínuo [70] [71] (*continuous time loop algorithm*). Além disso, o limite de Trotter é tomado na própria simulação numérica contornando o problema da discretização do tempo complexo. Neste algoritmo a armazenagem dos spins em matrizes para sua eventual utilização se torna desnecessária representando um ganho considerável em memória RAM pois não é preciso guardar a configuração de spins a cada passo, mas somente aquela em tempo zero e os instantes de tempo onde as linhas mundo são quebradas para gerar uma nova configuração.

3.2.2.2 Algoritmo de Swendsen-Wang em tempo contínuo

No mesmo espírito dos algoritmos de laço em tempo contínuo, Rieger e Kawashima [5] propuseram um algoritmo de *cluster* em tempo contínuo para estudar o modelo de Ising randômico. As motivações foram basicamente as mesmas às daquele caso: diminuição das autocorrelações entre as medidas Monte Carlo e evitar o erro sistemático que decorre da discretização da rede de spins. Outra motivação que esses autores tiveram foi dar um tratamento apropriado aos aglomerados de spins que se formam na fase de Griffiths-McCoy, sendo portanto conveniente um algoritmo de *cluster* ou de atualização não local, como os algoritmos de Wolff [72] e Swendsen-Wang [63].

A idéia básica do algoritmo de Swendsen-Wang é a de considerar de uma só vez os aglomerados de spins que apontam na mesma direção, ao invés de tentar a mudança de estado de cada spin individualmente. Neste algoritmo, a rede de spins é mapeada em uma rede de ligações entre spins do mesmo estado, que são feitas segundo uma probabilidade, e invertidos segundo uma razão de aceite. Ambas as ligações e as inversões garantem o balanceamento detalhado, que por sua vez garante, depois do período de equilíbrio, que as séries de configurações obedecem ao peso de Boltzmann. Para o modelo de Ising a probabilidade de se fazer uma ligação entre spins é

$$P_{ad} = 1 - \exp(-2\beta J) \quad (3.24)$$

que é independente de qualquer característica de algum estado específico e garante que as razões de aceite possam ser escolhidas de modo a tornar o algoritmo o mais eficiente possível. No algoritmo de Swendsen-Wang geralmente os aglomerados formados pelas ligações são invertidos independentemente com probabilidade $\frac{1}{2}$, que é uma escolha que minimiza a correlação da configuração de um *cluster* antes e depois de uma atualização. Outras escolhas são possíveis e também funcionam para este algoritmo.

Os passos básicos para uma atualização do algoritmo de Swendsen-Wang no modelo de Ising bidimensional são mostrados na figura 3.4. Em (a) é representada uma rede discreta de spins *up* e *down* e em (b), estes são conectados com spins vizinhos no mesmo estado segundo a probabilidade dada pela equação (3.24). O painel (c) mostra a mudança de estado de cada aglomerado com probabilidade $\frac{1}{2}$.

A extensão do algoritmo de Swendsen-Wang em rede discreta para o caso contínuo é feita considerando-se que no limite $\delta\tau \rightarrow 0$, spins consecutivos, $S_i(\tau) = S_i(\tau+1) = \dots = S_i(\tau+M)$, formam segmentos contínuos $\bar{S}_i[\tau, \tau+t]$ de comprimento $t = M\delta\tau$. Uma representação de uma destas redes em tempo contínuo é mostrada na figura 3.5. Os objetos de interesse agora são estes segmentos contínuos de spins que podem ter os valores ± 1 como estados. O ponto onde os segmentos mudam de estado são chamados de *corte*. Toda a dinâmica Monte Carlo está relacionada com estes segmentos de spins, com a introdução e a retirada destes cortes na rede.

Para a aplicação do algoritmo Swendsen-Wang primeiro consideram-se as conexões de spins na dimensão temporal. Como foi visto alguns parágrafos acima, spins com o mesmo estado são adicionados ao *cluster* com probabilidade dada pela equação (3.24). Então ainda sem tomar o limite $\delta\tau \rightarrow 0$, utilizando (3.21), tem-se para dois spins $S_i(\tau)$ e $S_i(\tau+1)$ na dimensão temporal

$$p'_i = 1 - \exp(-2K'_i) = 1 - \delta\tau h_i + \mathcal{O}(\delta\tau^2). \quad (3.25)$$

A probabilidade então de existir um segmento de comprimento t de spins conectados é igual a probabilidade de se ter $\frac{t}{\delta\tau}$ ligações, isto é,

$$p'^{\frac{t}{\delta\tau}}_i = (1 - \delta\tau h_i)^{\frac{t}{\delta\tau}} \quad (3.26)$$

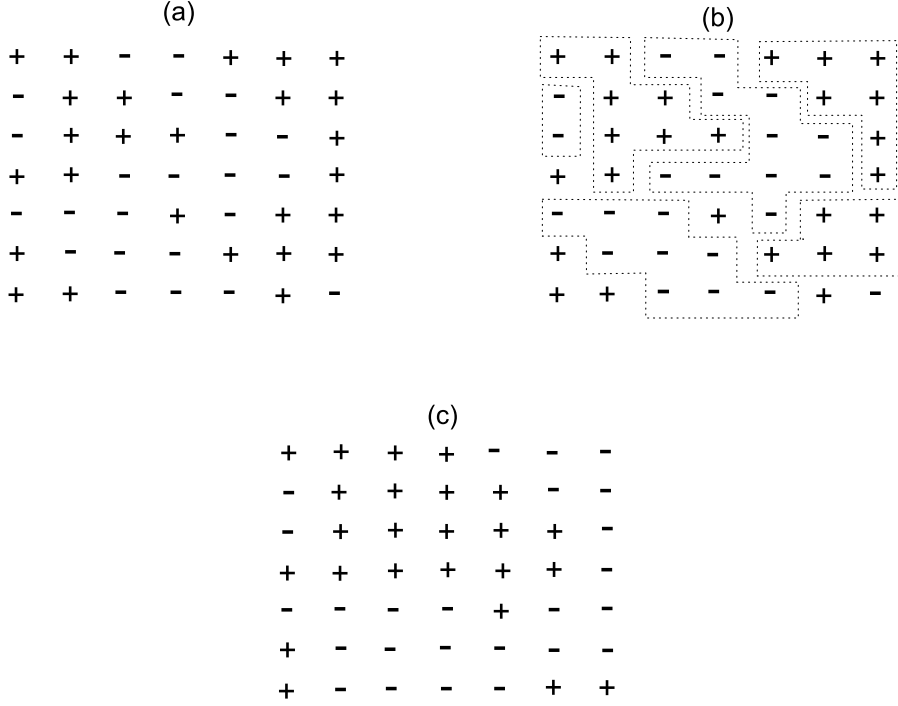


Figura 3.4 Passos de uma atualização do algoritmo de Swendsen-Wang na rede discreta de spins. (a) Estado inicial de spins de Ising com estados +1 (+) e -1 (-). (b) As ligações entre spins do mesmo estado são construídas segundo a probabilidade dada pela equação (3.24), dividindo a rede em *clusters* ou aglomerados. (c) Cada um dos aglomerados é invertido com probabilidade $\frac{1}{2}$.

Tomando-se o limite $\delta\tau \rightarrow 0$ obtém-se,

$$\lim_{\delta\tau \rightarrow 0} p_i'^{\frac{t}{\delta\tau}} = \exp(-h_i t). \quad (3.27)$$

Isto significa que para cada sítio espacial, novos cortes são introduzidos nos segmentos de spins via um processo de Poisson com taxa de decaimento igual a h_i^{-1} .

As conexões entre segmentos pertencentes a sítios vizinhos i e j são feitas considerando a superposição de segmentos $\tilde{S}_i[t_1, t_2]$ e $\tilde{S}_j[t_3, t_4]$. Agora, t é dado pela interseção destes segmentos espacialmente vizinhos. A probabilidade de se conectar dois spins, S_i e S_j , nestes segmentos é dada por

$$P_{ij} = 1 - \exp(-2K_{ij}) = 2\delta\tau J_{ij} + \mathcal{O}(\delta\tau^2) \quad (3.28)$$

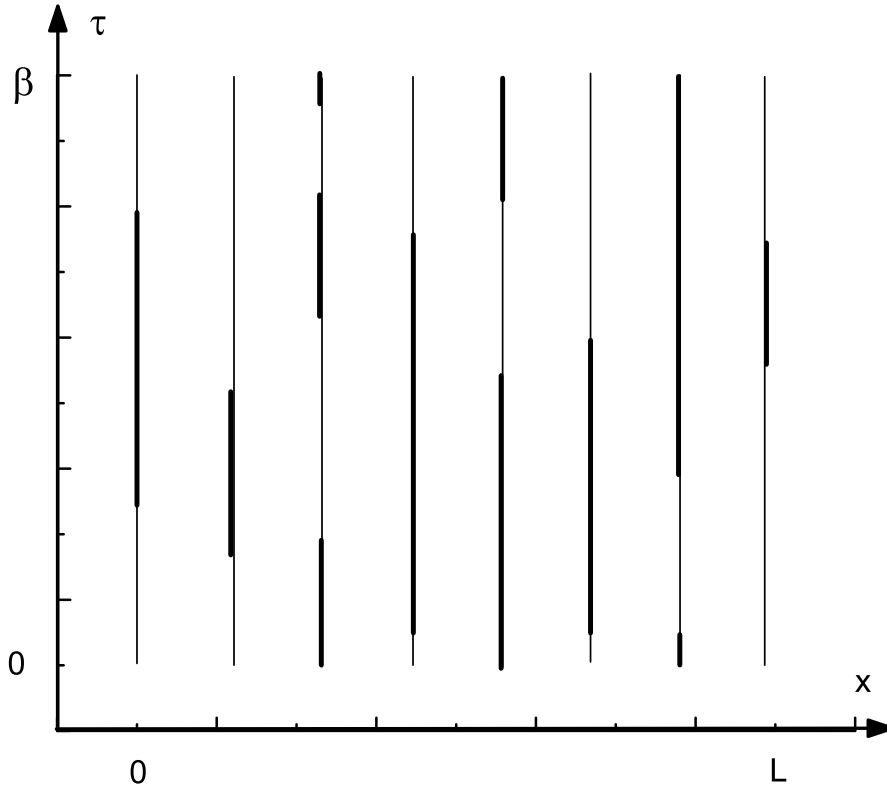


Figura 3.5 Representação de uma rede de spins em tempo contínuo. As linhas mais espessas indicam segmentos de spins na direção "+" e as outras linhas indicam segmentos de spins na direção "-". O ponto onde os segmentos na direção temporal mudam de estado são chamados de *corte*. Pelas propriedades da função de partição, note que estas linhas de spins exibem condições de contorno periódicas na direção temporal.

A probabilidade de *não* se conectar estes segmentos segue diretamente de (3.28), isto é,

$$(1 - P_{ij})^{\frac{t}{\delta\tau}} = (1 - 2\delta\tau J_{ij})^{\frac{t}{\delta\tau}} \rightarrow \exp(-2J_{ij}t) \quad (3.29)$$

Com isto os aglomerados de segmentos podem ser construídos tanto temporalmente quanto espacialmente, e a cada aglomerado é então atribuído aleatoriamente o valor $+1$ ou -1 , num processo análogo ao algoritmo de Swendsen-Wang na rede discreta. Os passos de uma atualização Monte Carlo do algoritmo de Swendsen-Wang em tempo contínuo são mostrados na figura 3.6. Em (a) cortes são introduzidos segundo o processo de Poisson em cada segmento de spin $+1$ e -1 segundo seu comprimento t , de acordo com a equação (3.27). No passo seguinte os *clusters* são construídos na direção espacial segundo o tempo de superposição destes segmentos

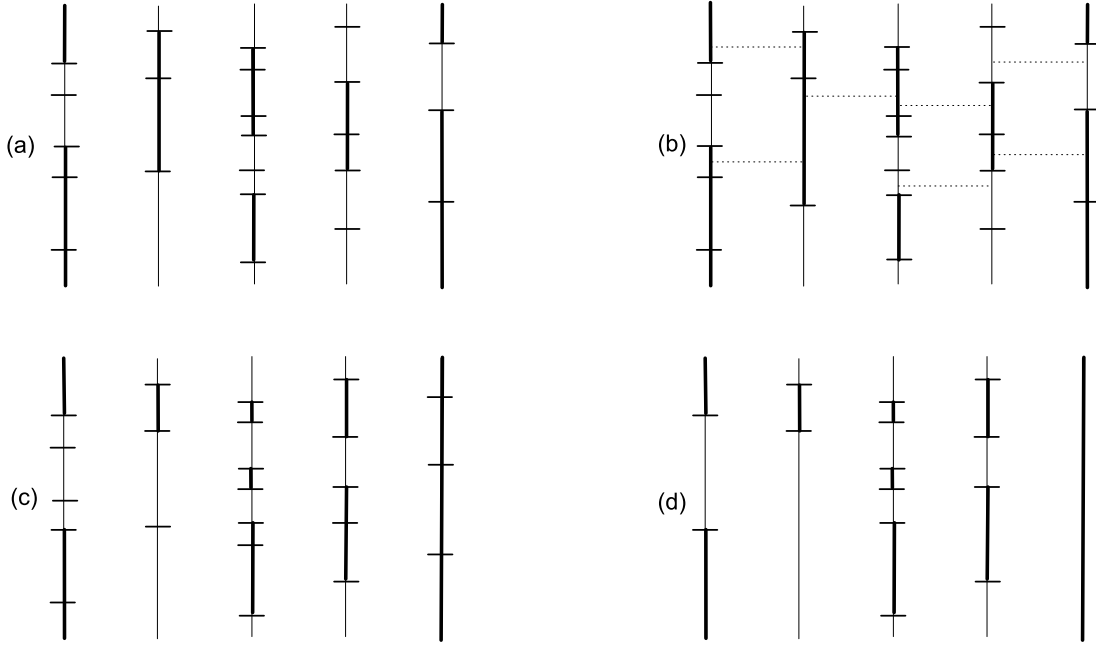


Figura 3.6 Passos de uma atualização do algoritmo de Swendsen-Wang em tempo contínuo introduzido por Rieger e Kawashima [5]. (a) Configuração inicial com os traços horizontais indicando os pontos de corte dos segmentos na direção temporal e os novos cortes introduzidos segundo o processo de Poisson com taxa de decaimento h^{-1} . (b) Formação de aglomerados de segmentos segundo a interseção de segmentos vizinhos espacialmente, segundo a probabilidade de não se conectar segmentos dada por (3.29). (c) Inversão dos aglomerados com probabilidade $\frac{1}{2}$. (d) Retirada dos cortes redundantes preparando a configuração para os cálculos das grandezas de interesse e/ou para um novo ciclo Monte Carlo.

vizinhos. Em (c), os *clusters* de segmentos são invertidos individualmente com probabilidade $\frac{1}{2}$ e em (d) os cortes redundantes são removidos permitindo o cálculo das grandezas de interesse segundo esta configuração. Para a magnetização em um sítio i , por exemplo, este cálculo é feito ao se considerar o saldo entre os segmentos de spins positivos e negativos,

$$m_i = \frac{1}{L_\tau} \int_0^{L_\tau} d\tau \langle S_i(\tau) \rangle \quad (3.30)$$

Nas simulações computacionais deste tipo de rede, a memória para cada configuração de spins deve ser alocada dinamicamente onde a informação de cada seguimento (tempo inicial, tempo final, valor de spin, etc) são armazenadas em *estruturas* que formam *listas en-*

cadeadas [73]. O número de segmentos em cada passo Monte Carlo é tipicamente da ordem de $\mathcal{O}(L_\tau h L^d)$.

3.3 Sistemas desordenados e o critério de Harris

Como foi visto nas seções anteriores, para sistemas puros o expoente dinâmico é igual a um, indicando a equivalência entre as dimensões espaciais e a temporal e indicando também que a classe de universalidade do sistema quântico d dimensional em $T = 0$ é a mesma do sistema clássico térmico $d + 1$ dimensional. Com a introdução de uma desordem temperada como, por exemplo, uma desordem ou diluição entre os acoplamentos, a criticalidade pode ser alterada conduzindo o sistema a uma nova classe de universalidade. Um critério que procura identificar para quais sistemas a desordem é relevante ou não para a criticalidade é o critério de Harris [74] que basicamente é o seguinte: Sendo ν o expoente do comprimento de correlação, se $\nu < \frac{2}{d}$ então o comportamento crítico do sistema desordenado é diferente daquele do sistema puro, e diz-se que a desordem é *relevante*. Isto pode ser entendido com um argumento heurístico. Com a presença da desordem podem existir regiões com diferentes acoplamentos críticos, $\bar{\Delta}_{c,x}$, onde x denota a posição em uma região de comprimento L e a barra indica uma média nesta região. O valor $\bar{\Delta}_{c,x}$ não necessariamente é o mesmo do valor global Δ_c . O número de pontos em cada região é proporcional ao volume, $N \sim L^d$, e cada um destes pontos pode ser considerado uma variável aleatória independente. Então pelo teorema do limite central a variância de $\Delta_{c,x}$ é da ordem de $L^{-\frac{d}{2}}$. Este valor se torna significativo quando esta variância é da ordem de $|\Delta - \Delta_c|$. Disto pode-se encontrar um comprimento característico $L' \sim |\Delta - \Delta_c|^{-\frac{2}{d}}$ que deve ser comparado com o comprimento de correlação $\xi \sim |\Delta - \Delta_c|^{-\nu}$. Se L' for menor que ξ então a desordem é irrelevante e tem-se,

$$|\Delta - \Delta_c|^{-\frac{2}{d}} < |\Delta - \Delta_c|^{-\nu} \quad (3.31)$$

que implica em

$$\nu > \frac{2}{d}, \quad (3.32)$$

que é o critério de Harris colocado no início desta seção. Desta maneira, por exemplo, para o modelo de Ising em campo transversal em $d = 1$ onde $v = 1$, a desordem é relevante ao se introduzir uma desordem perturbativa e este sistema deve mudar sua classe de universalidade. O mesmo ocorre com o modelo ANNNI (do inglês: *Axial Next-Nearest Neighbour Ising Model*) em campo transversal $1d$, que será discutido na seção seguinte, pois este possui a mesma classe de universalidade do modelo de Ising em campo transversal. Nesta tese foi estudado um modelo que faz uma interpolação entre estes dois modelos através da diluição entre os acoplamentos entre segundo vizinhos. Pelo critério de Harris, este modelo deve ter o comportamento de sua criticalidade alterada com a introdução desta diluição sendo que nos casos limites Ising em campo transversal e ANNNI em campo transversal o comportamento crítico deve ser aquele do modelo de Ising puro bidimensional.

3.4 Modelos ANNNI clássico e quântico

Dos efeitos da competição entre acoplamentos tipo Ising ferro e antiferromagnéticos entre pares de primeiros e segundos vizinhos, surgem efeitos de modulação espacial na configuração de spins para algum intervalo do valor do parâmetro de competição κ , que mede a competição entre os acoplamentos. Este tipo de modelo foi introduzido nas décadas de 50 e 60 para tentar entender as estruturas moduladas que apareciam em materiais magnéticos e ferroelétricos. O modelo tridimensional foi introduzido por Elliot [75] e consiste em camadas de spins de Ising com acoplamentos ferromagnéticos J_0 intracamadas e acoplamentos ferromagnéticos entre spins vizinhos e acoplamentos antiferromagnéticos entre segundos vizinhos de camadas diferentes. Devido a importância que este modelo ganhou ao longo daqueles anos e dos anos seguintes, Fisher e Selke [76] propuseram uma sigla para este modelo, ANNNI (do inglês: *Axial Next-Nearest Neighbour Ising Model*) pelo qual é atualmente conhecido e será doravante referido nesta Tese. O hamiltoniano é dado por,

$$H = - \sum_i \left[\sum_{\alpha} J_0(\alpha) S_i S_{i+\alpha} + \sum_{\alpha'} J_1(\alpha') S_i S_{i+\alpha'} + \sum_{\alpha''} J_2(\alpha'') S_i S_{i+\alpha''} \right] \quad (3.33)$$

Uma representação esquemática do sistema para os casos $1d$ e $2d$ é mostrado na figura 3.7.

Este sistema não se restringe somente ao estudo das estruturas moduladas, sendo seu diagrama de fases bastante rico se comparado com a simplicidade do modelo. O caso unidimensional é exatamente solúvel através da transformação $S_i^z S_{i+1}^z \rightarrow \tau_i^z$, que transforma o hamiltoniano do modelo ANNNI em um hamiltoniano de Ising com campo longitudinal. O estado fundamental do modelo ANNNI unidimensional consiste de uma fase ferromagnética, ... + + + + ..., para $\kappa < 0,5$ e das já mencionadas fases moduladas, ... + + - - + + - - ..., com periodicidade 4 para $\kappa > 0,5$, onde $\kappa = -J_2/J_1$ é o parâmetro de competição. Para a temperatura $T \neq 0$ não existe ordem de longo alcance e as correlações decaem exponencialmente em dois regimes separados por uma *linha de desordem*. Um regime é essencialmente exponencial e o outro é um regime oscilatório que decai exponencialmente.

O modelo ANNNI bidimensional e em dimensões superiores não possui solução exata. As informações sobre o diagramas de fases foram obtidas de várias técnicas analíticas e numéricas. Analogamente ao caso unidimensional, em $T = 0$ e $\kappa < 0,5$, o sistema se encontra na fase ferromagnética, sendo que em $T \neq 0$ o sistema evolui da fase ordenada para a fase desordenada, ocorrendo a transição em uma linha crítica $T_c(\kappa)$. Para $\kappa > 0,5$ ocorrem fases moduladas em $T = 0$, mas com o aumento da temperatura ocorre a desestabilização das paredes de domínio, dando origem a defeitos nessas paredes que se propagam pela rede de spins. Essa fase é chamada de incomensurável flutuante (*floating incommensurate*) e para temperaturas mais elevadas dá lugar à fase desordenada.

Um limite do modelo ANNNI bidimensional bastante estudado, é o limite hamiltoniano [77] [78] ($J_0 \rightarrow \infty$, $J_1, J_2 \rightarrow 0$, κ constante). Neste limite o hamiltoniano bidimensional referente a (3.33) pode ser escrito como um hamiltoniano de um sistema unidimensional,

$$H = - \sum_m (\sigma_m^x + \lambda \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z + \lambda' \sigma_m^z \sigma_{m+2}^z), \quad (3.34)$$

onde σ^i se refere às matrizes de Pauli. Este limite está relacionado com o hamiltoniano quântico de Ising em campo transversal visto na seção 3.2. Na verdade, o modelo descrito pela equação (3.34) é o modelo ANNNI em campo transversal [43], ou seja, um modelo de Ising quântico unidimensional com interações competitivas entre segundos vizinhos sob ação de um campo transversal,

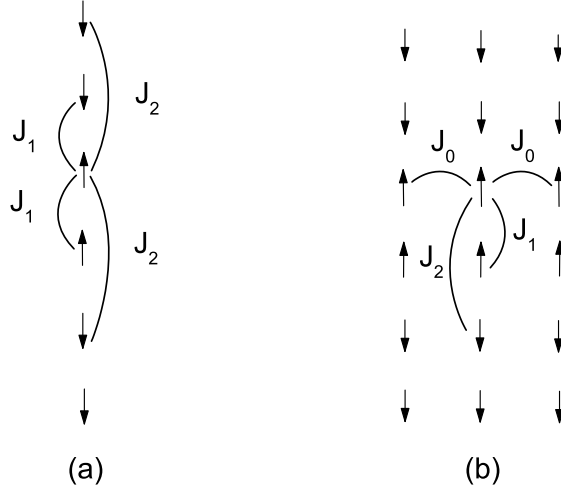


Figura 3.7 Representações esquemáticas do modelo ANNNI. (a) Sistema unidimensional com os acoplamentos ferromagnéticos entre primeiros vizinhos J_1 e acoplamentos antiferromagnéticos entre segundos vizinhos J_2 . (b) Representação do sistema bidimensional com as interações competitivas entre camadas e interações ferromagnéticas J_0 dentro das camadas.

$$H = - \sum_i (J_1 \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + J_2 \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z + h \sigma_m^x) \quad (3.35)$$

Esta relação está intimamente ligada ao mapeamento quântico-clássico discutido na seção 3.2.1. Utilizando os mesmos procedimentos daquela seção pode-se fazer o caminho inverso e obter o sistema bidimensional correspondente a (3.35),

$$H_{ef} = - \sum_{i,\tau} K_{i,i+1} S_i(\tau) S_{i+1}(\tau) - \sum_{i,\tau} K_{i,i+2} S_i(\tau) S_{i+2}(\tau) - \sum_{i,\tau} K'_i S_i(\tau) S_i(\tau + \delta\tau) \quad (3.36)$$

sendo,

$$K_{i,i+1} = \delta\tau J_1, \quad (3.37)$$

$$K_{i,i+2} = \delta\tau J_2, \quad (3.38)$$

$$K'_i = \frac{1}{2} \ln \coth \delta\tau h_i, \quad (3.39)$$

Como para o caso Ising puro, o expoente dinâmico é igual a um. O modelo ANNNI quântico $1d$ possui a mesma classe de universalidade do caso ANNNI clássico $2d$, que por sua vez, possui a mesma classe de universalidade do modelo de Ising nesta dimensão. Esta relação entre

o modelo quântico na dimensão d e o correspondente clássico na dimensão $d + 1$ possibilita que o hamiltoniano clássico possa ser o ponto de partida para simulações, por exemplo, do tipo Monte Carlo. Um estudo utilizando o algoritmo Monte Carlo em tempo discreto, discutido na seção 3.2.1, e o algoritmo Metropolis, foi feito por Arizmendi *et al* [78] tendo como base o hamiltoniano (3.36). Neste estudo o diagrama de fases foi investigado ao se analisar o comportamento do comprimento de correlação neste sistema. Foram obtidas a linha da transição ferro-paramagnética, a linha de desordem que é imersa na fase paramagnética, a linha de transição entre as fases de desordem e incomensurável flutuante e a linha de transição entre as fases incomensurável flutuante e modulada. Um estudo utilizando diagonalização exata de sistemas finitos ($N \leq 10$) e relação de escala de tamanho finito para a diferença de energia (*gap*, no inglês) entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado foi feito por Guimarães, Plascak, Barreto e Florêncio [79] obtendo resultados precisos para a região onde $\kappa < 0,5$. A linha de transição ferro-paramagnética foi obtida com precisão e o cálculo do expoente ν nesta linha indicou a sua classe de universalidade. Nesse trabalho, foi feita também uma estimativa menos precisa da linha de transição entre as fases incomensurável flutuante e desordenada. A técnica de grupo de renormalização da matriz densidade foi empregada ao modelo ANNNI quântico em campo transversal $1d$ por Beccaria, Campostrini e Feo [80] para a região $\kappa < 0,5$ do diagrama de fases onde foi obtida, com precisão, a linha de transição ferro-paramagnética. Ainda, nesse trabalho, foi sugerido por resultados numéricos que a linha de Peschel-Emery, um resultado exato na fase paramagnética para o Modelo ANNNI quântico unidimensional, coincide com a linha de desordem. Outro trabalho digno de nota é o estudo para investigar a estabilidade da criticalidade do modelo vidro de spins de Ising $1d$, em campo transversal, com relação às interações perturbativas de ambos os sinais entre segundos vizinhos e com relação às interações de longo alcance do tipo mundo pequeno (*small world*), utilizando a técnica de dizimação de Dasgupta-Ma feita por Carpentier, Pujol e Giering [81]. Neste estudo a interação entre segundos vizinhos mostrou-se irrelevante, porém, ao se introduzir as interações de longo alcance a criticalidade do sistema original foi alterada.

