



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

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

MODELO DE POTTS COM ACOPLAMENTOS ALEATÓRIOS EM REDES HIERÁRQUICAS

por

Washington de Lima

Dissertação 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 Mestre em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Sérgio Galvão Coutinho (Orientador-UFPE)

Prof. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo (UFPE)

Prof. Evaldo Mendonça Fleury Curado (CBPF)

Recife - PE, Brasil

Abril - 2004



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

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado

Washington de Lima

MODELO DE POTTS COM ACOPLAMENTOS ALEATÓRIOS EM REDES HIERÁRQUICAS

A Banca Examinadora composta pelos Professores Sérgio Galvão Coutinho (Presidente e Orientador), Ernesto Carneiro Pessoa Raposo, ambos da Universidade Federal de Pernambuco e Evaldo Mendonça Fleury Curado do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas consideram o candidato:

() Aprovado com Distinção (X) Aprovado () Reprovado

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 trinta dias do mês de abril de 2004.

Prof. Sérgio Galvão Coutinho
Presidente e Orientador

Prof. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo

Prof. Evaldo Mendonça Fleury Curado

Agradecimentos

É difícil lembrar de tantas pessoas que promoveram o meu atual estágio da vida e conseguir agradecê-las o suficiente. Mas não posso deixar de citar os meus pais pela contínua dedicação o qual tiveram durante toda a minha vida, mostrando-me que o homem deve fruto de contínua responsabilidade e sabedoria perante os seus atos, e pela maneira doce a qual eu fui sempre tratado, e em especial ao meu pai por ser o meu grande amigo e confidente.

A minha madrinha que num momento bastante difícil da minha vida tornou possível toda minha jornada, bem como seus sinceros sentimentos que sempre me passou, e sua grande preocupação quanto ao meu futuro.

Ao meu orientador Sérgio Coutinho, não somente pela orientação, mostrando-me como ser um verdadeiro cientista, mas pelo grande homem que ele é. Como em acreditar que seria capaz de realizar este projeto, quanto a sua enorme paciência com os meus constantes problemas de saúde.

Ao grande amigo Gustavo, pela sua incrível paciência na graduação em me ensinar a maior parte dos conceitos físicos, bem como os aspectos computacionais e pela sua co-orientação dedicada.

A minha lindona, por seu constante carinho a mim devotado e pelos nossos lindos momentos.

A todos aqueles que não citei, sabem o quanto eu os respeito.

Ao CNPq pelo suporte financeiro, e acreditar na Ciência desse país.

E sem sombra de dúvida a Deus, pelo privilégio de nos conceder o dom da vida, fôlego para vencer os obstáculos mais difíceis e nos amar do jeito que somos.

Resumo

Neste trabalho o diagrama de fase e as propriedades críticas do modelo de Potts de q estados é investigado dentro de uma estrutura do grupo de renormalização do espaço real. O modelo é definido na rede hierárquica diamante de dimensão fractal arbitrária d e fator de escala $b = 2$.

A transição de fase da fase paramagnética para a fase condensada foi observada para um certo conjunto de valores de (q, d) .

Para cada caso, a temperatura crítica é estimada através do método dos *reservatórios*, que num espaço de parâmetros apropriado, permite analisar o fluxo da distribuição renormalizada. São consideradas quatro distribuições iniciais: Gaussiana, delta-bimodal, exponencial e uniforme. É observado que para $q > 3$, o fluxo que evolui para o ponto-fixo da fase condensada, dentro deste espaço de parâmetros, é confinado (atrator) em uma região de temperatura muito baixa mas finita. A natureza deste atrator e a simetria da fase condensada correspondente não esclarecidas e deixada para ser estudada a posteriori.

Contudo, para um valor fixo de número de estados de Potts q , a dimensão crítica inferior, acima da qual a transição é observada, é também calculada dentro desta metodologia. Os resultados indicam a existência de um valor de saturação para a dimensão crítica inferior quando q tende ao infinito.

A magnetização local e a função dos pares de correlação do modelo são calculados usando uma metodologia, que engloba o esquema do grupo de renormalização no espaço real de Migdal-Kadanoff e um procedimento recursivo exato. Estes resultados permitem investigar a temperatura e o comportamento de escala do parâmetro de ordem e estimar os expoentes críticos associados com o parâmetro de ordem e com o comprimento de correlação para o modelo com $q = 3$ e $d = 5$.

Um comportamento não universal com respeito a distribuição de probabilidade inicial é observado, como ocorrido para o caso vidro-de-spins de Ising ($q = 2$), indicando que a renormalização da distribuição evoluiria a uma distribuição de ponto-fixo definindo um genuíno ponto de sela governando a transição com expoentes universais com respeito as funções de distribuição iniciais.

ABSTRACT

In this work the phase diagram and the critical properties of q -state Potts glass model are investigated within the framework of real space renormalization group. The model is defined on the diamond hierarchical lattices of arbitrary fractal dimension d and scale-factor $b = 2$. The phase-transition from the paramagnetic phase to the condensed one was observed within a given set of the (q, d) parameters. For each case, the critical temperature is estimated by means of the *reservoir* method, which allows the analysis the flow of the renormalized distribution in appropriated parameter space. Four initial symmetric probability distribution functions were considered, namely the Gaussian, the delta-bimodal, the uniform and the exponential ones. It is observed that for $q > 3$ the flow towards the condensed-phase fixed-point, within the parameter space, evolves erratically to a bound region (attractor) at very low but finite temperature. The nature of this attractor and the symmetry of the corresponding condensed phase remain unclear and leaved for further studies. However, for a fixed value of the number of Potts states q , the lower critical dimension, above which the phase-transition is observed, is also calculated within this methodology. The results indicate the existence of an upper bound for the lower critical dimension when q goes to infinity. The local magnetization and the pair-correlation function of the model are calculated using a methodology, which encompass the Migdal-Kadanoff real space renormalization group scheme and an exact recursion procedure. These results allow to investigate the temperature and the scaling behavior of order-parameter and estimate the critical exponents associated with the order-parameter and with the correlation length are estimated for the model with $q = 3$ and $d = 5$. A non-universal behavior with respect to the initial probability distribution is observed, as it occurs for the spin-glass Ising case ($q = 2$), indicating that the renormalization distribution should evolves to a fixed-point distribution defining a genuine critical saddle-point governing the transition with universal exponents with respect to the initial distribution functions.

Sumário

1	Introdução	6
1.1	O Modelo de Potts	7
1.2	Modelo de Spin em Redes Hierárquicas	16
1.3	Grupo de Renormalização de Migdal-Kadanoff e as Redes Hierárquicas	18
1.4	Vidro-de-Spins	27
2	Diagrama de Fase do Modelo de Potts com Interações Aleatórias	29
2.1	Grupo de Renormalização de M-K para o Modelo de Potts na Rede Hierárquica Diamante	30
2.2	Determinação da Temperatura Crítica: Método dos Reser- vatórios.	37
2.3	A Fase Condensada	52
3	Comportamento Crítico do Parâmetro de Ordem	54
3.1	Cálculo da magnetização local. Método exato.	55
3.2	Propriedades críticas do parâmetro de ordem.	69
4	Conclusões e Perspectivas	92
A	Relações de Recorrência para a Função de Correlação	94
	Bibliografia	104

Lista de Figuras

1.1	Rede bidimensional quadrada com N spins	8
1.2	Direção dos spins na rede quadrada	8
1.3	Exemplos dos estados associados ao modelo de Potts	9
1.4	Construção da rede hierárquica do tipo diamante com dimensão fractal $d = 2$. (a) hierarquia zero, \bullet são os sítios raízes, (b) primeira hierarquia ou célula básica, (c) segunda hierarquia. . .	17
1.5	Ilustração do processo de renormalização numa rede quadrada.	18
1.6	Célula básica da rede diamante com $d_F = 2$ possuindo acoplamentos ferromagnéticos	21
2.1	Célula básica da rede hierárquica de diamante d-dimensional, com fator de escala $b = 2$ e $p = 2^{d-1}$ conexões.	30
2.2	Processo de dizimação da rede diamante d-dimensional	31
2.3	Ilustração do método dos reservatórios	38
2.4	Diagrama de fluxo mostrando a variância da transmissividade térmica em função da temperatura renormalizada, para $q = 3$ e $d = 5$, tomando-se as quatro distribuições iniciais, delta-bimodal, exponencial, gaussiana e uniforme.	40
2.5	Ampliação da região onde ocorre o ponto crítico para $q = 3$, $d = 5$, para as quatro distribuições iniciais, delta-bimodal, exponencial, gaussiana e uniforme.	41
2.6	Variância da transmissividade térmica versus temperatura, 100 iterações; 1000000 amostras; $q = 3$; $d = 5$;	42
2.7	Variância da transmissividade térmica versus temperatura, 10 iterações; 100000 amostras; $q = 4$; $d = 6$;	44
2.8	Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição delta-bimodal, para $q = 4$, $d = 5.08746$. . .	46
2.9	Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição exponencial, para $q = 4$, $d = 5.08746$	46

2.10	Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição gaussiana, para $q = 4$, $d = 5.08746$	47
2.11	Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição uniforme, para $q = 4$, $d = 5.08746$	47
2.12	Dimensão crítica versus número de estados	48
2.13	Comportamento da variância das distribuições iniciais versus temperatura em $q = 3$	51
2.14	Transmissividade térmica versus temperatura renormalizada, 1000 amostras; 100000 iterações; $q = 3$; $d = 5$;	52
3.1	Efeitos da rede hierárquica diamante sob a sua célula básica.	56
3.2	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição delta-bimodal em $q = 3$ e $d = 5$	73
3.3	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição exponencial em $q = 3$ e $d = 5$	74
3.4	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição gaussiana em $q = 3$ e $d = 5$	75
3.5	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para hierarquias. Distribuição uniforme em $q = 3$ e $d = 5$	76
3.6	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição delta-bimodal em $q = 3$ e $d = 5$	78
3.7	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição exponencial em $q = 3$ e $d = 5$	79
3.8	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição gaussiana em $q = 3$ e $d = 5$	80

3.9	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição uniforme em $q = 3$ e $d = 5$	81
3.10	Expoente crítico β versus L (tamanho da rede), para as distribuições: delta-bimodal, exponencial, gaussiana e uniforme. Todas em $q = 3$ e $d = 5$	82
3.11	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição delta-bimodal em $q = 4$ e $d = 6$	83
3.12	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição exponencial em $q = 4$ e $d = 6$	84
3.13	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição gaussiana em $q = 4$ e $d = 6$	85
3.14	Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição uniforme em $q = 4$ e $d = 6$	86
3.15	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição delta-bimodal em $q = 3$ e $d = 5$	88
3.16	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição exponencial em $q = 3$ e $d = 5$	89
3.17	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição gaussiana em $q = 3$ e $d = 5$	90
3.18	Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição uniforme em $q = 3$ e $d = 5$	91

Lista de Tabelas

2.1	Valores de temperatura crítica para diversos valores de q e d , para as distribuições: Delta-bimodal, Gaussiana, Exponencial e Uniforme.	45
2.2	Intervalo de valores contendo a dimensão crítica inferior para o modelo de Potts vítreo com q -estados. Na linha d_F o valor inferior corresponde à dimensão onde a transição não foi observada enquanto o valor superior corresponde à dimensão onde a transição foi observada. A linha p indica o número de conexões da rede hierárquica diamante com fator de escala $b = 2$ correspondente. (*) ver [19]	45
3.1	Valores estimados para os expoentes críticos com suas respectivas precisões, obtidos a partir de uma das distribuições iniciais escolhida.	78

Capítulo 1

Introdução

Desde a descoberta dos primeiros materiais magnéticos, o campo de estudo do eletromagnetismo tem despertado grande interesse dos físicos. Estudos cada vez mais sofisticados vêm sendo desenvolvidos mostrando-se um assunto que continua sendo sempre atual.

Com o advento da Física Estatística pôde ser efetuada a conexão das propriedades termodinâmicas com os aspectos microscópicos da matéria, e este foi um dos passos mais importantes da ciência. De posse dessa ferramenta, o estudo do comportamento magnético começou a ser investigado com mais profundidade e tomar novos rumos, um dos quais é o estudo do comportamento crítico do sistema, onde se pode obter relações as quais descrevem a forma como o material passa a exibir propriedades magnéticas e qual temperatura em que esta possa ocorrer, nos fornecendo uma idéia bastante sólida de como é governada a transição de uma fase desordenada (**paramagnetismo**) para uma fase ordenada (**estado condensado**), ou vice-versa.

O estudo dos materiais magnéticos também exigia um melhor entendimento de como os átomos se arranjam, então tornou-se necessário observar como era a forma geométrica desses arranjos, bem como estes interagem. Então, primeiramente nos modelos propostos, usou-se as redes de Bravais e com elas obteve-se resultados bastante interessantes, como é bem descrito em [1]. Porém os modelos com interações com spins tornam-se extremamente complicados, e o número daqueles que apresentam soluções exatas é ainda muito pequeno. Podemos tomar como um exemplo o artigo onde o modelo de **Ising** numa rede com duas dimensões é apresentada a solução exata proposta por Onsager[32], e uma abordagem mais detalhada desta solução é mostrada por Lieb[2]. As dificuldades em se obter relações exatas geraram

vários métodos de aproximação, os quais são tratados em [3] e [4].

Um método bastante importante, o qual é utilizado neste trabalho, é o do grupo de renormalização introduzido por Wilson, onde esta metodologia é melhor apresentada de início em [5]. Esta técnica tenta simplificar as interações entre os spins numa rede. O que às vezes ocorre é que mesmo com esta simplificação, não se consegue resolver o problema completamente sem utilizar outras aproximações.

Outra discussão bastante importante é deprever como os spins interagem em um material magnético. Um dos modelos bem conhecidos e usados é o modelo de **Ising** no qual os spins interagem via um acoplamento \mathbf{J} considerando que estes mesmos spins possuem dois estados possíveis. No modelo de **Ising** ferromagnético quando dois vizinhos estão no mesmo estado (ou estados opostos) a energia associada ao acoplamento é $-\mathbf{J}(\mathbf{J})$. Outro modelo estudado é o de **Potts**. Neste modelo os spins possuem q estados, e estes interagem via um acoplamento \mathbf{J} . Este modelo inicialmente foi considerado um sistema de interesse teórico que exibia transição de ordem-desordem. Contudo diversos resultados experimentais são relatados [10], relacionando-os em casos particulares para $q = 2, 3, 4$ e sistemas em $0 \leq q \leq 1$. Como um exemplo particular que pode ser considerado, temos em campo magnético diagonal, um ferromagneto cúbico com três eixos simples, podem ser considerados como um modelo de Potts para $q = 3$. Estudos experimentais em tais ferromagnetos cúbicos, $DyAl_2$, tem sido realizados e o encontro de uma transição de primeira ordem é consistente com o entendimento corrente.

Diversos estudos recentes acerca do modelo de Potts vem sendo realizados, onde diversas técnicas são utilizadas. Como um bom exemplo relatado em [8] é utilizado simulações de Monte Carlo em dois diferentes vidros de Potts com 10 estados, e interações aleatórias entre os primeiros vizinhos numa simples rede cúbica. Um segundo exemplo que podemos é um trabalho proposto em [9], onde é investigado o modelo de Potts em duas dimensões sob métodos perturbativos e numéricos, com a finalidade de estudar a classe de universalidade do modelo de Potts desordenado.

1.1 O Modelo de Potts

O problema inicialmente foi sugerido por Domb como uma generalização do modelo de Ising, e este foi um trabalho proposto para tese de Potts. O modelo é definido numa rede plana, a qual estão confinados um conjunto de

spins, cada um dos quais estão apontando em uma das q direções espaçadas igualmente pelos ângulos θ , conforme é visto nas figuras 1.1 e 1.2:

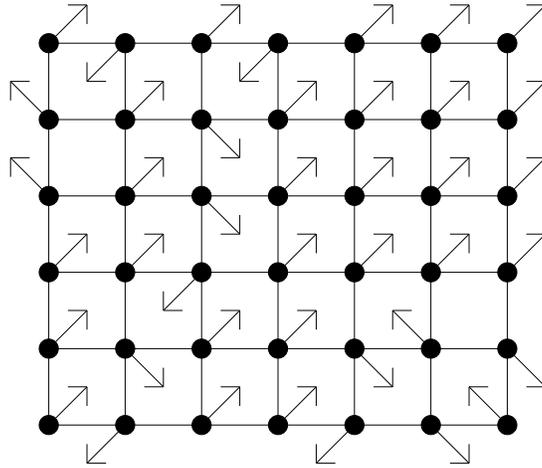


Figura 1.1: Rede bidimensional quadrada com N spins

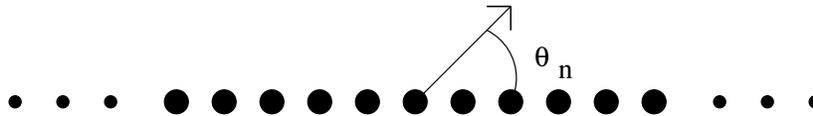


Figura 1.2: Direção dos spins na rede quadrada

Como indicado na figura 1.2 as interações entre os spins vizinhos mais próximos dependem do ângulo entre os spins, sendo assim pode ser definido o hamiltoniano de interação:

$$\mathbf{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{J}(\Theta_{ij}). \quad (1.1)$$

Onde $\Theta_{ij} = \Theta_{qi} - \Theta_{qj}$ é o ângulo da diferença entre os spins no estado q , para os sítios vizinhos i e j .

O hamiltoniano em (1.1) foi proposto inicialmente por Domb, o qual sugeriu que a interação $\mathbf{J}(\Theta)$ tomasse a forma:

$$\mathbf{J}(\Theta) = -\epsilon_1 \cos(\Theta), \quad (1.2)$$

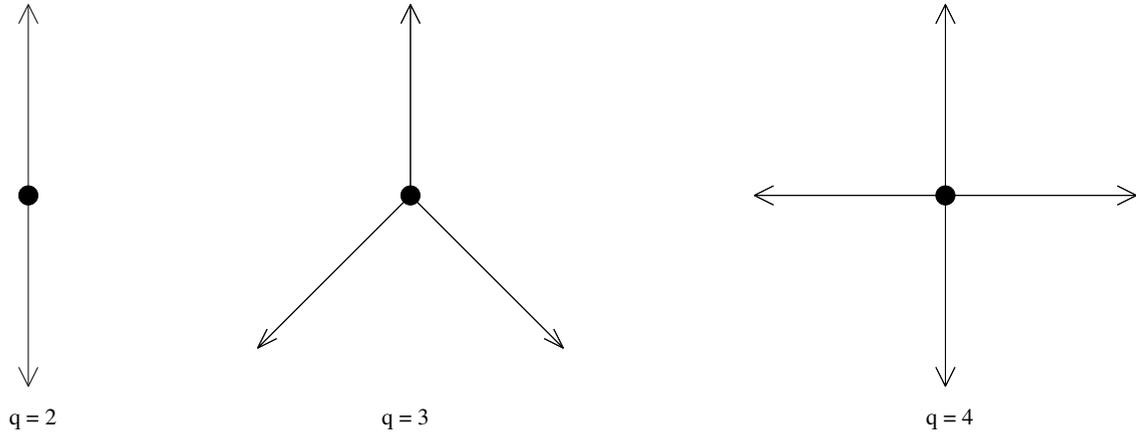


Figura 1.3: Exemplos dos estados associados ao modelo de Potts

sendo ϵ_1 uma constante.

Porém esta escolha mostrava a ocorrência de transição de fases numa rede quadrada para $q = 2, 3, 4$. Então Potts sugeriu que a interação $J(\Theta_{ij})$ fosse da forma:

$$\mathbf{J}(\Theta_{ij}) = -\epsilon_2 \delta_{\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j}, \quad (1.3)$$

sendo:

$$\delta_{q_i, q_j} = \begin{cases} 1, & \text{se } \sigma_i = \sigma_j \\ 0, & \text{se } \sigma_i \neq \sigma_j \end{cases} .$$

Com esta interação é possível obter o ponto crítico para todos os valores de q .

Na figura acima fazemos um esboço de alguns exemplos dos q -estados possíveis para o modelo de Potts.

A equação (1.2) é conhecido como modelo de Potts planar e a equação (1.3) é conhecida como modelo de Potts padrão ou simplesmente modelo de Potts.

O modelo pode ser estendido para incluir para incluir interações multi-pins e as ação de campos externos:

$$-\beta\mathbf{H} = \mathbf{L} \sum_{\mathbf{i}} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},0} + \mathbf{K} \sum_{\langle \mathbf{i},\mathbf{j} \rangle} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}}} + \mathbf{K}_3 \sum_{\langle \mathbf{i},\mathbf{j},\mathbf{k} \rangle} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}},\sigma_{\mathbf{k}}} + \dots \quad (1.4)$$

Se considerarmos apenas interações entre os primeiros vizinhos, então o hamiltoniano do sistema na ausência de um campo externo aplicado, toma a seguinte forma:

$$\mathbf{H} = - \sum_{\langle \mathbf{i},\mathbf{j} \rangle} \mathbf{J}_{\mathbf{ij}} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}}}, \quad (1.5)$$

onde $\delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}}}$ é a função delta de Kronecker, isto é,

$$\delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}}} = \begin{cases} 1, & \text{se } \sigma_{\mathbf{i}} = \sigma_{\mathbf{j}} \\ 0, & \text{se } \sigma_{\mathbf{i}} \neq \sigma_{\mathbf{j}} \end{cases}.$$

Se aplicarmos um campo externo, que favoreça o sistema num dado estado, digamos $\sigma = 1$, então o hamiltoniano para o sistema toma a forma:

$$\mathbf{H} = - \sum_{\langle \mathbf{i},\mathbf{j} \rangle} \mathbf{J}_{\mathbf{ij}} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}}} - \mathbf{h} \sum_{\mathbf{i}} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},1}, \quad (1.6)$$

sendo \mathbf{h} o campo magnético externo aplicado.

Como um exemplo vamos aplicar a solução de campo médio [11] com o campo externo nulo, fazendo uso da equação (1.6), como é visto por Wu [10], mostrando que este modelo apresenta transição de fase de primeira ordem, para o caso ferromagnético. Na teoria de campo médio estaríamos analisando o problema de um dado sítio da rede, no qual todas as interações dos sítios vizinhos são substituídas por um campo que atuaria nesse sítio:

$$\mathbf{H} = - \frac{\mathbf{J}\gamma}{2\mathbf{N}} \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}}}. \quad (1.7)$$

A equação acima representa o hamiltoniano de campo médio, e γ representa o número de coordenação da rede. Definindo $\mathbf{n}_{\sigma_{\mathbf{i}}}$ o número de spins no estado $\sigma_{\mathbf{i}}$ e $\mathbf{x}_{\sigma_{\mathbf{i}}}$ a fração de spins que está no estado $\sigma_{\mathbf{i}}$, então teremos:

$$\mathbf{n}_{\sigma_{\mathbf{i}}} = \sum_{\mathbf{j}=1}^{\mathbf{N}} \delta_{\sigma_{\mathbf{i}},\sigma_{\mathbf{j}}} \quad (1.8)$$

$$\mathbf{x}_{\sigma_i} = \frac{\mathbf{n}_{\sigma_i}}{\mathbf{N}} \quad (1.9)$$

Com o auxílio das equações (1.7), (1.8) e (1.9) podemos obter a função de partição para o sistema, inicialmente temos:

$$\mathbf{H} = -\frac{\gamma\mathbf{J}}{2\mathbf{N}} \sum_{i=1}^{\mathbf{N}} \sum_{j=1}^{\mathbf{N}} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}. \quad (1.10)$$

Sendo:

$$\mathbf{Z} = \text{Tr}[\exp(\beta\mathbf{H})] \quad , \quad \beta = \frac{1}{\mathbf{k}_B\mathbf{T}}, \quad (1.11)$$

então:

$$Z = \sum_{\sigma_1=1}^q \dots \sum_{\sigma_N=1}^q \exp\left[\frac{\gamma\beta J}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta_{\sigma_i, \sigma_j}\right]$$

Fazendo uso das equações (1.8), (1.9) e após algumas manipulações, chega-se à expressão:

$$Z = \sum_{\sigma_1=1}^q \dots \sum_{\sigma_N=1}^q \exp\left[\frac{\gamma\beta J}{2} \sum_{i=1}^N x_{\sigma_i}\right],$$

podendo ainda ser escrita como:

$$Z = \sum_{\sigma_1=1}^q \dots \sum_{\sigma_N=1}^q \prod_{i=1}^N \exp\left[\frac{\gamma\beta J}{2} x_{\sigma_i}\right].$$

Da equação acima podemos usar o produto de exponenciais, e obter assim a função de partição canônica:

$$\mathbf{Z} = \left[\sum_{\sigma=1}^q \exp\left(\frac{\gamma\beta\mathbf{J}}{2} \mathbf{x}_{\sigma}\right) \right]^{\mathbf{N}} \quad (1.12)$$

Tomando o valor médio do hamiltoniano poderemos obter a expressão para a energia livre. Inicialmente, recorreremos à expressão para a energia livre:

$$\mathbf{F} = \mathbf{U} - \mathbf{T}\mathbf{S} \quad (1.13)$$

Considerando:

$$\mathbf{U} = \mathbf{E} = \langle \mathbf{H} \rangle \quad (1.14)$$

Então poderemos escrever:

$$\mathbf{E} = \langle \mathbf{H} \rangle = \frac{\sum_{\sigma} \mathbf{H} \exp(-\beta \mathbf{H})}{\sum_{\sigma} \exp(-\beta \mathbf{H})} \quad (1.15)$$

Substituindo a equação (1.7) na equação (1.15):

$$E = \frac{\sum_{\sigma} \frac{-\gamma J}{2N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta(\sigma_i, \sigma_j) \exp(-\beta H)}{\sum_{\sigma} \exp(-\beta H)}$$

Rearrmando a expressão acima:

$$E = -\frac{\gamma J}{2} \frac{\sum_{\sigma} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\delta(\sigma_i, \sigma_j)}{N} \exp(-\beta H)}{\sum_{\sigma} \exp(-\beta H)}$$

Fazendo uso das equações (1.8) e (1.9), então:

$$E = -\frac{\gamma J}{2} \frac{\sum_{\sigma} \sum_{i=1}^N x_{\sigma_i} \exp(-\beta H)}{\sum_{\sigma} \exp(-\beta H)}$$

Fazendo uso da definição de média termodinâmica na expressão anterior, chega-se à equação:

$$\mathbf{E} = -\frac{\gamma \mathbf{J}}{2} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_{\sigma_i} \right\rangle = -\frac{\gamma \mathbf{J}}{2} \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{x}_{\sigma_i} \rangle \quad (1.16)$$

Para um sistema translacionalmente invariante temos:

$$\langle \mathbf{x}_{\sigma_i} \rangle = \langle \mathbf{x}_{\sigma} \rangle \quad \forall i \quad (1.17)$$

Substituindo a equação (1.17) em (1.16), constrói-se a seguinte equação:

$$\mathbf{E} = -\frac{N\gamma \mathbf{J}}{2} \langle \mathbf{x}_{\sigma} \rangle \quad (1.18)$$

Pode-se calcular a fração média de spins no estado σ , pela definição:

$$\langle \mathbf{x}_{\sigma} \rangle = \sum_{\sigma=1}^q \mathbf{x}_{\sigma} \mathbf{P}(\sigma), \quad (1.19)$$

onde $\mathbf{P}(\sigma)$, representa a probabilidade de encontrar spins no estado σ .

Pela definição pode-se ter:

$$\mathbf{P}(\sigma) = \frac{\text{número de spins no estado } \sigma}{\text{número total de spins}} = \frac{\mathbf{n}_\sigma}{\mathbf{N}} \quad (1.20)$$

Substituindo a equação (1.9) na equação (1.20), e em seguida substituindo o resultado na equação (1.18), então se obtém a energia por spin:

$$\frac{\mathbf{E}}{\mathbf{N}} = -\frac{\gamma\mathbf{J}}{2} \sum_{\sigma_i=1}^q \mathbf{x}_\sigma^2 \quad (1.21)$$

De acordo com a equação (1.13), torna-se necessário obter uma expressão para a entropia \mathbf{S} .

$$\frac{\mathbf{S}}{\mathbf{N}} = \mathbf{k}_B [\ln(\mathbf{Z}) + \beta \langle \mathbf{E} \rangle] \quad (1.22)$$

A energia média pode ser obtida usando a relação:

$$\langle \mathbf{E} \rangle = \sum_{\sigma} \mathbf{E}_\sigma \mathbf{P}(\sigma) \quad (1.23)$$

Temos ainda:

$$\mathbf{P}(\sigma) = \frac{\exp(-\beta \mathbf{E}_\sigma)}{\mathbf{Z}} \quad (1.24)$$

Manipulando a equação (1.24) é obtida a equação:

$$\mathbf{E}_\sigma = -\frac{1}{\beta} [\ln(\mathbf{Z}) + \ln(\mathbf{P}(\sigma))] \quad (1.25)$$

Substituindo as equações (1.12) e (1.25) na equação (1.22), e usando a condição de normalização,

$$\sum_{\sigma=1}^q \mathbf{P}(\sigma) = 1 \quad (1.26)$$

sendo utilizadas as equações (1.20) e (1.9), a expressão para a entropia por spin é obtida:

$$\mathbf{S} = -\mathbf{k}_B \sum_{\sigma=1}^q \mathbf{x}_\sigma \ln(\mathbf{x}_\sigma) \quad (1.27)$$

Substituindo as equações (1.21) e (1.27) na equação (1.13), então tem-se, a energia livre por spin:

$$\mathbf{F} = -\frac{\gamma\mathbf{J}}{2} \sum_{\sigma=0}^{q-1} \mathbf{x}_\sigma^2 + \mathbf{k}_B\mathbf{T} \sum_{\sigma=0}^{q-1} \mathbf{x}_\sigma \ln(\mathbf{x}_\sigma) \quad (1.28)$$

Rearrmando a equação (1.28), e fazendo $\beta = \frac{1}{\mathbf{k}_B\mathbf{T}}$ e $\mathbf{K} = \frac{\mathbf{J}}{\mathbf{k}_B\mathbf{T}}$, obtêm-se a expressão para a energia livre por spin:

$$\beta\mathbf{F} = \sum_{\sigma=0}^{q-1} [\mathbf{x}_\sigma \ln(\mathbf{x}_\sigma) - \frac{\gamma\mathbf{K}}{2} \mathbf{x}_\sigma^2] \quad (1.29)$$

Para interações ferromagnéticas, ou seja $\mathbf{J} > \mathbf{0}$, serão utilizadas soluções do tipo:

$$\mathbf{x}_0 = \frac{1}{\mathbf{q}}[\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\mathbf{m}] \quad , \quad \sigma = 0 \quad (1.30)$$

$$\mathbf{x}_\sigma = \frac{1}{\mathbf{q}}(\mathbf{1} - \mathbf{m}) \quad , \quad \sigma = 1, 2, \dots, q - 1. \quad (1.31)$$

Sendo \mathbf{m} o parâmetro de ordem.

Substituindo as equações (1.30) e (1.31) em (1.29), em seguida rearrumando as expressões, então chega-se à expressão:

$$\begin{aligned} \beta\mathbf{F} &= \frac{1}{\mathbf{q}}[\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\mathbf{m}] \ln[\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\mathbf{m}] + \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{1})(\mathbf{1} - \mathbf{m})}{\mathbf{q}} \ln(\mathbf{1} - \mathbf{m}) \\ &\quad - \ln(\mathbf{q}) - \frac{\gamma\mathbf{K}}{2\mathbf{q}}(\mathbf{q} - \mathbf{1})\mathbf{m}^2 - \frac{\gamma\mathbf{K}}{2\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (1.32)$$

Reagrupando os termos na equação (1.32) e tomando como definição para $\beta F(0)$:

$$\beta\mathbf{F}(\mathbf{0}) = -\ln(\mathbf{q}) - \frac{\gamma\mathbf{K}}{2\mathbf{q}} \quad (1.33)$$

Tem se a expressão para a energia livre por spin:

$$\begin{aligned}
\beta[\mathbf{F}(\mathbf{m}) - \mathbf{F}(\mathbf{0})] &= \frac{1}{\mathbf{q}}[1 + (\mathbf{q} - 1)\mathbf{m}] \ln[1 + (\mathbf{q} - 1)\mathbf{m}] \\
&+ \frac{(\mathbf{q} - 1)(1 - \mathbf{m})}{\mathbf{q}} \ln(1 - \mathbf{m}) \\
&- \frac{\gamma\mathbf{K}}{2\mathbf{q}}(\mathbf{q} - 1)\mathbf{m}^2
\end{aligned} \tag{1.34}$$

Expandindo a equação (1.34) em série de para \mathbf{m} pequeno, pode-se verificar o tipo de transição que ocorre. Inicialmente é feito:

$$\ln[1 + (q - 1)m] = (q - 1)m - \frac{1}{2}(q - 1)^2 m^2 + \frac{1}{3}(q - 1)^3 m^3 + \dots$$

$$\ln(1 - m) = -m - \frac{1}{2}m^2 - \frac{1}{3}m^3 + \dots$$

Aplicando estes resultados a equação (1.34), logo após agrupar alguns termos e cancelar outros, chega-se a equação:

$$\begin{aligned}
\beta[\mathbf{F}(\mathbf{m}) - \mathbf{F}(\mathbf{0})] &= \frac{(\mathbf{q} - 1)}{2\mathbf{q}}(\mathbf{q} - \gamma\mathbf{K})\mathbf{m}^2 - \frac{1}{6}(\mathbf{q} - 1)(\mathbf{q} - 2)\mathbf{m}^3 \\
&+ \frac{1}{3}(\mathbf{q} - 1)^2(\mathbf{q} + 2)\mathbf{m}^4 + \dots
\end{aligned} \tag{1.35}$$

A existência de um coeficiente negativo no termo cúbico para $q > 2$, significa que há uma transição de primeira ordem para o sistema.

Em $q = 2$, o ponto crítico é obtido derivando a equação (1.35), tomando-se a expansão somente até o termo de terceira ordem:

$$\gamma\mathbf{K}_c = 2 \tag{1.36}$$

Para $q > 2$ o ponto crítico é encontrado fazendo juntamente com a derivada da energia livre em relação ao parâmetro de ordem m , em m_c , sendo esta derivada nula, e $F(m_c) = F(0)$ [10]. Tendo isto, obtêm-se:

$$\gamma\mathbf{K}_c = \frac{2(\mathbf{q} - 1)}{(\mathbf{q} - 2)} \ln(\mathbf{q} - 1) \tag{1.37}$$

Associado a este ponto crítico, existem várias grandezas termodinâmicas que possuem um comportamento especial neste ponto em estudo.

1.2 Modelo de Spin em Redes Hierárquicas

No estudo dos materiais magnéticos leva-se em consideração como os momentos magnéticos estão dispostos em sua estrutura microscópica. Inicialmente estudou-se de vários modelos de spins em redes de Bravais, ou seja redes baseadas em uma célula unitária e com simetria translacional, como é bem descrito em [1]. Este estudo gerou vários resultados bastante importantes, para a compreensão das propriedades magnéticas dos materiais. Mas o número de modelos que apresentam soluções exatas são poucos. Uma alternativa viável para se obter modelos com solução exata foi considerá-los definidos em redes fractais que possuem simetria por transformação de escala, embora não tenham simetria de translação. Tais redes são obtidas pelo processo de iteração a partir de um elemento primitivo, denominado célula primitiva ou básica [16], tendo-se assim uma rede hierárquica.

O interessante desse tipo de rede é que modelos que não possuem solução exata em rede de Bravais, possuem solução exata em rede hierárquicas apropriadas. Torna-se importante salientar que esta hipótese de aproximar resultados da rede de Bravais por aqueles da rede hierárquica pode conduzir a resultados quantitativamente enganosos. Contudo para aqueles modelos cuja solução é possível, têm-se uma descrição qualitativa do comportamento do modelo na rede de Bravais [17].

Existem vários exemplos de redes hierárquicas. Um exemplo bastante importante é o da rede diamante [17], o qual é tema de estudo desse trabalho. Vários modelos de spin têm sido estudados nesta rede hierárquica e reportados na literatura [16, 17, 18, 19, 31].

Para construir uma rede hierárquica diamante, inicialmente parte-se de dois pontos conectados o qual é associado a hierarquia, ou geração zero, conforme mostrado na figura 1.4(a). No próximo passo a conexão é substituída por dois ramos em paralelo cada um com duas ligações em série como mostrado na figura 1.4(b), formando a célula unitária da rede de diamante, e que se constitui na primeira hierarquia. Na segunda iteração cada ligação da célula unitária é substituída por ela própria gerando a segunda hierarquia como mostrado na figura 1.4(c). O processo é então repetido sucessivas vezes. Nos vértices ou sítios da rede formada são alocados spins, sendo assim as conexões vistas como os acoplamentos entre os spins. O processo realizado desta forma, compondo a rede, é conhecido como processo de decoração [20] [21]. Se o processo é realizado no sentido inverso ao utilizado aqui, ou seja, decompondo a rede, este é conhecido como processo de dizimação, conforme

é citado em [20] e [21].

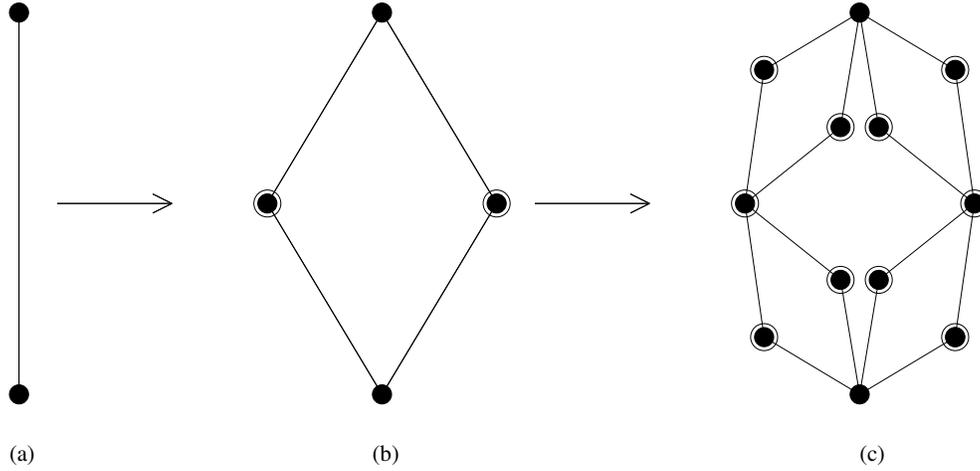


Figura 1.4: Construção da rede hierárquica do tipo diamante com dimensão fractal $d = 2$. (a) hierarquia zero, \bullet são os sítios raízes, (b) primeira hierarquia ou célula básica, (c) segunda hierarquia.

No caso geral da rede diamante com p conexões, com q sítios internos ou $b = q + 1$ ligações em série, sua dimensão fractal definida pela razão no limite de infinitas hierarquias entre o logaritmo do volume (número de sítios ou ligações) pelo logaritmo do tamanho característico (número mínimo de conexões entre os sítios raízes) [6, 7, 14, 15] é dada por,

$$\mathbf{d}_F = 1 + \frac{\ln(\mathbf{p})}{\ln(\mathbf{b})}. \quad (1.38)$$

Para uma rede com N hierarquias o número total de sítios é:

$$\mathbf{N}_S = 2 + \frac{(\mathbf{b} - 1) \mathbf{p} [(\mathbf{b}\mathbf{p})^N - 1]}{(\mathbf{b}\mathbf{p} - 1)}, \quad (1.39)$$

e o número de ligações,

$$\mathbf{N}_B = (\mathbf{b}\mathbf{p})^N. \quad (1.40)$$

No caso da rede mostrada na figura 1.4, $p = 2$ e $b = 2$, logo resulta $\mathbf{d}_F = 2$.

1.3 Grupo de Renormalização de Migdal-Kadanoff e as Redes Hierárquicas

Durante um bom tempo a maneira de se obter os expoentes críticos de modelos de spin era através da solução exata dos modelos fazendo uma avaliação das propriedades termodinâmicas no regime crítico, ou fazendo simulações numéricas, ou fazendo extrapolação de soluções aproximadas [3],[4] e [11]. Entretanto, Wilson [5] fez uma proposta, para uma nova maneira de analisar a região de criticalidade. Mas mesmo assim, este trabalho não teve muita repercussão, até que Kadanoff sugeriu uma série de simplificações no regime crítico dando uma maior crença as técnicas do chamado grupo de renormalização. Existem dois principais ramos dessas técnicas: uma aplicada a teoria de campos conhecida como técnicas do espaço-k e uma que segue as idéias propostas por Kadanoff, conhecida técnicas de renormalização no espaço real. As técnicas que utilizaremos neste trabalho serão as do grupo de renormalização no espaço real.

O método é apropriado para modelos definidos em redes que apresentem uma simetria de escala discreta. A rede é subdividida em blocos ou grupos de sítios, que possam ser substituídos por um único sítio representando todos os sítios do bloco e suas interações, conforme é ilustrado na figura 1.5.

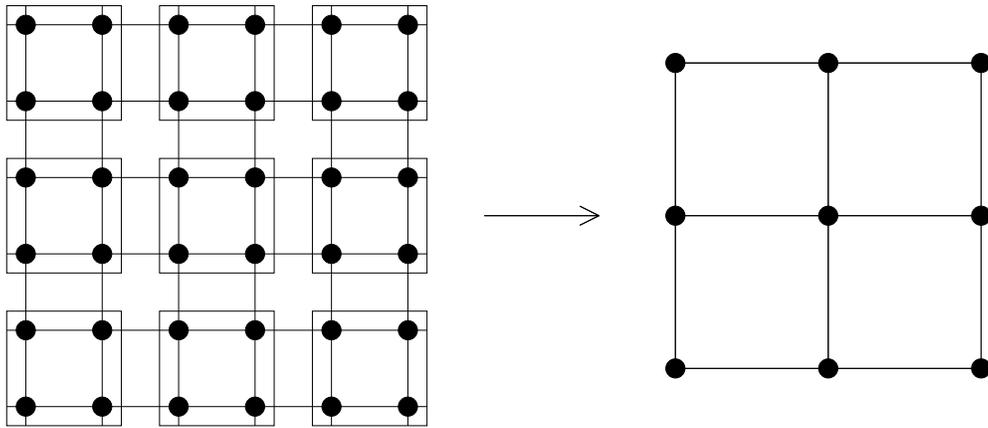


Figura 1.5: Ilustração do processo de renormalização numa rede quadrada.

Com este processo temos uma nova rede reduzida com um fator de escala, com um número menor de spins e um número menor de interações. Um

novo hamiltoniano associado à nova rede, com menor números de graus de liberdade, tal que pode-se definir a transformação do grupo de renormalização [3], como sendo:

$$\bar{\mathbf{H}}' = \bar{\mathbf{R}}(\bar{\mathbf{H}}), \quad (1.41)$$

onde \bar{H} representa o hamiltoniano adimensional $\bar{H} = \frac{H}{k_B T}$.

O operador do grupo de renormalização \mathbf{R} reduz o número de graus de liberdade do sistema. Tal redução é efetivada por um fator, denominado de fator de escala [3], definido por:

$$\mathbf{b}^d = \frac{\mathbf{N}}{\mathbf{N}'}. \quad (1.42)$$

Sendo \mathbf{N}' o número de spins da rede renormalizada e \mathbf{N} o número de spins da rede original.

A condição essencial que deve ser satisfeita por qualquer transformação do grupo de renormalização, é que a função de partição seja invariante sob a transformação, ou seja:

$$\mathbf{Z}_{\mathbf{N}'}(\bar{\mathbf{H}}') = \mathbf{Z}_{\mathbf{N}}(\bar{\mathbf{H}}) \quad (1.43)$$

Desta maneira a energia livre total permanece a mesma e sendo a energia livre uma quantidade extensiva, então a energia livre por spin reduzida, citada em [3] transforma-se como:

$$\bar{\mathbf{f}}(\bar{\mathbf{H}}') = \mathbf{b}^d \bar{\mathbf{f}}(\bar{\mathbf{H}}). \quad (1.44)$$

Onde $\bar{f} = \frac{f}{k_B T}$.

A equação (1.44), conduz a uma forma de escala para a energia livre.