Nesta tese foi estudado o modelo ANNNI unidimensional em campo transversal utilizando a técnica Monte Carlo em tempo contínuo exibida na seção 3.2.2.1. Naquela seção, o algoritmo

de Swendsen-Wang foi adaptado para o tempo contínuo mas os acoplamentos permitidos para os spins eram apenas os acoplamentos entre primeiros vizinhos. Estendemos esta técnica para poder incluir os acoplamentos entre segundos vizinhos, sendo estes de mesmo sinal ou não, o que nos permite estudar os efeitos de competição entre os acoplamentos. Esta técnica é então bastante apropriada para estudarmos com precisão o modelo ANNNI quântico tendo como benefícios todas as vantagens de um algoritmo de cluster em tempo contínuo como já foi discutido no capítulo anterior. Um trabalho que serviu como base para a adaptação que fizemos foi o trabalho de Henkel e Pleimling [6] que estendeu as idéias do algoritmo de Wolff [72] para sistemas com interações competitivas, como será discutido na próxima seção.

3.5 Algoritmo de Wolff aplicado ao modelo ANNNI

O algoritmo de Wolff [72] foi introduzido em 1989 baseado no algoritmo de Swendsen-Wang sendo portanto um algoritmo de *cluster* apropriado para regiões críticas diminuindo sensivelmente o alentejamento crítico. A diferença com relação ao algoritmo de Swendsen-Wang é que no algoritmo de Wolff um único aglomerado de spins é formado e invertido com probabilidade (razão de aceite) um. Isto é feito escolhendo-se aleatoriamente um spin na rede e verificando seus vizinhos segundo uma probabilidade que depende da temperatura. Esta probabilidade é a mesma daquela para o algoritmo Swendsen-Wang dada por (3.24). Como naquele algoritmo, essa probabilidade garante o balanceamento detalhado e que as configurações de equilíbrio obedeçam a distribuição de Boltzmann, bem como garante que a razão de aceite seja escolhida para tornar o algoritmo o mais eficiente possível. No caso do algoritmo de Wolff esta razão de aceite é igual a um.

A figura 3.8 mostra a evolução de um passo Monte Carlo segundo o algoritmo de Wolff. Em (a) tem-se uma rede discreta de spins onde um spin é escolhido aleatoriamente na rede tendo cada spin o mesmo peso na escolha. Em (b) os spins vizinhos foram verificados e adicionados ao agrupamento segundo a probabilidade (3.24). Esta probabilidade tende a zero para $T \rightarrow \infty$ e neste regime cada spin é invertido individualmente, sendo então equivalente ao algo-

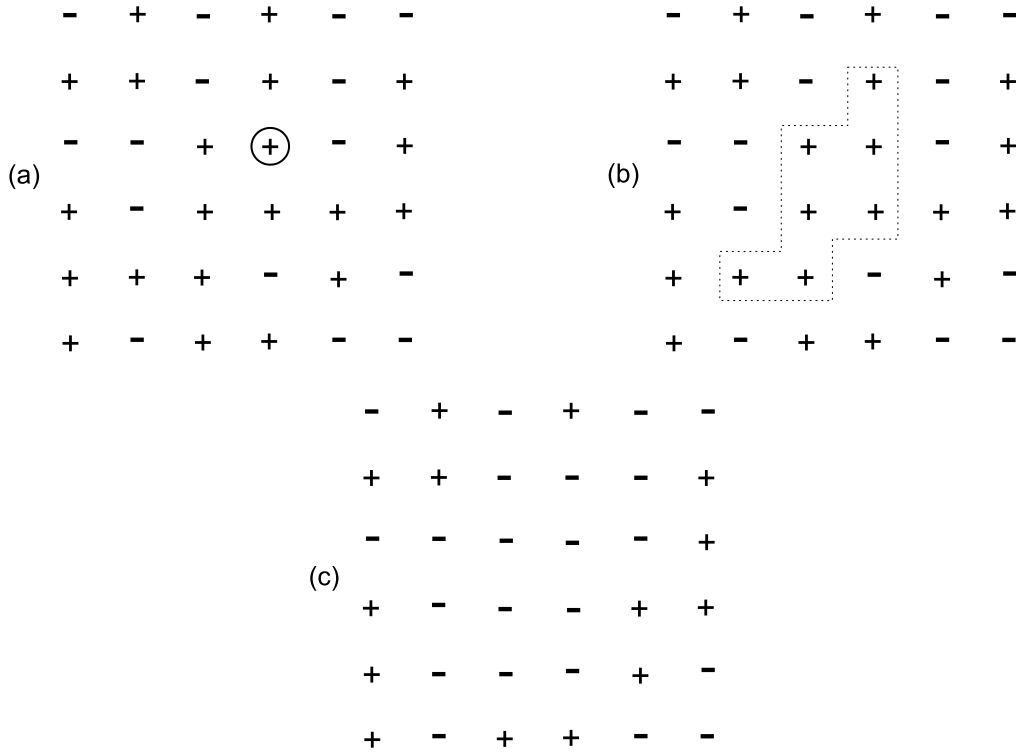


Figura 3.8 Passos para uma atualização segundo a algoritmo de Wolff em uma rede discreta. (a) Um sítio semente é escolhido aleatoriamente na rede de spins. (b) Um aglomerado de spins de mesmo sinal é construído segundo a probabilidade de se adicionar spins vizinhos de mesmo sinal (3.24). (c) O aglomerado resultante é invertido.

ritmo Metropolis, neste regime. Para T próximo a zero a probabilidade (3.24) é próxima de um, e quase todos os spin são invertidos em bloco sendo poucos aqueles devido às excitações térmicas, tendo seus spins diferentes daqueles do bloco. Neste regime o algoritmo de Wolff é semelhante ao algoritmo de Swendsen-Wang. Em (c) Os spins identificados como pertencentes ao agrupamento construído em (b) são invertidos com razão de aceite igual a um.

O diferencial do algoritmo de Wolff com relação aos algoritmos de Metropolis e Swendsen-Wang é sua performance na região crítica [73] que é ligeiramente mais eficiente que aquela do algoritmo de Swendsen-Wang, além da sua maior simplicidade de programação. Na região crítica ocorrem flutuações de aglomerados de todas as ordens, sendo que o algoritmo de Swendsen-Wang os trata da mesma forma invertendo-os com probabilidade $\frac{1}{2}$. Isto faz com que o algo-

ritmo de Swendsen-Wang gaste considerável tempo computacional com pequenos aglomerados. O algoritmo de Wolff por sua vez escolhe um spin aleatoriamente e a chance deste spin pertencer ao aglomerado de percolação é bastante grande. Sendo então este escolhido o aglomerado resultante é invertido com razão de aceite igual a um.

Para o caso de interações competitivas, uma variante do algoritmo de Wolff foi introduzida por Henkel e Pleimling [6] para estudar o modelo ANNNI clássico em três dimensões. O interesse foi o estudo do ponto de Lifshitz que é um ponto onde a fase ordenada, a fase desordenada e a fase de estruturas moduladas se tornam indistinguíveis. Eles estudaram as propriedades do comportamento por escala da função de correlação entre dois pontos, comparando-a com valores obtidos analiticamente por outros métodos. Uma das motivações desses autores foi a de tentar substituir os algoritmos de inversão de spins simples por algoritmos de aglomerados, pois os algoritmos do tipo Metropolis limitam o tamanho dos sistemas a serem considerado em decorrência do alentecimento crítico.

Nesta variante, os aglomerados de spins podem ser formados por spins de valores distintos, ao contrário do algoritmo de Wolff original onde os spins do aglomerado possuem o mesmo valor. De início um spin semente é sorteado aleatoriamente na rede. Então são adicionados os outros spins. Considerando um spin adicionado s_i , outro spin s_j vizinho é incluído no agrupamento se este tiver o mesmo valor de spin de s_i segundo a mesma probabilidade (3.24) utilizada no algoritmo de Wolff ou Swendsen-Wang. A modificação introduzida nesta variante é a adição de spins segundo vizinhos de sinais diferentes de s_i com a probabilidade,

$$P_2 = 1 - \exp(-2\beta J_1 \kappa). \quad (3.40)$$

Identificado o agrupamento este é invertido. Na figura 3.9 é feita uma comparação entre um agrupamento de Wolff usual com uma agrupamento com spins de ambos os sinais. Este algoritmo em rede discreta combinado com o algoritmo em tempo contínuo introduzido por Rieger e Kawashima, mostrado na seção 3.2.2.2, foi o ponto de partida para o algoritmo que desenvolvemos, a seguir, para estudar o modelo ANNNI quântico em uma dimensão.

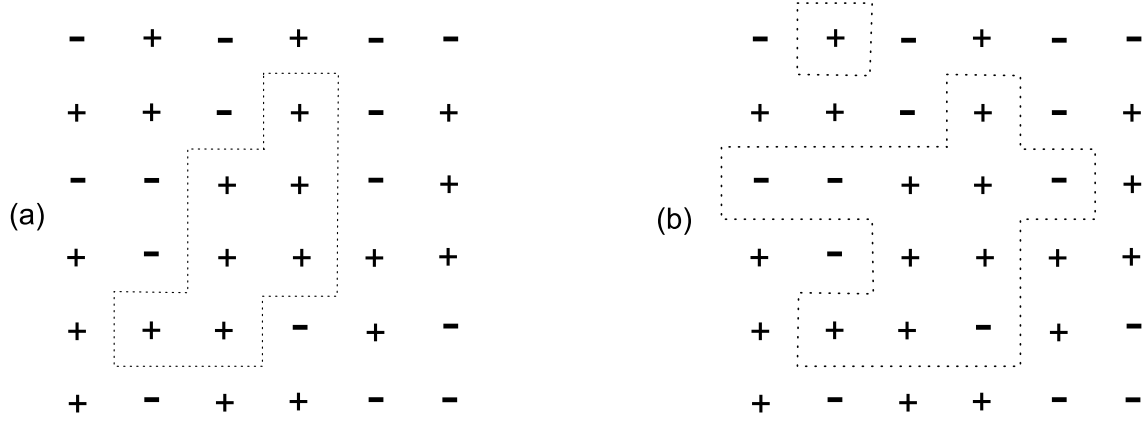


Figura 3.9 Comparação entre os aglomerados formados segundo o algoritmo de Wolff e o algoritmo proposto por Henkel e Pleimling [6] para sistemas com interações competitivas. (a) Aglomerado segundo o algoritmo de Wolff com elementos de spins de mesmo sinal. (b) Aglomerado segundo o algoritmo adaptado a interações competitivas onde agora foi levado em conta a probabilidade (3.40) de se adicionar ao aglomerado spins segundos vizinhos de sinais opostos.

3.6 Algoritmo em tempo contínuo aplicado ao modelo ANNNI quântico

A extensão da variante do algoritmo de Wolff para aplicações em sistemas com interações competitivas para o caso de tempo contínuo é direta. No limite $\delta\tau \rightarrow 0$, os spins consecutivos de mesmo sinal formam segmentos de spins na dimensão temporal. Começa-se então com o agrupamento destes spins nesta dimensão e o procedimento é o mesmo daquele visto na seção 3.2.2.2, pois a expressão do acoplamento (3.39) do sistema ANNNI clássico mapeado é a mesma daquela do modelo de Ising $d + 1$ dimensional mapeado, descrito pelo hamiltoniano da equação (3.21). A dinâmica do algoritmo nesta dimensão temporal é dada pela introdução de cortes, segundo o processo de Poisson, com taxa de decaimento igual a h_i^{-1} .

Para a construção do aglomerado na dimensão espacial levam-se em conta, agora, os acoplamentos entre primeiros e segundos vizinhos. Primeiro é escolhido um ponto na rede de forma aleatória. Em seguida, a partir do segmento ao qual pertence este ponto será construído o agrupamento de segmentos de spins. Para esta construção leva-se em conta a superposição ou interseção dos segmentos de spins entre primeiros vizinhos com interação ferromagnética, $\bar{S}_i[t_1, t_2]$ e

$\bar{S}_j[t_3, t_4]$, e a superposição entre segmentos segundo vizinhos com interação antiferromagnética, $\bar{S}_i[t_1, t_2]$ e $\bar{S}_k[t_5, t_6]$. A probabilidade de se conectar dois spins, S_i e S_j , nestes segmentos com interações ferromagnéticas é a mesma daquela dada na seção 3.2.2.2, pois a probabilidade de adição de elementos ao agrupamento do algoritmo de Wolff discreto é a mesma daquela do algoritmo de Swendsen-Wang dada por (3.24),

$$P_{ij} = 1 - \exp(-2K_{ij}) = 2\delta\tau J_{ij} + \mathcal{O}(\delta\tau^2). \quad (3.41)$$

Então, a probabilidade de *não* se conectar os segmentos $\bar{S}_i$ e $\bar{S}_j$ resulta

$$(1 - P_{ij})^{t/\delta\tau} = (1 - 2\delta\tau J_{ij})^{t/\delta\tau} \rightarrow \exp(-2J_{ij}t). \quad (3.42)$$

O caso das ligações entre segmentos segundo vizinhos é semelhante mas, agora, leva-se em conta a probabilidade definida pela equação (3.40). Então, a probabilidade então de *não* se conectar tais segmentos com interações antiferromagnéticas, $\bar{S}_i$ e $\bar{S}_k$, é,

$$(1 - P_{ik})^{t/\delta\tau} = (1 - 2\delta\tau J_{ik}\kappa)^{t/\delta\tau} \rightarrow \exp(-2J_{ik}\kappa t). \quad (3.43)$$

Com isto, pode-se identificar um agrupamento de segmentos de spins de ambos os sinais e inverter o sinal de seus elementos no passo seguinte. Os passos de um ciclo Monte Carlo para este algoritmo é mostrado esquematicamente na figura 3.10.

3.7 Escala de tamanho finito para sistemas anisotrópicos

Como ferramenta para análise dos dados foi utilizado o comportamento de escala de tamanho finito (*finite size scaling*) que no caso de sistemas quânticos exige um tratamento um tanto diferenciado por conta da anisotropia introduzida no mapeamento quântico-clássico. Isto leva a uma função de escala a duas variáveis sendo, então, a análise dos dados feita em duas etapas.

Uma abordagem para a obtenção dos expoentes críticos seria o cálculo direto dos expoentes a partir das formas assintóticas dadas na equação (3.2). Como, por exemplo, para a suscetibilidade magnética,

$$\chi \sim |\delta|^{-\gamma}, \quad (3.44)$$

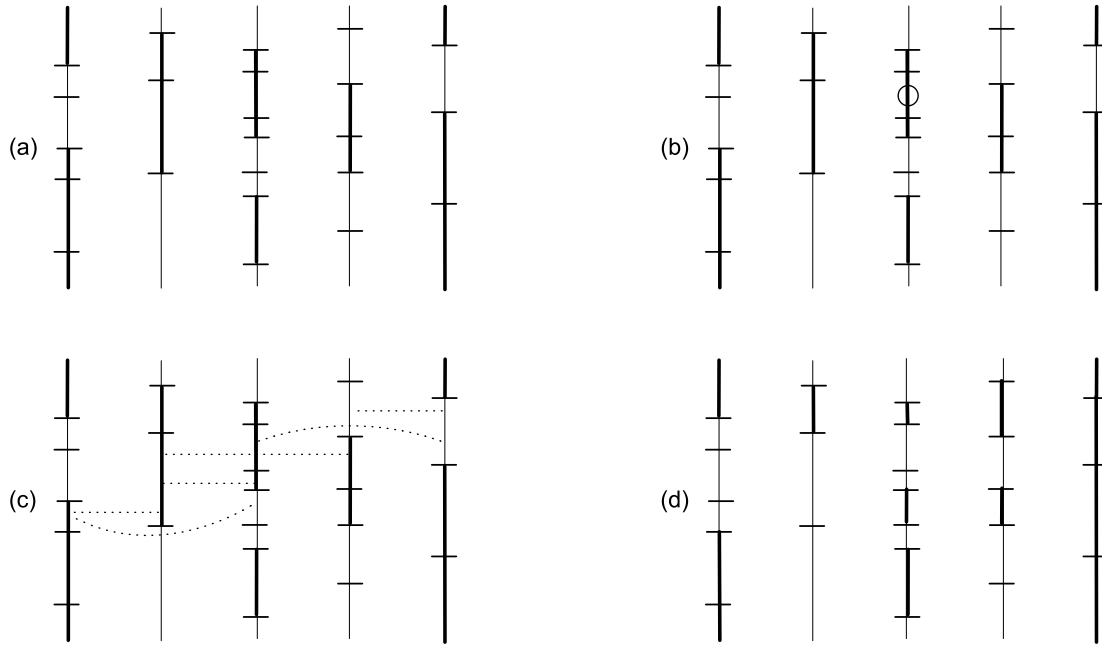


Figura 3.10 Passos de uma atualização do algoritmo adaptado a interações competitivas em tempo contínuo. (a) Configuração inicial onde os traços horizontais indicam os pontos de corte dos segmentos de spins ou novos cortes introduzidos segundo o processo de Poisson com taxa de decaimento igual a h^{-1} . (b) Escolha aleatória de um ponto da rede de spins. (c) A partir do seguimento que engloba este ponto é construído um aglomerado de segmentos de ambos os sinais segundo as probabilidades de não se conectar segmentos dadas pelas equações (3.42) e (3.43). (d) Inversão deste aglomerado de segmentos. O próximo passo, não mostrado na figura, seria a remoção dos cortes redundantes.

poderia-se obter os valores de χ em função de δ para um valor fixo de L e o expoente seria então obtido a partir do ajuste de curvas a estes pontos. O inconveniente é que nem sempre se conhece o valor do acoplamento crítico, para se obter o valor da distância δ a este ponto. Outro inconveniente é que nem sempre se tem uma estimativa da própria região crítica onde vale o comportamento assintótico (3.44).

Na análise de escala de tamanho finito usual pode-se obter os valores do acoplamento crítico e dos expoentes críticos, contornando as dificuldades acima expostas. Esta ferramenta se baseia na observação da maneira como as grandezas variam com o tamanho L do sistema. No ponto crítico o comprimento de correlação diverge como $\xi \sim |\delta|^{-\nu}$. Tomando como exemplo ainda

a suscetibilidade magnética, ao se utilizar esta expressão para ξ , obtém-se

$$\chi \sim \xi^{\frac{\gamma}{\nu}}. \quad (3.45)$$

Como o sistema é finito, na região crítica, a suscetibilidade magnética é limitada pelo tamanho L do sistema e não diverge como indicado na relação (3.44). Para valores de ξ menores que L o sistema se comporta como o sistema de tamanho infinito. Tudo isto pode ser reunido numa única expressão matemática,

$$\chi = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}} \chi_0\left(\frac{L}{\xi}\right) \quad (3.46)$$

onde $\chi_0(x) = \text{constante}$, para $x \gg 1$ e $\chi_0(x) \sim x^{\gamma/\nu}$ para $x \rightarrow 0$. Esta forma para a suscetibilidade magnética já embute toda a informação sobre o tamanho finito do sistema. Com algumas manipulações algébricas a expressão acima pode ser posta em uma forma mais tratável, uma forma que depende da distância δ ,

$$\chi = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi}(L^{\frac{1}{\nu}} \delta) \quad (3.47)$$

onde $\tilde{\chi}(x) = x^{-\gamma} \chi_0(x^\nu)$ é uma função de escala adimensional. Esta forma da suscetibilidade mostra como esta varia com o acoplamento crítico, levando-se em conta o tamanho finito do sistema. É interessante notar que $\tilde{\chi} = \text{constante}$ para $\delta \rightarrow 0$. Outra propriedade importante é que a forma funcional de $\tilde{\chi}(x)$ é supostamente a mesma independente do valor de L . Isolando $\tilde{\chi}(x)$ em (3.47) e identificando a dependência de χ com L por um subscrito tem-se,

$$\tilde{\chi}(x) = L^{-\frac{\gamma}{\nu}} \chi_L(\delta) \quad (3.48)$$

com $x = L^{\frac{1}{\nu}} \delta$. $\tilde{\chi}(x)$ deve coincidir para qualquer valor de L , tendo os expoentes ν , γ e o acoplamento crítico o valor correto. É desta forma, através do ajuste destas curvas, que se obtêm os valores dos expoentes críticos e dos acoplamentos críticos. Através de uma simulação Monte Carlo, por exemplo, pode-se obter a curva $\chi_L(\delta)$ e a partir desta, utilizando os procedimentos acima descritos, se obter o valor das grandezas acima mencionadas.

Este método pode ser estendido para outras grandezas de interesse como, por exemplo, a

magnetização por spin e o calor específico,

$$m = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{m}(L^{\frac{1}{\nu}} \delta), \quad (3.49)$$

$$c = L^{\frac{\alpha}{\nu}} \tilde{c}(L^{\frac{1}{\nu}} \delta) \quad (3.50)$$

Outra grandeza que foi utilizada nesta Tese para o cálculo de expoentes bem como dos acoplamentos críticos foi o *cumulante* de Binder, definido por [82]:

$$g = \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right) \quad (3.51)$$

que é uma grandeza adimensional, onde $\langle x^n \rangle$ é o momento de ordem n da variável aleatória x . Sua forma em escala de tamanho finito é,

$$g = \tilde{g}(L^{\frac{1}{\nu}} \delta). \quad (3.52)$$

Vê-se que g possui o mesmo valor finito independente de L em $\delta = 0$. Explorando esta propriedade podemos encontrar com precisão o acoplamento crítico, pois este é identificado como a intersecção das curvas para vários valores de L . O expoente ν por sua vez pode ser obtido do colapso destas curvas, pois a função de escala deve ser a mesma para qualquer valor de L .

Para o caso investigado nesta Tese a forma de escala de tamanho finito deve ser generalizada para ser utilizada em sistemas anisotrópicos, pois foi visto que o mapeamento quântico-clássico introduz uma anisotropia entre as dimensões espaciais e a dimensão temporal. O comprimento de correlação pode divergir com expoentes diferentes com relação a essas dimensões,

$$\xi \sim |\delta|^{-\nu} \quad (3.53)$$

$$\xi_\tau \sim |\delta|^{-\nu_\tau} \quad (3.54)$$

Podemos identificar z como sendo ν_τ/ν . Com isso podemos escrever a forma de escala de tamanho finito para uma grandeza geral O como

$$O = L^{-x_0} \tilde{O}\left(\frac{L}{\xi}, \frac{L_\tau}{\xi_\tau}\right) \quad (3.55)$$

onde x_0 é a dimensão de escala da grandeza O . Considerando que os comprimentos de correlação se comportam sob escala como a equação (3.5), a relação (3.55) pode ser escrita como,

$$O = L^{-x_0} \tilde{O}\left(\delta L^{\frac{1}{\nu}}, \frac{L_\tau}{L^z}\right). \quad (3.56)$$

Para o cumulante de Binder esta forma torna-se,

$$g = g(\delta L^{\frac{1}{v}}, \frac{L\tau}{L^z}). \quad (3.57)$$

Esta foi a grandeza investigada nesta Tese para o modelo ANNNI quântico unidimensional. A fórmula acima introduz uma função de escala de duas variáveis, sendo então a análise dos dados feita em duas etapas para se encontrar o campo crítico h_c e os expoentes z e v . Nesta Tese foi utilizada uma abordagem que leva em conta as propriedades dos momentos de m que aparecem na definição do cumulante definido em (3.51) [83] [84].