Foi visto de forma qualitativa, até agora a teoria do grupo de renormalização aplicada a uma rede quadrada de maneira ilustrativa. A seguir esta técnica será aplicada numa rede hierárquica do tipo diamante considerando o modelo de Potts com interações ferromagnéticas. O hamiltoniano de interação pode ser escrito na forma:

$$\mathbf{H} = -q\mathbf{J} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (1.45)$$

a partir da equação (1.5), e com o número q de estados convenientemente colocado.

A rede que será utilizada será aquela mostrada na figura 1.4.

É bastante conveniente definir a variável:

$$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{J}}{k_B \mathbf{T}}, \quad (1.46)$$

onde o \mathbf{K} representa o acoplamento reduzido entre os spins, e k_B é a constante de Boltzmann.

Substituindo-se a equação (1.46) em (1.45), obtêm-se o hamiltoniano de interação adimensional no n -ésimo nível:

$$\mathbf{H}_n = -q\mathbf{K}_n \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \quad (1.47)$$

Sendo assim pode-se obter a função de partição canônica para o n -ésimo nível de iteração:

$$\mathbf{Z}_n = \sum_{\sigma} \exp[q\mathbf{K}_n \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}] \quad (1.48)$$

Precisa-se agora fazer uma pequena distinção entre os sítios da célula básica, conforme é visto na figura 1.6, para facilitar os cálculos na obtenção da função de partição.

A função de partição canônica pode ser reescrita fazendo uso da figura 1.6 e a equação (1.47):

$$\mathbf{Z} = \sum_{\{\mu\}} \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[q\mathbf{K} \sum_{i=1}^2 (\delta_{\sigma_i, \mu} + \delta_{\sigma_i, \mu'}) \right]. \quad (1.49)$$

A função de partição restrita pode ser definida na forma:

$$\mathbf{Z}_{\mu, \mu'} = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[q\mathbf{K} \sum_{i=1}^2 (\delta_{\sigma_i, \mu} + \delta_{\sigma_i, \mu'}) \right], \quad (1.50)$$

e que pode ser reescrita na forma:

$$\mathbf{Z}_{\mu, \mu'} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i=1}^2 \exp [\delta_{\sigma_i, \mu} + \delta_{\sigma_i, \mu'}]. \quad (1.51)$$

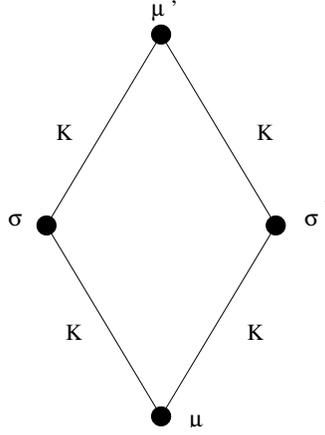


Figura 1.6: Célula básica da rede diamante com $d_F = 2$ possuindo acoplamentos ferromagnéticos

Efetuada algumas simples manipulações, então chega-se ao resultado:

$$\mathbf{Z}_{\mu,\mu'} = \left\{ \sum_{\sigma} \exp[\mathbf{qK}(\delta_{\sigma,\mu} + \delta_{\sigma,\mu'})] \right\}^2. \quad (1.52)$$

Agora será feito duas considerações:

1. $\mu = \mu'$

$$\mathbf{Z}_{\mu,\mu} = \left[\sum_{\sigma} \exp(2\mathbf{qK}\delta_{\sigma,\mu}) \right]^2 \quad (1.53)$$

Lembrando que:

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \begin{cases} 1, & \text{se } \sigma_i = \sigma_j \\ 0, & \text{se } \sigma_i \neq \sigma_j, \end{cases} \quad (1.54)$$

e aplicando esta condição acima à equação (1.53), chega-se a equação:

$$\mathbf{Z}_{\mu,\mu} = [(\mathbf{q} - 1) + \exp(2\mathbf{qK})]^2 \quad (1.55)$$

2. $\mu \neq \mu'$

Aplicando-se a condição (1.54) à equação (1.52), tendo-se ainda as seguintes condições:

$$\sigma = \mu \Rightarrow \delta_{\sigma,\mu} = 1 \quad \text{e} \quad \sigma \neq \mu'$$

$$\sigma = \mu' \Rightarrow \delta_{\sigma,\mu} = 1 \quad \text{e} \quad \sigma \neq \mu$$

$$\sigma \neq \mu', \mu \Rightarrow \delta_{\sigma,\mu} = 0$$

$$\sigma \neq \mu', \mu \Rightarrow \delta_{\sigma,\mu'} = 0$$

Com o uso destas condições chega-se à equação:

$$\mathbf{Z}_{\mu,\mu'} = [(\mathbf{q} - 2) + 2\exp(\mathbf{q}\mathbf{K})]^2 \quad (1.56)$$

Realizando-se o processo inverso de renormalização, ao visto na figura 1.4, processo este conhecido como dizimação da rede que corresponde a tomar o traço sobre as variáveis internas, então constrói-se o hamiltoniano efetivo,

$$\bar{\mathbf{H}}_{\text{ef}} = -\beta\mathbf{H}_{\text{ef}} = \mathbf{q}\mathbf{K}'\delta_{\mu,\mu'} + \text{constante} \quad (1.57)$$

Sendo \mathbf{K}' o acoplamento da rede renormalizada, figura 1.4(a).

Fazendo uso deste hamiltoniano efetivo visto na equação (1.57), será calculada a função de partição canônica efetiva:

$$\mathbf{Z}_{\text{ef}} = \sum_{\{\mu,\mu'\}} \exp(\bar{\mathbf{H}}_{\text{ef}}) = \sum_{\{\mu,\mu'\}} \exp(\mathbf{q}\mathbf{K}'\delta_{\mu,\mu'} + \text{constante}) \quad (1.58)$$

Podendo ainda ser escrita como:

$$\mathbf{Z}_{\text{ef}} = \sum_{\{\mu,\mu'\}} \mathbf{A} \exp(\mathbf{q}\mathbf{K}'\delta_{\mu,\mu'}) \quad (1.59)$$

Temos agora dois casos a considerar:

1. $\mu = \mu'$

Têm-se: $\delta_{\mu,\mu} = 1$.

Então a função de partição canônica toma a forma:

$$\mathbf{Z}_{\text{ef}}(\mu, \mu') = \mathbf{A} \exp(\mathbf{q}\mathbf{K}') \quad (1.60)$$

2. $\mu \neq \mu'$

Têm-se: $\delta_{\mu,\mu'} = 0$.

Agora a função partição canônica será escrita:

$$\mathbf{Z}'_{\text{ef}}(\mu', \mu) = \mathbf{A} \quad (1.61)$$

Com estes dois resultados pode-se agora obter finalmente a equação de renormalização.

Lembrando-se da equação (1.43) e comparando as equações (1.60) e (1.55), consegue-se obter:

$$\mathbf{A} \exp(\mathbf{q}\mathbf{K}') = [(\mathbf{q} - 1) + \exp(2\mathbf{q}\mathbf{K})]^2 \quad (1.62)$$

Da mesma maneira, se efetuar a condição imposta pela equação (1.43), e comparando as equações (1.56) e (1.61), então se obtém:

$$\mathbf{A} = [(\mathbf{q} - 2) + 2\exp(\mathbf{q}\mathbf{K})]^2 \quad (1.63)$$

E fazendo uso da equação (1.62) em (1.63), então obtém-se a equação de renormalização:

$$\mathbf{K}' = \frac{2}{\mathbf{q}} \ln \left[\frac{(\mathbf{q} - 1) + \exp(2\mathbf{q}\mathbf{K})}{(\mathbf{q} - 2) + 2\exp(\mathbf{q}\mathbf{K})} \right] \quad (1.64)$$

A seguir obteremos a equação de renormalização para uma nova variável, conhecida por transmissividade térmica [22], a qual pode ser definida tomando-se uma ligação para um dado sítio i , com uma determinada configuração. Considerando p_i^c , a probabilidade de um sítio estar correlacionado ao sítio i e p_i^d a probabilidade do sítio estar descorrelacionado com relação ao sítio i . Então define-se a transmissividade térmica, como sendo:

$$\mathbf{t}_i = \mathbf{p}_i^c - \mathbf{p}_i^d = \frac{\mathbf{1} - \exp\left(-\mathbf{q}\frac{\mathbf{q}J_i}{k_B T}\right)}{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\exp\left(-\frac{\mathbf{q}J_i}{k_B T}\right)} \quad (1.65)$$

De maneira mais simples esta grandeza mede a probabilidade de um sítio estar ou não correlacionado a outro sítio.

Por questão de simplicidade reescreveremos a equação (1.64) na forma seguinte:

$$\mathbf{t}_n = \frac{\mathbf{1} - \exp(-\mathbf{q}K_n)}{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\exp(-\mathbf{q}K_n)} \quad (1.66)$$

Onde t_n representa a transmissividade do n -ésimo nível da rede conectando dois sítios e K_n é o acoplamento do n -ésimo nível.

Será feito uma simples manipulação da equação (1.65), afim de obter uma relação entre o acoplamento e a transmissividade térmica.

$$\exp(\mathbf{q}K_n) = \frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\mathbf{t}_n}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_n} \quad (1.67)$$

Reescrevendo a equação (1.63) na forma:

$$\exp\left(\frac{qK_{n-1}}{2}\right) = \frac{(q-1) + \exp(2qK_n)}{(q-2) + 2\exp(qK_n)},$$

Substituindo-a na equação (1.67), e após algumas manipulações chega-se à equação [16]:

$$\mathbf{t}_{n-1} = \frac{2\mathbf{t}_n^2 + (\mathbf{q} - 2)\mathbf{t}_n^4}{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\mathbf{t}_n^4} \quad (1.68)$$

A seguir faremos o cálculo da temperatura crítica, em função da transmissividade térmica. Iterando-se a equação (1.68) obtêm-se os pontos fixos quando:

$$\mathbf{t}_{n-1} = \mathbf{t}_n = \mathbf{t} \quad (1.69)$$

Substituindo-se a equação (1.69) na equação (1.68), têm-se:

$$\mathbf{t} \left[\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1})\mathbf{t}^4 \right] = 2\mathbf{t}^2 + (\mathbf{q} - 2)\mathbf{t}^4, \quad (1.70)$$

A qual pode ser reescrita como:

$$\mathbf{t} \left[(\mathbf{q} - 1)\mathbf{t}^4 - (\mathbf{q} - 2)\mathbf{t}^3 - 2\mathbf{t} + 1 \right] = 0 \quad (1.71)$$

A equação (1.71), tem uma solução trivial $t = 0$, que corresponde à fase paramagnética ($T = \infty$) e a solução $t = 1$ que corresponde à fase ferromagnética ou condensada ($T = 0$). Desta forma foi obtido dois dos pontos fixos do sistema.

Desta forma a equação (1.71), poderá ser fatorada como:

$$\mathbf{t}(\mathbf{t} - 1) \left[(\mathbf{q} - 1)\mathbf{t}^3 + \mathbf{t}^2 + \mathbf{t} - 1 \right] = 0 \quad (1.72)$$

Podemos justificar fisicamente a solução $\mathbf{t} = 1$, como sendo $T \rightarrow 0$, ou seja:

$$\lim_{\mathbf{T} \rightarrow 0} \mathbf{t} = \lim_{\mathbf{T} \rightarrow 0} \frac{1 - \exp\left(\frac{-\mathbf{q}\mathbf{J}}{\mathbf{k}_B\mathbf{T}}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-\mathbf{q}\mathbf{J}}{\mathbf{k}_B\mathbf{T}}\right)} = 1 \quad (1.73)$$

O fator do terceiro grau visto em (1.72) produz duas raízes complexas e uma real, sendo a raíz real correspondendo ao ponto-fixa instável associado à transmissividade térmica no ponto crítico, ou seja, t_c .

Rescrevendo a equação do terceiro grau em (1.72) na forma:

$$(\mathbf{q} - 1)\mathbf{t}_c^3 + \mathbf{t}_c^2 = 1 - \mathbf{t}_c \quad (1.74)$$

Em seguida rearranjando a equação (1.67), usando a equação (1.74), e efetuando algumas manipulações, chega-se a expressão:

$$\exp(\mathbf{q}\mathbf{K}_c) = \frac{1 - \mathbf{t}_c}{\mathbf{t}_c^2(1 - \mathbf{t}_c)} = \frac{1}{\mathbf{t}_c^2} \quad (1.75)$$

Rearranjando a equação (1.75) e fazendo uso da equação (1.46), chega-se à seguinte temperatura crítica em função da transmissividade térmica:

$$\mathbf{T}_c = \frac{-\mathbf{q}\mathbf{J}}{2\mathbf{k}_B \ln(\mathbf{t}_c)} \quad (1.76)$$

O propósito agora, é a obtenção do expoente crítico associado ao comprimento de correlação, ν . Inicialmente é necessário obter o autovalor da matriz de transformação [4], que para o caso ferromagnético possui apenas um autovalor, gerado pela equação de renormalização. Portanto:

$$\lambda = \frac{\partial t_{n-1}}{\partial t_n} \Big|_{t_c} \quad (1.77)$$

Substituindo a equação (1.68) na equação (1.77), chega-se a equação:

$$\lambda = \frac{4t_c + (\mathbf{q} - 2)t_c^3 - 4t_c^5}{[1 + (\mathbf{q} - 1)t_c^4]^2} \quad (1.78)$$

Tendo-se ainda que no ponto crítico t_c satisfaz a equação (1.74), podemos escrever:

$$(\mathbf{q} - 1)t_c^3 = 1 - t_c - t_c^2 \quad (1.79)$$

Multiplicando ambos os membros da equação (1.79) por t_c^2 , e aplicando na equação (1.78), chega-se à expressão:

$$\lambda = \frac{4t_c - 4t_c^2 + 4(\mathbf{q} - 1)t_c^3 + 4t_c^4}{[1 + t_c - t_c^2 - t_c^3]^2} \quad (1.80)$$

Utilizando novamente a expressão (1.78), chega-se a expressão:

$$\lambda = \frac{4 - 8t_c^2 + 4t_c^4}{(t_c^3 + t_c^2 - t_c - 1)^2} \quad (1.81)$$

Aplicando mais uma vez a equação (1.74) de forma rearranjada na equação (1.80), e fazendo algumas manipulações, chega-se à expressão conveniente para λ :

$$\lambda = \left\{ \frac{2(1 - t_c^2)}{t_c[(\mathbf{q} - 2)t_c^2 + 2]} \right\}^2 \quad (1.82)$$

Considerando a definição para o expoente ν [4]:

$$\nu = \frac{\ln(b)}{\ln(\lambda)} \quad (1.83)$$

Aplicando a equação (1.82) em (1.83), e lembrando que o fator de escala utilizado foi $b = 2$, então obtemos o expoente crítico, ν :

$$\nu = \frac{\ln(2)}{2 \ln \left\{ \frac{2(1 - t_c^2)}{t_c[(\mathbf{q} - 2)t_c^2 + 2]} \right\}}, \quad (1.84)$$

reproduzindo o resultado obtido em [16].

Esta seção simplesmente mostra alguns resultados importantes obtidos, que servirão de base para estudos mais profundos. Estudos estes que serão importantes para compreender o estudo de fenômenos magnéticos desordenados.

1.4 Vidro-de-Spins

Materiais magnéticos, como algumas ligas metálicas, com elementos magnéticos diluídos em metais não magnéticos, são de grande interesse e foram bastante estudados [23] e [24].

Alguns desses materiais possuem um comportamento peculiar quando na sua preparação a temperatura é resfriada de forma rápida. Neste processo dito temperado os átomos magnéticos, colocados como impurezas, localizam-se de forma aleatória, não estabelecendo uma quebra de simetria global, gerando interações desordenadas, ou seja, interações competitivas em detrimento da ordem tal como existiria num material puro. Materiais desordenados frustrados magnéticos ou não magnéticos aparecem em vários ramos da Física da Matéria Condensada.

No caso de ligas magnéticas fracamente diluídas com frustração e desordem, o comportamento ferromagnético ou antiferromagnético não consegue ser estabelecido. Contudo, alguns deles conseguem exibir uma “transição de resfriamento” para um novo estado condensado dito “vidro de spins” [24,25] em que os momentos magnéticos se orientam em direções aleatórias congeladas. Neste estado, a magnetização global do sistema é nula, embora localmente seja não nula. Então torna-se necessário definir um parâmetro de ordem que caracterize esta transição [24] e [25], este parâmetro é conhecido por parâmetro de ordem de Edwards-Anderson definido por:

$$q_{EA} = \overline{\langle S_i \rangle_T^2} \quad (1.85)$$

onde S_i é a variável de spin e $\langle S_i \rangle$ representa a média térmica, enquanto que a barra representa a média configuracional sobre a desordem em questão.

O estudo da fase vidro-de-spins tem sido tema de várias pesquisas, e tal comportamento desta fase vem sendo bastante discutido devido as suas peculiaridades [27]. Vários modelos foram propostos para explicar as propriedades dos materiais com comportamento “vidro-de-spins”. Dentre os mais populares estão o modelo de Edwards-Anderson (EA) [35] e sua versão mais

simplificada, o modelo de Sherington-Kirkpatrick (SK) [36], este último definido por variáveis de Ising e com interações de alcance infinito. A solução do modelo (SK), que corresponde à solução de campo médio, mostra que a energia livre da fase condensada vidro-de-spins seria descrita por uma paisagem de energia formada por muitos estados puros (vales) separados por barreiras de energia infinitas. A questão se essa descrição corresponde àquela dos sistemas físicos reais, onde os acoplamentos são de alcance finito, permanece ainda não esclarecida. Por isso, esforços têm sido feitos para estudar os modelos de vidro-de-spins com interações de alcance finito. Em particular, o modelo vidro-de-spins de Ising tem sido bastante estudado por métodos de simulação numérica [37].

Outra abordagem alternativa, tem sido o estudo deste modelo em redes hierárquicas onde uma solução exata (numérica) pode ser alcançada [18, 19, 38, 39, 40].

Outro modelo magnético desordenado com frustração que, embora mais rico, tem sido menos estudado é o modelo de Potts vítreo com q -estados, isto é, com interações aleatórias competitivas com uma configuração desordenada fixa, seguindo uma certa distribuição de probabilidades. A solução de campo médio desse modelo com $q > 4$ exibe tanto uma transição de fase estática em T_0 quanto uma transição dinâmica em $T_D > T_0$. A transição estática exibe descontinuidades no parâmetro de ordem. Singularidades tipo cúspide na energia interna e entropia mas não apresenta calor latente [9]. Portanto, torna-se relevante questionar se tais singularidades ou mesmo a transição de fase sobrevive para sistemas (ou modelos) com interações de alcance finito.

No que segue, nesta dissertação, estudaremos o modelo de Potts com interações aleatórias com q -estados definido na rede hierárquica diamante com fator de escala $b = 2$, considerando quatro distribuições de probabilidade para as interações.

Capítulo 2

Diagrama de Fase do Modelo de Potts com Interações Aleatórias

Nesta dissertação de mestrado, é usado o modelo de Potts com interações aleatórias na rede hierárquica do tipo diamante, rede esta discutida no primeiro capítulo deste trabalho, conforme é visto na figura 1.4. Entretanto, a célula básica da rede mostrada na figura 1.4 representa o caso particular da rede com dimensão, $d = 2$. Nesta dissertação será considerado em princípio a rede com dimensão d e número de estados q de Potts arbitrário, e estudados alguns casos particulares de dimensão e número de estados. É efetuado um estudo do modelo de Potts na rede de diamante no diagrama de fluxo em um espaço de parâmetros apropriado definido pela variância da transmissividade térmica em função da temperatura, ou seja, $\Delta \times T$. Neste espaço fica evidenciada a transição de fase do sistema, e determinada a temperatura crítica T_c do sistema.

2.1 Grupo de Renormalização de M-K para o Modelo de Potts na Rede Hierárquica Diamante

Como visto no primeiro capítulo o esquema de grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff (ou simplesmente M-K) em redes hierárquicas pode ser aplicado independentemente a cada célula básica do tipo diamante da rede com d -dimensões, conforme mostrada na figura 2.1:

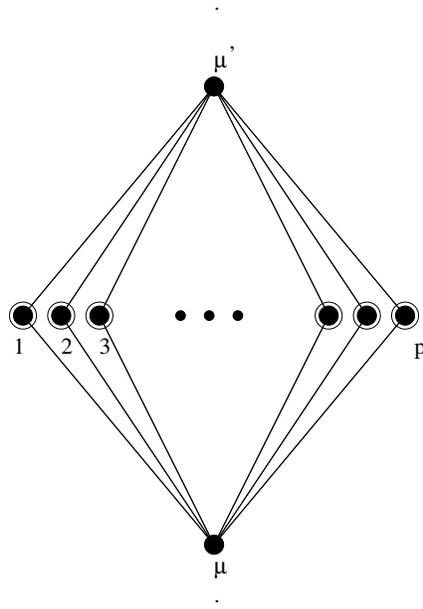


Figura 2.1: Célula básica da rede hierárquica de diamante d -dimensional, com fator de escala $b = 2$ e $p = 2^{d-1}$ conexões.

O objetivo do grupo de renormalização de M-K, é obter uma equação de renormalização [4],

$$\mathbf{K}' = \mathbf{f}(\{\mathbf{K}\}) \quad (2.1)$$

que relaciona os acoplamentos do modelo $\{\vec{K}'\}$ quando se faz uma transformação (redução) de escala (dizimação) do modelo $\{\vec{K}\}$.

A seguir, mostraremos como será obtida a equação de renormalização para rede diamante para o modelo Potts com interações aleatórias.

Como já é sabido as redes hierárquicas são autosimilares, ou seja, em cada passo da construção da rede, esta será semelhante à rede anterior por um fator de escala, conforme mostrado na figura 1.4. Então, inicialmente considera-se a figura 2.2:

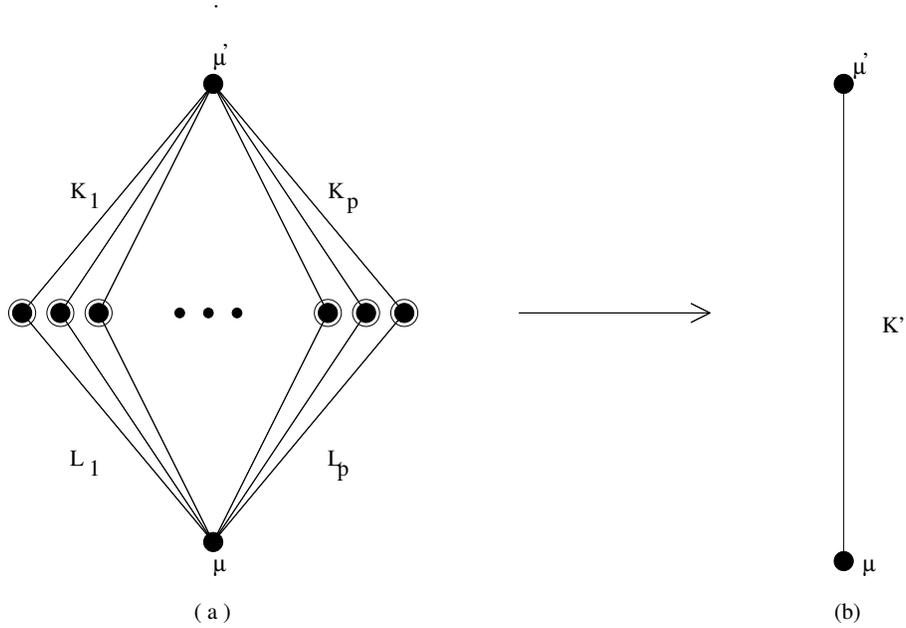


Figura 2.2: Processo de dizimação da rede diamante d-dimensional

Considere uma rede diamante com N hierarquias onde cada sítio possui uma variável de spin de Potts, que pode assumir q estados, ou seja $\sigma = 1, 2, 3, \dots, q$. Em cada célula básica introduzida na N -ésima hierarquia cada spin interno interage com spins raízes μ' e μ via as interações K_i e L_i . Para cada célula da rede com N hierarquias será fixado os valores das variáveis de spin dos sítios raízes μ' e μ , e feita a dizimação das variáveis de spin dos sítios internos de cada célula básica, introduzida na N -ésima geração. Desta maneira pode-se escrever o hamiltoniano de interação, de acordo com a equação (1.5):

Será fixado os sítios raízes μ' e μ , e será trabalhado os sítios internos da

célula básica.

$$\mathbf{H} = -\mathbf{q} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{J}_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (2.2)$$

onde \mathbf{q} é colocado na equação (2.2) com a finalidade de normalizar a energia com respeito ao número de estados.

Reescrevendo o hamiltoniano adimensional com o auxílio da equação (2.3):

$$\bar{\mathbf{H}} = -\beta \mathbf{H} = \mathbf{q} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{K}_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (2.3)$$

onde K_{ij} é descrito na equação (1.46).

A função de partição pode ser escrita:

$$\mathbf{Z} = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\mathbf{q} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{K}_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \right] \quad (2.4)$$

Para se obter a equação de renormalização do modelo, é necessário apenas o processo de dizimação apenas em uma célula básica como mostrado na seção 1.2 para o caso do modelo puro (ferromagnético).

Considerando uma célula básica e usando a notação introduzida na figura 2.2 onde as interações ocorrem através de K_i e L_i , pode-se reescrever a função de partição para a célula básica:

$$\mathbf{Z} = \sum_{\mu'} \sum_{\mu} \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_p} \prod_{i=1}^p \exp \{ \mathbf{q} [\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + \mathbf{L}_i \delta_{\sigma_i, \mu}] \} \quad (2.5)$$

A função de partição restrita para os valores fixos de μ e μ' é dada por:

$$\mathbf{Z}_{\mu' \mu} = \sum_{\sigma_1} \dots \sum_{\sigma_p} \prod_{i=1}^p \exp \{ \mathbf{q} [\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + \mathbf{L}_i \delta_{\sigma_i, \mu}] \}, \quad (2.6)$$

Sendo:

$$Z = \sum_{\mu' \mu} Z_{\mu' \mu}$$

Fazendo

$$Z_{\mu'\mu} = \sum_{\sigma_1} \exp \{q [K_1 \delta_{\sigma_1, \mu'} + L_1 \delta_{\sigma_1, \mu}]\} \\ \dots \sum_{\sigma_p} \exp \{q [K_p \delta_{\sigma_p, \mu'} + L_p \delta_{\sigma_p, \mu}]\},$$

chega-se à equação:

$$\mathbf{Z}_{\mu', \mu} = \prod_{i=1}^p \sum_{\sigma_i} \exp \{q [\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + \mathbf{L}_i \delta_{\sigma_i, \mu}]\} \quad (2.7)$$

Da mesma maneira como foi realizado para o caso ferromagnético, na seção **1.3**, será efetuado uma análise para os casos $\mu' = \mu$ e $\mu' \neq \mu$.

1. $\mu' = \mu$

A equação (2.7), resulta:

$$\mathbf{Z}_{\mu\mu} = \prod_{i=1}^p \sum_{\sigma_i} \exp \{q [\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu} + \delta_{\sigma_i, \mu}]\}, \quad (2.8)$$

onde

$$\delta_{\sigma_i, \mu} = \begin{cases} 1, & \text{se } \sigma_i = \mu \\ 0, & \text{se } \sigma_i \neq \mu \end{cases}$$

Para este caso a função de partição restrita resulta:

$$\mathbf{Z}_{\mu, \mu} = \prod_{i=1}^p \{(\mathbf{q} - \mathbf{1}) + \exp [q (\mathbf{K}_i + \mathbf{L}_i)]\} \quad (2.9)$$

2. $\mu' \neq \mu$

Têm-se agora as possibilidades:

$$\delta_{\sigma_i, \mu'} = \mathbf{1}, \quad \sigma_i = \mu' \quad \text{e} \quad \sigma_i \neq \mu \quad (2.10)$$

$$\delta_{\sigma_i, \mu} = \mathbf{1}, \quad \sigma_i = \mu \quad \text{e} \quad \sigma_i \neq \mu' \quad (2.11)$$

$$\delta_{\sigma_i, \mu} = \mathbf{0}, \quad \sigma_i \neq \mu \quad \text{e} \quad \sigma_i \neq \mu' \quad (2.12)$$

Aplicando as equações (2.10), (2.11) e (2.12) na equação (2.7), e realizando algumas manipulações têm-se a função de partição restrita para este caso:

$$\mathbf{Z}_{\mu', \mu} = \prod_{i=1}^p [(\mathbf{q} - \mathbf{2}) + \mathbf{exp}(\mathbf{q}\mathbf{K}_i) + \mathbf{exp}(\mathbf{q}\mathbf{L}_i)] \quad (2.13)$$

Aplicando o processo de dizimação da rede que seria o processo inverso daquele mostrado na figura 2.2, obtem-se para cada célula básica apenas os dois sítios raízes μ' e μ , com uma interação \mathbf{K}' . Desta maneira o hamiltoniano deste nível é da forma:

$$\overline{\mathbf{H}} = \mathbf{q}\mathbf{K}'\delta_{\mu', \mu} + \mathbf{constante}, \quad (2.14)$$

cuja partição para o sistema renormalizado:

$$\mathbf{Z}' = \sum_{\mu\mu'} \mathbf{Z}'_{\mu\mu'} = \sum_{\mu', \mu} \mathbf{exp}[\mathbf{q}\mathbf{K}'\delta_{\mu', \mu} + \mathbf{constante}] \quad (2.15)$$

onde

$$\mathbf{Z}'_{\mu', \mu} = \mathbf{A}\mathbf{exp}[\mathbf{q}\mathbf{K}'\delta_{\mu', \mu}], \quad (2.16)$$

onde \mathbf{A} é uma constante a determinar.

Analisando as duas possibilidades para μ' e μ , é possível calcular \mathbf{K}' e \mathbf{A} .

1. $\mu' = \mu$

$$\mathbf{Z}'_{\mu, \mu} = \mathbf{A}\mathbf{exp}(\mathbf{q}\mathbf{K}') \quad (2.17)$$

2. $\mu' \neq \mu$

$$\mathbf{Z}'_{\mu', \mu} = \mathbf{A} \quad (2.18)$$

considerando que a função de partição no sistema não renormalizado deve ser igual à do sistema renormalizado, teremos:

1. $\underline{\mu'} = \underline{\mu}$

Fazendo-se uso das equações (2.9) e (2.17), tem-se:

$$\mathbf{A} \exp(\mathbf{qK}') = \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \{(\mathbf{q} - 1) + \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_i + \mathbf{L}_i)]\} \quad (2.19)$$

2. $\underline{\mu'} \neq \underline{\mu}$

Utilizando das equações (2.13) e (2.18), chega-se:

$$\mathbf{A} = \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} [(\mathbf{q} - 2) + \exp(\mathbf{qK}_i) + \exp(\mathbf{qL}_i)] \quad (2.20)$$

Usando a equação (2.20) em (2.19), obtem-se:

$$\exp(\mathbf{qK}') = \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \frac{\{(\mathbf{q} - 1) + \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_i + \mathbf{L}_i)]\}}{[(\mathbf{q} - 2) + \exp(\mathbf{qK}_i) + \exp(\mathbf{qL}_i)]} \quad (2.21)$$

Rearrmando a equação (2.21), e lembrando-se que logaritmo do produto é igual a soma dos logaritmos, então chega-se à equação de renormalização para rede diamante d-dimensional, com interações aleatórias:

$$\mathbf{K}' = \frac{1}{\mathbf{q}} \sum_{i=1}^{\mathbf{p}} \ln \left\{ \frac{(\mathbf{q} - 1) + \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_i + \mathbf{L}_i)]}{(\mathbf{q} - 2) + \exp(\mathbf{qK}_i) + \exp(\mathbf{qL}_i)} \right\} \quad (2.22)$$

Vê-se que diferentemente da rede Bravais, a solução para a equação de renormalização na rede hierárquica, é exata.

O intuito agora é obter uma equação de renormalização para a transmissividade térmica, variável citada no primeiro capítulo deste trabalho em (1.64), onde é medida a correlação entre pares de spins.

Inicialmente tem-se:

$$\mathbf{t}_{\mathbf{K}_i} = \frac{1 - \exp(-\mathbf{qK}_i)}{1 + (\mathbf{q} - 1) \exp(-\mathbf{qK}_i)}, \quad (2.23)$$

e

$$\mathbf{t}_{\mathbf{L}_i} = \frac{1 - \exp(-\mathbf{qL}_i)}{1 + (\mathbf{q} - 1) \exp(-\mathbf{qL}_i)} \quad (2.24)$$

Rearrmando as equações (2.23) e (2.24), na forma:

$$\exp(\mathbf{qK}_i) = \frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i}}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i}} \quad (2.25)$$

$$\exp(\mathbf{qL}_i) = \frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}} \quad (2.26)$$

e aplicando-as na equação (2.21), obtem-se:

$$\frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}'}{\mathbf{1} - \mathbf{t}'} = \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \frac{(\mathbf{q} - \mathbf{1}) + \left[\frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i}}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i}} \right] \left[\frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}} \right]}{(\mathbf{q} - \mathbf{2}) + \frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i}}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i}} + \frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}}} \quad (2.27)$$

Efetuando as operações indicadas, chega-se à expressão:

$$\frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}'}{\mathbf{1} - \mathbf{t}'} = \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i} \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}}{\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i} \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}} \quad (2.28)$$

Resolvendo a equação (2.28) para \mathbf{t}' , chega-se à equação de renormalização para a transmissividade térmica:

$$\mathbf{t}' = \frac{\prod_{i=1}^{\mathbf{p}} [\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i} \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}] + \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} (\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i} \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i})}{\prod_{i=1}^{\mathbf{p}} [\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i} \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i}] + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} (\mathbf{1} - \mathbf{t}_{\mathbf{K}_i} \mathbf{t}_{\mathbf{L}_i})} \quad (2.29)$$

Pode-se escrever o acoplamento renormalizado em função da transmissividade térmica renormalizada, basta considerar:

$$\mathbf{t}' = \frac{\mathbf{1} - \exp(-\mathbf{qK}')}{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \exp(-\mathbf{qK}')} \quad (2.30)$$

Fazendo apenas algumas manipulações, chega-se à expressão:

$$\mathbf{K}' = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{q}} \ln \left[\frac{\mathbf{1} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \mathbf{t}'}{\mathbf{1} - \mathbf{t}'} \right] \quad (2.31)$$

De posse destes resultados como será mostrado na seção 2.2, a seguir, pode-se estudar as possíveis transições de fase do modelo num espaço de parâmetros apropriado.

2.2 Determinação da Temperatura Crítica: Método dos Reservatórios.

Como as interações K_i e L_i são variáveis aleatórias que obedecem a uma função de distribuição de probabilidades a determinação das possíveis transições de fase, ditadas pelas equações (2.22) e (2.29), devem ser feitas por métodos estocásticos.

O passo inicial é descrever a metodologia numérica utilizada, para iterar a equação (2.22). O método utilizado foi o método dos reservatórios, método este descrito em [28].

O método consiste em escolher uma distribuição inicial conhecida, as quais são citadas em [29], que nesta dissertação será uma das quatro mostradas nas equações abaixo:

1. Distribuição Delta-bimodal

$$\mathbf{P}(\mathbf{J}_{i,j}) = \frac{1}{2} [\delta(\mathbf{J}_{i,j} - \mathbf{1}) + \delta(\mathbf{J}_{i,j} + \mathbf{1})] \quad (2.32)$$

2. Distribuição Exponencial

$$\mathbf{P}(\mathbf{J}_{i,j}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-\sqrt{2} |\mathbf{J}_{i,j}|) \quad (2.33)$$

3. Distribuição Gaussiana

$$\mathbf{P}(\mathbf{J}_{i,j}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{J}_{i,j}^2\right) \quad (2.34)$$

4. Distribuição Uniforme

$$\mathbf{P}(\mathbf{J}_{i,j}) = \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{3}}, & \text{se } -\sqrt{3} \leq \mathbf{J}_{i,j} \leq \sqrt{3} \\ \mathbf{0}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.35)$$

Tais distribuições possuem média nula e variância unitária.

A partir da distribuição de probabilidades inicial são escolhidos de maneira aleatória os acoplamentos K_i e L_i , os quais serão aplicados na equação de renormalização (2.22) e gerar um acoplamento renormalizado. Este processo

é realizado um número suficiente de vezes até que se construa um banco de acoplamentos renormalizados para garantir que o processo estocástico seja estatisticamente decorrelacionado, o tamanho do banco de acoplamentos deve ser muitas vezes maior que o número de ligações da rede considerada. Este procedimento pode ser esquematizado na figura 2.3, abaixo:

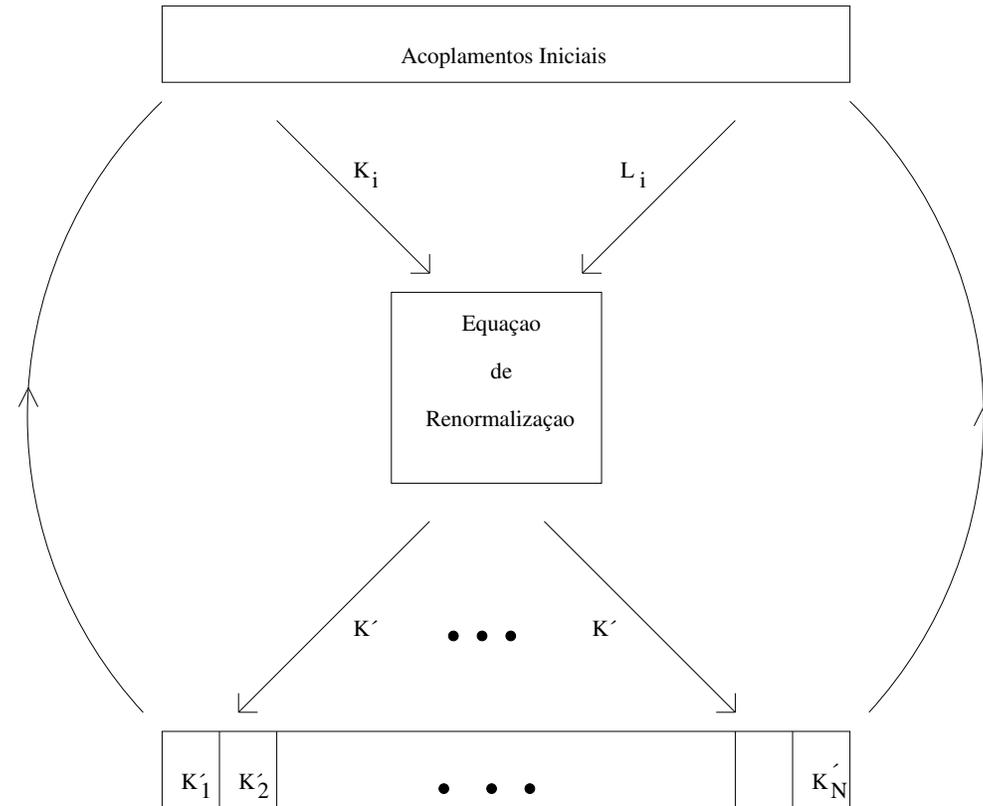


Figura 2.3: Ilustração do método dos reservatórios

No segundo passo da renormalização a distribuição inicial é substituída pelo banco dos acoplamentos renormalizados, e a partir dele o processo de escolha aleatória dos acoplamentos é novamente efetuado até ser gerado um novo banco que será novamente o reservatório para o novo passo do processo de renormalização. Desta maneira o processo é efetivado sucessivas vezes, o quanto for necessário.

Para se estudar as possíveis transições de fase do modelo, investiga-se a

evolução, sob renormalização, da variância das distribuições renormalizadas de acoplamentos e da transmissividade.

A temperatura renormalizada é obtida tomando-se o inverso do desvio padrão dos acoplamentos renormalizados, isto é,

$$k_B T = \frac{1}{\sqrt{\overline{K^2} - \overline{K}^2}}, \quad (2.36)$$

onde é tomada a média configuracional de K^2 e o quadrado da média configuracional de K .

E a variância da transmissividade é obtida fazendo-se:

$$\Delta = \overline{t_{ij}^2} - \overline{t_{ij}}^2. \quad (2.37)$$

O objetivo é construir um espaço de parâmetros apropriado que é justamente composto pela variância da transmissividade térmica em função da temperatura renormalizada. Neste espaço de parâmetros a partir de um dado valor de temperatura inicial o processo de renormalização faz com que a temperatura flua para uma das bacias de atração dos pontos fixos estaveis das fases paramagnética e condensada.

Desta maneira, é possível construir um diagrama de fluxo a partir das quatro distribuições iniciais escolhidas, conforme é visto na figura 2.4 para o caso do modelo com $q = 3$ e $d_F = 5$.

Nos diagramas de fluxo apresentados na figura 2.4, para cada distribuição inicial (equações (2.32)-(2.35)), foram escolhidas duas temperaturas iniciais próximas, mas distintas em relação à direção do fluxo de renormalização. Para o valor menor o fluxo evolui para o ponto-fixa da fase condensada, enquanto para o valor maior evolui para a fase paramagnética. A transição de fases existe para o modelo quando este comportamento é observado. O valor da temperatura crítica é obtido numericamente, quando se observa a mudança de comportamento do fluxo. Na figura 2.5, apresentamos a ampliação da região crítica do diagrama da figura 2.4. Observa-se claramente que o espaço de parâmetros $\Delta \times T$ está dividido em duas regiões correspondentes às bacias de atração dos respectivos pontos-fixos, estando o ponto crítico (ponto-fixa instável) localizado na fronteira entre as duas bacias de atração.

Na tabela 2.1, apresentaremos os intervalos da temperatura que contem a temperatura crítica da transição de fases (quando houver) para o modelo com que $q = 2$ (Ising), 3 e 4 e várias dimensões (inteiras) da rede hierárquica diamante com fator de escala $b = 2$.

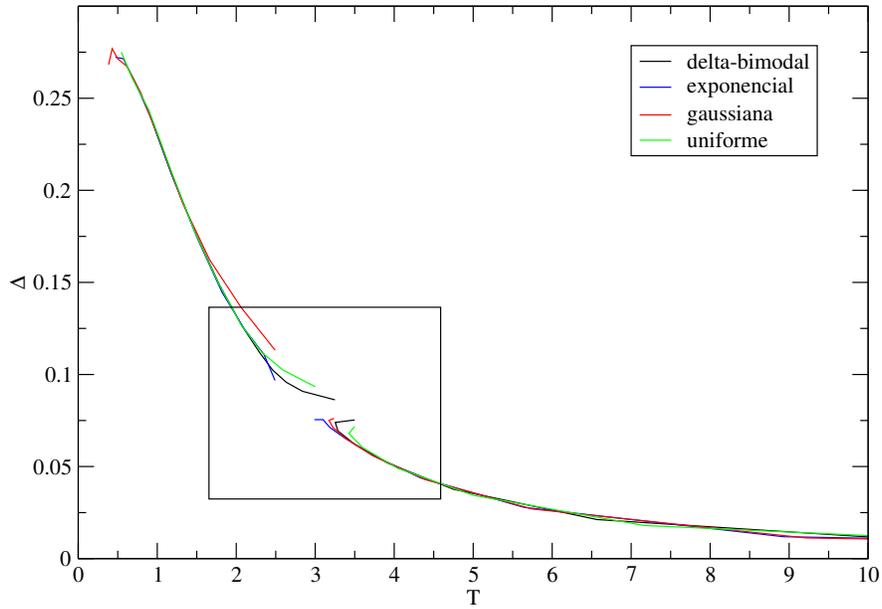


Figura 2.4: Diagrama de fluxo mostrando a variância da transmissividade térmica em função da temperatura renormalizada, para $q = 3$ e $d = 5$, tomando-se as quatro distribuições iniciais, delta-bimodal, exponencial, gaussiana e uniforme.