No limite $N \rightarrow \infty$, g tende a zero na fase desordenada porque a distribuição da magnetização é gaussiana com média zero. Na fase ordenada, em $T=0$, a magnetização tem como distribuição dois picos tipo delta em $+1$ e -1 sendo, portanto, o cumulante g igual a 1. Para sistemas finitos, ao se fixar L e h , o cumulante possui um valor máximo entre $L\tau \rightarrow 0$ e $L\tau \rightarrow \infty$. Isso segue do fato de que para $L\tau \rightarrow 0$ o sistema não possui mais características de um sistema $d+1$ dimensional por conta do valor reduzido da dimensão $L\tau$, comportando-se como um sistema d dimensional na fase desordenada, portanto $g \rightarrow 0$. Para $L\tau \rightarrow \infty$, a dimensão temporal se sobrepõe às outras dimensões tornando o sistema essencialmente unidimensional. Como sistemas unidimensionais não possuem ordem de longo alcance para temperatura finita, $g \rightarrow 0$. Portanto, podemos concluir que o máximo de g aumenta com o aumento de L na fase ordenada e diminui com o aumento de L na fase desordenada. Esse é o critério que utilizamos para encontrar o campo crítico: na transição de fases o máximo de g é invariante com relação a L . Estima-se, então, o valor de z a partir dessa invariância fixando-se o mesmo valor da razão $L\tau/L^z$ para valores de L distintos. Fixada esta razão, a função de escala é reduzida a uma função de uma só variável e completa-se o procedimento via a análise do comportamento de escala para tamanhos finitos usual. Pode-se confirmar o valor de h_c e se obter ainda o valor do expoente v .

3.8 Expoentes e diagrama de fases no regime de competições fracas

3.8.1 Cálculo do expoente dinâmico e do campo crítico

Como primeiro teste, o algoritmo discutido na seção 3.6 foi aplicado ao modelo de Ising em campo transversal ($\kappa = 0$) e ao Modelo ANNNI em campo transversal com $\kappa = 0,1$ unidimensionais. Estes sistemas possuem a mesma classe de universalidade do modelo de Ising clássico em duas dimensões. Foi utilizada a análise do comportamento por escala de tamanho finito exposta na seção anterior para calcular o expoente z , o expoente ν e o campo crítico. O primeiro passo foi o cálculo do cumulante g em função do comprimento do sistema na dimensão L_τ para alguns valores de L e alguns valores de campos magnéticos h . A figura 3.11 (a) mostra o comportamento de g em função de L_τ para $h = 1,05$ no caso do modelo de Ising em campo transversal. Todas as curvas possuem um máximo para g que depende do tamanho L . Neste caso quanto maior o valor de L , menor é o valor do máximo de g , e como foi exposto na seção anterior isto corresponde à fase paramagnética. Na figura 3.11 (b), para $h = 0,95$, o valor máximo de g também depende de L , mas o valor do máximo de g cresce com o aumento de L , indicando que o sistema está na fase ferromagnética. Finalmente para a figura 3.11(c), para $h = 1,0$, o valor máximo de g é independente do valor de L e, pelo critério que foi adotado, corresponde ao campo crítico que neste caso é $h_c = 1$. Este é o resultado exato para o modelo de Ising em campo transversal [43].

Identificado h_c , pode-se calcular o expoente z fixando-se uma das variáveis de *scaling*, L_τ/L^z , levando em conta que na transição $L_\tau \sim L^z$, onde utilizamos para L_τ o valor do máximo de g na transição. Com um ajuste linear do logaritmo dos valores destes máximos em função do logaritmo do valor de L podemos encontrar z . Isto está mostrado para o caso Ising na figura 3.12 (b). Na figura 3.12 (a) é mostrado o bom colapso das curvas $g(L_\tau)$ ao se escolher estes valores de máximos e z para cada valor de L .

Como último passo da abordagem de escala de tamanho finito anisotrópica, sendo então fixada a razão $\frac{L_\tau}{L^z}$, conclui-se com uma escala de tamanho finito usual para $g = \tilde{g}(L^{\frac{1}{\nu}}\delta)$. O ponto crítico é identificado como o ponto de intersecção das curvas de g em função h para

alguns valores de L . Para o caso Ising isto é mostrado na figura 3.13 (a). O ponto de intersecção confirma o resultado anterior de $h_c = 1$. O colapso destas curvas é apresentado na figura 3.13 (b) e fornece o valor do expoente ν que neste caso é $\nu = 1,0$.

Todos estes cálculos foram repetidos para o caso ANNNI com $\kappa = 0,1$. Na figura 3.14 são identificadas as fases paramagnética, ferromagnética e o ponto crítico que neste caso é $h_c \approx 0,825$. Um bom colapso é obtido para $z = 1$ como é mostrado na figura 3.15 (a). Na figura 3.16 são obtidos $h_c = 0,82 \pm 0,015$ como o ponto de intersecção e $\nu = 1$ pelo melhor colapso das curvas. Destes resultados é confirmado que os sistemas ANNNI e Ising $1d$ possuem a mesma classe de universalidade e esta é a mesma classe do modelo de Ising bidimensional.

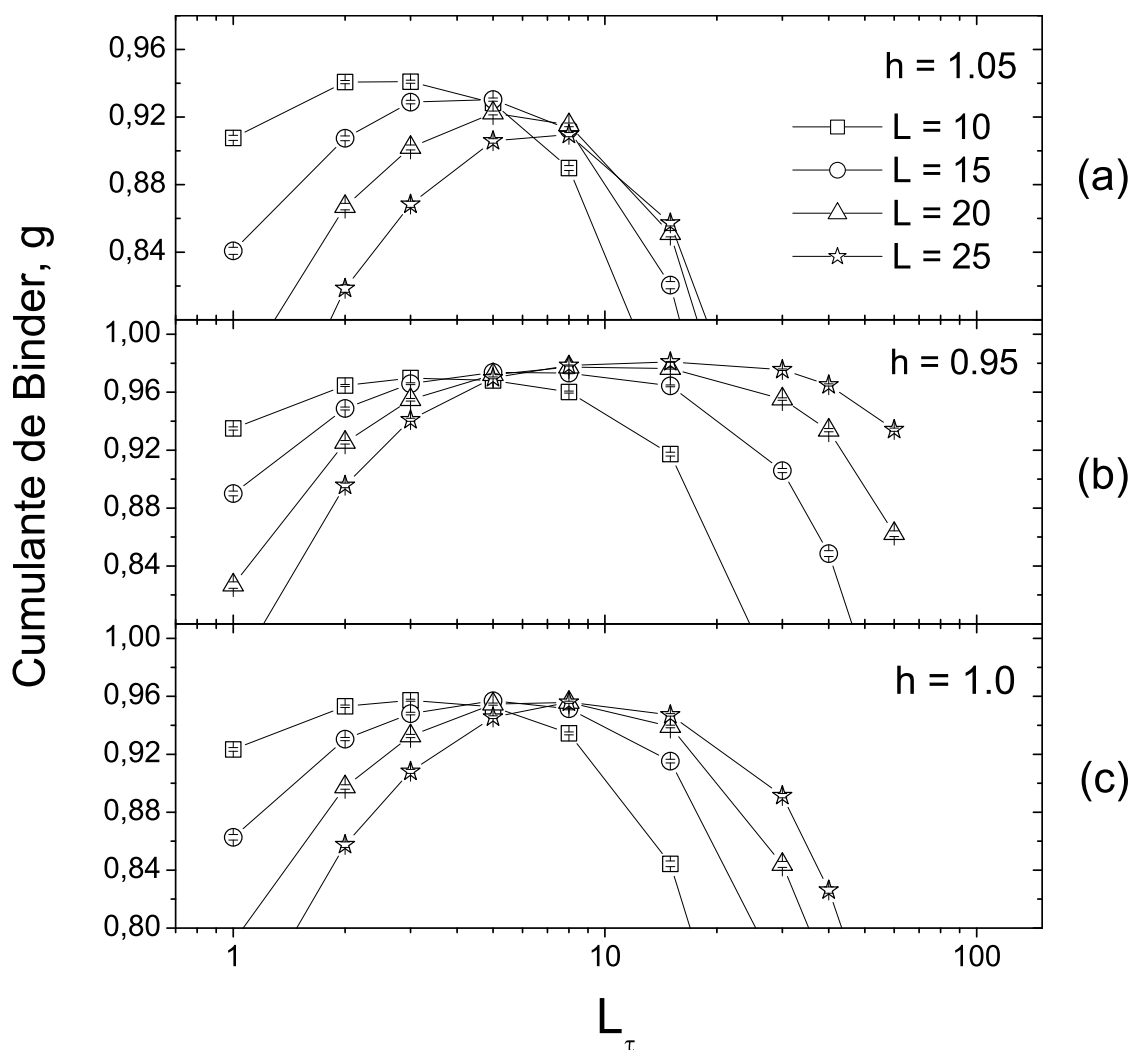


Figura 3.11 Comportamento do cumulante de Binder g em função do comprimento do sistema finito na direção temporal L_τ para campos magnéticos fixos e valores de L iguais a 10, 15, 20 e 25, para o caso Ising em campo transversal unidimensional. (a) Para $h = 1,05$ o valor do máximo de g diminui com o valor de L indicando a fase paramagnética. (b) Para $h = 0,95$ o valor do máximo de g aumenta com o valor de L indicando a fase ferromagnética. (c) O valor do máximo de g independe de L indicando o valor de $h = 1$ como o ponto crítico.

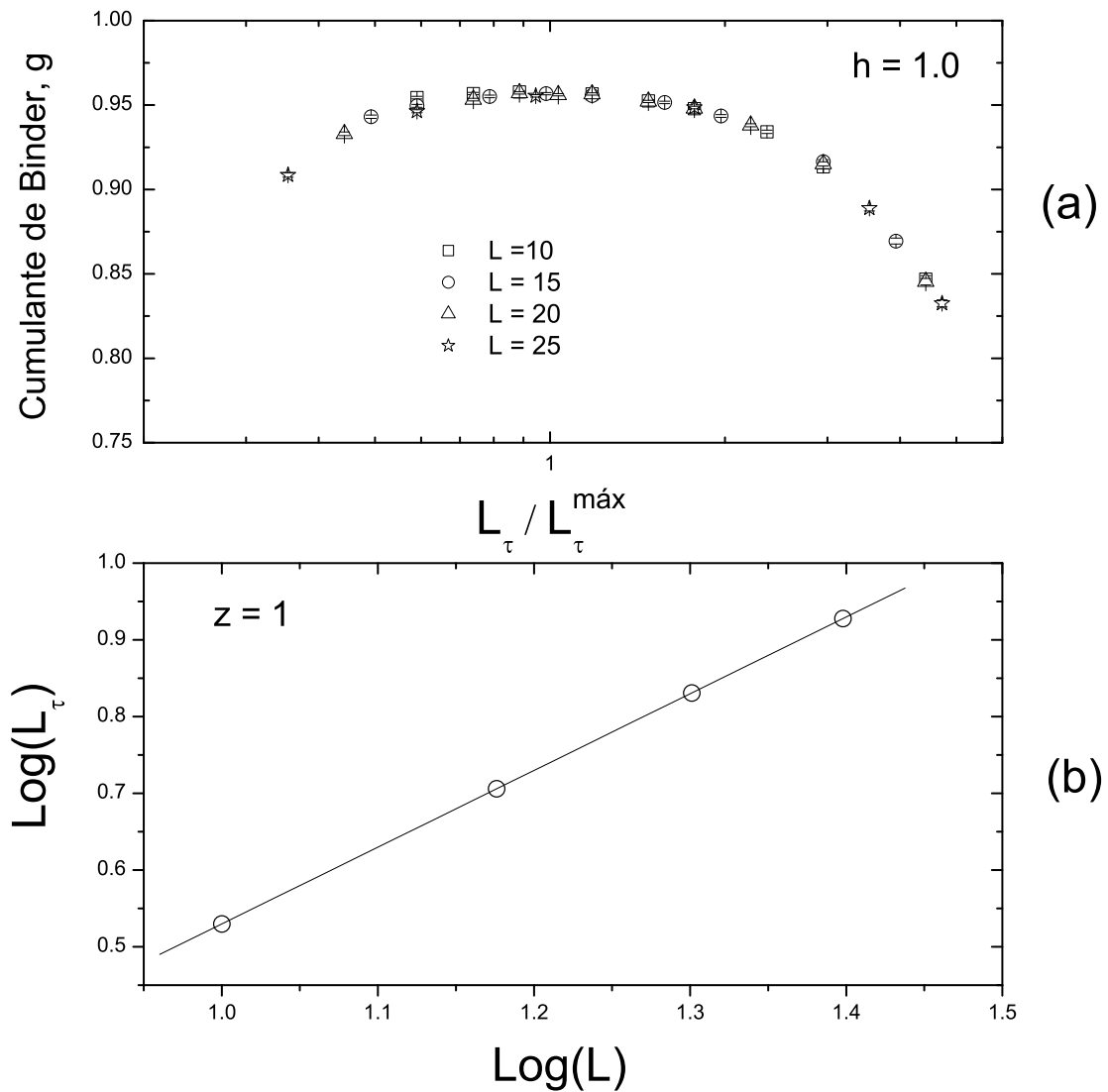


Figura 3.12 (a) Colapso das curvas mostradas na figura 3.11 (c) onde é fixada a razão $\frac{L_\tau}{L}$, onde são utilizados os valores L_τ onde ocorrem os máximos de g . (b) Ajuste linear dos logaritmos de L_τ referentes aos máximos de g em função dos logaritmos dos comprimentos L , que fornece o valor de $z = 1$

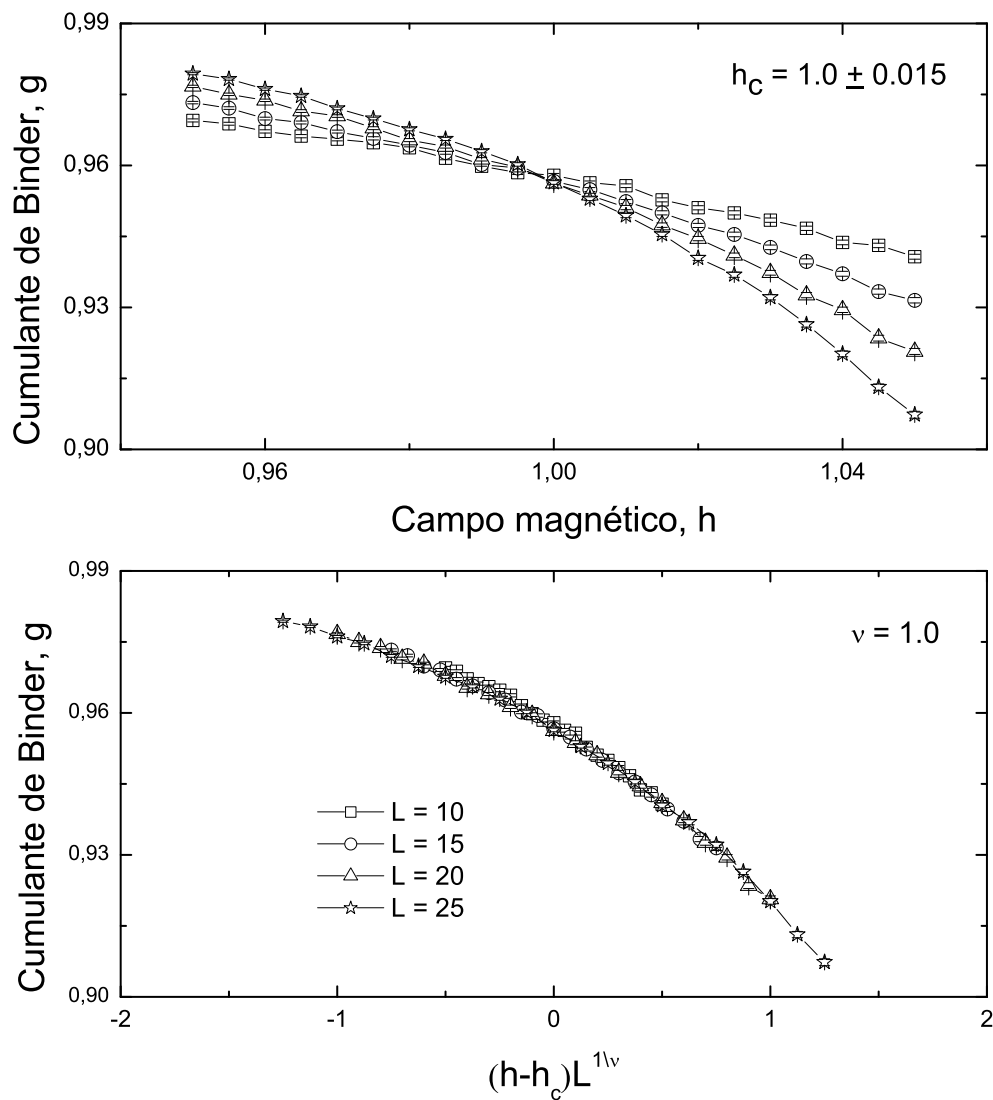


Figura 3.13 Comportamento de g em função do campo magnético após ser fixada a razão $\frac{L_x}{L_z}$ para os valores de $L = 10, 15, 20$ e 25 . (a) O ponto de interseção das curvas $h = 1,0 \pm 0,015$ indica o valor do ponto crítico para o caso Ising em campo transversal unidimensional. (b) Colapso das curvas mostradas em (a) resultando em um valor de $\nu = 1$.

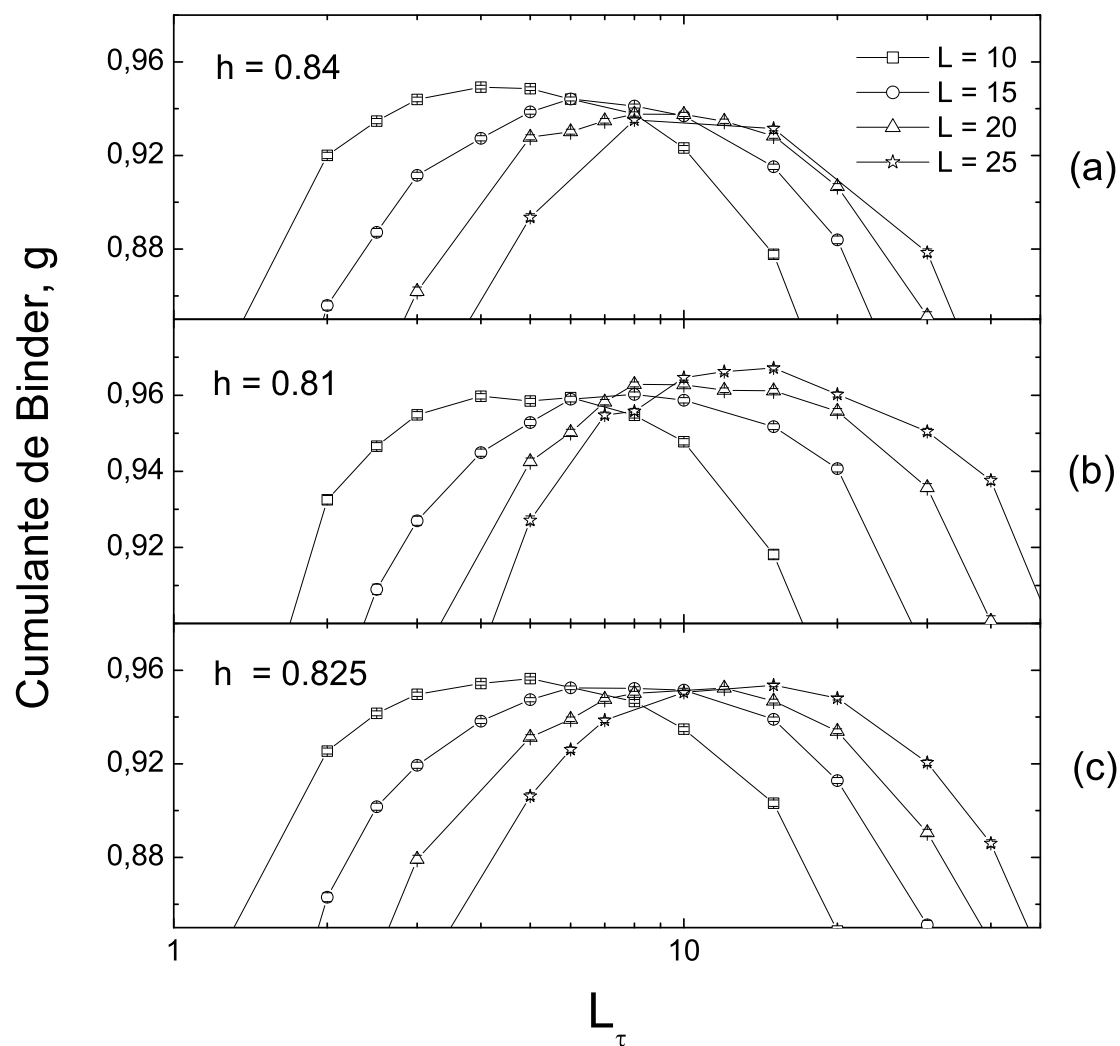


Figura 3.14 Comportamento do cumulante de Binder g em função do comprimento do sistema finito na direção temporal L_τ para campos magnéticos fixos e valores de L iguais a 10, 15, 20 e 25, para o caso ANNNI em campo transversal unidimensional com $\kappa = 0,1$. (a) Para $h = 0,84$ o valor do máximo de g diminui com o valor de L indicando a fase paramagnética. (b) Para $h = 0,81$ o valor do máximo de g aumenta com o valor de L indicando a fase ferromagnética. (c) O valor do máximo de g independe de L indicando o valor de $h \approx 0,825$ como o ponto crítico.