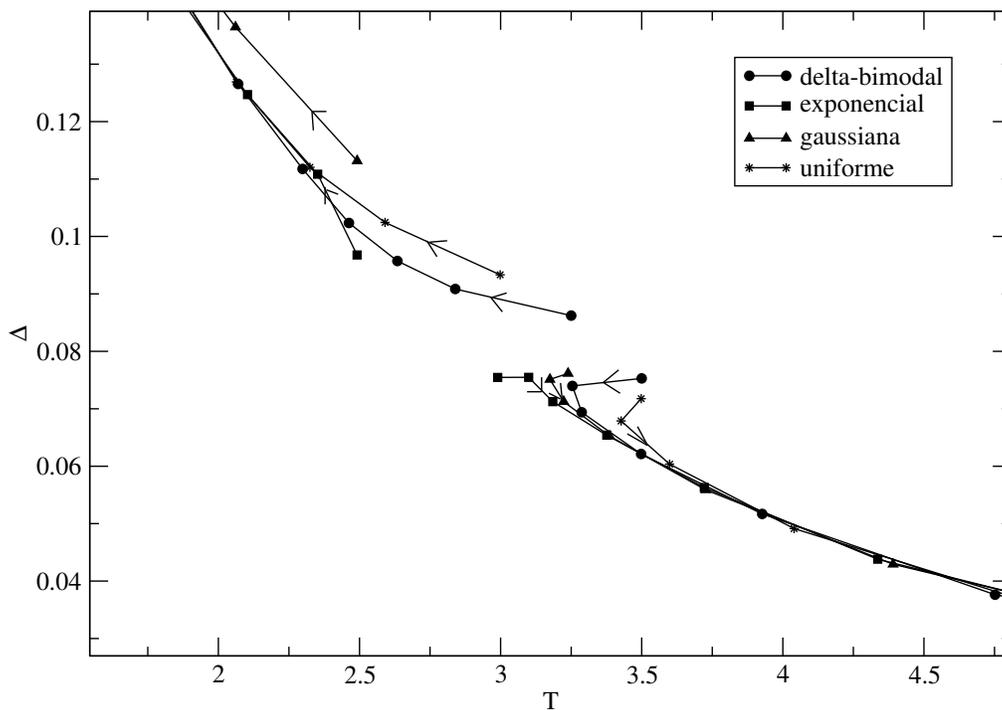


Figura 2.5: Ampliação da região onde ocorre o ponto crítico para $q = 3$, $d = 5$, para as quatro distribuições iniciais, delta-bimodal, exponencial, gaussiana e uniforme.

Os resultados para o caso $q = 2$, que corresponde ao modelo de Ising estão de acordo com prévios reportados na literatura [18].

O caso $q = 3$, também reproduz os resultados prévios obtidos em [31], usando a mesma metodologia, como mostrado na figura 2.6, abaixo.

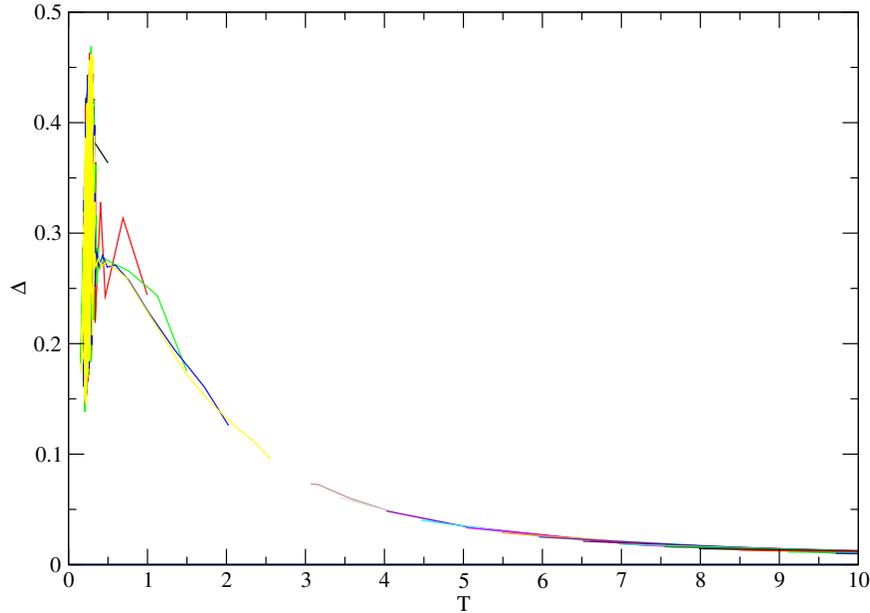


Figura 2.6: Variância da transmissividade térmica versus temperatura, 100 iterações; 1000000 amostras; $q = 3$; $d = 5$;

Observando, ainda, na figura 2.6 que, para baixas temperaturas o fluxo em direção ao atrator da fase ordenada ocorre através de grandes flutuações até ficar em um “atrator”, como será discutido mais adiante. Este comportamento foi observado por Banavar e Bray [30] porém com um número de interações pequeno e em outro espaço de parâmetros que não apresenta o atrator observado neste trabalho [33].

Ampliando o intervalo o intervalo de parâmetros do modelo investigado, na tabela I em [30] consideramos o caso $q = 4$ e $D_F = 6$ mostrando que a transição de fases ocorre, como mostrado na figura 2.7 [33], com as mesmas características.

Com isto tornou-se possível acrescentar mais um resultado a uma tabela descrita em [31], a qual mostra os valores de temperatura crítica obtidos pelo processo mesmo processo que foi utilizado neste trabalho, como mostrado na tabela 2.1.

Nos diagramas de fluxo mostrados nas figuras 2.6 e 2.7, fica evidente pelo comportamento do fluxo a distinção entre as fases condensada e paramagnética, assim como intervalo de temperatura em que se encontra a transição de fase.

Neste trabalho o processo de renormalização foi iterado cerca de 100000 vezes. Estudo semelhante para se investigar o fluxo foi efetivado por Camelo Neto e algumas propriedades foram observadas, diferentes daquelas observadas no trabalho de Banavar e Bray [30], que serão discutidas mais adiante. Em [31] foram consideradas três distribuições de probabilidade para os acoplamentos. Neste trabalho, acrescentamos a distribuição e ampliamos o estudo do fluxo para outras dimensões da rede e valores de q .

Em particular, investigamos qual seria limite inferior, isto é, a dimensão crítica inferior, em que ocorre a transição de fases para $q = 3$ e $q = 4$.

Por inspeção do comportamento do fluxo, como pode ser visto nas figuras 2.8 a 2.11 para o caso $q = 4$ e $d_F = 5,08746$, a dimensão crítica inferior para o modelo com $q = 2, 3, 4, 5$ e 6 pode ser analisada através da figura 2.12 onde apresentamos valores de d_F onde a transição é observada e valores onde não foi observada, para cada valor de q . Assinalamos também os valores inteiros de d_F onde a transição foi observada e a temperatura crítica estimada e mostrada na tabela 2.1. Na tabela 2.2, mostramos os intervalos onde deve-se situar a dimensão crítica inferior do modelo, bem como o valor do número de conexões da rede correspondente:

O resultado desse estudo indica a um valor de saturação o que seria bastante interessante, pois levaria a crer na existência de uma dimensão, acima da qual haveria transição para qualquer número de estados q .

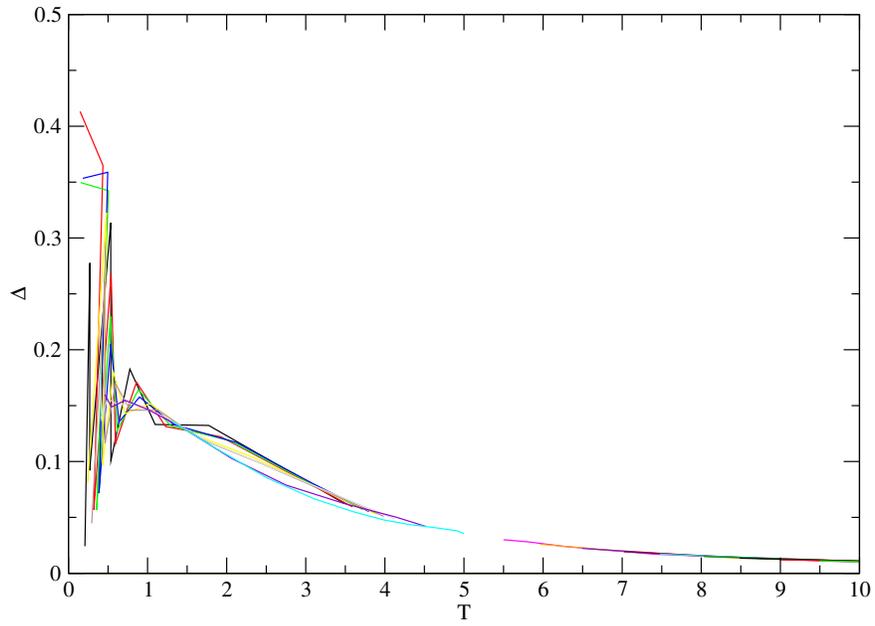


Figura 2.7: Variância da transmissividade térmica versus temperatura, 10 iterações; 100000 amostras; $q = 4$; $d = 6$;

		Temperaturas Críticas		
		$q = 2$	$q = 3$	$q = 4$
Bimodal	$d = 3$	1.13 – 1.15	-	-
	$d = 4$	2.29 – 2.32	-	-
	$d = 5$	3.63 – 3.66	3.34 – 3.37	-
	$d = 6$	5.40 – 5.43	5.24 – 5.27	5.40 – 5.44
Gaussiana	$d = 3$	0.87 – 0.90	-	-
	$d = 4$	2.07 – 2.10	-	-
	$d = 5$	3.47 – 3.50	3.10 – 3.13	-
	$d = 6$	5.28 – 5.31	5.08 – 5.13	5.27 – 5.31
Uniforme	$d = 3$	0.98 – 1.02	-	-
	$d = 4$	2.19 – 2.22	-	-
	$d = 5$	3.57 – 3.60	3.23 – 3.26	-
	$d = 6$	5.36 – 5.39	5.17 – 5.22	5.36 – 5.39
Distribuição Exponencial	$d = 3$	0.8 – 0.9	-	-
	$d = 4$	2.0 – 2.1	-	-
	$d = 5$	3.4 – 3.5	2.86 – 2.89	-
	$d = 6$	5.25 – 5.35	4.95 – 5.0	4.6 – 4.7

Tabela 2.1: Valores de temperatura crítica para diversos valores de q e d , para as distribuições: Delta-bimodal, Gaussiana, Exponencial e Uniforme.

q	2 (Ising)	3	4	5	6
d_F	2.51 * – 2.585	4.459 – 4.585	5 – 5.08746	5.523 – 5.459	5.7 – 5.754
p	2 – 3	11 – 12	16 – 17	22 – 23	26 – 27

Tabela 2.2: Intervalo de valores contendo a dimensão crítica inferior para o modelo de Potts vítreo com q -estados. Na linha d_F o valor inferior corresponde à dimensão onde a transição não foi observada enquanto o valor superior corresponde à dimensão onde a transição foi observada. A linha p indica o número de conexões da rede hierárquica diamante com fator de escala $b = 2$ correspondente. (*) ver [19]

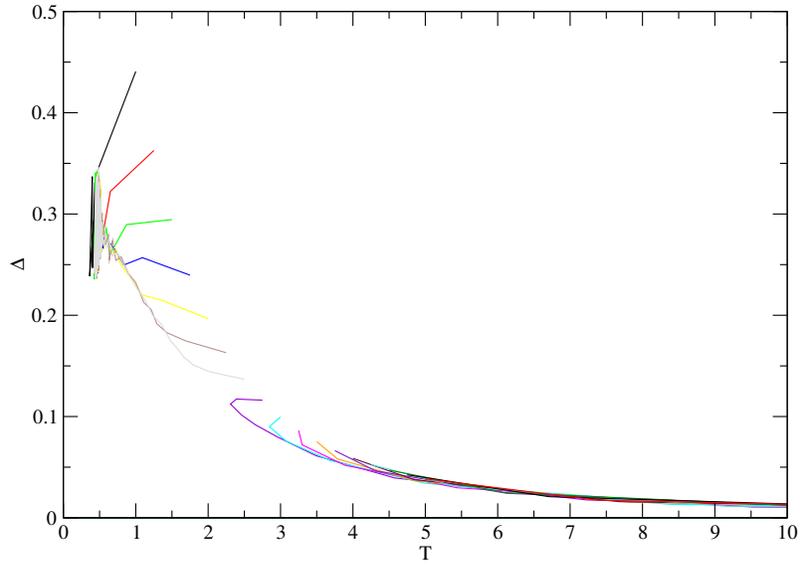


Figura 2.8: Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição delta-bimodal, para $q = 4$, $d = 5.08746$.

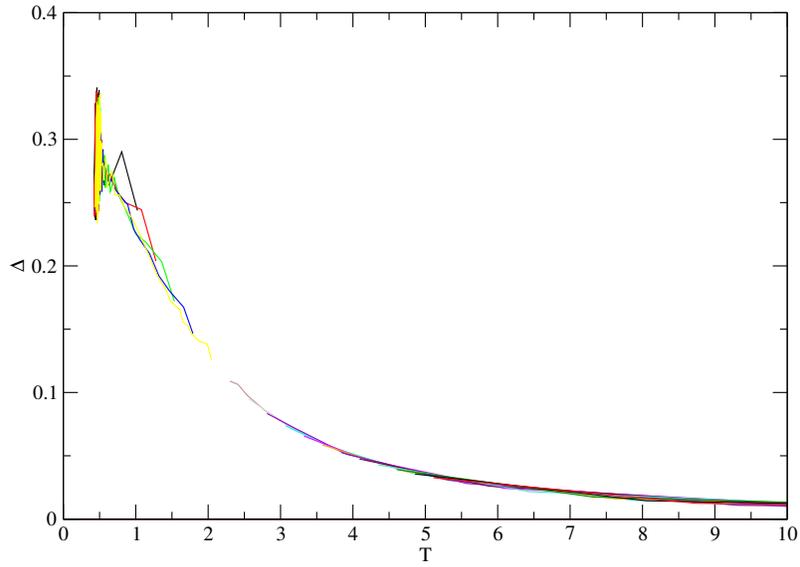


Figura 2.9: Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição exponencial, para $q = 4$, $d = 5.08746$.

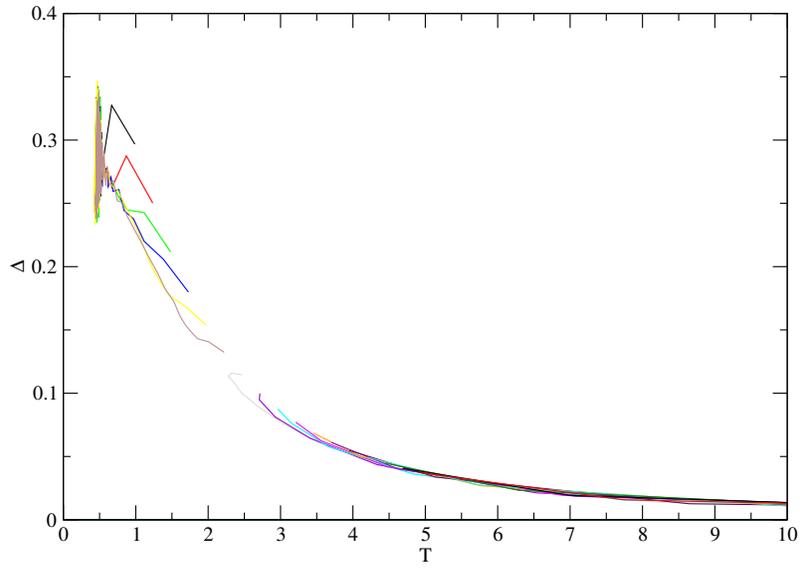


Figura 2.10: Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição gaussiana, para $q = 4$, $d = 5.08746$.

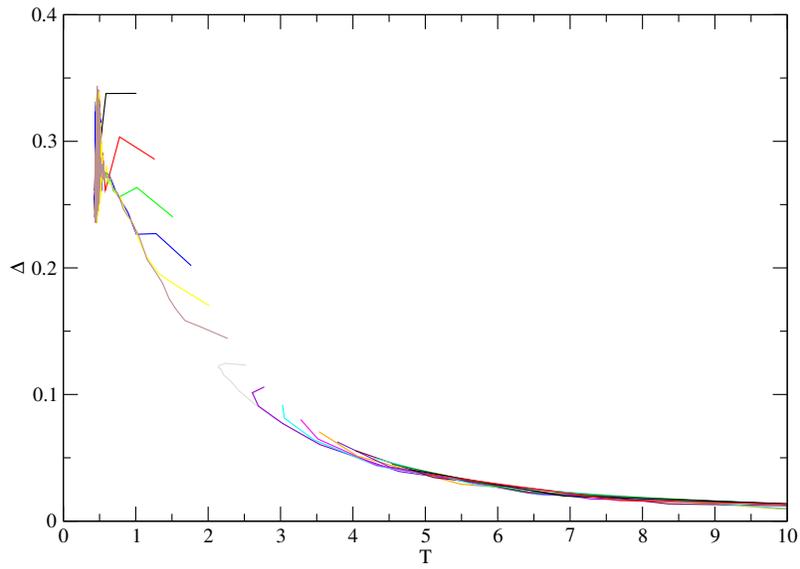


Figura 2.11: Variância da transmissividade versus temperatura renormalizada. Distribuição uniforme, para $q = 4$, $d = 5.08746$.

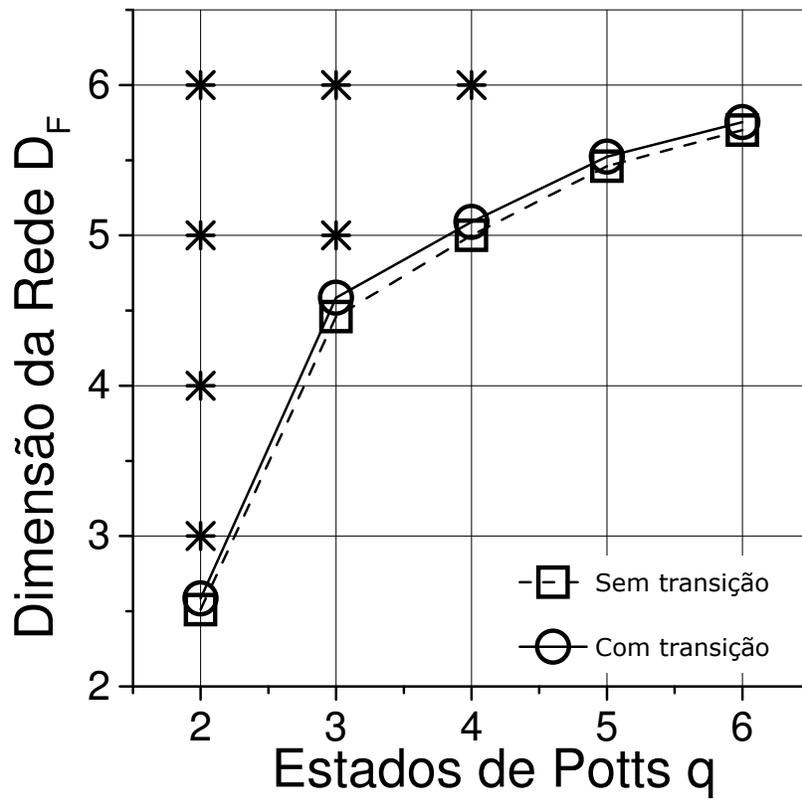


Figura 2.12: Dimensão crítica versus número de estados

É interessante ainda mostrar o comportamento das distribuições iniciais quando a temperatura é suficientemente baixa, ou seja será estudado o limite em que $T \rightarrow 0$.

Foi efetuado os cálculos para distribuição delta-bimodal, tal distribuição é citada na equação (2.32). Inicialmente tem-se:

$$\overline{t_{ij}} = \int dJ_{ij} t_{ij} P(J_{ij}) \quad (2.38)$$

$$\overline{t_{ij}^2} = \int dJ_{ij} t_{ij}^2 P(J_{ij}) \quad (2.39)$$

Aplicando-se agora a equação (1.64) na equação (2.38), têm-se:

$$\overline{t_{ij}} = \int_{-1}^1 dJ_{ij} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{-qJ_{ij}}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{-qJ_{ij}}{k_B T}\right)} \right] \frac{1}{2} [\delta(J_{ij} - 1) + \delta(J_{ij} + 1)] \quad (2.40)$$

Usando a propriedade da função delta,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \delta(x - a) = f(a), \quad (2.41)$$

na equação (2.40), então chega-se à equação:

$$\overline{t_{ij}} = \frac{1}{2} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)} + \frac{1 - \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)} \right] \quad (2.42)$$

Agora tomando-se o quadrado da equação (2.42), tem-se:

$$\begin{aligned} \overline{t_{ij}^2} &= \frac{1}{4} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)} \right]^2 + \frac{1}{4} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)} \right]^2 + \\ &\frac{1}{2} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)} \right] \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)} \right] \end{aligned} \quad (2.43)$$

Agora aplicando-se a equação (1.64) na equação (2.39), obtem-se

$$\overline{t_{ij}^2} = \int_{-1}^1 dJ_{ij} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{-qJ_{ij}}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{-qJ_{ij}}{k_B T}\right)} \right]^2 \frac{1}{2} [\delta(J_{ij} - 1) + \delta(J_{ij} + 1)] \quad (2.44)$$

Usando a definição (2.41) na equação (2.44), chega-se à equação:

$$\overline{t_{ij}^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right)} \right]^2 + \frac{1}{2} \left[\frac{1 - \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)}{1 + (q-1) \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right)} \right]^2 \quad (2.45)$$

Aplicando-se as equações (2.43) e (2.45) à equação (2.37), chega-se à equação:

$$\begin{aligned} \Delta = & \frac{1}{4} \left[\frac{1 - 2\exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{-2q}{k_B T}\right)}{1 + 2(q-1) \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right) + (q-1)^2 \exp\left(\frac{-2q}{k_B T}\right)} \right] + \\ & \frac{1}{4} \left[\frac{1 - 2\exp\left(\frac{q}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{2q}{k_B T}\right)}{1 + 2(q-1) \exp\left(\frac{q}{k_B T}\right) + (q-1)^2 \exp\left(\frac{2q}{k_B T}\right)} \right] - \\ & \left[\frac{1 - \cosh\left(\frac{q}{k_B T}\right)}{1 + 2(q-1) \cosh\left(\frac{q}{k_B T}\right) + (q-1)^2} \right] \end{aligned} \quad (2.46)$$

Tomando-se o limite em $T \rightarrow 0$, na equação (2.46), tem-se:

$$\begin{aligned} \Delta = & \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \lim_{T \rightarrow 0} \left[\frac{1 - 2\exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right) + \exp\left(\frac{2q}{k_B T}\right)}{1 + 2(q-1) \exp\left(\frac{-q}{k_B T}\right) + (q-1)^2 \exp\left(\frac{2q}{k_B T}\right)} \right] \\ & \frac{1}{2} \lim_{T \rightarrow 0} \left[\frac{1 - \cosh\left(\frac{q}{k_B T}\right)}{1 + 2(q-1) \cosh\left(\frac{q}{k_B T}\right) + (q-1)^2} \right] \end{aligned} \quad (2.47)$$

Para calcular o limite de $T \rightarrow 0$, foi bastante simples. Para os dois outros membros da equação (2.47), aplicando a regra de L'Hospital,

$$\Delta = \frac{1}{4} \left[1 + \frac{1}{(q-1)^2} \right] + \frac{1}{2(q-1)}. \quad (2.48)$$

Fazendo-se um teste para $q = 2$, tem-se; $\Delta = 1$, como obtido em [35] e para $q = 3$, obtem-se:

$$\Delta = 0.5625. \quad (2.49)$$

Este resultado é também verificado quando efetuada uma simulação numérica para as outras distribuições iniciais, no limite de $T \rightarrow 0$, conforme é mostrado no gráfico da figura 2.13.

Nesta seção foi desenvolvida a metodologia para a obtenção da temperatura crítica do modelo de Potts vítreo com q estados, partindo de quatro distribuições iniciais escolhidas à priori. Também foi pesquisado a dimensão crítica d_c inferior dimensão limite em que ocorre transição de fases, para os valores de q , verificando que há indícios da existência de um valor superior para $d_c(q)$ acima do qual haverá transição para qualquer valor de q .

Os valores de temperatura crítica encontrados serão bastante importantes na obtenção dos expoentes críticos que caracterizarão a transição de fases, o qual serão discutidos no próximo capítulo.

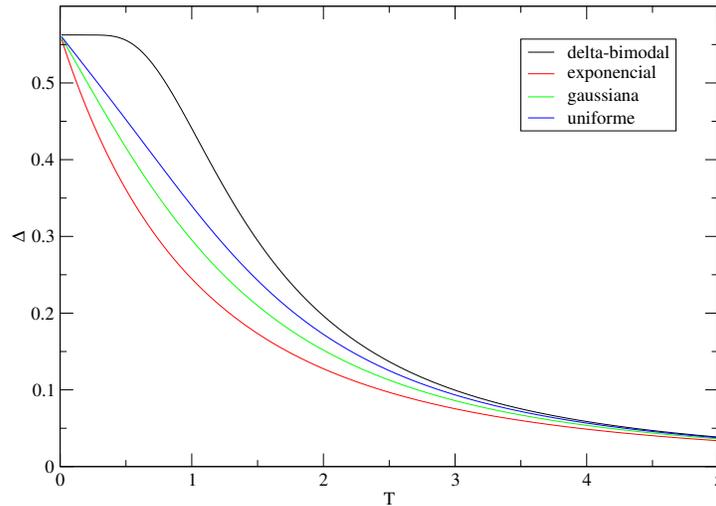


Figura 2.13: Comportamento da variância das distribuições iniciais versus temperatura em $q = 3$.

2.3 A Fase Condensada

Nesta seção será efetuada uma abordagem qualitativa da fase condensada. Como já havia discutido na seção anterior, este trabalho foi tratado em [31], onde observou-se que o fluxo, no espaço $\Delta \times T$, em direção ao ponto-fixo da fase condensada apresenta um comportamento aleatório, partindo-se das distribuições de probabilidade iniciais consideradas.

Neste trabalho confirmamos que a partir da distribuição exponencial este comportamento também é observado, como pode ser visto na figura 2.14.

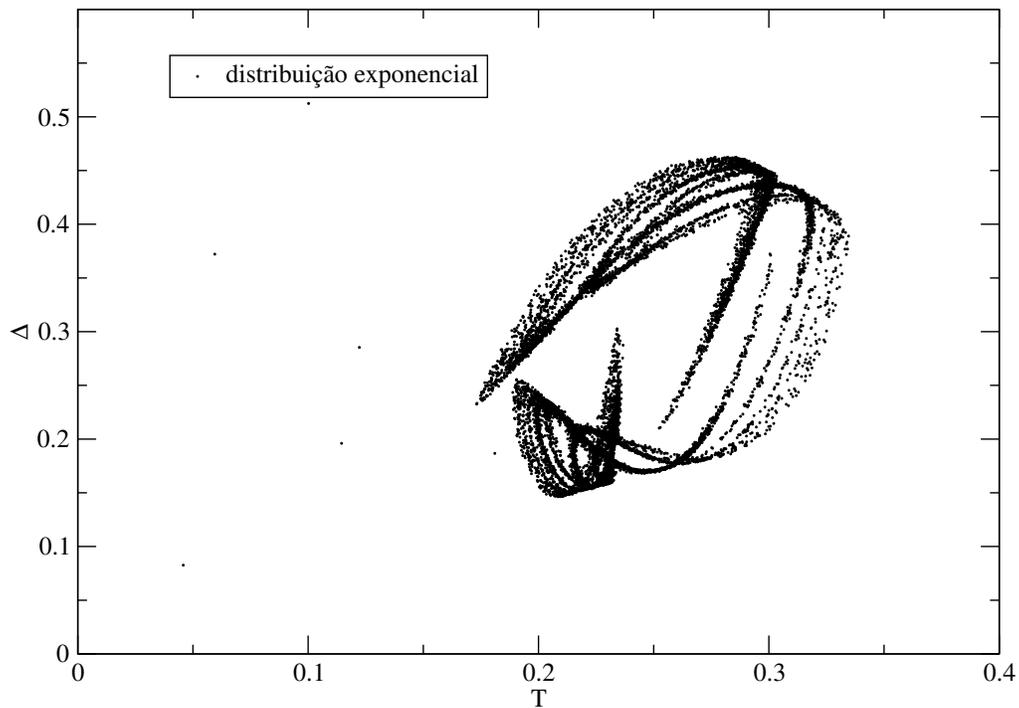


Figura 2.14: Transmissividade térmica versus temperatura renormalizada, 1000 amostras; 100000 iterações; $q = 3$; $d = 5$;

O comportamento oscilatório do fluxo em direção ao ponto-fixo da fase condensada foi observado por Banavar e Bray [30], porém em outro espaço de parâmetros sem observar este comportamento na figura 2.14.

Nesta figura faz-se uma ampliação da região onde o fluxo fica confinado oscilando até formar a figura que se assemelha a um “atrator estranho” tal como ocorre nos mapas dinâmicos que apresentam caos.

Em [30] foram realizadas cerca de 10000 iterações, usando a distribuição gaussiana como distribuição inicial. Segundo esses autores tal fenômeno é decorrente da competição entre a entropia e a energia das interações aleatórias [30].

Capítulo 3

Comportamento Crítico do Parâmetro de Ordem

Este capítulo será dedicado a obtenção dos expoentes críticos que caracterizam a transição de fases do modelo de Potts vítreo com q-estados definido nas redes hierárquicas diamante. As grandezas termodinâmicas, tais como susceptibilidade, calor específico, magnetização etc, apresentam divergências, ou exibem singularidades no ponto crítico, as quais podem ser caracterizadas por lei de potência quando se aproxima do ponto crítico.

Por exemplo em um sistema ferromagnético, a magnetização em função da temperatura, de acordo com [4], pode ser escrita como:

$$\mathbf{m} \propto \left| \frac{\mathbf{T} - \mathbf{T}_c}{\mathbf{T}_c} \right|^\beta, \quad (3.1)$$

partindo-se de uma temperatura abaixo de T_c , a campo nulo, onde T_c representa a temperatura crítica.

Da mesma maneira pode ser mostrado [4] que o comportamento do comprimento de correlação em função da temperatura nas proximidades do ponto crítico, pode ser escrito como,

$$\xi \propto \left| \frac{\mathbf{T} - \mathbf{T}_c}{\mathbf{T}_c} \right|^{-\nu} \quad (3.2)$$

Usando-se a equação (3.1) em (3.2), chega-se a uma importante relação:

$$\mathbf{m} \propto \xi^{\frac{-\beta}{\nu}} \quad (3.3)$$

Para o caso do modelo de vidro-de-spins de Ising [18] uma análise correspondente para o parâmetro de ordem de Edward-Anderson, definido na equação (1.85) é realizado. Neste caso, tem-se:

$$\mathbf{q}_{\text{EA}} \propto \left| \frac{\mathbf{T}_c - \mathbf{T}}{\mathbf{T}_c} \right|^\beta, \quad (3.4)$$

onde \mathbf{T} é a temperatura medida abaixo de T_c .

No ponto crítico, para um sistema com um tamanho finito (porém grande) o comprimento de correlação ξ alcança todo sistema, isto é,

$$\xi \sim \mathbf{L} \quad (3.5)$$

Utilizando-se a equação (3.2) em (3.4), e considerando um sistema de tamanho finito, no ponto crítico pode ser feito uso da equação (3.5), resultando:

$$\mathbf{q}_{\text{EA}} \sim \mathbf{L}^{-\frac{\beta}{\nu}}, \quad (3.6)$$

que mostra que o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson no ponto crítico obedece a uma lei de escala (com o tamanho da rede) segundo um expoente $\left(-\frac{\beta}{\nu}\right)$.

Existe, ainda, um conjunto de relações que conectam os expoentes críticos, uns aos outros. Estas relações são conhecidas na literatura como relações de escala, pois somente dois expoentes são independentes, os outros expoentes podem ser determinados a partir destes dois.

Nesta dissertação, investigaremos o comportamento crítico do parâmetro de ordem do modelo em função da temperatura para determinar o expoente crítico β associado. Em seguida, analisa-se o comportamento de escala no ponto crítico para determinar $\left(\frac{\beta}{\nu}\right)$, e conseqüentemente estimar o valor de ν .

3.1 Cálculo da magnetização local. Método exato.

Nesta seção será exposto o cálculo das relações de recorrência para o cálculo da magnetização local do modelo de Potts desordenado, na rede hierárquica do tipo diamante, método este desenvolvido por Ladário *et al* em [16]. De posse dessa magnetização será possível obter relações com o

parâmetro de ordem de Edwards-Anderson com o objetivo de conseguir os expoentes críticos que neste trabalho serão os expoentes β e ν , os demais expoentes podem ser obtidos pelas leis de escala bem conhecidas na literatura, considerando, por hipótese, que são válidas para o modelo em questão.

Inicialmente será considerada uma célula básica da rede hierárquica do tipo diamante com d dimensões e fator de escala $b = 2$, parte de uma rede maior, ou seja, uma rede de alta hierarquia. Então conforme é visto na figura 3.1 os sítios raízes, μ' e μ , serão submetidos a ação dos campos $h_{\mu'}$ e h_{μ} estes campos simularão os efeitos do restante da rede sobre esta célula básica, assim como o efeito de interação efetiva entre os sítios raízes via o restante da rede através da interação λ .

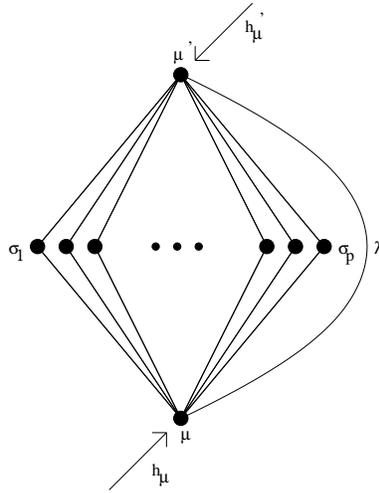


Figura 3.1: Efeitos da rede hierárquica diamante sob a sua célula básica.

De posse destas considerações pode-se construir o hamiltoniano de interação, do modelo equivalente:

$$-\beta\mathbf{H} = \mathbf{q} \sum_{i=1}^{\mathbf{p}} (\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + \mathbf{L}_i \delta_{\sigma_i, \mu}) + \lambda \delta_{\mu', \mu} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu', 0} + \mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu, 0} \quad (3.7)$$

Na equação (3.7) é considerada a existência de um estado privilegiado devido aos campos $h_{\mu'}$ e h_{μ} .

Considerando a função de partição canônica.

$$\mathbf{Z} = \sum_{\{\mu, \sigma\}} \exp[-\beta \mathbf{H}(\mathbf{H}\{\mu, \sigma\})] \quad (3.8)$$

Usando a expressão de H dada pela equação (3.7) na equação (3.8), é obtido:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} &= \sum_{\{\mu\}} \exp(\lambda \delta_{\mu', \mu}) \exp(\mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu', \mathbf{0}}) \exp(\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu, \mathbf{0}}) \times \\ &\times \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[\mathbf{q} \sum_{i=1}^p (\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + \mathbf{L}_i \delta_{\sigma_i, \mu}) \right]. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Lembrando a função de partição restrita definida em (2.6), então a equação (3.9) pode ser escrita:

$$\mathbf{Z} = \sum_{\{\mu\}} \exp(\lambda \delta_{\mu', \mu}) \exp(\mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu', \mathbf{0}}) \exp(\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu, \mathbf{0}}) \mathbf{Z}_{\mu', \mu} \quad (3.10)$$

com:

$$Z_{\mu\mu'} = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[q \sum_{i=1}^p (K_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + L_i \delta_{\sigma_i, \mu}) \right]$$

A função de partição restrita, foi calculada anteriormente (vide equações (2.9) e (2.12)), com as devidas condições apropriadas. Definindo

$$\phi_1^i = (\mathbf{q} - \mathbf{1}) + \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_i + \mathbf{L}_i)] \quad (3.11)$$

$$\phi_2^i = (\mathbf{q} - \mathbf{2}) + \exp(\mathbf{q}\mathbf{K}_i) + \exp(\mathbf{q}\mathbf{L}_i) \quad (3.12)$$

e usando nas equações (2.9) e (2.12), obtem-se as funções de partição restrita para os dois casos:

1. $\mu' = \mu$

$$\mathbf{Z}_{\mu, \mu} = \prod_{i=1}^p \phi_1^i \quad (3.13)$$

2. $\mu' \neq \mu$

$$\mathbf{Z}_{\mu', \mu} = \prod_{i=1}^p \phi_2^i \quad (3.14)$$

Utilizando as equações (3.13) e (3.14) na equação (3.10) tem-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} = & \sum_{\mu'=0}^{q-1} \sum_{\mu=0}^{q-1} \exp(\lambda \delta_{\mu',\mu} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu,0}) \prod_{i=1}^p \phi_1^i + \\ & + \sum_{\substack{\mu'=0 \\ \mu' \neq \mu}}^{q-1} \sum_{\mu=0}^{q-1} \exp(\lambda \delta_{\mu',\mu} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu,0}) \prod_{i=1}^p \phi_2^i \end{aligned} \quad (3.15)$$

Sendo:

$$\delta_{\mu',\mu} = \begin{cases} 1 & \text{se } \mu' = \mu \\ 0 & \text{se } \mu' \neq \mu \end{cases}$$

Então tem-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} = & \sum_{\substack{\mu'=0 \\ \mu' = \mu}}^{q-1} \exp(\lambda) \exp[(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu})] \delta_{\mu,0} \prod_{i=1}^p \phi_1^i + \\ & + \sum_{\substack{\mu'=0 \\ \mu' \neq \mu}}^{q-1} \sum_{\mu=0}^{q-1} \exp(\mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0}) \exp(\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu,0}) \prod_{i=1}^p \phi_2^i \end{aligned} \quad (3.16)$$

Lembrando que $h_{\mu'}$ e h_{μ} denotam apenas os campos atuando nos sítios raízes μ' e μ , então quando $\mu = 0$ tem-se a contribuição:

$$\exp(h_{\mu'})$$

e nas outras $(q-1)$ possibilidades tem-se $\exp(0) = 1$. Desta maneira obtêm-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} = & \exp(\lambda) \prod_{i=1}^p \phi_1^i \left[\exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu}) + \underbrace{1 + \dots + 1}_{(q-1)\text{ fatores}} \right] + \\ & + \sum_{\substack{\mu'=0 \\ \mu' \neq \mu}}^{q-1} \sum_{\mu=0}^{q-1} \exp(\mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0}) \exp(\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu,0}) \prod_{i=1}^p \phi_2^i \end{aligned} \quad (3.17)$$

No segundo membro da equação (3.17), quando $\mu' = 0$ tem-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} = & [(\mathbf{q} - 1) + \mathbf{exp}(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu})] \mathbf{exp}(\lambda) \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \phi_1^i + \\ & + \left[\mathbf{exp}(\mathbf{h}_{\mu'}) \sum_{\mu=1}^{\mathbf{q}-1} \mathbf{1} + \sum_{\substack{\mu'=0 \\ \mu' \neq \mu}}^{\mathbf{q}-1} \sum_{\mu=1}^{\mathbf{q}-1} \mathbf{exp}(\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu,0}) \right] \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \phi_2^i \end{aligned} \quad (3.18)$$

Efetuada as somas e usando as equações (3.19) e (3.20), definidas abaixo:

$$\Phi_1 = \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \phi_1^i \quad (3.19)$$

$$\Phi_2 = \prod_{i=1}^{\mathbf{p}} \phi_2^i \quad (3.20)$$

Chega-se à expressão para a função de partição:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} = & [(\mathbf{q} - 1) + \mathbf{exp}(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu})] \mathbf{exp}(\lambda) \Phi_1 + \\ & + (\mathbf{q} - 1) [\mathbf{exp}(\mathbf{h}_{\mu'}) + \mathbf{exp}(\mathbf{h}_{\mu}) + (\mathbf{q} - 2)] \Phi_2 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Definimos a magnetização local para o modelo de Potts, como sendo

$$\mathbf{m}_i = \frac{\mathbf{q} \langle \delta_{s_i,0} \rangle - 1}{\mathbf{q} - 1}, \quad (3.22)$$

onde escolhemos o estado $s_i = 0$, para representar a quebra de simetria do sistema.

Desta maneira para calcular a magnetização do i -ésimo sítio da rede precisa-se calcular a média termodinâmica $\langle \delta_{s_i,0} \rangle$ dada por:

$$\langle \delta_{\mu,0} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{h}_{\mu}} \quad (3.23)$$

e,

$$\langle \delta_{\mu',0} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{h}_{\mu'}} \quad (3.24)$$

Fazendo uso da equação (3.21), e substituindo-a em (3.23) e (3.24), têm-se:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu,0} \rangle = \Phi_1 \exp(\lambda) \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu}) + (\mathbf{q} - 1) \Phi_2 \exp(\mathbf{h}_{\mu}) \quad (3.25)$$

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu',0} \rangle = \Phi_1 \exp(\lambda) \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu}) + (\mathbf{q} - 1) \Phi_2 \exp(\mathbf{h}_{\mu'}) \quad (3.26)$$

O problema agora é calcular a magnetização dos sítios internos da célula básica. Neste ponto será necessário usar o peso de Boltzmann para calcular as médias termodinâmicas necessárias, ou seja:

$$\mathbf{P} = \frac{\exp(-\beta\mathbf{H})}{\mathbf{Z}} \quad (3.27)$$

Que desta forma, obtém-se:

$$\langle \mathbf{f}(\{\mu, \sigma\}) \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\mu, \sigma\}} \mathbf{f}(\{\mu, \sigma\}) \exp[-\beta\mathbf{H}(\{\mu, \sigma\})]. \quad (3.28)$$

Fazendo uso da equação (3.28), será possível calcular a média termodinâmica $\langle \delta_{\sigma_j,0} \rangle$. Desta maneira usando-se a equação (3.9) em (3.28), tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_j,0} \rangle &= \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\mu, \sigma\}} \delta_{\sigma_j,0} \exp[h_{\mu} \delta_{\mu,0} + h_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \lambda \delta_{\mu',\mu} + \\ &\quad + q \sum_{i=1}^p (K_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + L_i \delta_{\sigma_i, \mu})]. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Definindo:

$$\psi_j(\mu', \mu) = \sum_{\{\sigma\}} \delta_{\sigma_j,0} \exp \left[\mathbf{q} \sum_{i=1}^p (\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + \mathbf{L}_i \delta_{\sigma_i, \mu}) \right], \quad (3.30)$$

e substituindo na equação (3.29), chega-se à expressão:

$$\langle \delta_{\sigma_j,0} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\mu\}} \exp(\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu,0} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \lambda \delta_{\mu',\mu}) \psi_j(\mu', \mu) \quad (3.31)$$

Efetuando algumas manipulações na expressão (3.30):

$$\psi_j(\mu', \mu) = \sum_{\sigma_1=0}^{q-1} \dots \sum_{\sigma_j=0}^{q-1} \dots \sum_{\sigma_p=0}^{q-1} \delta_{\sigma_j,0} \prod_{i=1}^p \exp[(K_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + L_i \delta_{\sigma_i, \mu})]$$

encontra-se a equação:

$$\begin{aligned} \psi_j(\mu', \mu) &= \sum_{\sigma_j=0}^{q-1} \delta_{\sigma_j,0} \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_j \delta_{\sigma_j, \mu'} + \mathbf{L}_j \delta_{\sigma_j, \mu})] \times \\ &\times \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^p \sum_{\sigma=0}^{q-1} \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_i \delta_{\sigma_i, \mu'} + \mathbf{L}_i \delta_{\sigma_i, \mu})]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Sabe-se que no primeiro membro do lado direito da equação (3.32), somente será diferente de zero em $\sigma_j = 0$, portanto:

$$\psi_j(\mu', \mu) = \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_j \delta_{0, \mu'} + \mathbf{L}_j \delta_{0, \mu})] \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^p \phi^i(\mu', \mu). \quad (3.33)$$

Substituindo a equação (3.33) em (3.31), obtém-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle &= \sum_{\{\mu\}} \exp(\mathbf{h}_\mu \delta_{\mu, 0} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu', 0} + \lambda \delta_{\mu', \mu}) \times \\ &\times \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_j \delta_{0, \mu'} + \mathbf{L}_j \delta_{0, \mu})] \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^p \phi^i(\mu', \mu) \end{aligned} \quad (3.34)$$

Realizando algumas simples manipulações em (3.34):

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle &= \sum_{\{\mu\}} \exp[(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{qK}_j) \delta_{\mu', 0} + (\mathbf{h}_\mu + \mathbf{qL}_j) \delta_{\mu, 0} + \lambda \delta_{\mu', \mu}] \times \\ &\times \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^p \phi^i(\mu', \mu) \end{aligned} \quad (3.35)$$

Definindo:

$$\mathbf{h}'_j = \mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{qK}_j \quad (3.36)$$

e

$$\mathbf{h}_j = \mathbf{h}_\mu + \mathbf{q}\mathbf{L}_j \quad (3.37)$$

e fazendo:

$$\prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^p \phi^i(\mu', \mu) = \frac{\prod_{i=1}^p \phi^i(\mu', \mu)}{\phi^j(\mu', \mu)} \quad (3.38)$$

ou seja, antes tinha-se um produtório com a restrição $i \neq j$. Agora tem-se um produtório $\forall i$.