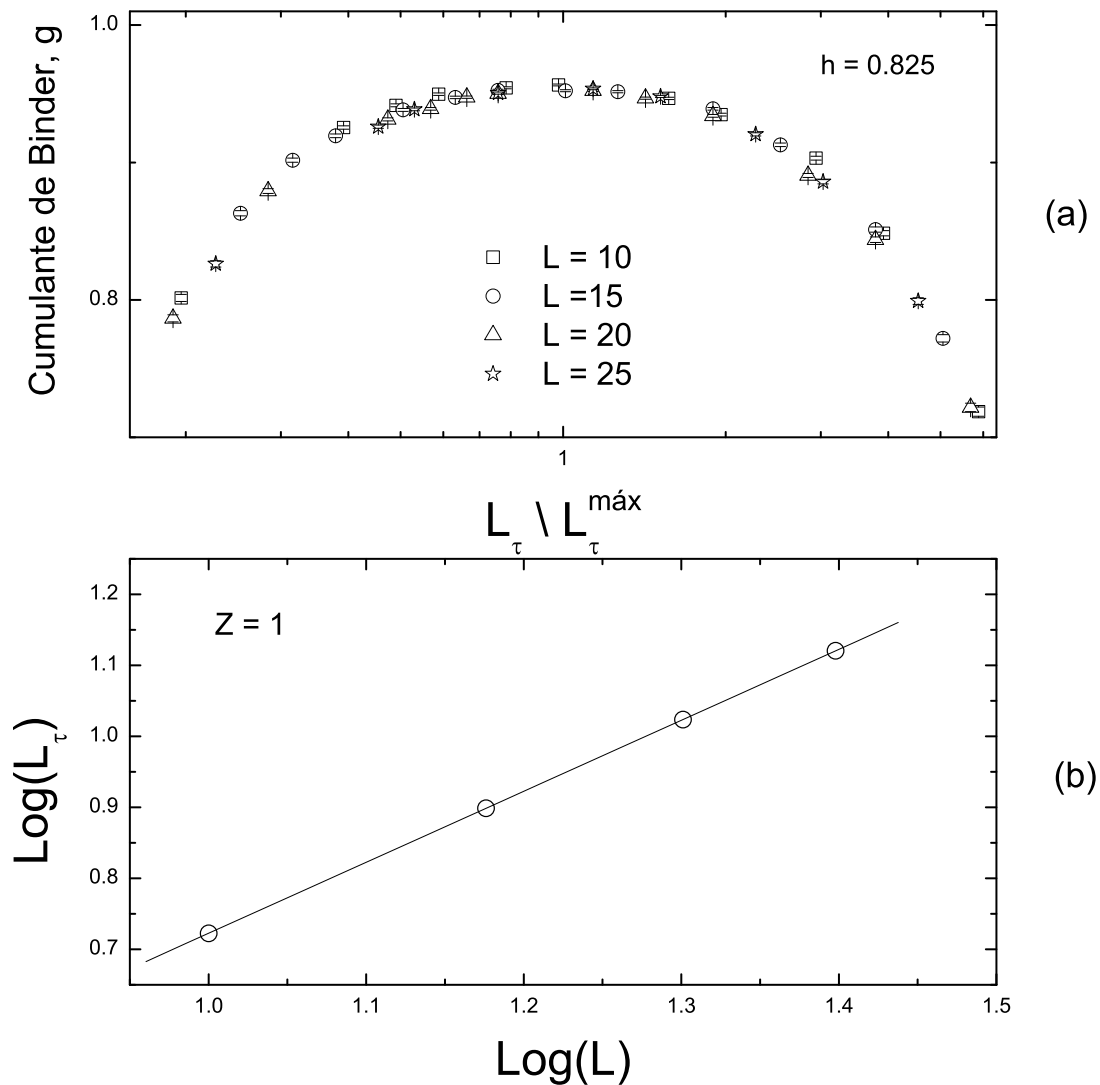


Figura 3.15 (a) Colapso das curvas mostradas na figura 3.14 (c) onde é fixada a razão $\frac{L_{\tau}}{L^z}$, onde são utilizados os valores L_{τ} onde ocorrem os máximos de g . (b) Ajuste linear dos logaritmos de L_{τ} referentes aos máximos de g em função dos logaritmos dos comprimentos L , que como no caso Ising em campo transversal fornece o valor de $z = 1$

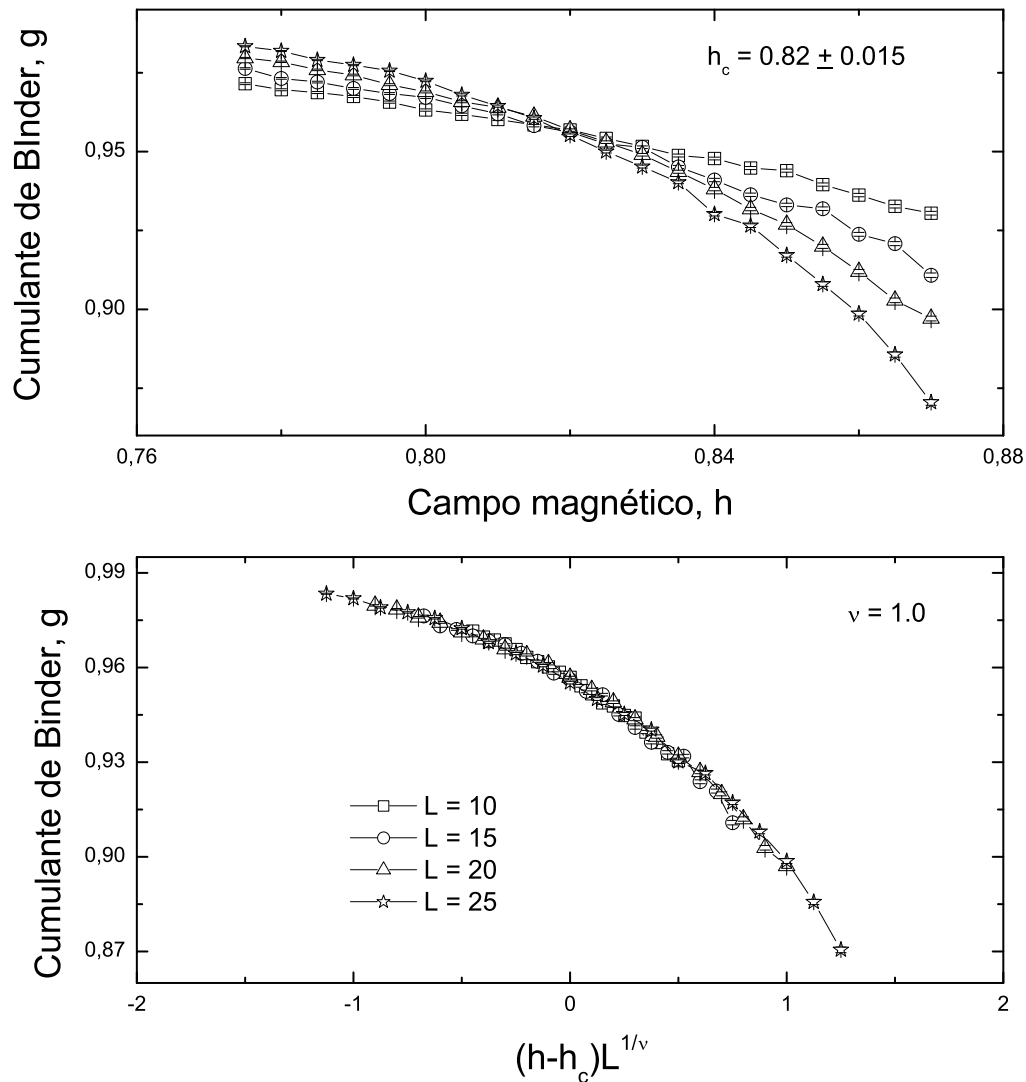


Figura 3.16 Comportamento de g em função do campo magnético após ser fixada a razão $\frac{L_\tau}{L_z}$ para os valores de $L = 10, 15, 20$ e 25 para o caso ANNNI em campo transversal com $\kappa = 0, 1$. (a) O ponto de interseção das curvas $h = 0,82 \pm 0,015$ indica o valor do ponto crítico para este caso. (b) Colapso das curvas mostradas em (a) resultando em um valor de $\nu = 1$.

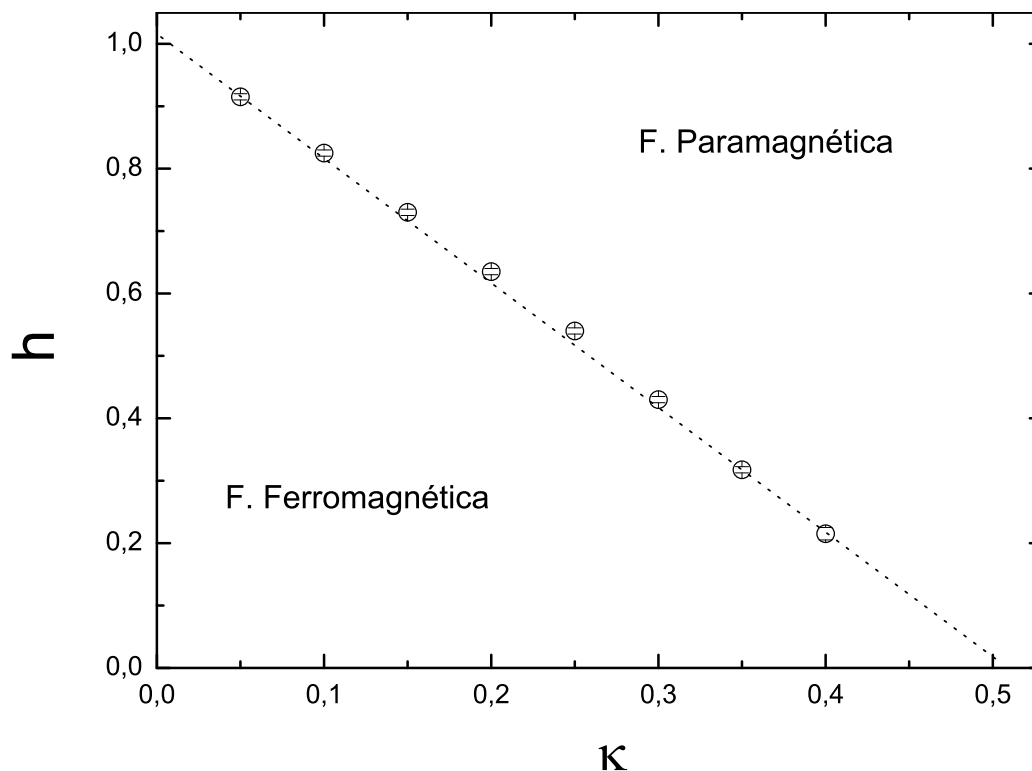


Figura 3.17 Diagrama de fases do modelo ANNNI em campo transverso para $\kappa < 0,5$, obtido através do algoritmo em tempo contínuo aplicado a este modelo.

3.8.2 Diagrama de fases para competições fracas

Outro teste para o algoritmo utilizado foi realizado para determinar com certa precisão a linha de transição ferro-paramagnética do modelo ANNNI quântico unidimensional e compará-la com resultados obtidos recentemente por outras técnicas. Nesta seção, serão apresentados resultados obtidos através da escala de tamanho finito, mas levando em conta que no caso de sistemas puros se conhece a priori o valor do expoente dinâmico ($z = 1$). Isto simplifica consideravelmente o tratamento dos dados que passam a ser analisados pela análise do comportamento de escala em tamanhos finitos usual ao se fixar a razão L_τ/L . Neste caso, após uma inspeção esta razão foi fixada entre 0,5 e 5 para valores de κ entre 0,05 e 0,4. O valor de L_τ correspondente ao máximo de g cresce consideravelmente ao se aumentar κ , e isto causa também um aumento considerável do tempo computacional para as simulações. Os resultados obtidos mostram certa robustez quanto a desvios na escolha de L_τ/L quando os resultados obtidos são

comparados aos de outras técnicas. Na tabela abaixo, os resultados obtidos neste trabalho são comparados com os resultados das referências [79] [80] obtidos por outros métodos, e a figura 3.17 mostra os pontos da linha ferro-paramagnética obtidos neste trabalho.

κ	MC	Ref. [80]	Ref. [79]
0,05	0,915(5)	-	-
0,1	0,825(5)	-	0,8246(3)
0,15	0,730(5)	0,73405(4)	-
0,2	0,635(5)	0,6393(1)	0,6407(4)
0,25	0,540(5)	0,5403(3)	-
0,3	0,430(5)	0,43669(4)	0,4368(2)
0,35	0,317(5)	0,32821(2)	-
0,4	0,21 (1)	0,216090(3)	0,2068(3)

Tabela 3.1 Tabela que compara os valores do campo crítico do modelo ANNNI obtidos pelo método Monte Carlo para $\kappa < 0,5$ com resultados recentes reportados na literatura. Os resultados MC foram obtidos assumindo a priori $z = 1$ e fixando-se a razão $\frac{L_\tau}{L}$ não tão rigorosamente como na seção 3.8.1.

3.9 Modelo ANNNI quântico 1d com interações entre segundos vizinhos diluídas

Nesta seção, serão apresentados os resultados para o modelo ANNNI diluído que faz uma interpolação entre os modelos ANNNI o modelo Ising puro, ambos, em campo transversal. O objetivo é estudar o papel da desordem em relação à criticalidade quântica de tais modelos puros. Os modelos ANNNI e Ising em campo transversal em uma cadeia, possuem a mesma classe de universalidade do modelo Ising clássico bidimensional. A introdução da desordem portanto, segundo o critério de Harris, deve ser relevante modificando a criticalidade quântica

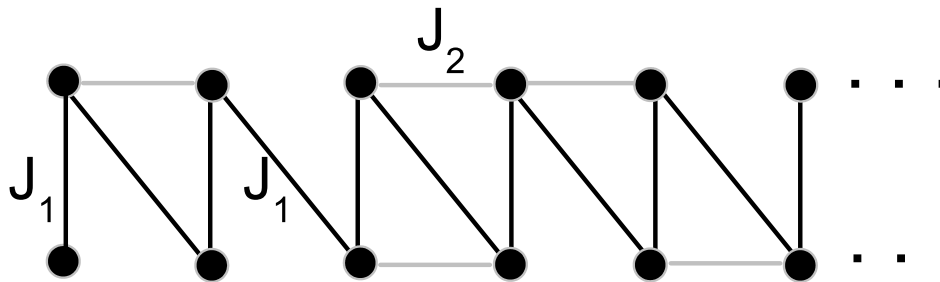


Figura 3.18 Representação esquemática do modelo de Ising em campo transversal com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos J_1 (linha cheia preta) e interações diluídas antiferromagnéticas entre segundos vizinhos J_2 (linha cheia cinza).

do modelo ANNNI diluído. Esta desordem entre acoplamentos foi introduzida por meio da diluição dos acoplamentos entre segundos vizinhos, permitindo uma mudança gradual entre os modelos puros acima citados. Desta forma, espera-se que o sistema deixe a classe de universalidade do tipo Ising $2d$ e retorne para esta mesma classe de universalidade nos extremos do intervalo de variação do parâmetro de diluição, $\varepsilon \in [0, 1]$.

O hamiltoniano do modelo pode ser escrito como,

$$\mathcal{H} = -J_1 \left(\sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \kappa \sum_i \eta_{i,i+2} \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z \right) - h \sum_i \sigma_i^x \quad (3.58)$$

Como anteriormente κ está relacionado com a competição entre os acoplamentos. O parâmetro

η pode assumir os valores 0 ou 1 segundo a distribuição de probabilidades,

$$P(\eta_i) = (1 - \varepsilon)\delta(\eta_i) + \varepsilon\delta(\eta_i - 1) \quad (3.59)$$

O modelo Ising em campo transversal corresponde ao caso $\varepsilon = 0$, enquanto para $\varepsilon = 1$ tem-se o modelo ANNNI em campo transversal. Uma representação esquemática do modelo é mostrada na figura 3.18. As interações entre primeiros vizinhos J_1 são representadas por linhas pretas em zigue-zague e as interações entre segundos vizinhos diluídas J_2 são representadas por linhas cinzas.

Para realizar a simulação computacional deste modelo, foi utilizada a expansão de Suzuki-Trotter que mapeia o modelo quântico 1d em um sistema clássico bidimensional com spins do tipo Ising. A introdução da desordem (diluição) nos acoplamentos do sistema quântico implica numa desordem perfeitamente correlacionada na direção temporal. Utilizamos o algoritmo Monte Carlo de tempo imaginário contínuo introduzido neste capítulo, e testado para os casos puros na seção anterior, para cada realização ou amostra do sistema desordenado. Foram usadas condições de contorno periódicas na direção espacial e temporal. Ao todo foram utilizadas 100 amostras para o cálculo das médias e a investigação da criticalidade quântica foi limitada ao caso $\kappa = 0, 1$, onde o parâmetro ε assumiu os valores 0, 1, 0,3, 0,5, 0,7 e 0,9. Para o cálculo das médias numa amostra, foi utilizado da ordem de 10^4 passos Monte Carlo, tomados de 5 em 5. Para a termalização do algoritmo foram utilizados, também, da ordem de 10^4 passos Monte Carlo.

Após o cálculo da média em amostras a análise dos dados pode ser feita com a escala de tamanho finito anisotrópica da mesma forma que na seção anterior. A obtenção do campo crítico é feita de uma forma iterativa a partir das propriedades do cumulante de Binder, mostradas na seção anterior: primeiro obtém-se o gráfico L_τ vs g para alguns tamanhos L e um valor relativamente arbitrário de h , obtém-se os máximos desta curva para os vários valores de L , identifica-se qual a fase em questão (ferro ou paramagnética) e a partir destes máximos conclui-se com a simulação que gera o gráfico h vs g , o qual por meio a interseção das curvas fornece um valor aproximado para h_c . A partir deste valor aproximado de h_c continua-se em um processo iterativo à procura de novos máximos e de novos valores de h_c até a convergência seja

obtida. A transição de fases é identificada pelo ponto onde os máximos são invariantes com relação a L .

As figuras 3.19 mostram justamente as curvas L_τ vs g no ponto crítico, para $L = 8, 10, 12, 16, 20$ e 25 , onde os máximos das curvas são invariantes para $h_c = 0,835, 0,875, 0,91, 0,945$ e $0,97$ com os valores de $\varepsilon = 0,1, 0,3, 0,5, 0,7$ e $0,9$, respectivamente. O colapso dessas curvas fornece o valor do expoente dinâmico z que por sua vez pode indicar uma mudança ou não da classe de universalidade do sistema. Esses colapsos são mostrados na figura 3.20 e os respectivos expoentes dinâmicos foram calculados na figura 3.21, os quais são $z = 1,093 \pm 0,008, 1,054 \pm 0,016, 1,05 \pm 0,02, 1,06 \pm 0,01$ e $1,14 \pm 0,01$, todos diferentes de 1 indicando uma mudança da classe de universalidade do sistema diluído com relação ao sistema puro. A figura 3.22 mostra todos estes pontos em um só gráfico.

A confirmação dos valores de h_c (dentro da margem de erro) estimados na figura 3.19, pode ser visto dos cruzamentos das curvas 3.23 para os mesmos valores de ε considerados em 3.19. Os pontos dos cruzamentos são $h_c = 0,835 \pm 0,025, 0,865 \pm 0,03, 0,905 \pm 0,03, 0,935 \pm 0,035$ e $0,975 \pm 0,03$, estando portanto os valores de h_c observados na figura 3.19 dentro das margens de erro dos valores obtidos nas figuras 3.23. O colapso destas curvas, mostrado na figura 3.24, para todos os valores de ε , indicam o mesmo valor para o expoente do comprimento de correlação $\nu = 1$. Na figura 3.25 o diagrama ε vs h para o caso $\kappa = 0,1$ é apresentado mostrando a linha de pontos críticos entre os casos Ising ($h_c = 1,0, \varepsilon = 0$) e ANNNI ($h_c \approx 0,82, \varepsilon = 1$) em campo transversal.

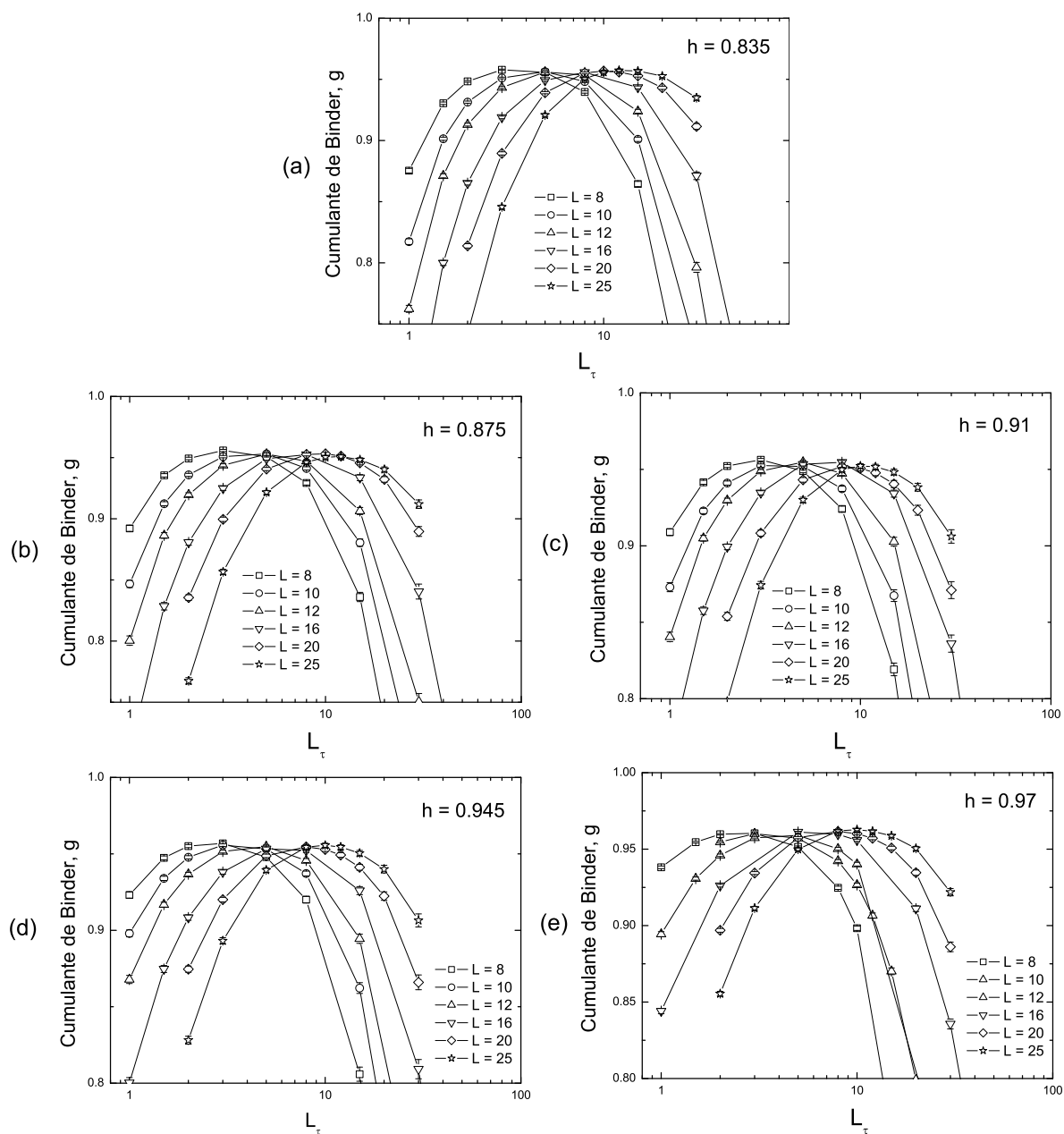


Figura 3.19 Cumulante de Binder em função de L_τ para $\varepsilon = 0, 1, 0, 3, 0, 5, 0, 7$ e $0, 9$, em seus respectivos campos críticos h_c , onde os máximos das curvas não dependem de L .

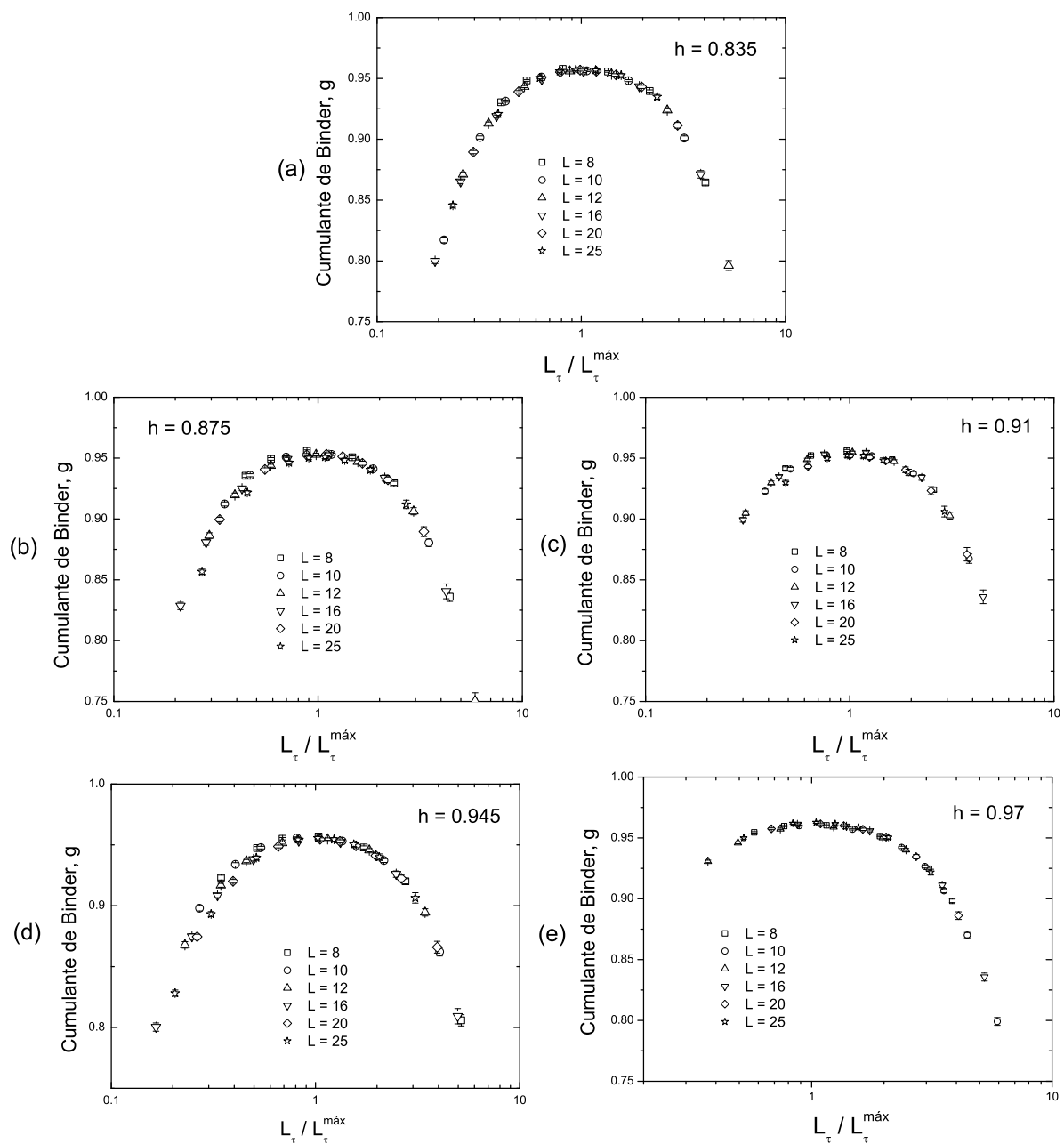


Figura 3.20 Colapso das curvas mostradas na figura 3.19, a partir dos máximos de g em função de L_τ .

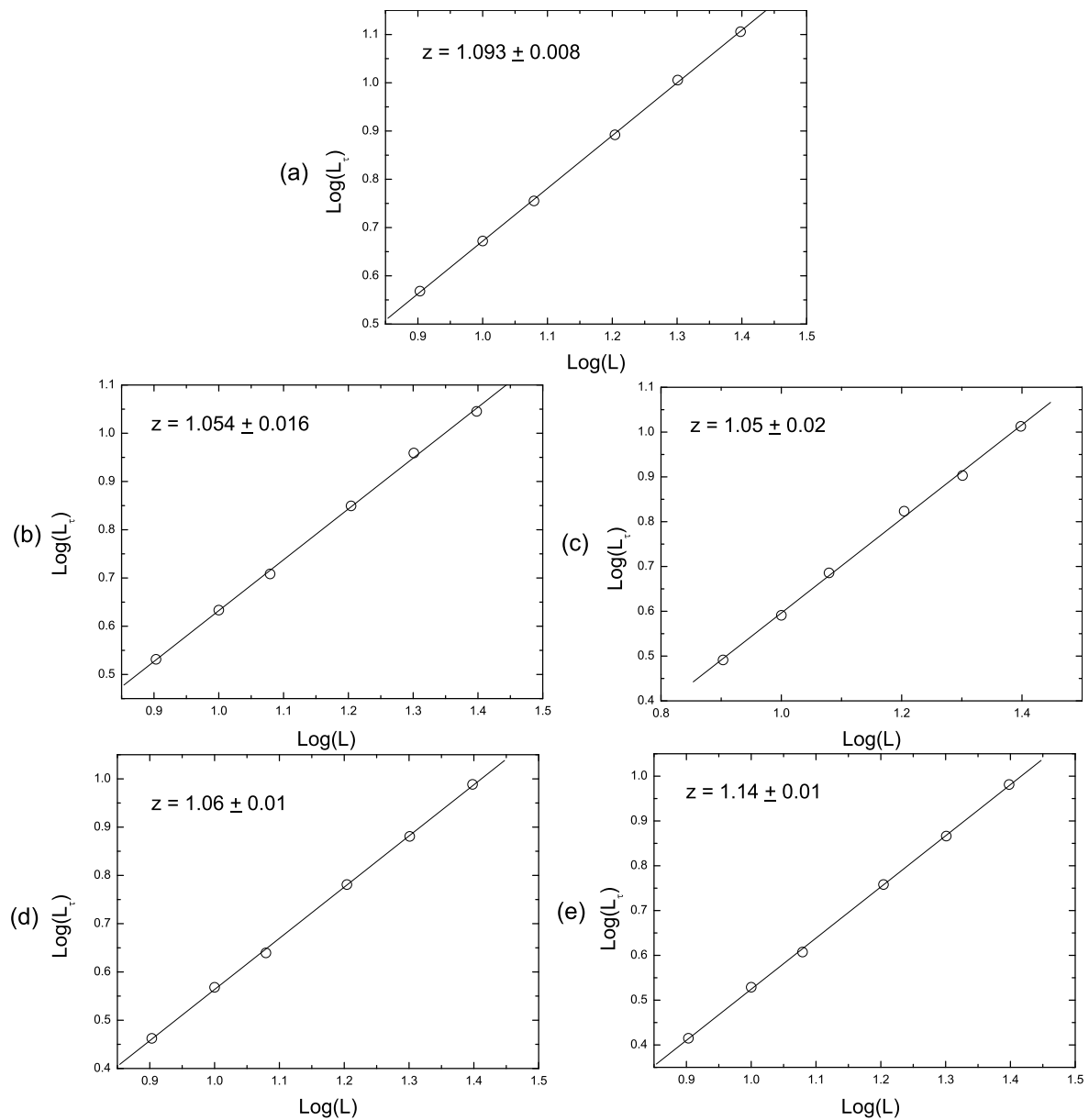


Figura 3.21 Cálculo do expoente dinâmico z a partir dos máximos de g em função de L_τ . Os valores de h_c correspondentes são: 0,835 (a), 0,875 (b) 0,835 (c) 0,91 (d) 0,835 (e), para $\varepsilon = 0, 1, 0,3, 0,5, 0,7$ e 0,9 respectivamente.

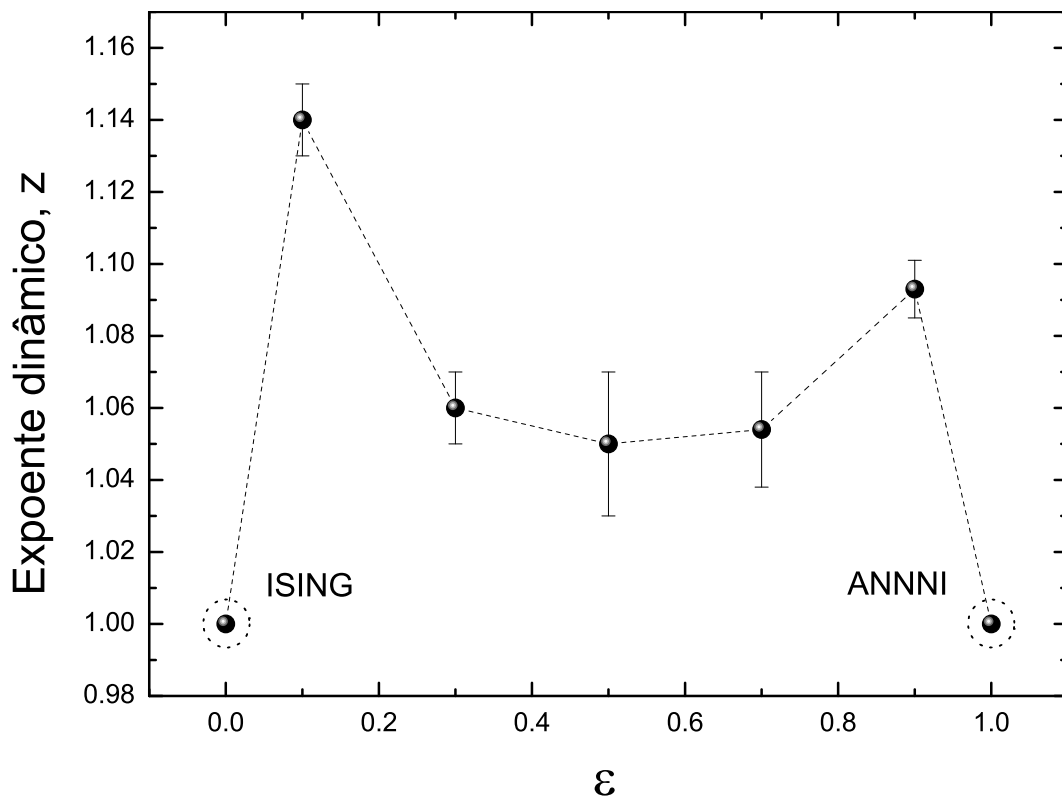


Figura 3.22 Expoentes dinâmicos em função do parâmetro de diluição ε . Os valores de $z \neq 1$ indicam uma mudança da classe de universalidade com relação aos sistemas Ising e ANNNI puros em campo transversal.

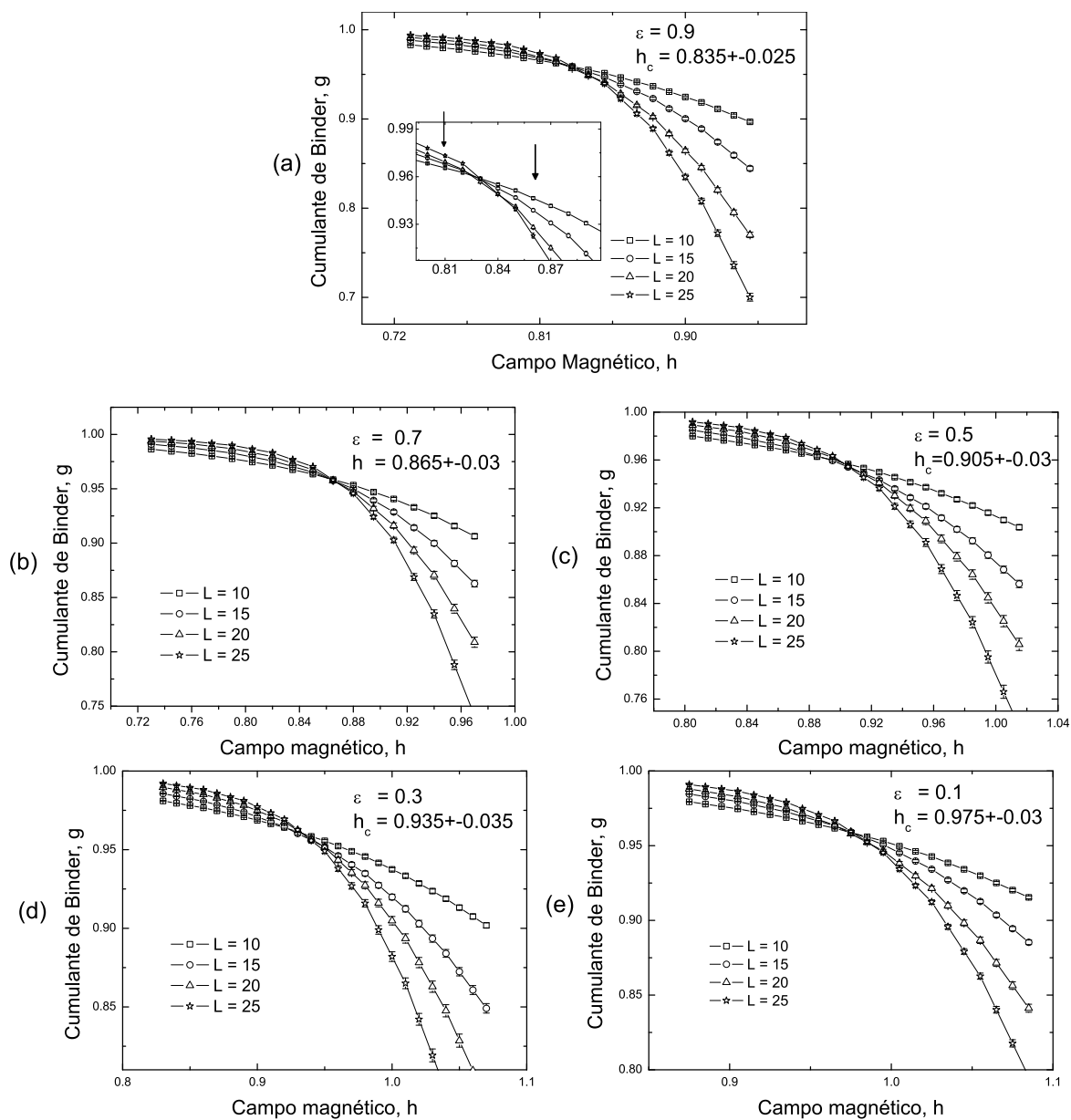


Figura 3.23 Cumulante de Binder em função do campo magnético para $\varepsilon = 0, 1, 0, 3, 0, 5, 0, 7$ e $0, 9$. Os pontos de interseção indicam os campos críticos para cada valor de ε .

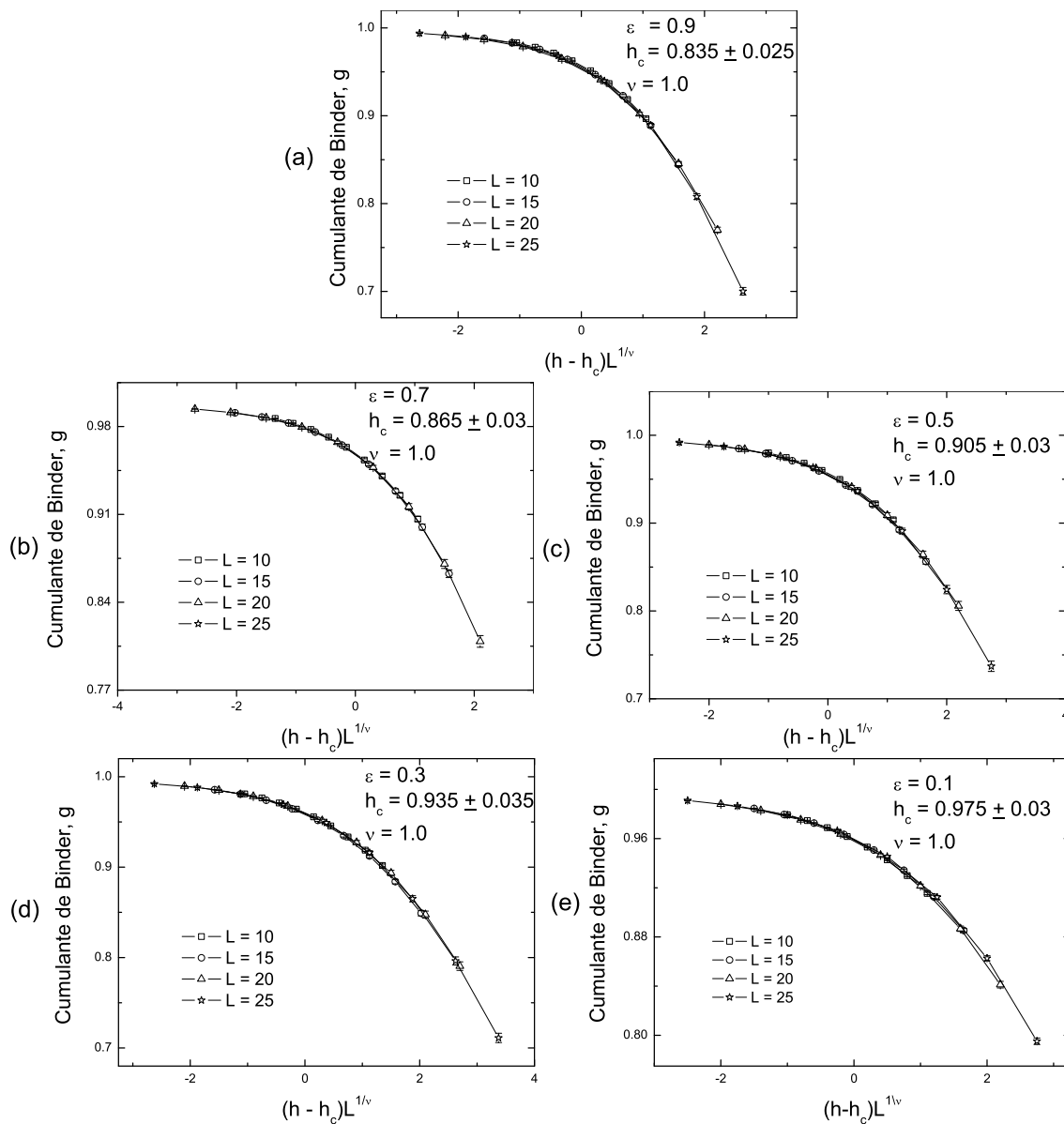


Figura 3.24 Colapso das curvas mostradas em 3.23. $\nu \approx 1$ para todos os valores de ε investigados.

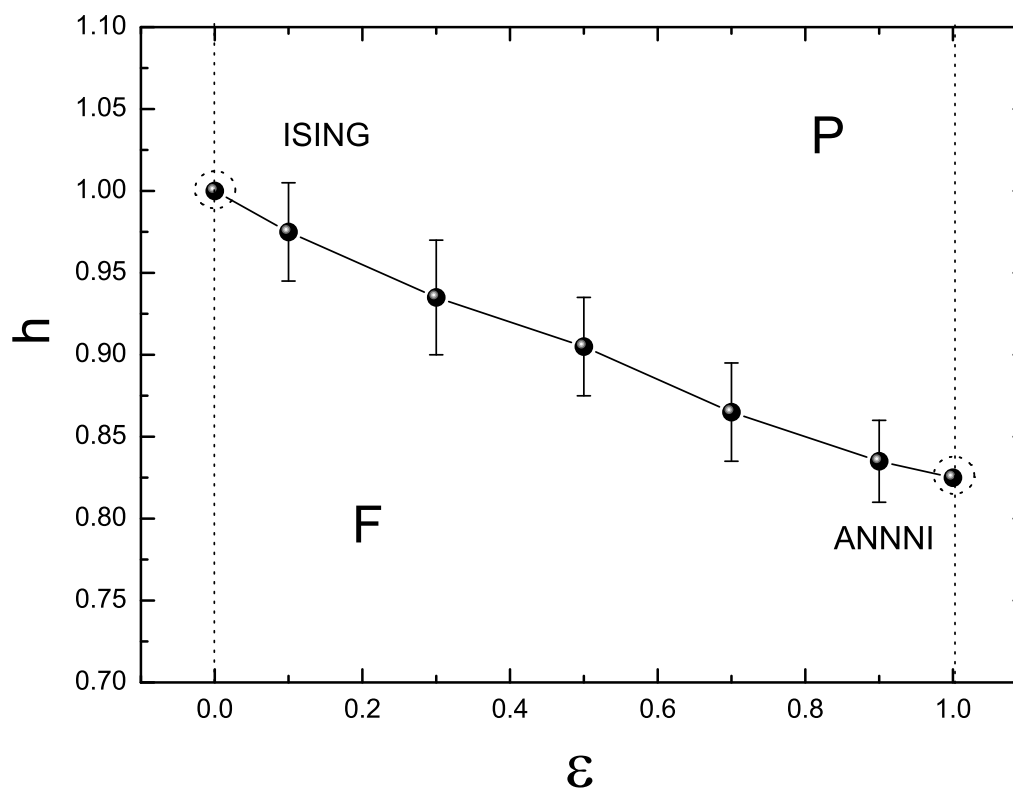


Figura 3.25 Diagrama de fases h vs ε para $\kappa = 0, 1$.

3.10 Conclusões

Estudamos a criticalidade do modelo de spins quânticos de Ising com interações competitivas diluídas em uma cadeia linear através da técnica de Monte Carlo em tempo contínuo adaptada a sistemas com competição entre os acoplamentos e escala de tamanho finito para sistemas anisotrópicos. Foram calculados expoentes dinâmicos (z), expoentes do comprimento de correlação (ν) e campos magnéticos críticos (h_c). No caso puro, o algoritmo Monte Carlo reproduziu os valores de z , ν e h_c , para o modelo de Ising em campo transversal $1d$, que possui solução exata. Para o caso ANNNI $1d$ puro em campo transversal, o algoritmo reproduziu com certa precisão a linha de transição ferro-paramagnética do diagrama de fases para competições fracas $\kappa < 0,5$, em comparação com outras técnicas utilizadas para abordar este modelo, que não possui solução exata. Para o caso de acoplamentos diluídos entre segundos vizinhos, calculamos z , ν e h_c para os valores do parâmetro de diluição $\varepsilon = 0, 1, 0,3, 0,5, 0,7$ e $0,9$, fixando $\kappa = 0,1$. Os valores calculados de z em função de ε indicam uma mudança da classe de universalidade com relação aos modelos puros ($z \neq 1$), estando de acordo com o critério de Harris que prediz tal mudança para este modelo. Os valores do expoente ν calculados em função de ε não apresentam nenhuma variação sendo $\nu \approx 1$ e o comportamento de h_c em função de ε é aproximadamente linear entre os casos $\varepsilon = 0$ (Ising, $h_c = 1$) e $\varepsilon = 1$ (ANNNI, $h_c \approx 0,82$). O artigo correspondente aos resultados apresentados neste capítulo está em preparação para ser submetido ao *Physical Review B*, com o título *Quantum bond-diluted ANNNI chain*.

O modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $\frac{1}{2}$ na rede diamante

4.1 O modelo de Heisenberg

O magnetismo é um dos fenômenos físicos mais antigos descoberto pelo homem, data provavelmente dos Gregos em 800A.C., mas somente teve sua existência esclarecida após o advento da mecânica quântica quando Heisenberg e Dirac descobriram independentemente que a interação de troca entre elétrons é a base da teoria microscópica do magnetismo [85]. Esta interação é essencialmente eletrostática e de origem puramente quântica, sendo algumas ordens de grandeza maiores que as interações clássicas entre momentos magnéticos do tipo dipolo-dipolo. Sua origem resulta da sobreposição da parte antissimétrica das funções de onda de elétrons em átomos vizinhos e pode ser escrita como uma interação efetiva entre elétrons da forma $-J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, onde $\vec{S}_i, \vec{S}_j$ são operadores de spin dos respectivos elétrons e J é a integral de intercâmbio,

$$J_{ab} = \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \varphi_a^*(\vec{r}_1) \varphi_b^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \varphi_b(\vec{r}_1) \varphi_a(\vec{r}_2), \quad (4.1)$$

onde $\varphi_x(\vec{r})$ é a função de onda do elétron no estado x ($x = a, b$) na posição $\vec{r}$. Para $J > 0$ o estado fundamental dos elétrons é um estado tripleto (spins paralelos) e para $J < 0$ o estado fundamental é o estado singleto (spins antiparalelos). O hamiltoniano que generaliza esta interação entre dois elétrons para um material isolante homogêneo com N componentes é o hamiltoniano de Heisenberg que tem a forma,

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

onde a soma é sobre todos os pares de spins vizinhos e isto se justifica pelo fato da interação de troca, que depende da superposição das funções de onda, decrescer rapidamente com a distância. Esta interação é chamada de interação de troca *direta*. Existem outros tipos de interação

semelhantes como a interação de troca mediada por elementos não magnéticos situados entre elementos magnéticos, que é a chamada interação de *supertroca*, e ainda a interação de troca via elétrons de condução em metais chamada de interação indireta. A rede onde estão localizados estes spins são em geral redes d -dimensionais, mas estes modelos são estudados também em redes que interpolam entre uma dimensão e outra, como é o caso das redes tipo fita que fazem a interpolação entre uma cadeia e um sistema bidimensional. Neste capítulo, serão apresentados resultados referentes ao modelo de Heisenberg em uma rede fractal do tipo diamante cuja dimensionalidade (fractal) está relacionada ao número de conexões presentes na célula unitária do tipo diamante, que será descrita mais adiante.

O estado fundamental do hamiltoniano (4.2) no caso ferromagnético ($J > 0$) corresponde à configuração onde todos os spins estão alinhados paralelamente à uma direção, como no caso de spins clássicos. Para o caso antiferromagnético ($J < 0$) a correspondência do estado fundamental com o estado de Néel para spins clássicos não se verifica. Tanto para o caso ferromagnético quanto para o caso antiferromagnético de spins $\frac{1}{2}$ em uma dimensão, o estado fundamental e o espectro de excitação de baixas energias são conhecidos através da técnica do Bethe ansatz.

Um resultado rigoroso para o modelo de Heisenberg isotrópico com interações de alcance finito é o teorema de Mermin-Wagner [86] que afirma que não existe ordem magnética de longo alcance seja ferro ou antiferromagnética para temperaturas finitas em $d \leq 2$. Para o caso isotrópico $d > 2$, a ordem magnética de longo alcance é destruída no ponto crítico, chamado de ponto de Curie para os materiais ferromagnéticos e ponto de Néel para os antiferromagnéticos. Na região crítica várias grandezas termodinâmicas apresentam comportamento do tipo lei de potência e a transição é caracterizada por um conjunto de expoentes críticos. Uma breve discussão destes comportamento e dos expoentes críticos foi feita na seção 3.1.1. A tabela 4.1 mostra alguns valores dos expoentes críticos calculados aproximadamente por métodos de teoria de campos [7] para o caso do modelo ferromagnético clássico isotrópico tridimensional na rede cúbica. (Para efeito de comparação foram incluídos na tabela 4.1 os expoentes do caso Ising tridimensional.)

As interações de troca em sua essência são isotrópicas, só dependem das direções relativas

Expoente	Heisenberg	Ising
ν	0,705(3)	0,6300(15)
β	0,3645(25)	0,3250(15)
η	0,033(4)	0,031(4)
γ	1,386(4)	1,241(2)

Tabela 4.1 Valores de alguns expoentes críticos para o modelo de Heisenberg clássico ($S \rightarrow \infty$) $3d$, bem como seus respectivos valores para o caso Ising calculados segundo a referência [7].

entre spins, não privilegiando em princípio nenhuma direção particular. Mas, em muitos compostos apresentam eixos fáceis de magnetização privilegiando então um dos eixos cristalinos. Fatores destas anisotropias podem ser por exemplo o acoplamento spin-órbita na qual o spin pode depender da distribuição eletrônica ou ainda o campo cristalino que depende das simetrias da rede, onde o campo eletrostático que a rede cria sobre um de seus elementos pode privilegiar um dos eixos. Sistemas com forte anisotropia uniaxial são descritos pelo modelo de Ising.

Uma variante do modelo (4.2) que considera uma certa anisotropia de *exchange*, ou seja quando o acoplamento J depende da direção das componentes do operador $\vec{S}$ é o modelo de Heisenberg anisotrópico [87], que para o caso de spin $\frac{1}{2}$ tem o seguinte hamiltoniano,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [(1 - \Delta)(\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) + \sigma_i^z \sigma_j^z] \quad (4.3)$$

onde σ^k com $k = x, y, z$ são as matrizes de Pauli identificadas com cada sítio i da rede e a soma é sobre todos os pares de spins vizinhos. O parâmetro $\Delta \in [0, 1]$ é o parâmetro de anisotropia onde para $\Delta = 0$ tem-se o modelo de Heisenberg isotrópico discutido nos parágrafos acima e para $\Delta = 1$ tem-se o modelo de Ising clássico. Para um valor de $\Delta \neq 0$, costuma-se chamar este modelo também de *XXZ*.

A introdução da anisotropia permite o aparecimento de uma fase ordenada a $T \neq 0$ e $d = 2$, diferente do caso isotrópico onde pelo teorema de Mermin-Wagner a dimensão crítica inferior é $d = 3$. Este modelo foi o ponto de partida para o estudo que desenvolvemos e apresentaremos neste capítulo. A rede que foi utilizada como suporte para os spins foi uma rede hierárquica do

tipo diamante com p conexões, que está relacionada a aproximação de Migdal-Kadanoff [88] [89] para redes hipercúbicas. Neste trabalho, foi utilizado o grupo de renormalização no espaço real aplicado a sistemas quânticos, onde as equações de renormalização são obtidas de uma forma aproximada através de combinações de processos de dizimação em paralelo. Os efeitos desta aproximação são menos relevantes quanto maior for a temperatura, como é discutido na referência [90]. Foi neste contexto de temperatura finita diferente de zero que aplicamos o método proposto por Morgado, Coutinho e Curado [91][92] para a obtenção da magnetização local do sistema através de uma relação recursiva que permite calcular a magnetização de sítios internos da rede por meio do valor da magnetização dos sítios de uma geração anterior. Isto permitiu o cálculo de alguns expoentes críticos.