Utilizando as equações (3.36), (3.37) e (3.38) na equação (3.35), chega-se à equação:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle = \sum_{\{\mu\}} \exp(\mathbf{h}'_j \delta_{\mu', 0} + \mathbf{h}_j \delta_{\mu, 0} + \lambda \delta_{\mu', \mu}) \frac{\prod_{i=1}^p \phi^i(\mu', \mu)}{\phi^j(\mu', \mu)} \quad (3.39)$$

O lado direito da equação (3.39) é similar à função de partição mostrada em (3.10), tendo como solução a equação (3.21), então a expressão descrita em (3.39) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle &= [(\mathbf{q} - 1) + \exp(\mathbf{h}'_j + \mathbf{h}_j)] \exp(\lambda) \frac{\Phi_1}{\phi^j(\mu', \mu)} + \\ &(\mathbf{q} - 1) [\exp(\mathbf{h}'_j) + \exp(\mathbf{h}_j) + (\mathbf{q} - 2)] \frac{\Phi_2}{\phi^j(\mu', \mu)} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Definindo:

$$\tilde{\Phi}_1 = \frac{\Phi_1}{\phi^j(\mu', \mu)} \quad (3.41)$$

$$\tilde{\Phi}_2 = \frac{\Phi_2}{\phi^j(\mu', \mu)} \quad (3.42)$$

e substituindo-as em (3.40) resulta:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle &= [(\mathbf{q} - 1) + \exp(\mathbf{h}'_j + \mathbf{h}_j)] \exp(\lambda) \tilde{\Phi}_1 + \\ &(\mathbf{q} - 1) [\exp(\mathbf{h}'_j) + \exp(\mathbf{h}_j) + (\mathbf{q} - 2)] \tilde{\Phi}_2 \end{aligned} \quad (3.43)$$

Torna-se necessário também calcular as correlações entre os sítios, definido por:

$$\Delta_{\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j} = \mathbf{q} \langle \delta_{\mathbf{s}_i, 0} \delta_{\mathbf{s}_j, 0} \rangle - \langle \delta_{\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j} \rangle \quad (3.44)$$

Para determinar as correlações torna-se necessário calcular as médias termodinâmicas vistas em (3.44). Inicialmente temos:

$$\langle \delta_{\mu', 0} \delta_{\mu, 0} \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{Z}} \frac{\partial^2 \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{h}_{\mu'} \partial \mathbf{h}_{\mu}} \quad (3.45)$$

Fazendo uso da equação (3.23) em (3.45), portanto:

$$\langle \delta_{\mu', 0} \delta_{\mu, 0} \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{Z}} \frac{\partial \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu, 0} \rangle}{\partial \mathbf{h}_{\mu'}} \quad (3.46)$$

Substituindo-se (3.25) em (3.46) e efetuando a derivada, chega-se à expressão:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', 0} \delta_{\mu, 0} \rangle = \Phi_1 \exp(\lambda) \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu}) \quad (3.47)$$

Para calcular a média $\langle \delta_{\mu', \mu} \rangle$, usamos:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{Z}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \lambda} \quad (3.48)$$

Usando a equação (3.21) em (3.48), e efetuando a derivada, a expressão é obtida:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle = \Phi_1 \exp(\lambda) [(\mathbf{q} - \mathbf{1}) + \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu})] \quad (3.49)$$

Fazendo uso das equações (3.47) e (3.49) em (3.44), obtém-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mu', \mu} &= \frac{\mathbf{q}}{\mathbf{Z}} \Phi_1 \exp(\lambda + \mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu}) - \\ &\quad \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{Z}} \Phi_1 \exp(\lambda) [(\mathbf{q} - \mathbf{1}) + \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu})] \end{aligned} \quad (3.50)$$

Até o momento foi obtido um conjunto de relações as quais estão relatadas ao longo desta seção. Será feito um conjunto de manipulações com estas relações, com a finalidade de eliminar os campos e a interação desconhecidos.

Inicialmente substituindo-se a equação (3.47) em (3.49), tem-se:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle = \Phi_1 (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \exp(\lambda) + \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle \quad (3.51)$$

Rearranjando os termos da equação (3.51), chega-se à expressão:

$$\exp(\lambda) = \frac{\mathbf{Z}}{(\mathbf{q} - \mathbf{1}) \Phi_1} (\langle \delta_{\mu', \mu} \rangle - \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle) \quad (3.52)$$

que relaciona o campo λ e os sítios raízes.

Tomando a equação (3.47) e aplicando em (3.25), tem-se a expressão:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle = \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \Phi_2 \exp(\mathbf{h}_\mu) \quad (3.53)$$

Manipulando adequadamente a equação (3.53), a seguinte expressão é obtida:

$$\exp(\mathbf{h}_\mu) = \frac{\mathbf{Z}}{(\mathbf{q} - \mathbf{1}) \Phi_2} (\langle \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle - \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle) \quad (3.54)$$

Da mesma maneira, toma-se a equação (3.47) e substituindo em (3.26), obtém-se:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \rangle = \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \rangle + \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle \quad (3.55)$$

e por conseguinte,

$$\exp(\mathbf{h}_{\mu'}) = \frac{\mathbf{Z}}{(\mathbf{q} - \mathbf{1}) \Phi_2} (\langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \rangle - \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle). \quad (3.56)$$

De posse destes resultados a expressão vista em (3.43), poderá ser manipulada substituindo os campos nesta equação pelas propriedades dos sítios raízes.

Inicialmente a equação (3.43) será reescrita na forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, \mathbf{0}} \rangle &= (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \exp(\lambda) \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} + \\ &+ \exp[\mathbf{q}(\mathbf{K}_j + \mathbf{L}_j)] \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_\mu + \lambda) \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} + \\ &+ (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \exp(\mathbf{h}_{\mu'}) \exp(\mathbf{q}\mathbf{K}_j) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \exp (\mathbf{h}_\mu) \exp (\mathbf{qL}_j) \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} + \\
& + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) (\mathbf{q} - \mathbf{2}) \frac{\Phi_2}{\phi_2^j}
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Definindo:

$$\mathbf{A}_j = \exp (\mathbf{qK}_j) \tag{3.58}$$

e

$$\mathbf{B}_j = \exp (\mathbf{qL}_j), \tag{3.59}$$

impondo estas definições à equação (3.57) e também aplicando a equação (3.47) em (3.57), a seguinte equação é obtida:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, \mathbf{0}} \rangle & = (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \exp (\lambda) \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} + \\
& \mathbf{A}_j \mathbf{B}_j \frac{\mathbf{Z}}{\phi_1^j} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \exp (\mathbf{h}_{\mu'}) \mathbf{A}_j + \\
& (\mathbf{q} - \mathbf{1}) \exp (\mathbf{h}_\mu) \mathbf{B}_j \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) (\mathbf{q} - \mathbf{2}) \frac{\Phi_2}{\phi_2^j}.
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Substituindo-se (3.49), (3.54) e (3.56) em (3.40), chega-se à expressão:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Z} & = \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle + \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \rangle - \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle + \\
& \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle - \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle + (\mathbf{q} - \mathbf{1}) (\mathbf{q} - \mathbf{2}) \Phi_2.
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Agrupando os termos semelhantes, chega-se então à expressão:

$$(\mathbf{q} - \mathbf{1}) (\mathbf{q} - \mathbf{2}) \Phi_2 = \mathbf{Z} (\mathbf{1} - \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle - \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \rangle - \langle \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle + \mathbf{2} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle) \tag{3.62}$$

Usando (3.62) em (3.60), a seguinte equação é obtida:

$$\langle \delta_{\sigma_j, \mathbf{0}} \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\phi_1^j} \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle - \frac{\mathbf{1}}{\phi_1^j} \langle \delta_{\mu', \mathbf{0}} \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\mathbf{A}_j \mathbf{B}_j}{\phi_1^j} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \frac{\mathbf{A}_j}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \rangle - \frac{\mathbf{A}_j}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \\
& + \frac{\mathbf{B}_j}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu,0} \rangle - \frac{\mathbf{B}_j}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \frac{1}{\phi_2^j} - \frac{1}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',\mu} \rangle - \\
& + \frac{1}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \rangle - \frac{1}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu,0} \rangle + \frac{2}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \frac{1}{\phi_2^j} \quad (3.63)
\end{aligned}$$

Reagrupando os termos da equação (3.63), então tem-se:

$$\begin{aligned}
\langle \delta_{\sigma_j,0} \rangle & = \left[\frac{\mathbf{A}_j \mathbf{B}_j - 1}{\phi_1^j} - \left(\frac{\mathbf{A}_j + \mathbf{B}_j - 2}{\phi_2^j} \right) \right] \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \\
& + \frac{\phi_2^j - \phi_1^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \langle \delta_{\mu',\mu} \rangle + \frac{\mathbf{A}_j - 1}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \rangle + \\
& + \frac{\mathbf{B}_j - 1}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu,0} \rangle + \frac{1}{\phi_2^j} \quad (3.64)
\end{aligned}$$

Reescrevendo as expressões para ϕ_1^i e ϕ_2^i , descritas em (3.11) e (3.12), com as definições assumidas em (3.58) e (3.59), tem-se:

$$\phi_1^j = (\mathbf{q} - 1) + \mathbf{A}_j \mathbf{B}_j \quad (3.65)$$

$$\phi_2^j = (\mathbf{q} - 2) + \mathbf{A}_j + \mathbf{B}_j \quad (3.66)$$

Substituindo estas equações em (3.64), resulta:

$$\begin{aligned}
\langle \delta_{\sigma_j,0} \rangle & = \left[\frac{\phi_1^j - \mathbf{q}}{\phi_1^j} - \frac{(\phi_2^j - \mathbf{q})}{\phi_2^j} \right] \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \\
& + \left(\frac{\phi_2^j - \phi_1^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \right) \langle \delta_{\mu',\mu} \rangle + \\
& + \frac{1}{\phi_2^j} [(\mathbf{A}_j - 1) \langle \delta_{\mu',0} \rangle + (\mathbf{B}_j - 1) \langle \delta_{\mu,0} \rangle + 1] \quad (3.67)
\end{aligned}$$

Rearranjando os termos da equação (3.67), resulta:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle &= \left(\frac{\phi_1^j - \phi_2^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \right) \mathbf{q} \langle \delta_{\mu', 0} \delta_{\mu, 0} \rangle + \left(\frac{\phi_2^j - \phi_1^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \right) \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle + \\ &\quad \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} [(\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) \langle \delta_{\mu', 0} \rangle + (\mathbf{B}_j - \mathbf{1}) \langle \delta_{\mu, 0} \rangle + \mathbf{1}] \end{aligned} \quad (3.68)$$

Agrupando os termos semelhantes em (3.68) tem-se:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle &= \left(\frac{\phi_1^j - \phi_2^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \right) (\mathbf{q} \langle \delta_{\mu', 0} \delta_{\mu, 0} \rangle - \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle) + \\ &\quad + \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} [(\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) \langle \delta_{\mu', 0} \rangle + (\mathbf{B}_j - \mathbf{1}) \langle \delta_{\mu, 0} \rangle + \mathbf{1}] \end{aligned} \quad (3.69)$$

Lembrando da função de correlação mostrada em (3.44) e substituindo em (3.69) chega-se a:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle &= \left(\frac{\phi_1^j - \phi_2^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \right) \Delta_{\mu', \mu} + \\ &\quad \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} [(\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) \langle \delta_{\mu', 0} \rangle + (\mathbf{B}_j - \mathbf{1}) \langle \delta_{\mu, 0} \rangle + \mathbf{1}]. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Fazendo algumas manipulações obtém-se:

$$\begin{aligned} \left(\frac{q-1}{q} \right) \left(\frac{q \langle \delta_{\sigma_j, 0} \rangle - 1}{q-1} + \frac{1}{q-1} \right) &= \left(\frac{\phi_1^j - \phi_2^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \right) \Delta_{\mu', \mu} + \\ &\quad + \frac{1}{\phi_2^j} \left[(\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) \left(\frac{q-1}{q} \right) \left(\frac{q \langle \delta_{\mu', 0} \rangle - 1}{q-1} + \frac{1}{q-1} \right) + \right. \\ &\quad \left. + (\mathbf{B}_j - \mathbf{1}) \left(\frac{q-1}{q} \right) \left(\frac{q \langle \delta_{\mu, 0} \rangle - 1}{q-1} + \frac{1}{q-1} \right) + \mathbf{1} \right] \end{aligned} \quad (3.71)$$

Fazendo uso da equação (3.22), em (3.71), obtém-se:

$$\left(\frac{q-1}{q} \right) \left(m_j + \frac{1}{q-1} \right) = \left(\frac{\phi_1^j - \phi_2^j}{\phi_1^j \phi_2^j} \right) \Delta_{\mu', \mu} +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{\phi_2^j} \left[(A_j - 1) \left(\frac{q-1}{q} \right) \left(m_{\mu'} + \frac{1}{q-1} \right) + \right. \\
& \left. + (B_j - 1) \left(\frac{q-1}{q} \right) \left(m_{\mu} + \frac{1}{q-1} \right) + 1 \right] \quad (3.72)
\end{aligned}$$

Fazendo uso das equações (3.65) e (3.66) é obtida a expressão:

$$\phi_1^j - \phi_2^j = (\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) (\mathbf{B}_j - \mathbf{1}). \quad (3.73)$$

Substituindo a equação (3.73) em (3.72) e fazendo algumas manipulações:

$$\begin{aligned}
\mathbf{m}_j &= \frac{1}{\phi_2^j} (\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) \mathbf{m}_{\mu'} + \frac{1}{\phi_2^j} (\mathbf{B}_j - \mathbf{1}) \mathbf{m}_{\mu} + \\
& \left(\frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q} - \mathbf{1}} \right) \frac{(\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) (\mathbf{B}_j - \mathbf{1})}{\phi_1^j \phi_2^j} \Delta_{\mu', \mu} + \\
& \frac{1}{(\mathbf{q} - \mathbf{1}) \phi_2^j} \phi_2^j - \frac{1}{\mathbf{q} - \mathbf{1}}. \quad (3.74)
\end{aligned}$$

Agrupando os termos semelhantes tem-se:

$$\begin{aligned}
\mathbf{m}_j &= \frac{1}{\phi_2^j} (\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) \mathbf{m}_{\mu'} + \frac{1}{\phi_2^j} (\mathbf{B}_j - \mathbf{1}) \mathbf{m}_{\mu} + \\
& \left(\frac{\mathbf{q}}{\mathbf{q} - \mathbf{1}} \right) \frac{(\mathbf{A}_j - \mathbf{1}) (\mathbf{B}_j - \mathbf{1})}{\phi_1^j \phi_2^j} \Delta_{\mu', \mu} \quad (3.75)
\end{aligned}$$

A expressão obtida em (3.75) representa a magnetização do j -ésimo sítio em função dos sítios raízes. Tendo-se uma equação de recorrência para magnetização. A função de correlação $\Delta_{\mu', \mu}$ é calculada no apêndice, onde é visto a função de correlação entre os sítios raízes e o sítio interno da célula básica, onde é analisado estas interações por partes, ou seja, a interação $\mu \rightarrow \sigma_j$ e a $\mu' \rightarrow \sigma_j$, conforme é visto no apêndice.

Com estas expressões de recorrência acopladas será possível efetuar uma simulação numérica, que permite obter o comportamento do parâmetro de ordem em função da temperatura e assim fazer uma estimativa razoável dos expoentes críticos.

3.2 Propriedades críticas do parâmetro de ordem.

Nesta seção será mostrado os resultados obtidos pela simulação numérica das relações de recorrência obtidos na seção anterior.

A princípio será analisado o comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson definido em (1.85) frente às variações de temperatura para um dado tamanho de rede, bem como este parâmetro se comporta frente a variações do tamanho da rede no ponto crítico. Com este tipo de estudo torna-se possível estimar os expoentes críticos, efetuando um estudo do comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson local e fazendo-se o uso da equações (3.4) e (3.6), serão obtidos os expoentes $\beta(q, d)$ e $\nu(q, d)$.

A metodologia consiste inicialmente em iterar a equação (3.75). Este processo é realizado de maneira exata, em que os acoplamentos utilizados, bem como as magnetizações, são armazenados na memória do computador a cada passo da iteração. Em cada processo iterativo o número de ligações e sítios da rede cresce exponencialmente, tornando difícil obter um sistema com hierarquia mais alta devido às limitações de memória do computador. Será obtido agora expressões que comprovam este fato.

Inicialmente denota-se o número de ligações em cada iteração N_l . Fazendo uso da figura 2.2, pode-se escrever o procedimento o qual será tomado, utilizando-se a decoração da rede:

$$N_l(0) = 1 \rightarrow \text{hierarquia zero}$$

$$N_l(1) = 2p \rightarrow \text{primeira hierarquia}$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$N_l(h) = (2p)^h \rightarrow \text{h-ésima hierarquia}$$

Portanto, tomando o número total de ligações, que devem ser armazenados é dado pela seguinte equação

$$\mathbf{N} = \sum_{n=0}^h (2p)^n. \tag{3.76}$$

Expandindo-se:

$$N = 1 + (2p) + (2p)^2 + \dots + (2p)^h ,$$

multiplicando a expansão de N por $(2p)$ e, em seguida, somando as expressões obtidas, obtém-se:

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{1} - (\mathbf{2p})^{\mathbf{h}+1}}{\mathbf{1} - (\mathbf{2p})}. \quad (3.77)$$

Novamente observando a figura 2.2, podemos levantar dados para obter o número de sítios de cada hierarquia, portanto:

$$N_S(0) = 2 \rightarrow \text{hierarquia zero}$$

$$N_S(1) = N_S(0) + pN_I(0) \rightarrow \text{primeira hierarquia}$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$N_S(h) = N_S(h-1) + pN_I(h-1) \rightarrow \text{h-ésima hierarquia}$$

Relembrando que $N_I(p, h) = (2p)^h$ e aplicando na expressão logo acima para h-ésima hierarquia, então:

$$\mathbf{N}_S(\mathbf{h}) = \mathbf{N}_S(\mathbf{h} - \mathbf{1}) + \mathbf{p} (\mathbf{2p})^{\mathbf{h}-1} \quad (3.78)$$

Utilizando-se a recursividade da equação (3.78), tal que:

$$\mathbf{N}_S(\mathbf{h}) = \mathbf{N}_S(\mathbf{0}) + \mathbf{p} + \mathbf{p} (\mathbf{2p}) + \mathbf{p} (\mathbf{2p})^2 + \dots + \mathbf{p} (\mathbf{2p})^{\mathbf{h}-1}. \quad (3.79)$$

Rearrmando a expressão (3.79), e lembrando que na hierarquia zero se tem apenas dois sítios, então:

$$\mathbf{N}_S(\mathbf{h}) = \mathbf{2} + \mathbf{p} \sum_{\mathbf{n}=0}^{\mathbf{h}-1} (\mathbf{2p})^{\mathbf{n}} \quad (3.80)$$

Sendo:

$$\sum_{n=0}^h (2p)^n = \frac{1 - (2p)^{h+1}}{1 - (2p)} \quad (3.81)$$

Então:

$$\sum_{n=0}^{h-1} (2p)^n = \frac{1 - (2p)^h}{1 - (2p)}. \quad (3.82)$$

Substituindo em (3.80), obtém-se a expressão para o número total de sítios para uma dada hierarquia h , ou seja:

$$N_S(h) = 2 + p \left[\frac{(2p)^h - 1}{(2p) - 1} \right] \quad (3.83)$$

Neste próximo passo será tomado as associações:

- $M_S \rightarrow$ memória para os sítios
- $M_L \rightarrow$ memória para as ligações
- $M_T \rightarrow$ memória total

De posse destas definições e das equações (3.77) e (3.83) as expressões são obtidas:

$$M_S = 2^3 \left\{ 2 + p \left[\frac{(2p)^h - 1}{(2p) - 1} \right] \right\} \quad (3.84)$$

e,

$$M_L = 2^3 \left[\frac{(2p)^{h+1} - 1}{(2p) - 1} \right] \quad (3.85)$$

O fator 2^3 representa a transformação dos dados para bytes.

Desta maneira tem-se:

$$M_T = M_S + M_L = 2^3 \left\{ \frac{4p - 2 + [(2p)^h - 1] + (2p)^{h+1} - 1}{2p - 1} \right\}, \quad (3.86)$$

que rearranjando, obtém-se:

$$(2\mathbf{p})^h = \frac{(2\mathbf{p} - 1)}{2^3} M_T + 3 - 3\mathbf{p} \quad (3.87)$$

Tomando logaritmo dos dois lados da equação resulta:

$$h = \frac{1}{\log(2\mathbf{p})} \log \left[3 + \frac{(2\mathbf{p} - 1)}{8} M_T - 3\mathbf{p} \right] \quad (3.88)$$

Com a equação (3.88), pode determinar o número de hierarquias máximo $h_{max} = int(h)$ que se consegue construir em função do número de conexões entre os sítios e principalmente a quantidade de memória disponível do computador que pode ser usada.

Para, por exemplo, $\mathbf{p} = 16$ e $M_T = 1$ **Gigabytes** de memória RAM. O resultado obtido é $h_{max} = 5$.

Nas figuras 3.2 a 3.5 é mostrado o comportamento do logaritmo do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global do modelo com $q = 3$ e $d = 5$ ($\mathbf{p} = 16$) em função do logaritmo da temperatura, para as quatro distribuições de probabilidade consideradas.

Como pode ser visto pelas figuras, com este número de iterações fica um pouco delicado obter os expoentes críticos, pois a região linear não é tão visível para que se possa achar o coeficiente angular desta reta. Os efeitos de tamanho finito são bastante visíveis. Em torno de $\epsilon = 0.6$, torna-se difícil de encontrar uma linearidade. Por outro lado, o efeito de saturação da magnetização devido ao ponto nulo deve ser evitado.