4.2 Grupo de renormalização no espaço real - GRER

4.2.1 Definições

O método do grupo de renormalização ¹ teve início com o trabalho de Wilson [48] no início da década de 1970 tendo como influência as idéias de Kadanoff [97] sobre transformações de um bloco de variáveis dinâmicas em uma única variável e cujo sucesso está relacionado às correlações de longo alcance na região crítica onde o único comprimento relevante é o comprimento de correlação, podendo assim serem removidos graus de liberdade intermediários relacionados às interações de curto alcance. A idéia original de Wilson foi formulada no espaço dos momentos utilizando a equivalência entre as técnicas de teoria de campos e fenômenos críticos em mecânica estatística. O grupo de renormalização no espaço real introduzido nos trabalhos de Niemeijer e van Leeuwen[98] se aproximam mais das idéias de Kadanoff e são baseados na subtração de graus de liberdade situados em uma rede, segundo uma redução de escala b . A idéia central é que no ponto crítico o sistema se torna invariante sob esta transformação pois o comprimento de correlação diverge. Os pontos críticos são então identificados como pontos fixos da transformação e a estabilidade destes pontos pode ser investigada para se verificar

¹Esta seção tem como base as referências [93] [94] [95] [45] [96]

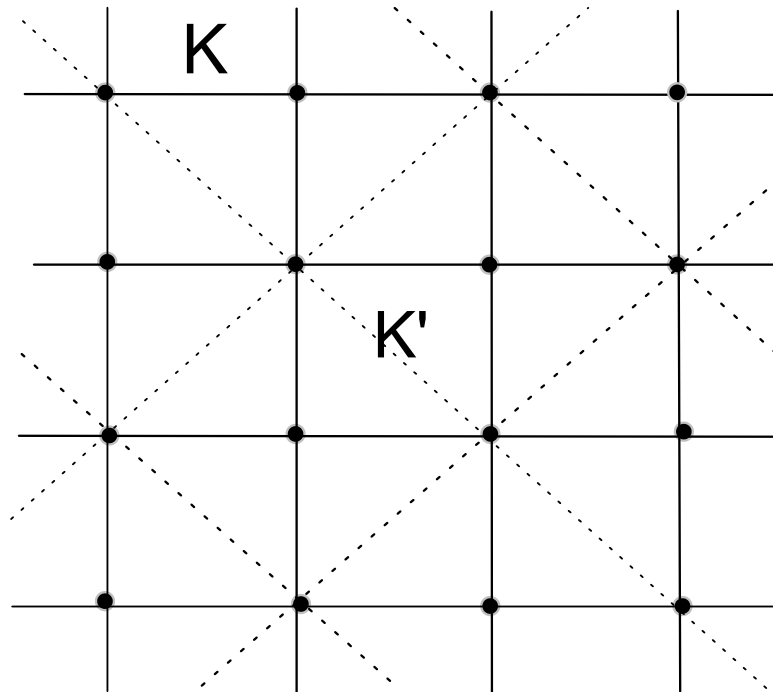


Figura 4.1 Exemplo esquemático de uma transformação de renormalização em uma rede quadrada onde os acoplamentos iniciais K são transformados em acoplamentos K' preservando a geometria da rede.

quais parâmetros são relevantes ou não. Todas estas informações são obtidas sem se conhecer uma forma explícita da função de partição do sistema, mas apenas a forma como os parâmetros se transformam em cada iteração, que em muitos casos são aproximações que evitam a proliferação de constantes de acoplamento. Um esquema de uma transformação deste tipo para uma rede bidimensional é mostrado na figura 4.1. Estas equações de renormalização fornecem fluxos em um espaço de parâmetros que podem ser utilizados para se estudar fenômenos de *crossover* bem como de *universalidade*. Aliás o grupo de renormalização é uma ferramenta que fornece respostas a outras questões referentes aos fenômenos críticos como por exemplo a homogeneidade de funções termodinâmicas e as relações entre expoentes críticos, além dos já citados fenômenos de crossover e universalidade.

Um conceito importante no GRER é o de espaço de parâmetros. Este espaço é definido

por eixos cartesianos que representam os acoplamentos presentes em um hamiltoniano reduzido $\tilde{\mathcal{H}} = \frac{\mathcal{H}}{k_B T}$. Estes eixos podem ser por exemplo os acoplamentos referentes à temperatura, ao campo magnético ou algum outro parâmetro da energia. Um vetor $\vec{\mu}$ nesse espaço d -dimensional representa então um certo hamiltoniano reduzido para estes valores de parâmetros. No caso do modelo Ising na presença de um campo longitudinal estes parâmetros seriam βJ e $h = \beta \mathcal{H}$ onde $\beta = (k_B T)^{-1}$.

Uma transformação de blocos do sistema pode ser representada por uma transformação geralmente não linear em que o hamiltoniano reduzido inicial é transformado em outro, neste mesmo espaço de parâmetros, supondo que a transformação não gere acoplamentos espúrios que aumentariam a dimensionalidade deste espaço, ou seja

$$\vec{\mu}' = \mathbf{R}\vec{\mu}. \quad (4.4)$$

O operador $\mathbf{R}$ reduz o número de graus de liberdade do sistema de N para N' , sendo o fator de escala definido como $b^d = \frac{N}{N'}$. A condição essencial para a obtenção da transformação $\mathbf{R}$ é que a função de partição seja invariante (e consequentemente a energia livre total) após a transformação em bloco, isto é,

$$Z_{N'}(\tilde{\mathcal{H}}') = Z_N(\tilde{\mathcal{H}}). \quad (4.5)$$

Outra condição geralmente é imposta a esta transformação, é que o hamiltoniano transformado mantenha a mesma forma funcional do hamiltoniano original, para que após cada transformação, o espaço de parâmetros tenha a mesma dimensionalidade. Esta condição é muito difícil se ser satisfeita em geral de modo que uma abordagem aproximada quase sempre é preciso ser feita, como é o caso do modelo de Ising clássico em uma rede hipercúbica d -dimensional onde somente no caso $d = 1$, a relação é exata. Uma aproximação bastante utilizada para redes hipercúbicas é a aproximação de Migdal-Kadanoff [88] [89] será discutida logo mais neste capítulo.

A escolha do procedimento para a redução dos graus de liberdade dos blocos não é única, como por exemplos a regra da maioria ou a dos processos de dizimação. Repetidas iterações a partir de um ponto inicial no espaço de parâmetros, produzem um fluxo de pontos discretos que “saltam” neste espaço, sendo que o comprimento de correlação é re-escalado a cada iteração

por

$$\xi' = \frac{\xi}{b}. \quad (4.6)$$

Acima do ponto crítico as iterações conduzem o fluxo para um ponto que representa um estado de desordem, e abaixo do ponto crítico o fluxo é conduzido a um ponto que representa um estado ordenado. Estes pontos são os pontos fixos atrativos ou estáveis. O ponto crítico, relacionado à transição de fase de segunda ordem, é identificado como um ponto fixo misto (atrativo e repulsivo, dependendo da direção no espaço de parâmetros). Todos estes pontos podem ser obtidos da chamada equação de ponto-fixa,

$$\vec{\mu}^* = \mathbf{R}\vec{\mu}^* \quad (4.7)$$

Aos pontos fixos mistos está relacionado o conceito de superfície crítica, onde cada ponto desta é atraído para um destes pontos fixos mistos, podendo haver em alguns casos competição entre atratores. A natureza dos pontos fixos (atrativos, repulsivos ou mistos) pode ser investigada através da linearização da transformação $\mathbf{R}$ em regiões próximas a estes pontos. Um ponto nesta região pode então ser expandido em uma base de autovetores normalizados da matriz linearizada de $\mathbf{R}$,

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \sum_i g_i \vec{v}_i \quad (4.8)$$

Um número m de iterações nesta região produz,

$$\mathbf{A}^m \vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \sum_i \lambda_i^m g_i \vec{v}_i \quad (4.9)$$

Onde $A_{ij} = \frac{\partial R_i}{\partial \mu_j}(\vec{\mu}^*)$ é a forma linearizada de $\mathbf{R}$, e λ_i são seus autovalores. Desta expressão conclui-se que para $\lambda_i < 1$ o fluxo conduz o sistema para o ponto fixo nesta direção, sendo então a variável dita irrelevante nesta direção (atração). Para $\lambda_i > 1$ ocorre o contrário, e a variável é considerada relevante (repulsão).

4.2.2 Universalidade, crossover e o expoente do comprimento de correlação ν

No GRER podemos associar a idéia de fluxo em um espaço de parâmetros com os fenômenos de universalidade e *crossover*. Os pontos em uma superfície crítica que correspondem a hamiltonianos críticos para este conjunto de parâmetros estão sujeitos a atratores. Na proximidade

destes, e sobre a superfície crítica o fluxo converge segundo os autovalores das variáveis irrelevantes, possuindo então a mesma criticalidade ou classe de universalidade deste ponto fixo misto. O fenômeno de *crossover* pode ser explicado quando existe a competição entre dois ou mais atratores, como por exemplo acontece com o modelo de Heisenberg anisotrópico apresentado na seção 4.1. Para um pequeno valor de anisotropia e para valores de T próximos de T_c o fluxo passa próximo do ponto fixo de Heisenberg mas é desviado por uma variável relevante para o ponto fixo de Ising. Assim o sistema apresenta um comportamento crítico de Heisenberg, mas muito próximo de T_c existe uma mudança da criticalidade para a classe Ising.

A análise do comportamento assintótico do comprimento de correlação próximo ao ponto fixo misto, acima definido, fornece o valor do expoente crítico ν . Considerando um espaço de parâmetros bidimensional, sendo um dos parâmetros a temperatura por simplicidade, a expansão na base de autovetores normalizados próximo ao ponto fixo misto, pode ser escrita como,

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + g_r \vec{v}_r + g_{ir} \vec{v}_{ir}. \quad (4.10)$$

Partindo de um ponto próximo à uma temperatura crítica T_c e pouco acima da superfície (linha) crítica ($g_r \approx 0$) onde se encontra o ponto fixo misto, sobre o qual o comprimento de correlação é infinito, o fluxo de renormalização deve “tangenciar” esta linha crítica e passar por um ponto de retorno próximo ao ponto fixo misto, pois este fluxo é atraído para o ponto fixo de altas temperaturas onde $\xi \rightarrow 0$. Próximo a esta linha crítica a componente g_r pode ser expandida sendo aproximada até primeira ordem em $a(T - T_c)$. Após m iterações nesta região, o novo ponto no espaço de parâmetros é,

$$\vec{\mu}(m) = \vec{\mu}^* + a(T - T_c) \lambda_r^m \vec{v}_r + g_{ir} \lambda_{ir}^m \vec{v}_{ir}. \quad (4.11)$$

O ponto de retorno pode ser identificado como o ponto onde o fator $a(T - T_c) \lambda_r^m$ é próximo da unidade,

$$a(T - T_c) \lambda_r^m \sim 1. \quad (4.12)$$

O mesmo procedimento vale para o comprimento de correlação renormalizado $\frac{\xi}{b^m}$ nesta região, que evolui desde um valor muito grande próximo à linha crítica, para um valor que tende a zero no ponto fixo de altas temperaturas. O ponto de retorno pode ser então definido

como o ponto onde ξ se aproxima de um valor a' relacionado ao espaçamento da rede,

$$\frac{\xi}{b^m} \sim a' \quad (4.13)$$

Ao se eliminar m das equações acima, tem-se o comportamento assintótico de ξ ,

$$\xi = \frac{a}{a'^v} (T - T_c)^{-v} \quad (4.14)$$

sendo,

$$v = \frac{\log b}{\log \lambda_r}. \quad (4.15)$$

Um argumento semelhante com um ponto de partida na região oposta em relação à linha crítica produz o mesmo valor para v . Neste caso, o fluxo é direcionado para o ponto-fixo atrator associado a fase ferromagnética.

4.2.3 A aproximação de Migdal-Kadanoff para a rede hipercúbica

A abordagem que foi utilizada no presente trabalho é baseada na aproximação de Migdal-Kadanoff para sistemas quânticos. A aplicação desta aproximação para sistemas clássicos, como, por exemplo, para o modelo de Ising, tem como base a remoção e/ou deslocamento de ligações seguido de processos de dizimação nas cadeias lineares resultantes destas remoções e/ou deslocamentos. Um processo de dizimação em uma cadeia de Ising é um processo onde os spins são divididos em dois grupos de spins (caso $b = 2$), por exemplo spins pares e ímpares segundo sua posição na rede, sendo o traço sobre os graus de liberdade de um destes grupos somados, reduzindo assim o sistema por um fator de escala $b = 2$. A condição (4.5) é então imposta fornecendo uma equação de renormalização exata para o acoplamento $K = \beta J$, dada por

$$K' = \tanh^{-1}[(\tanh K)^2]. \quad (4.16)$$

A extensão do processo de dizimação para o caso de uma rede hipercúbica não produz resultados tão simples como no caso unidimensional, pois a cada iteração do processo de renormalização novas constantes de acoplamento relacionadas a interações entre muitos spins são

produzidas, necessitando então uma abordagem aproximada que exclui o surgimento desses acoplamentos indesejados. Na aproximação de Migdal-Kadanoff para uma rede quadrada com fator de escala $b = 2$ e considerando duas coordenadas perpendiculares x e y , primeiro ligações alternadas na direção y são desfeitas e adicionadas às suas ligações vizinhas produzindo,

$$K'_y = 2K_y. \quad (4.17)$$

Na direção x , por sua vez, se sucede um processo de dizimação,

$$K'_x = R^{(2)}(K_x), \quad (4.18)$$

onde $R^{(2)}$ representa um processo de dizimação com $b = 2$ em uma cadeia. Para o caso Ising, $R^{(2)}$ é dado pela expressão (4.16). Até este ponto o processo possui o inconveniente de produzir acoplamentos anisotrópicos. Isto pode ser minimizado ao se repetir o mesmo processo na outra direção. A figura 4.2 reproduz todos estes passos de uma forma esquemática. Para o caso geral de uma rede hipercúbica tem-se,

$$K'_p = b^{d-p} R^{(b)}(b^{p-1} K_p), \quad (4.19)$$

onde K_p são as ligações ou acoplamentos paralelos às direções da rede hipercúbica ($p = 1, 2, \dots, d$).

4.2.3.1 Caso exato: Rede diamante

A aproximação de Migdal-Kadanoff torna-se exata para sistemas de spins que têm como base as chamadas redes hierárquicas como foi mostrado por Ostlund, Berker [99] e Bleher, Žalis [100]. As redes hierárquicas, ao contrário das redes de Bravais, são redes não homogêneas não possuindo portanto simetria de translação. Estas redes podem ser construídas por meio das chamadas células geradoras que são as células básicas da rede ao se substituir todas ou algumas ligações da rede em uma hierarquia n por estas células geradoras, produzindo uma rede na hierarquia $n+1$. A figura 4.3 mostra este passo a partir de uma ligação isolada da rede completa.

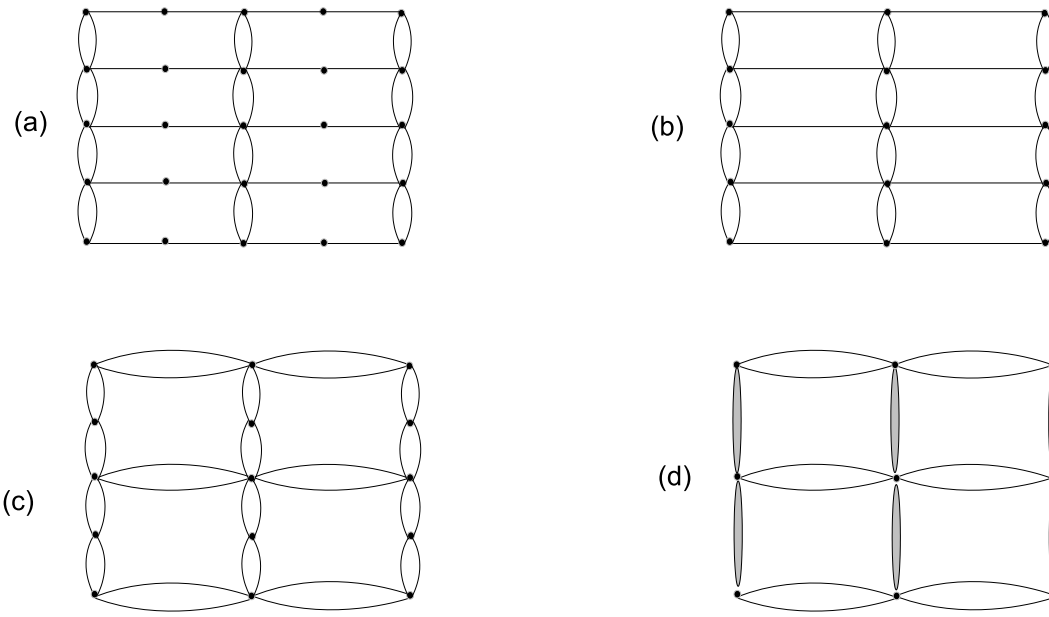


Figura 4.2 Passos da aproximação de Migdal-Kadanoff na rede quadrada. (a) Rede com parte dos acoplamentos na direção y deslocados para formar acoplamentos alternados do tipo $2K_y$. (b) Dizimação unidimensional dos spins na direção x . (c) Deslocamento dos acoplamentos resultantes na direção x . (d) Dizimação unidimensional dos spins na direção y .

Os spins externos da célula geradora são chamados de vértices e o menor número de ligações que une estes vértices está relacionado com o fator de escala b da transformação de renormalização. Esta distância também define um comprimento na célula geradora bem como na rede em uma hierarquia n . A distância entre os vértices originais (oriundos da hierarquia $n = 0$) em uma hierarquia n é portanto,

$$L = b^n. \quad (4.20)$$

Outra definição importante nestas redes é o número de ligações iteráveis B da rede hierárquica que basicamente é o número de ligações em uma célula geradora, as quais dão origem a outras células geradoras na hierarquia $n + 1$. No caso mostrado na figura 4.3 todas as ligações são iteráveis. Este número B está relacionado com a definição de volume nas redes hierárquicas da

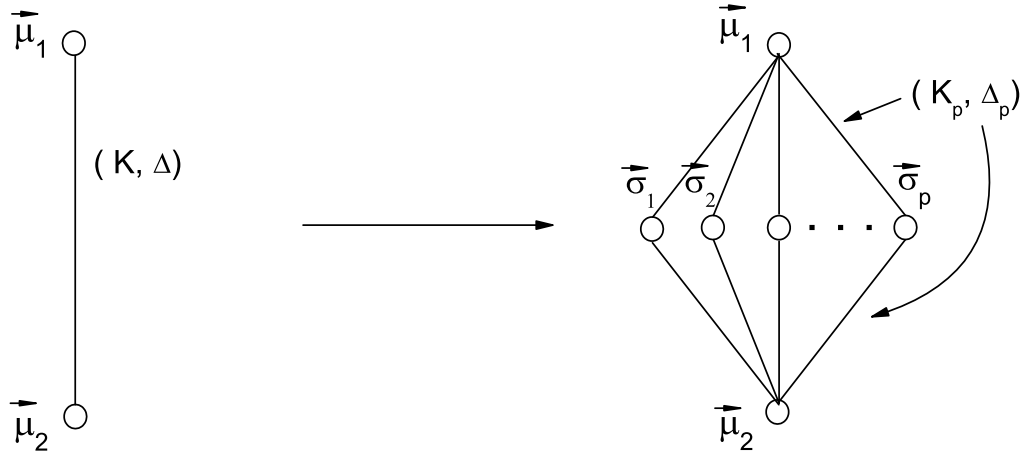


Figura 4.3 Processo de composição da célula básica de uma rede tipo diamante com p conexões a partir de um acoplamento inicial. Ao se continuar o processo para cada acoplamento desta célula básica por um número n de vezes tem-se como resultado uma rede fractal hierárquica do tipo diamante.

seguinte maneira,

$$V = B^n. \quad (4.21)$$

A partir das definições (4.20) e (4.21) pode-se portanto definir a dimensão de uma rede hierárquica,

$$d = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log B^n}{\log b^n} = \frac{\log B}{\log b}. \quad (4.22)$$

O caso estudado, neste capítulo, é o de um sistema quântico de spins em uma rede diamante com p conexões e fator de escala $b = 2$ (fig. 4.3). A grandeza B é portanto $2p$ e $b = 2$. Substituindo em (4.22) tem-se para a dimensão fractal da rede diamante com p conexões e $b = 2$,

$$d_f = 1 + \frac{\log p}{\log 2}. \quad (4.23)$$

As equações de Migdal-Kadanoff para o caso de spins clássicos são exatas nestas redes pois estas são invariantes por transformações de escala assim como as transformações de renormalização nos pontos críticos. Renormalizando as células geradoras em uma hierarquia n obtém-se a mesma rede em uma hierarquia inferior. Para o caso quântico isto geralmente não se verifica por conta da não comutatividade dos operadores envolvidos, que em princípio, não permitiria a separação de uma célula geradora do resto da rede. Isto será discutido na próxima seção.

4.3 GRER para sistemas quânticos

4.3.1 Aproximação por blocos

Se para o caso de sistemas clássicos a relação de renormalização raramente pode ser apresentada de forma exata, exigindo assim uma análise aproximada como a de Migdal-Kadanoff, para o caso de sistemas quânticos existe um ingrediente de dificuldade a mais que é a não comutatividade dos operadores existentes no hamiltoniano, como é o caso do modelo de Heisenberg anisotrópico (4.3) que será discutido nesta seção. Primeiro, tratando o caso unidimensional de spins σ_i distribuídos numa cadeia, o objetivo é encontrar uma equação de renormalização que satisfaça,

$$\exp(-\tilde{\mathcal{H}}_{\sigma_{2i}}) = \text{Tr}_{\{\sigma_{2i+1}\}} \exp(-\mathcal{H}_{\sigma_i}), \quad (4.24)$$

onde $\tilde{\mathcal{H}}$ e $\mathcal{H}$ são hamiltonianos reduzidos, e é assumido um processo de dizimação onde os graus de liberdade dos spins ímpares são somados resultando em um hamiltoniano renormalizado com a mesma forma do hamiltoniano inicial. O fator de escala portanto é $b = 2$. A equação (4.24) é o ponto de partida para os casos de redes hipercúbicas ou redes hierárquicas na aproximação de Migdal-Kadanoff pois, como foi visto, esta é composta de deslocamentos de ligações e dizimações unidimensionais.

O traço presente na equação (4.24) não pode ser realizado de uma forma exata, por conta da não comutatividade dos operadores. A estratégia é então dividir a cadeia em blocos facilmente diagonalizáveis e é aqui que reside a aproximação para tais sistemas. Uma aproximação muito utilizada que apresenta bons resultados qualitativos e quantitativos para temperaturas relativamente altas é a aproximação de Suzuki-Takano [101] [102], onde a dizimação é realizada em um cluster separado da rede original,

$$\exp(-\tilde{\mathcal{H}}_{2i,2i+2}) = \text{Tr}_{\{\sigma_{2i+1}\}} \exp[-(\mathcal{H}_{2i,2i+1} + \mathcal{H}_{2i+1,2i+2})]. \quad (4.25)$$

A justificativa para isto, segundo Suzuki e Takano é que no processo,

$$\exp(\sum_i \mathcal{H}_i) \approx \prod_i \exp(\mathcal{H}_i) \approx \exp(\sum_i \tilde{\mathcal{H}}_i), \quad (4.26)$$

onde $\mathcal{H}_i$ se refere ao bloco (4.25), a aproximação é feita duas vezes em direções opostas havendo então uma compensação mútua. Suzuki e Takano combinaram esta aproximação com o procedimento de Migdal-Kadanoff para estudar o modelo de Heisenberg anisotrópico [102] onde foram obtidas as correções a esta aproximação mostrando que esta é satisfatória para temperaturas altas em comparação com outros métodos. Para os casos Ising em duas dimensões e Ising, XY e Heisenberg isotrópico em três dimensões as propriedades críticas destes modelos foram obtidas de forma satisfatória, pois estas transições estão no regime de relativamente altas temperaturas.

Outras aproximações referentes a sistemas quânticos também baseadas em renormalização de clusters são disponíveis, como por exemplo, a aproximação diagonal [103] onde é considerado o mapeamento dos elementos diagonais da matriz densidade entre o sistema (cluster) original e transformado. Esta aproximação foi estendida ao modelo de Heisenberg anisotrópico na referência [104]. Outra aproximação que considera a solução exata dentro do cluster para este modelo foi introduzida por Caride *et al* [105] e aplicada a sistemas diluídos na referência [90].

4.3.2 Equação de renormalização para o modelo de Heisenberg anisotrópico na aproximação de Migdal-Kadanoff

O bloco básico para a construção da aproximação de Migdal-Kadanoff para o modelo de Heisenberg anisotrópico na rede diamante é mostrado na figura 4.4. A condição (4.25) deve ser satisfeita. Para isto devemos diagonalizar o hamiltoniano em ambos os lados desta equação. Será apresentado aqui somente um roteiro simplificado para o cálculo da equação de renormalização. Os hamiltonianos para os dois lados de (4.25) são,

$$-\beta \mathcal{H}_{12} = K'[(1 - \Delta')(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \sigma_1^z \sigma_2^z] + K_0, \quad (4.27)$$

$$-\beta \mathcal{H}_{123} = K\{(1 - \Delta)[\sigma_3^x(\sigma_1^x + \sigma_2^x) + \sigma_3^y(\sigma_1^y + \sigma_2^y)] + \sigma_3^z(\sigma_1^z + \sigma_2^z)\}, \quad (4.28)$$

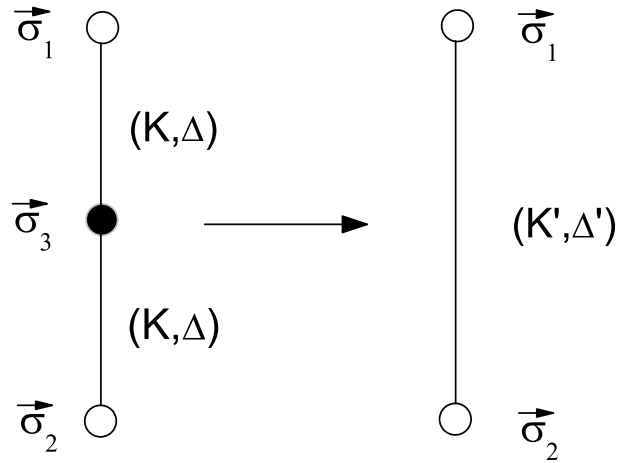


Figura 4.4 Processo de dizimação do bloco básico de renormalização (com fator de escala $b = 2$) segundo a aproximação por blocos utilizada neste capítulo.

sendo $K' = \beta J'$ $K = \beta J$. A exponencial dessas expressões, com a ajuda da propriedade das matrizes de Pauli $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k$, podem ser escritas na seguinte forma expandida [90],

$$\exp(-\beta \mathcal{H}_{12}) = a^0 + b_{12}^0 (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + c_{12}^0 \sigma_1^z \sigma_2^z, \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \exp(-\beta \mathcal{H}_{123}) &= a + b_{12} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + b_{13} (\sigma_1^x \sigma_3^x + \sigma_1^y \sigma_3^y) + b_{23} (\sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_2^y \sigma_3^y) + \\ &= c_{12} \sigma_1^z \sigma_2^z + c_{13} \sigma_1^z \sigma_3^z + c_{23} \sigma_2^z \sigma_3^z. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Os coeficientes a^0, b_{12}^0, c_{12}^0 são funções de K', Δ', K_0 . Os coeficientes $a, b_{12}, b_{13}, \dots, c_{23}$ são funções de K e Δ . O traço da expressão (4.30) nas variáveis de σ_3 pode ser facilmente realizado produzindo,

$$\text{Tr}_{\sigma_3} = 2 (a + b_{12} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \sigma_1^z \sigma_2^z). \quad (4.31)$$

Comparando a forma acima com a expressão (4.29) tem-se,

$$a^0 = 2a, \quad (4.32)$$

$$b_{12}^0 = 2b_{12}, \quad (4.33)$$

$$c_{12}^0 = 2c_{12}. \quad (4.34)$$

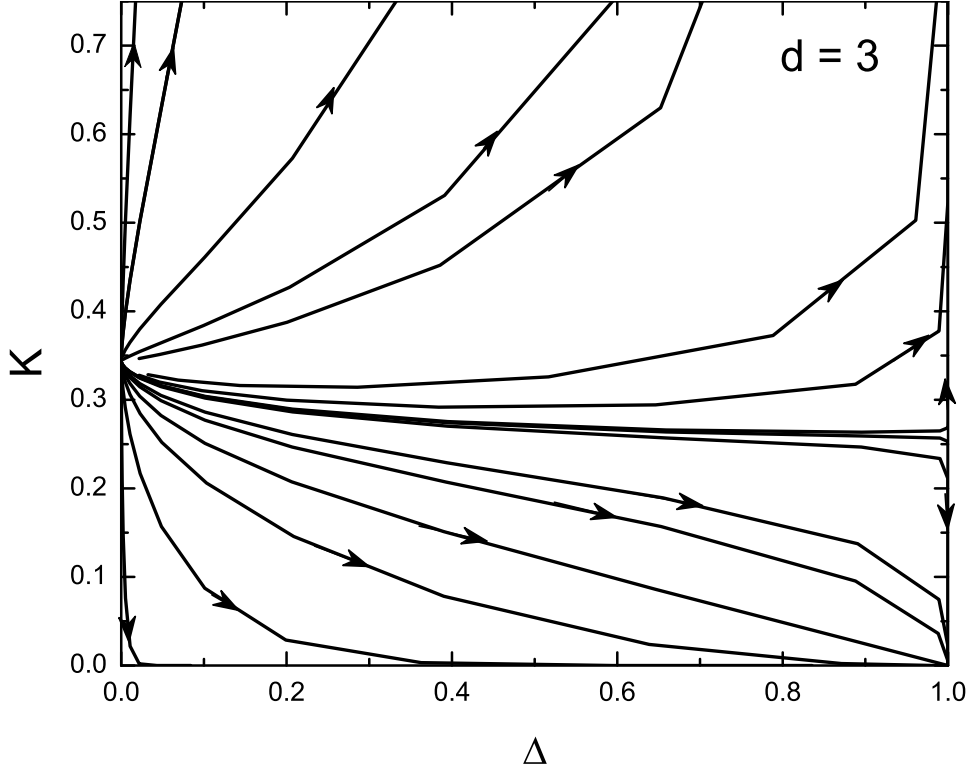


Figura 4.5 Linhas de fluxo para o caso $d = 3$ obtidas por meio da equação (4.40).

Para se obter a exponencial do operador $-\beta \mathcal{H}_{12}$ definido em (4.27), pode-se escrever este operador na base $\{|m_1, m_2\rangle\}$ que é a base de autovetores de $\sigma_1^z \sigma_2^z$. Após uma transformação para uma base de autovetores,

$$-\beta \tilde{\mathcal{H}}_{12} = \mathcal{U}_{12}(-\beta \mathcal{H}_{12})\mathcal{U}_{12}^\dagger, \quad (4.35)$$

o operador resultante é diagonal e $\exp(-\beta \tilde{\mathcal{H}}_{12})$ pode ser facilmente calculado e escrito novamente na base antiga de autovetores do operador $\sigma_1^z \sigma_2^z$. Comparando esta forma com a matriz do operador (4.29) nesta mesma base, a^0, b_{12}^0 e c_{12}^0 são escritos em função de K', Δ', K_0 e podem ser substituídos em (4.34) fornecendo,

$$\begin{aligned} \exp(4K') &= \frac{(a + c_{12})^2}{(a - c_{12})^2 - 4(b_{12})^2}, \\ \exp(4W') &= \frac{a - c_{12} + 2b_{12}}{a - c_{12} - 2b_{12}}, \\ \exp(K_0) &= 4(a + c_{12}) \exp(K'). \end{aligned} \quad (4.36)$$

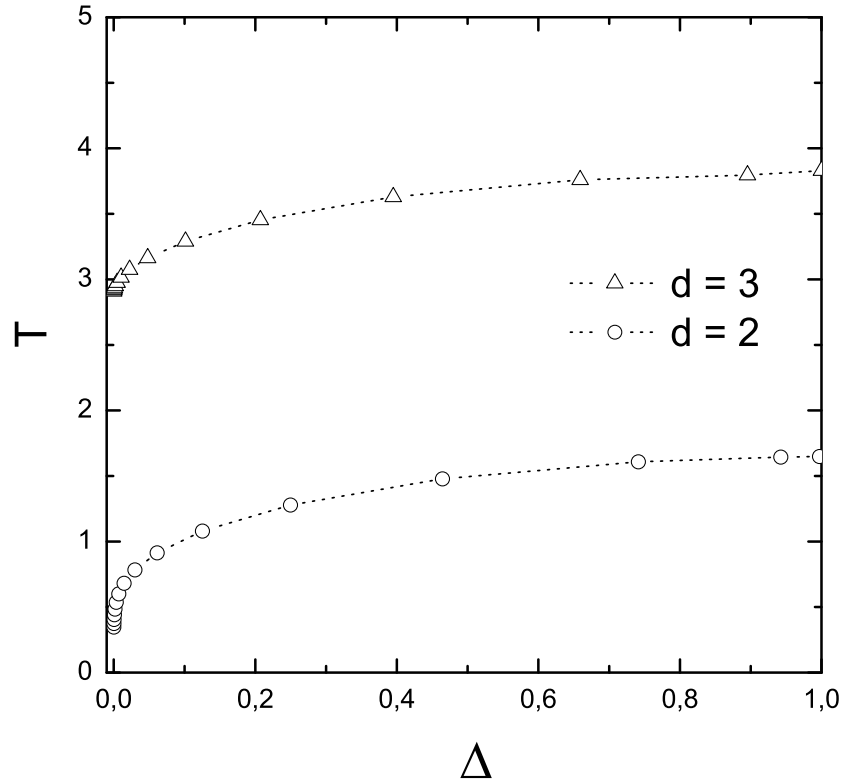


Figura 4.6 Linhas críticas do modelo de Heisenberg anisotrópico segundo a aproximação de Migdal-Kadanoff para a rede diamante com $d = 2$ e $d = 3$. Note que para $d = 2$ esta aproximação está coerente com o teorema de Mermin-Wagner pois esta não apresenta temperatura de transição diferente de zero.

Com um procedimento semelhante, após a diagonalização de βH_{123} , os coeficientes a , b_{12} , $b_{13}, \dots, c_{23}$ podem ser escritos como função de K e Δ . Com a substituição destas expressões em (4.36) tem-se finalmente as equações de renormalização para a célula mostrada na figura (4.4),

$$K' = f(K, \Delta) = \frac{1}{4} \ln \left\{ \frac{[\exp(2K) + \exp(-K)C_-(K, \Delta)]^2}{4 \exp(-K)C_+(K, \Delta)} \right\}, \quad (4.37)$$

$$K'(1 - \Delta') = g(K, \Delta) = \frac{1}{4} (\ln C_+(K, \Delta) - K), \quad (4.38)$$

sendo,

$$C_{\pm}(K, \Delta) = \cosh(K \sqrt{1 + 8(1 - \Delta)^2}) \pm \frac{\sinh(K \sqrt{1 + 8(1 - \Delta)^2})}{\sqrt{1 + 8(1 - \Delta)^2}}. \quad (4.39)$$

Este é o elemento de renormalização básico para o modelo de Heisenberg anisotrópico nesta aproximação por blocos. Para o estudo de redes hipercúbicas a aproximação de Migdal-Kadanoff sintetizada nas equações (4.19) pode então ser aplicada. Para o caso da rede diamante,

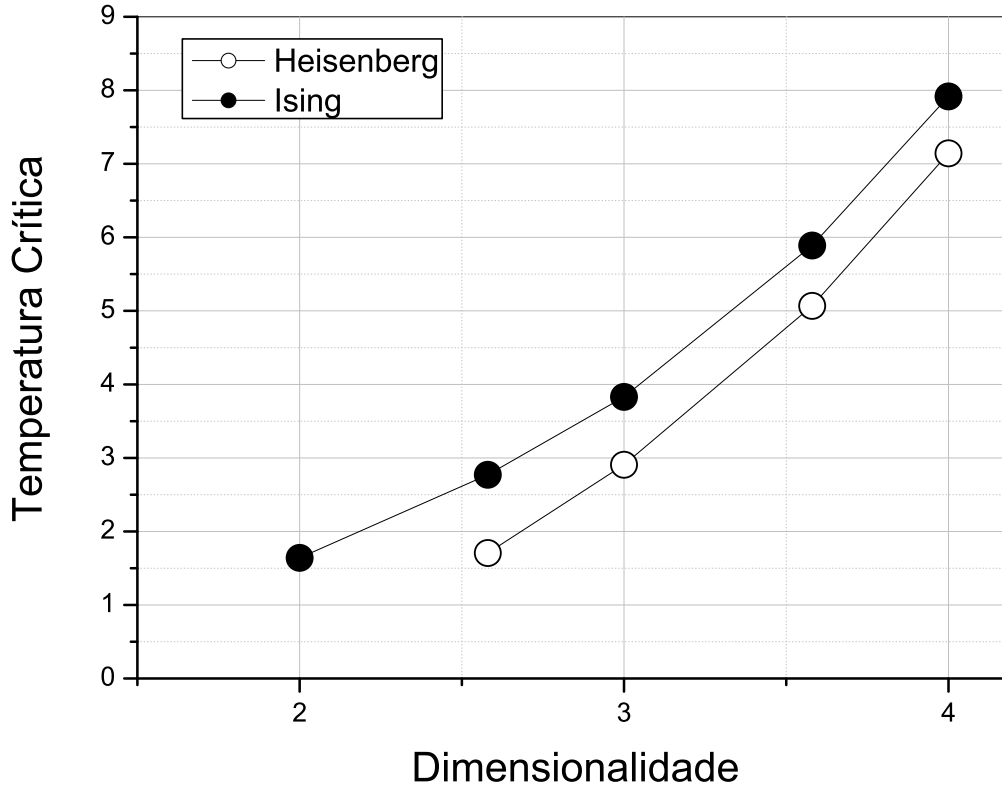


Figura 4.7 Temperaturas críticas para os pontos fixos do tipo Heisenberg e Ising em algumas dimensões segundo a aproximação de Migdal-Kadanoff.

tratado neste trabalho, esta aproximação para uma célula com p conexões pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} K' &= p f(K, \Delta), \\ K'(1 - \Delta') &= p g(K, \Delta). \end{aligned} \quad (4.40)$$

Nesta aproximação, não existem pontos fixos instáveis para $d = 1$. Existe um ponto fixo instável do tipo Ising ($\Delta = 1$) para $d = 2$ e a partir de $d = 3$ existem dois pontos fixos instáveis, um do tipo Ising e outro do tipo Heisenberg ($\Delta = 0$), sendo o fluxo de renormalização na linha crítica na direção do ponto Ising. Portanto para qualquer $\Delta \neq 0$ a criticalidade é do tipo Ising e para valores de $\Delta \sim 0$ existe um *crossover* entre os comportamentos críticos do tipo Heisenberg e do tipo Ising. A figura 4.5 mostra várias linhas de fluxo para o caso $d = 3$ e a figura 4.6 mostra o fluxo de renormalização próximo à linha crítica para os casos $d = 2$ e $d = 3$ da rede diamante. Esta aproximação está de acordo com o teorema de Mermin-Wagner não apresentando,

portanto, ordem de longo alcance para o modelo de Heisenberg isotrópico bidimensional. Todavia, nesta aproximação a dimensão crítica inferior para o modelo de Heisenberg deve ser menor que 2,58, uma vez que nesta dimensão observa-se $T_c \neq 0$. Utilizando a fórmula (4.15) os expoentes ν podem ser calculados. Estes expoentes juntamente com os acoplamentos críticos no caso Ising e Heisenberg para algumas dimensões $d_f = 1 + \frac{\ln p}{\ln 2}$ são mostrados na tabela 4.2 e as temperaturas críticas ($T_c = 1/K_c$) são mostradas na figura 4.7. Nas próximas seções utilizaremos um desacoplamento de um cluster da rede em temperaturas altas para o cálculo de maneira recursiva da magnetização local e da correlação spin-spin. Isto permitirá o cálculo de outros expoentes críticos bem como estudar certas propriedades da magnetização local.

4.4 Relação de recorrência para a magnetização local

Nesta seção, será estendido o procedimento introduzido por Morgado, Coutinho e Curado [91] [92] para o cálculo da magnetização local de uma maneira recursiva para o caso do modelo de Heisenberg anisotrópico. O sistema original abordado por estes autores foi o modelo de Ising clássico na rede diamante com duas pernas ou conexões. O objetivo principal foi a obtenção da estrutura multifractal da magnetização relacionado-a com os expoentes críticos termodinâmicos do sistema. Algumas relações de escala entre expoentes referentes à distribuição espacial da magnetização e os expoentes termodinâmicos foram obtidos.

Para o caso clássico o procedimento é exato. Como foi mostrado na seção anterior a não comutatividade entre os operadores quânticos introduz uma dificuldade a mais e, neste caso, do cálculo da magnetização não é diferente. Por isso nos cálculos efetuados, foi introduzido uma aproximação por blocos, conveniente a temperaturas altas, semelhante àquela mostrada na seção anterior. Isto permitiu o desacoplamento entre as variáveis internas da célula e as variáveis referentes ao restante da rede. Um esquema desta célula sob o efeito do restante da rede é mostrado na figura 4.8.

O método para a obtenção da magnetização local considera a função de partição de um sistema na n -ésima hierarquia, sendo esta composta pela célula básica, por campos efetivos

Dimensão	Heis.		Ising	
	K_c	ν	K_c	ν
2	-	-	0,6094	1,3383
2,58	0,5861	1,9224	0,3609	1,1227
3	0,3439	1,3983	0,2611	1,0648
3,58	0,1973	1,1736	0,1698	1,0276
4	0,1400	1,0767	0,1263	1,0153

Tabela 4.2 Acoplamentos críticos e expoentes ν para os pontos fixos do tipo Heisenberg e Ising em algumas dimensões segundo a aproximação de Migdal-Kadanoff

h_1 e h_2 que atuam nos sítios externos e por uma interação efetiva (K'', Δ''). Os campos e a interação efetiva são simplificações para a ação do resto da rede na célula preservando, por exemplo, a informação sobre a posição da célula com relação a rede completa. Estes campos e interação efetivas, pelo menos em princípio, podem ser obtidos ao se tomar o traço sobre as variáveis do restante da rede, mas o objetivo do método é o de eliminar estas variáveis externas, escrevendo as médias dos sítios internos da célula em função dos sítios externos desta mesma célula obtendo-se então uma relação recursiva para a magnetização local.

Para o caso do modelo de Heisenberg anisotrópico a função de partição para a célula mais os campos e a interação efetivos mostrada na figura 4.8 é escrita como,

$$\exp(-\beta \mathcal{H}) = \exp[-\beta(H + H' + H'')], \quad (4.41)$$

sendo,

$$H = K[(1 - \Delta)(\sigma_1^x \sigma_3^x + \sigma_1^y \sigma_3^y) + \sigma_1^z \sigma_3^z], \quad (4.42)$$

$$H' = K'[(1 - \Delta')(\sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_2^y \sigma_3^y) + \sigma_2^z \sigma_3^z], \quad (4.43)$$

$$H'' = K''[(1 - \Delta'')(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \sigma_1^z \sigma_2^z] + h_1 \sigma_1^z + h_2 \sigma_2^z. \quad (4.44)$$

As variáveis a se eliminar são K'', Δ'', h_1 e h_2 . Para isto usaremos o seguinte desacopla-

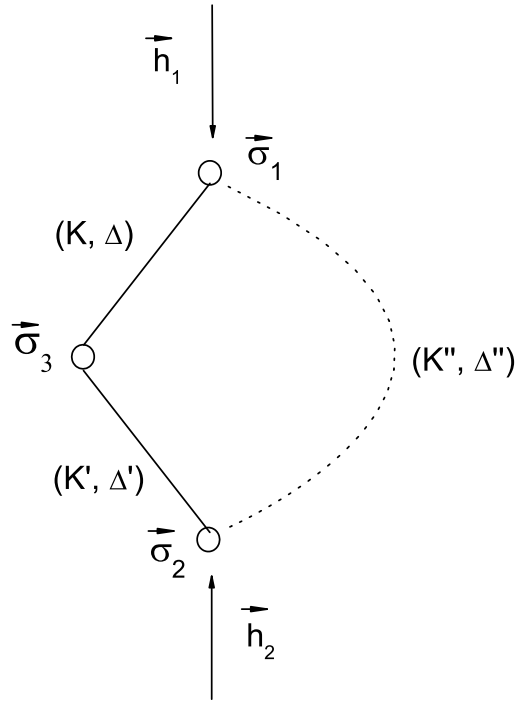


Figura 4.8 Porção da rede do tipo diamante sujeita a acoplamentos efetivos que simulam os efeitos do resto da rede neste conjunto de spins.

mento da célula diamante,

$$\exp(-\beta \mathcal{H}) \simeq \exp[-\beta(H + H')] \exp(-\beta H''). \quad (4.45)$$

Será considerado daqui em diante o caso homogêneo em que $K = K'$ e $\Delta = \Delta'$. A exponencial de $-\beta(H + H')$ e de $-\beta H''$ podem ser expandidas como em (4.29) e (4.30),

$$\begin{aligned} \exp[-\beta(H + H')] &= a + b(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + c(\sigma_1^x \sigma_3^x + \sigma_1^y \sigma_3^y) + d(\sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_2^y \sigma_3^y) + \\ &\quad + e\sigma_1^z \sigma_2^z + f\sigma_1^z \sigma_3^z + g\sigma_2^z \sigma_3^z, \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} \exp(H'') &= \mathbb{A} + \mathbb{B}(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) + \mathbb{C}(\sigma_1^x \sigma_2^y + \sigma_1^y \sigma_2^x) + \mathbb{D}\sigma_1^z \sigma_2^z + \mathbb{E}\sigma_1^z + \\ &\quad + \mathbb{F}\sigma_2^z. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Na última expansão aparecem termos cruzados do tipo $\sigma^x \sigma^y$ por conta da introdução do campo efetivo. Como,

$$\langle \sigma_3^z \rangle = \frac{\text{Tr} \sigma_3^z \exp(-\beta \mathcal{H})}{\mathcal{Z}}, \quad (4.48)$$

para a obtenção de $\langle \sigma_3^z \rangle$ deve-se multiplicar os operadores σ_3^z , (4.46) e (4.47) e tomar o traço deste produto. Os únicos termos que contribuem para a média são,

$$\frac{\mathcal{Z}}{8} \langle \sigma_3^z \rangle = f\mathbb{E} + g\mathbb{F}. \quad (4.49)$$

Similarmente, no cálculo das médias $\langle \sigma_1^z \rangle$ e $\langle \sigma_2^z \rangle$ os termos que sobrevivem são,

$$\frac{\mathcal{Z}}{8} \langle \sigma_1^z \rangle = a\mathbb{E} + e\mathbb{F}, \quad (4.50)$$

$$\frac{\mathcal{Z}}{8} \langle \sigma_2^z \rangle = e\mathbb{E} + a\mathbb{F}. \quad (4.51)$$

Ao considerarmos um sistema de equações lineares as equações (4.50) e (4.51), com as variáveis a se determinar sendo $\mathbb{E}$ e $\mathbb{F}$, pode-se obter para estas,

$$\frac{8}{\mathcal{Z}} \mathbb{E} = \frac{1}{a} \left(1 - \frac{1}{1 - (\frac{a}{e})^2} \right) \langle \sigma_1^z \rangle + \frac{1}{e} \left(\frac{1}{1 - (\frac{a}{e})^2} \right) \langle \sigma_2^z \rangle, \quad (4.52)$$

$$\frac{8}{\mathcal{Z}} \mathbb{F} = \frac{1}{e^2 - a^2} (e \langle \sigma_1^z \rangle - a \langle \sigma_2^z \rangle). \quad (4.53)$$

Substituindo as equações (4.52) e (4.53) na equação para a média (4.49) tem-se,

$$\langle \sigma_3^z \rangle = \frac{f/e}{1 + \frac{a}{e}} (\langle \sigma_1^z \rangle + \langle \sigma_2^z \rangle). \quad (4.54)$$

As variáveis a , e e f são obtidas da diagonalização da matriz (4.28),

$$a = \frac{1}{4} (1 + \exp(2K) + 2 \exp(-K) \cosh \alpha), \quad (4.55)$$

$$e = \frac{1}{4} \left(-1 + \exp(2K) - \frac{2K}{\alpha} \exp(-K) \sinh \alpha \right), \quad (4.56)$$

$$f = \frac{1}{4} \left(\exp(2K) - \exp(-K) \left(\cosh \alpha - \frac{K}{\alpha} \sinh \alpha \right) \right). \quad (4.57)$$

Sendo,

$$\alpha = K \sqrt{1 + 8(1 - \Delta)^2}. \quad (4.58)$$

Finalmente substituindo estas expressões em (4.54) obtém-se a relação recursiva para a magnetização do sítio interno da rede diamante,

$$\langle \sigma_3^z \rangle = A(K, \Delta) [\langle \sigma_1^z \rangle + \langle \sigma_2^z \rangle], \quad (4.59)$$

com,

$$A(K, \Delta) = \frac{1}{2} \left(\frac{\exp(2K) - \exp(-K)C_-(K, \Delta)}{\exp(2K) + \exp(-K)C_-(K, \Delta)} \right). \quad (4.60)$$

A definição de $C_-(K, \Delta)$ é dada por (4.39). A equação (4.59) permite a obtenção da magnetização na hierarquia n a partir das magnetizações das hierarquias anteriores, com a ajuda das equações de renormalização (4.40).

O limite Ising pode ser obtido de (4.60) fazendo $\Delta = 1$,

$$\begin{aligned} A(K, 1) &= \frac{1}{2} \left(\frac{\exp(2K) - \exp(-2K)}{\exp(2K) + \exp(-2K)} \right) = \frac{\sinh 2K}{2 \cosh 2K} \\ &= \frac{1}{2} \tanh 2K = \frac{\tanh K}{1 + \tanh^2 K}. \end{aligned} \quad (4.61)$$

que é o mesmo resultado encontrado nas referências [91] e [92].

4.5 Relação de recorrência para a correlação spin-spin

Com um procedimento análogo ao mostrado na seção anterior a correlação spin-spin $\langle \sigma_3^z \sigma_1^z \rangle$ pode ser obtida de uma maneira recursiva a partir das correlações das hierarquias anteriores. A obtenção destas correlações permitem por exemplo o cálculo da energia interna e consequentemente do calor específico também de uma maneira recursiva. O objetivo é o cálculo da média,

$$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle = \frac{\text{Tr} \{ \sigma_1^z \sigma_3^z \exp[-\beta(H + H')] \exp(-\beta H'') \}}{\mathcal{Z}}, \quad (4.62)$$

onde a decomposição do operador densidade segue do desacoplamento entre as variáveis internas e externas à célula que consideramos na seção anterior. Multiplicando os operadores expandidos (4.46) e (4.47) por $\sigma_1^z \sigma_3^z$ os termos que contribuem para a média após o traço das variáveis de spin serem tomados são,

$$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle = f(\mathbb{A} + \mathbb{D}). \quad (4.63)$$

Agora calculando as correlações referentes ao spins externos $\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle$ com um procedimento análogo ao anterior tem-se,

$$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle = a\mathbb{D} - 2b\mathbb{B} + e\mathbb{A}. \quad (4.64)$$

Para eliminarmos $\mathbb{B}$ das equações (4.63) e (4.64) impomos a condição,

$$\mathcal{Z} = \text{Tr } \rho = 1, \quad (4.65)$$

o que implica em,

$$a\mathbb{A} + 2b\mathbb{B} + e\mathbb{D} = 1. \quad (4.66)$$

Finalmente combinando (4.63), (4.64) e (4.66) encontra-se para a correlação das componentes z de spin,

$$C_{13}^{zz} = \langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle = A(K, \Delta) (1 + C_{12}^{zz}). \quad (4.67)$$

Sendo $A(K, \Delta)$ dado pela expressão (4.60). Desta forma pode-se obter a correlação entre um spin da n -ésima hierarquia e um spin da $(n-1)$ -ésima hierarquia em função da correlação entre spins da $(n-1)$ -ésima hierarquia.

4.6 Relação de recorrência para a magnetização total e expoente crítico

β

Para o cálculo da magnetização total da rede diamante na n -ésima hierarquia, utilizou-se a magnetização total em um *perfil* da rede. Um perfil é definido como sendo o menor caminho (ou um dos possíveis) entre os spins raízes da rede nesta mesma hierarquia n . Estes spins raízes são os dois primeiros spins na hierarquia zero da rede que servem de base para a construção de toda rede. Pode ser mostrado que a magnetização total neste perfil é dada por,

$$M_p(n) = \left(1 + (1 + 2A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})) \frac{A(K_n, \Delta_n)}{A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})} \right) M_p(n-1) - \\ (1 + 2A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})) \frac{A(K_n, \Delta_n)}{A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})} M_p(n-2). \quad (4.68)$$

Vê-se que a magnetização do perfil na hierarquia n depende das magnetizações de todas as hierarquias anteriores. $A(K_n, \Delta_n)$ que aparece acima é o coeficiente (4.60) calculado na hierarquia n . A magnetização total para uma rede com “p” conexões é obtida da expressão acima ao

Dimensão	β Heisenberg	β Ising
2	-	0,1617
2,58	0,8387	0,3433
3	0,7046	0,4632
3,58	0,7282	0,6080
4	0,7718	0,6915

Tabela 4.3 Valores dos expoentes críticos β calculados nos pontos fixos do tipo Heisenberg e Ising a partir das fórmulas (4.72).

multiplicá-la pelo número de perfis possíveis p^n subtraindo-se a contribuição dos sítios redundantes,

$$M_t(n) = \left(1 + p(1 + 2A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})) \frac{A(K_n, \Delta_n)}{A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})} \right) M_t(n-1) - p(1 + 2A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})) \frac{A(K_n, \Delta_n)}{A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})} M_t(n-2) \quad (4.69)$$

Desta forma, para a magnetização total podemos encontrar a magnetização por spin ao dividi-la pelo número total de spins na rede $\phi_{n-1} = \frac{1}{2p} \phi_n$, sendo este valor no limite $n \rightarrow \infty$. Desta maneira, para a magnetização por spin,

$$m_n = \frac{1}{2p} \left(1 + p(1 + 2A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})) \frac{A(K_n, \Delta_n)}{A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})} \right) m_{n-1} - \frac{1}{4p} (1 + 2A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})) \frac{A(K_n, \Delta_n)}{A(K_{n-1}, \Delta_{n-1})} m_{n-2} \quad (4.70)$$

Esta relação é útil para o cálculo do expoente β da magnetização. Para isto tem-se que, próximo dos pontos fixos instáveis Ising ($\Delta = 1$ com $p > 1$) ou Heisenberg ($\Delta = 0$ com $p > 2$), o coeficiente $A(K, \Delta)$ se torna invariante $A_n = A_{n-1} = A_{n-2} = \dots = A_{n-l} = A_c$, com $l < n$, e a magnetização toma uma forma assintótica $m_n = (\delta K_n)^\beta$, sendo $\delta K_n = r_c \delta K_{n-1}$ com $r_c = \frac{dK_n}{dK_{n-1}}(K_c)$. Fazendo todas estas substituições em (4.70) resulta em,

$$1 = \frac{\mathcal{A}}{r_c^\beta} + \frac{\mathcal{B}}{r_c^{2\beta}} \quad (4.71)$$

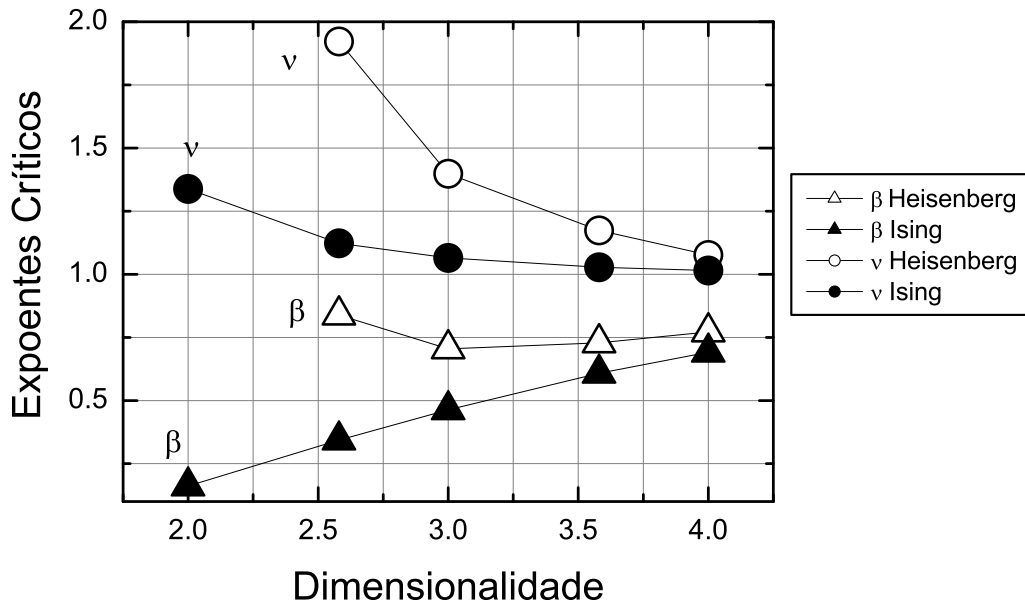


Figura 4.9 Expoentes críticos ν e β para algumas dimensões fractais, para os casos Ising e Heisenberg. O expoente β foi calculado segundo a expressão (4.72).

Com $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$ sendo funções de p e A_c . Resolvendo para β encontra-se a seguinte forma para este expoente em ambos os pontos fixos instáveis,

$$\beta = \frac{(0.5 + A_c)}{\ln r_c} \quad (4.72)$$

Esta expressão mostra como o expoente β depende do coeficiente A_c da relação recursiva para a magnetização local. A informação sobre a dimensionalidade do sistema (ou equivalentemente o número de conexões da rede diamante) está contida implicitamente nos valores de A_c e r_c . Os valores do expoente β para algumas dimensões nos casos Ising e Heisenberg são apresentados na tabela 4.3, bem como na figura 4.9, junto com os expoentes do comprimento de correlação ν .

4.7 Conclusões

O comportamento crítico do modelo de Heisenberg anisotrópico de spin $1/2$, na rede diamante com p conexões e fator de escala $b = 2$ foi investigado por meio do grupo de renormalização no espaço real. Utilizamos a equação de renormalização na aproximação de Suzuki-Takano para o cálculo dos acoplamentos críticos e do expoente ν do comprimento de correlação. Através do desacoplamento das variáveis internas de uma célula básica da rede diamante das variáveis do resto da rede, relacionamos a magnetização de um sítio da geração n com a magnetização de seus vizinhos pertencentes a gerações anteriores. Por decorrência, foi possível obter relações de recorrência analíticas recursivas para a magnetização local do sistema, bem como para a correlação spin-spin. Estas relações, juntamente com as temperaturas críticas $T_c(p)$ obtidas pelas equações de renormalização deste modelo, permitiram a análise o comportamento da magnetização na região crítica e a obtenção do expoente crítico β , associado a magnetização, em função de p , para os pontos fixos de Ising e Heisenberg associados a este modelo. O artigo correspondente aos resultados apresentados neste capítulo está em preparação para ser submetido a *Physica A*, com o título *Quantum anisotropic $S = 1/2$ Heisenberg model on diamond hierarchical lattices*.

Trabalhos decorrentes desta Tese

1. R. M. da Silva, C. C. de Souza Silva, S. Coutinho. Reversible transport of interacting brownian ratchets. Artigo aceito para publicação no *Physical Review E*-EU10340/daSilva.
2. R. M. da Silva, S. Coutinho, C. C. de Souza Silva. Quantum bond-diluted ANNNI chain. Artigo em preparação a ser submetido ao *Physical Review B*.
3. R. M. da Silva, S. Coutinho, J. R. de Sousa. Quantum anisotropic $S = 1/2$ Heisenberg model on diamond hierarchical lattices. Artigo em preparação a ser submetido a *Physica A*.

Referências Bibliográficas

- [1] P. Reimman. Brownian motors: Noise transport far from equilibrium. *Phys. Report*, 361:57–265, 2002.
- [2] P. Hänggi, F. Marchesoni, and F. Nori. *Brownian Motors*. arXiv:cond-mat, 0410033v4, 2004.
- [3] P. Reimman and P. Hänggi. Introduction to the physics of brownian motors. *Appl. Phys. A*, 75:169–178, 2002.
- [4] R. Bartussek, Hänggi, P., and J. G. Kissner. Periodically rocked thermal ratchets. *Europhys. Lett.*, 28:459–464, 1994.
- [5] H. Rieger and N. Kawashima. Application of a continuous time cluster algorithm to the two-dimensional random quantum Ising ferromagnet. *Eur. Phys. J. B*, 9:233, 1999.
- [6] M. Henkel and M. Pleimling. Anisotropic scaling and generalized conformal invariance at Lifshitz points. *Phys. Rev. Lett.*, 87:125702, 2001.
- [7] J.C. le Guillou and J. Zinn-Justin. Critical exponents from field theory. *Phys. Rev. B*, 21:1980, 3976.
- [8] R. P. Feynman. *The Feynman Lectures on Physics*. Addison-Wesley, Reading,MA, 1966.
- [9] R. D. Astumian and P. Hänggi. Brownian motors. *Physics Today*, 55:33, 2002.
- [10] R. D. Astumian and P. Hänggi. Making molecules into motors. *Physics Today*, 55:33, 2002.
- [11] R. D. Astumian and M. Bier. Fluctuation driven ratchets: Molecular motors. *Phys. Rev. Lett.*, 72:1766–1769, 1994.

- [12] F. Jülicher, A. Adjari, and J. Prost. Modeling molecular motors. *Rev. Mod. Phys.*, 69:1269–1281, 1997.
- [13] M. O. Magnasco. Forced thermal ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 71:1477–1481, 1993.
- [14] R. D. Astumian and I. Derényi. Fluctuation driven transport and models of molecular motors and pumps. *Eur. Biophys. J*, 27:474, 1998.
- [15] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume. *Statistical Physics II - Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [16] R. Zwanzig. *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, Oxford, 2001.
- [17] M. V. Fistul. Symmetric broken motion of a periodic driven brownian particle: Nonadiabatic regime. *Phys. Rev. E*, 65:046621, 2002.
- [18] P. Jung, J. G. Kissner, and P. Hänggi. Regular and chaotic transport in asymmetric periodic potentials: inertia ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 76:3436, 1996.
- [19] J. L. Mateos. Chaotic transport and current reversal in deterministic ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 84:258–261, 2000.
- [20] M. Borromeo, G. Constantini, and F. Marchesoni. Deterministic ratchets: Route to diffusive transport. *Phys. Rev. E*, 65:041110, 2002.
- [21] Z Siwy and A. Fulinski. Fabrication of a synthetic nanopore ion pump. *Phys. Rev. Lett.*, 89:198103, 2002.
- [22] I. Kosztin and K. Schulten. Fluctuation-driven molecular transport through an membrane channel. *Phys. Rev. Lett.*, 93:238102, 2004.
- [23] C. S. Lee, B. Jankó, I. Derényi, and A. L. Barabási. Reducing vortex density in superconductors using the ratchet effect. *Nature*, 400:337, 1999.

- [24] J. E. Vilegas, F. Savel'ev S., Nori, E. M. Gonzales, J. V. Anguita, R. Garcia, and J. L. Vicent. A superconducting reversible rectifier that controls the motion of magnetic flux quanta. *Science*, 302:1188, 2003.
- [25] J. E. Vilegas, E. M. Gonzales, M. P. Gonzales, J. V. Anguita, and J. L. Vicent. Experimental ratchet in superconducting films with periodic arrays of asymmetric potentials. *Phys. Rev. B*, 71:024519, 2005.
- [26] J. Van de Vondel, C. C. de Souza Silva, B. Y. Zhu, M. Morelle, and V. V. Moshchalkov. Vortex rectification effects in films with periodic asymmetric pinning. *Phys. Rev. Lett.*, 94:057003, 2005.
- [27] C. C. de Souza Silva, J. Van de Vondel, M. Morelle, and V. V. Moshchalkov. Vortex ratchet effects in films with a periodic array of antidots. *Phys. Rev. B*, 73:014507, 2006.
- [28] C. C. de Souza Silva, J. Van de Vondel, M. Morelle, and V. V. Moshchalkov. Controlled multiple reversals of a ratchet effect. *Nature*, 440:651–654, 2006.
- [29] Q. Lu, C. J. O. Reichhardt, and C. Reichhardt. Reversible vortex effects and ordering in superconductors with simple asymmetric potential arrays. *Phys. Rev. B*, 75:054502, 2007.
- [30] W. Gillijns, A. V. Silhanek, V. V. Moshchalkov, C. J. O. Reichhardt, and C. Reichhardt. Origin of reversed vortex ratchet motion. *Phys. Rev. Lett.*, 99:247002, 2007.
- [31] C. C. de Souza Silva, Silhanek A. V., J. Van de Vondel, W. Gillijns, V. Metlushko, Ilic B., and Moshchalkov V. V. Dipole-induced vortex ratchets in superconducting films with arrays of micromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 98:117005, 2007.
- [32] P. Reimann, M. Grifoni, and P. Hänggi. Quantum ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 79:10, 1997.
- [33] H. Linke, T. E. Humphrey, A. Löfgren, A. O. Sushkov, R. Newbury, R. P. Taylor, and P. Omling. Experimental tunneling ratchets. *Science*, 286:2314, 1999.

- [34] Gould H. and J. Tobochnik. *An Introduction to Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems*. Addison-Wesley, Reading-Massachusetts, 1996.
- [35] N. Gronbech-Jensen. Summation of logarithmic interactions in nonrectangular periodic media. *Comp. Phys. Comm.*, 119:115, 1997.
- [36] Kim Y. B., Hempstead C. F., and Strnad A. R. Critical persistent current in hard superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 79:10, 1997.
- [37] Lemerle S., Ferré J., Chappert C., Mathet V., Giamarchi T., and Le Doussal P. Domain wall creep in an ising ultrathin magnetic film. *Phys. Rev. Lett.*, 80:849, 1998.
- [38] S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, cambridge,UK, 1999.
- [39] L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini, and D. Shankar. Continuous quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 69:315, 1997.
- [40] M. A. Continentino. *Quantum Scaling in Many Body Physics*. World Scientific, Cingapura, 2001.
- [41] D. Belitz and T. R. Kirkpatrick. The Anderson-Mott transition. *Rev. Mod. Phys.*, 66:261, 1994.
- [42] D. Bitko, T. F. Rosebaum, and G. Aeppli. Quantum critical behavior for a model magnet. *Phys. Rev. Lett.*, 77:940, 1996.
- [43] B. K. Chakrabarti, A. Dutta, and P. Sen. *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*. Springer, Heidelberg, 1996.
- [44] H. E. Stanley. *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. Oxford University Press, Oxford, 1971.
- [45] M. Plischke and B. Bergersen. *Equilibrium Statistical Physics*. World Scientific.

- [46] B. Widom. Surface tension and molecular correlations near the critical point. *J. Chem. Phys.*, 43:3892, 1965.
- [47] R. B. Griffiths. Thermodynamic functions for fluids and ferromagnets near the critical point. *Phys. Rev.*, 158:176, 1967.
- [48] K. G. Wilson. Renormalization group and critical phenomena. I. Renormalization group and the Kadanoff scaling picture. *Phys. Rev. B*, 4:3174, 1971.
- [49] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Rev. Mod. Phys.*, 49:435, 1977.
- [50] D. Belitz and T. R. Kirkpatrick. *Quantum Phase Transitions*. arXiv:cond-mat, 9811058, 1998.
- [51] J. W. Negele and H. Orland. *Quantum Many Particle Systems*. Westview Press, Boulder, Colorado, 1998.
- [52] K. Huang. *Quantum Field Theory. From Operators to Path Integrals*. Wiley, New York, 1998.
- [53] P. G. deGennes. Collective motions of hydrogen bonds. *Solid State Comm.*, 1:132, 1963.
- [54] S. Katsura. Statistical mechanics of the anisotropic linear Heisenberg model. *Phys. Rev.*, 127:1508, 1962.
- [55] R. B. Stinchcombe. Ising model in a transverse field. I. Basic theory. *J. Phys. C*, 6:2459, 1973.
- [56] P. Pfeuty. The one-dimensional Ising model with a transverse field. *Ann Phys*, 57:79, 1970.
- [57] D. S. Fisher. Random transverse-field Ising spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 69:534, 1992.
- [58] B. M. McCoy. Incompleteness of the critical exponent description for ferromagnetic systems containing random impurities. *Phys. Rev. Lett.*, 23:383, 1969.

- [59] A. P. Young and H. Rieger. Numerical study of the random transverse-field Ising spin chain. *Phys. Rev. B*, 54:3328, 1996.
- [60] H. Rieger and N. Kawashima. Disordered systems near quantum critical points. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122:505, 1999.
- [61] M. Suzuki. Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+1) dimensional ising systems. equivalence, critical exponents and systematic approximants of the partition function and spin correlations. *Prog. Theor. Phys.*, 56:1454, 1976.
- [62] M. Suzuki. *Quantum Monte Carlo Methods in Equilibrium and Non-equilibrium Systems*. Springer-Verlag, Heidelberg, 1987.
- [63] R. Swendsen and J.S. Wang. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett*, 58:86, 1987.
- [64] H. F. Trotter. On the product of semigroups of operators. *Amer. Math. Soc.*, 10:545, 1959.
- [65] L. Onsager. Crystal statistics I. A two dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev*, 65:117, 1944.
- [66] B. M. McCoy and T. T. Wu. Random impurities as the cause of smooth specific heats near the critical temperature. *Phys. Rev. Lett.*, 21:549, 1968.
- [67] B. M. McCoy and T. T. Wu. Theory of a two-dimensional Ising model with random impurities. I. Thermodynamics. *Phys. Rev.*, 176:631, 1968.
- [68] H. G. Evertz, G. Lana, and M. Marcu. Cluster algorithm for vertex models. *Phys. Rev. Lett.*, 70:875, 1993.
- [69] H. G. Evertz. The loop algorithm. *Adv. Phys.*, 52:1, 2003.
- [70] B. B. Beard and U. J. Wiese. Simulations of discrete quantum system in continuous euclidean time. *Phys. Rev. Lett.*, 77:5130, 1996.

- [71] N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupistyn. Exact, complete and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum system. *JETP*, 87:1998, 310.
- [72] U. Wolff. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys. Rev. Lett*, 62:361, 1989.
- [73] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, Oxford, 1999.
- [74] A. B. Harris. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *J. Phys. C*, 7:1671, 1974.
- [75] R. J. Elliott. Phenomenological discussion of magnetic ordering in the heavy rare-earth metals. *Phys. Rev.*, 124:346, 1961.
- [76] M. E. Fisher and W. Selke. Infinitely many commensurate phases in a simple Ising model. *Phys. Rev. Lett.*, 44:1502, 1980.
- [77] P. Rujan. Critical behavior of two-dimensional models with spatially modulated phases: Analytic results. *Phys. Rev. B*, 24:6620, 1981.
- [78] C. M. Arizmendi, A. H. Rizzo, L. N. Epele, and C. A. García Canal. Phase diagram of the ANNNI model in the hamiltonian limit. *Z. Phys. B*, 83:273, 1991.
- [79] P. R. C. Guimarães, J. A. Plascak, F. C. S. Barreto, and J. Florêncio. Quantum phase transitions in the one-dimensional transverse Ising model with second-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, 66:064413, 2002.
- [80] M. Beccaria, M. Campostrini, and A. Feo. Density-matrix renormalization-group study of the disorder line in the quantum axial next-nearest-neighbor ising model. *Phys. Rev. B*, 73:052402, 2006.
- [81] D. Carpentier, P. Pujol, and K.-U. Giering. Random quantum Ising chains with competing interactions. *Phys. Rev. E*, 72:066101, 2005.

- [82] K. Binder. Finite size scaling analysis of Ising model block distribution functions. *Zeitschrift für Physik B: condensed matter*, 43(2):119–140, 1981.
- [83] H. Rieger and A. P. Young. Zero-temperature quantum phase transition of a two-dimensional Ising spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 72:4141, 1994.
- [84] M. Guo, R. N. Bhatt, and D. A. Huse. Quantum critical behavior of a three-dimensional Ising spin glass in a transverse magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 72:4137, 1994.
- [85] D. C. Mattis. *The Theory of Magnetism*. Harper-Row, New York, 1965.
- [86] N. D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, 17:1133, 1966.
- [87] L. J. de Jongh and A. R. Miedema. Experiments on simple magnetic model systems: a survey of their experimental status in the light of current theories. *Adv. Phys.*, 23:1, 1974.
- [88] A. A. Migdal. Phase transitions in gauge and spin-lattice systems. *Sov. Phys.-JETP*, 42:743, 1975.
- [89] L. P. Kadanoff. Notes on Migdal’s recursion formulas. *Annals of Physics*, 100:359, 1976.
- [90] A. M. Mariz, C. Tsallis, and A. O. Caride. Criticality of the $d=2$ bond-dilute anisotropic Heisenberg ferromagnet. *J. Phys. C.*, 18:4189, 1985.
- [91] W. A. M. Morgado, E. M. F. Curado, and S. Coutinho. Multifractal magnetization on hierarchical lattices. *J. Stat. Phys.*, 61:913, 1990.
- [92] W. A. M. Morgado, E. M. F. Curado, and S. Coutinho. Multifractality in magnetic models. *Rev. Bras. Fís.*, 21:247, 1991.
- [93] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, and M. E. J. Newman. *The Theory of Critical Phenomena: An Introduction to the Renormalization Group*. Oxford Science Publications, Oxford, 1992.

- [94] J. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Claredon Press, Oxford, 1992.
- [95] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1995.
- [96] R. M. Zorzenon dos Santos. *Transições de Fase em Sistemas Magnéticos Desordenados*. PUC-RJ, Rio de Janeiro, 1986.
- [97] L. P. Kadanoff, W. Gotze, D. Hamblen, R. Hecht, E. A. S. Lewis, V. V. Palciauskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes, and J. Kane. Static phenomena near critical points: Theory and experiment. *Rev. Mod. Phys.*, 39:395, 1967.
- [98] Th. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen. Renormalization theory for spin systems. *Physica*, 71:17, 1974.
- [99] A. N. Berker and S. Ostlund. Renormalization-group calculations of finite systems: order parameter and specific heat for epitaxial ordering. *J. Phys. C*, 12:4961, 1979.
- [100] P. M. Bleher and E. Ž alis. Existence of long-range order in the Migdal recursion relations. *Comm. Math. Phys*, 67:17, 1979.
- [101] M. Suzuki and H. Takano. Migdal renormalizataion group approach to quantum spin systems. *Phys. Lett. A*, 69A:426, 1979.
- [102] H. Takano and M. Suzuki. Migdal-Kadanoff renormalization group approach to the spin-1/2 anisotropic Heisenberg model. *J. Stat. Phys.*, 26:635, 1981.
- [103] R. R. dos Santos. The pure and diluted quantum transverse Ising model. *J. Phys. C*, 15:3141, 1982.
- [104] J. R. de Sousa, N. S. Branco, B. Boechat, and C. Cordeiro. Quantum spin-1/2 two-dimensional XXZ model: an alternative quantum renormalization-group approach. *Phys. A*, 328:167, 2003.

- [105] A. O. Caride, C. Tsallis, and S. I. Zanette. Criticality of the anisotropic quantum Heisenberg model on a self-dual hierarchical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 51:145, 1983.