Uma análise numa região muito pequena onde pode ser visto uma espécie de linearidade, entre $\epsilon = 0.7$ e $\epsilon = 0.9$, excluindo os efeitos de tamanho finito e de saturação da magnetização, pode ser realizada conforme é mostrado nas figuras 3.6 a 3.9. Pelo gráfico das figuras podemos ver que com um pouco mais de memória RAM seria possível aumentar a região de linearidade, conforme foi obtido em trabalho semelhante feito para o modelo **Ising** [18] por exemplo, e desta forma ter uma estimativa melhor para o expoente crítico β em questão.

Definida a região de linearidade, foi efetuado o melhor ajuste linear, de acordo com as figuras mostradas em 3.6 a 3.9 e obtido o coeficiente angular desta reta, pois com este coeficiente obtém-se o expoente β , de acordo com a equação (3.4). Este tipo de ajuste é feito em cada tamanho de rede desde $h = 2$ até $h = 5$, obtendo-se o diagrama visto na figura 3.10, onde

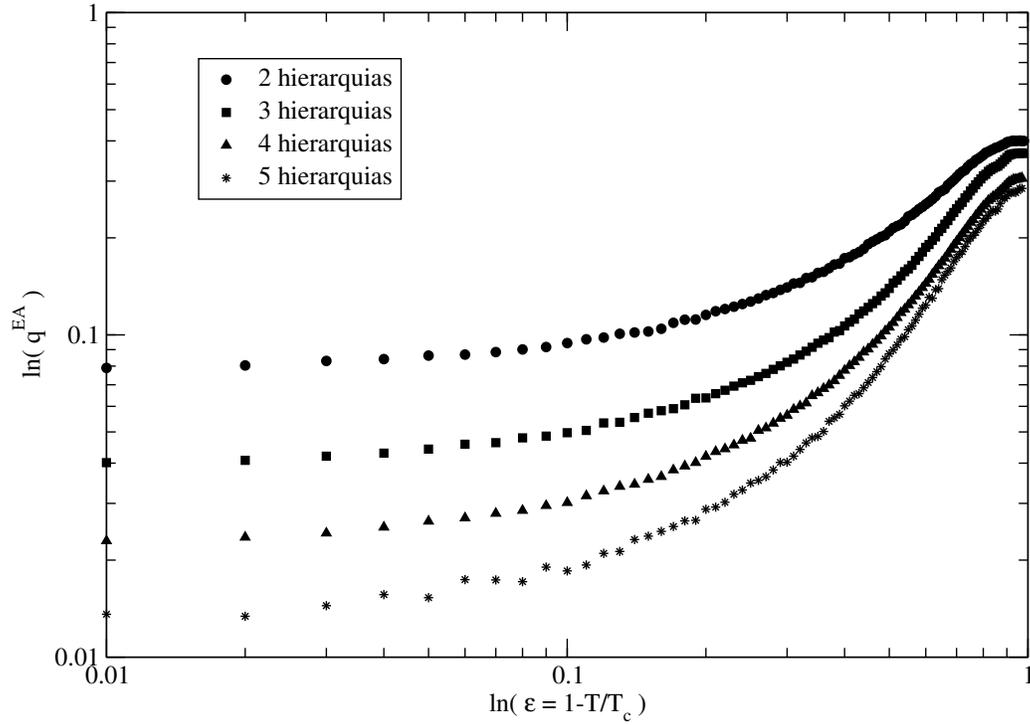


Figura 3.2: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição delta-bimodal em $q = 3$ e $d = 5$.

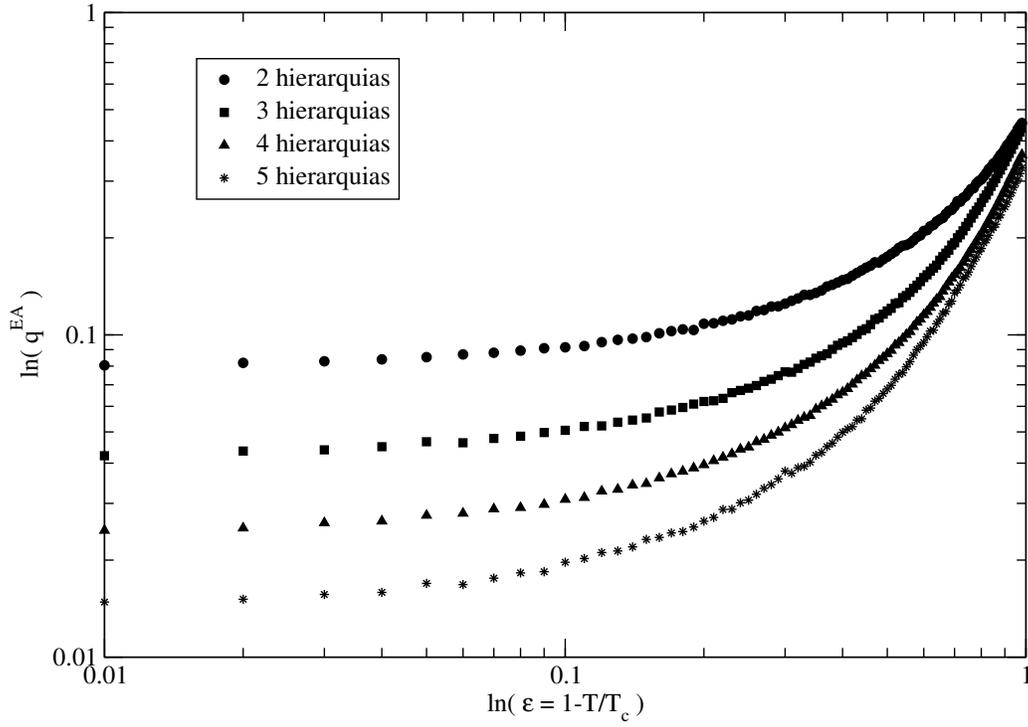


Figura 3.3: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição exponencial em $q = 3$ e $d = 5$

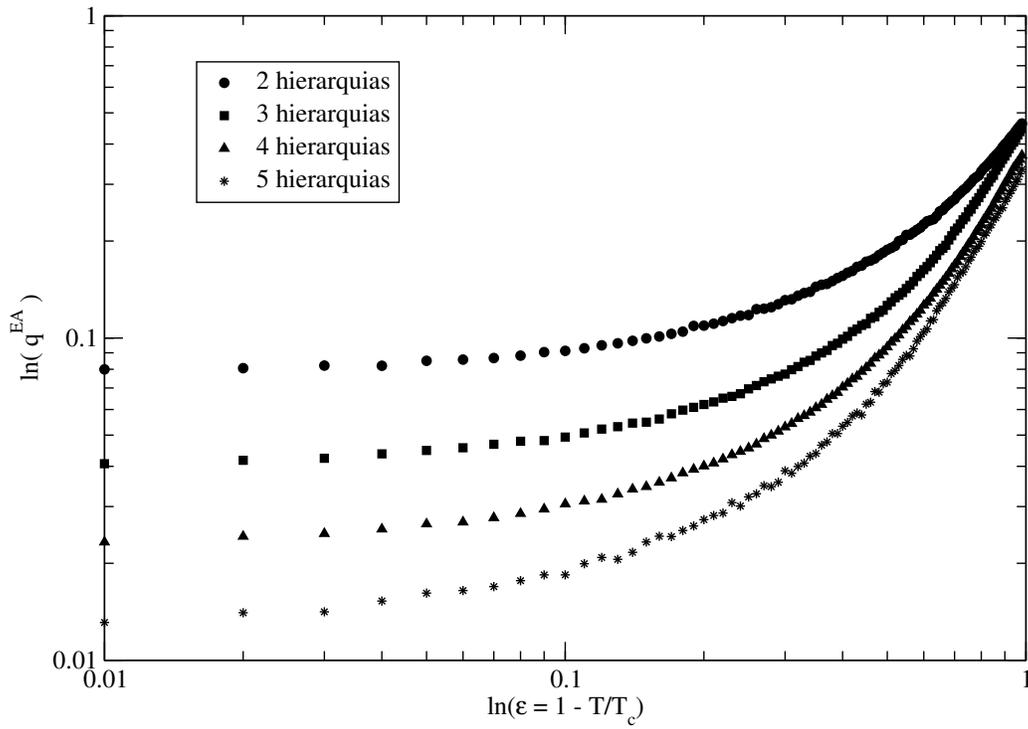


Figura 3.4: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição gaussiana em $q = 3$ e $d = 5$.

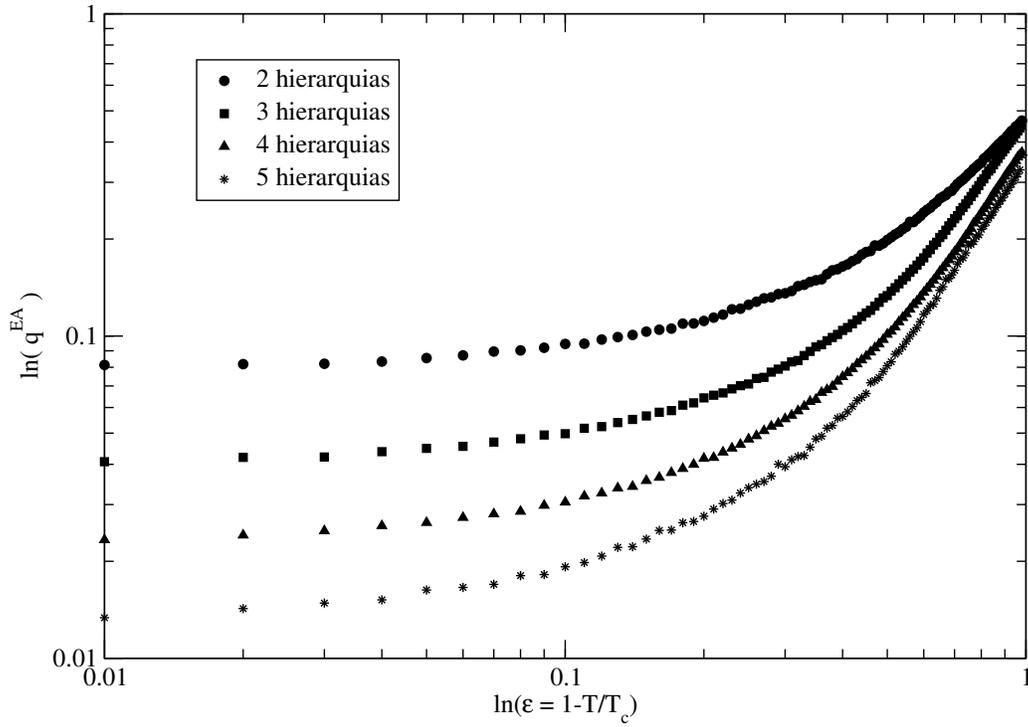


Figura 3.5: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson global em função da temperatura para hierarquias. Distribuição uniforme em $q = 3$ e $d = 5$.

observamos claramente que o valor dos expoentes devem alcançar um valor de saturação no limite de $T \rightarrow \infty$, para cada distribuição inicial escolhida. Os resultados numéricos deste ajuste estão mostrados na tabela 3.1. Os resultados não indicam um comportamento universal para os expoentes com respeito à escolha da distribuição inicial como seria de esperar.

No caso do modelo de vidros-de-spins de Ising tal comportamento não-universal também foi verificado [18,41] e posteriormente esclarecido [42]. Neste caso foi mostrado, no espaço de parâmetros da renormalização, a cada passo, a função distribuição de probabilidade evolui para uma função de distribuição de “ponto-fixa”, cuja trajetória intercepta com fronteiras entre as bacias de atração num genuíno ponto-fixa instável (ponto de sela) que governa o comportamento crítico do sistema. No caso de vidros-de-spins de Ising os expoentes foram calculados revelando um comportamento universal [42].

A mesma análise é feita para $q = 4$ e $d = 6$ ($p = 32$), mas neste caso não foi possível obter um resultado razoável para os expoente crítico β , em face do tamanho de rede insuficiente. Para 1 Gigabytes de memória RAM obtem-se $h_{max} = 4$.

Uma região linear não foi observada em nenhuma dos casos, em um intervalo de valores significativo. Nas figuras 3.11 a 3.14 exibimos o comportamento de q_{EA} na região crítica.

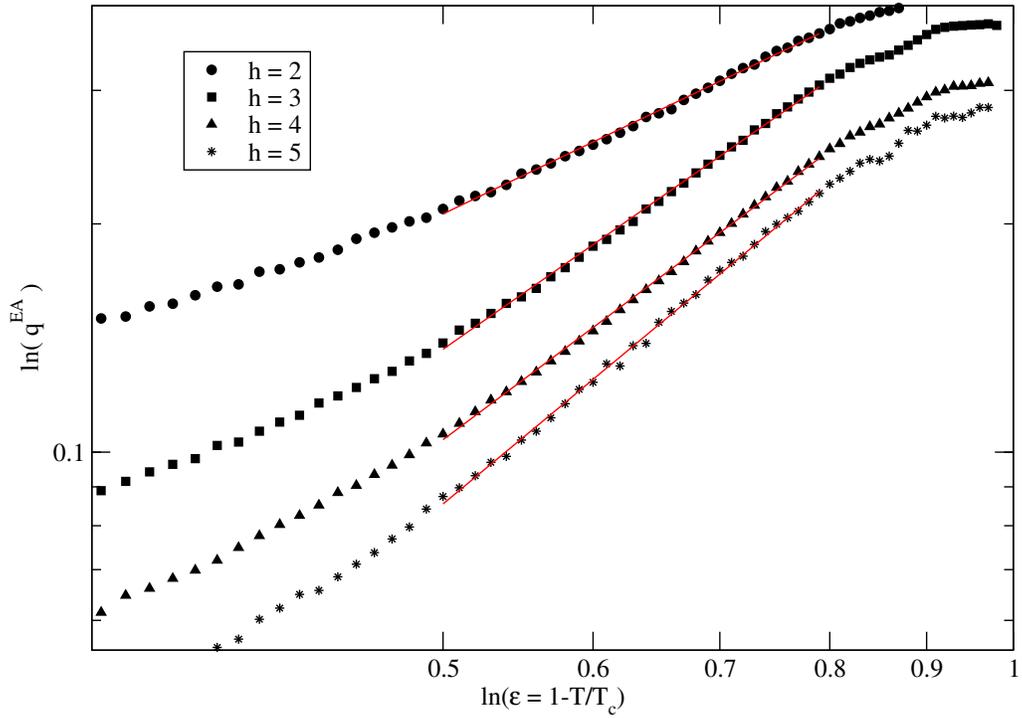


Figura 3.6: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição delta-bimodal em $q = 3$ e $d = 5$.

Distribuições	Expoentes Críticos	
	$\beta(3, 5)$	$\nu(3, 5)$
Bimodal	2.08 ± 0.02	2.67 ± 0.02
Exponencial	2.70 ± 0.04	3.58 ± 0.01
Gaussiana	2.31 ± 0.02	3.16 ± 0.05
Uniforme	2.14 ± 0.01	2.66 ± 0.01

Tabela 3.1: Valores estimados para os expoentes críticos com suas respectivas precisões, obtidos a partir de uma das distribuições iniciais escolhida.

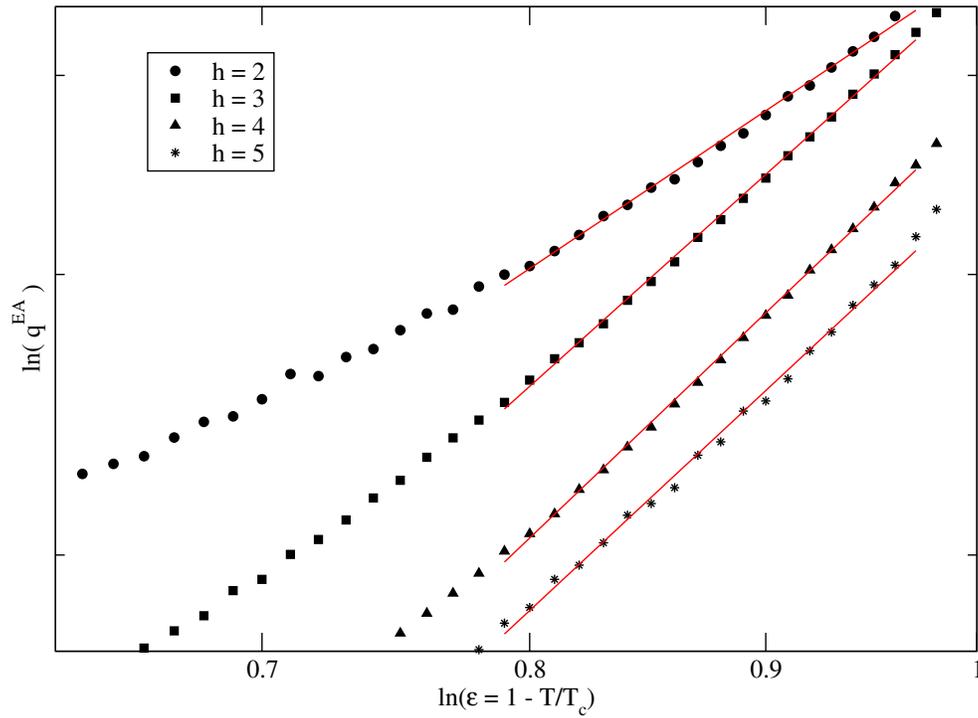


Figura 3.7: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição exponencial em $q = 3$ e $d = 5$.

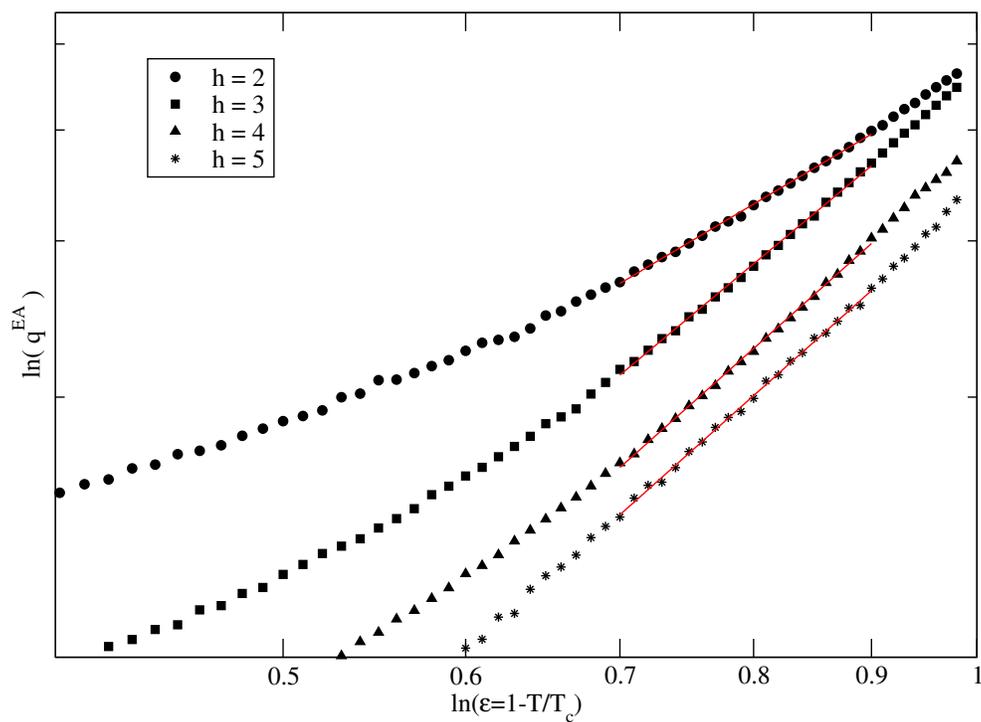


Figura 3.8: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição gaussiana em $q = 3$ e $d = 5$.

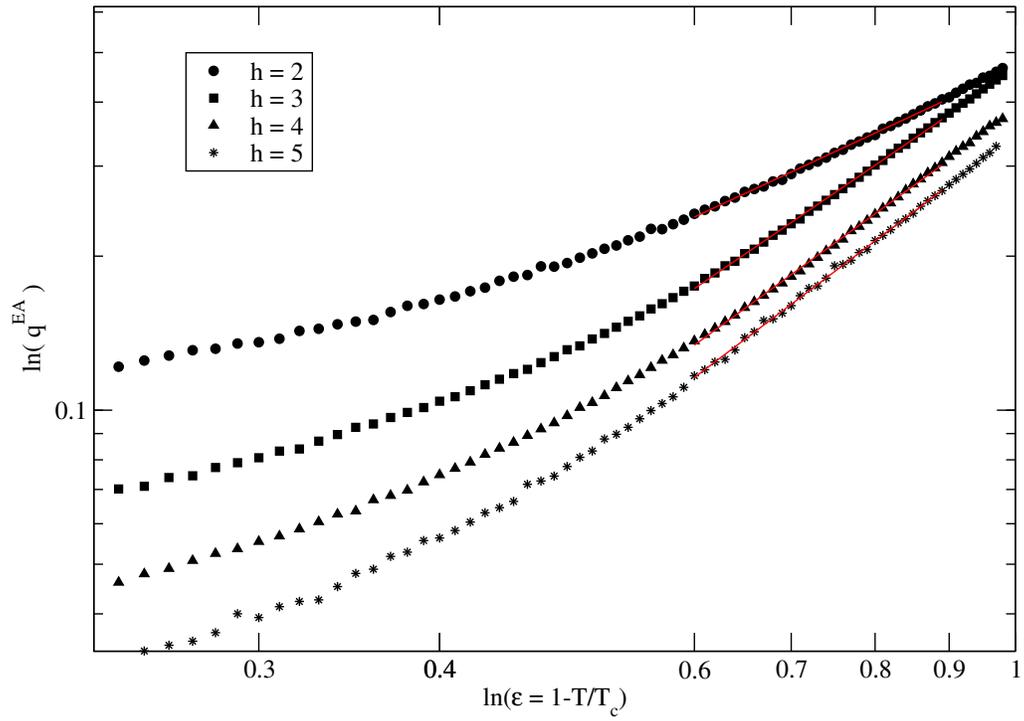


Figura 3.9: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Ampliação da região onde é efetuado a análise de linearidade usando a distribuição uniforme em $q = 3$ e $d = 5$.

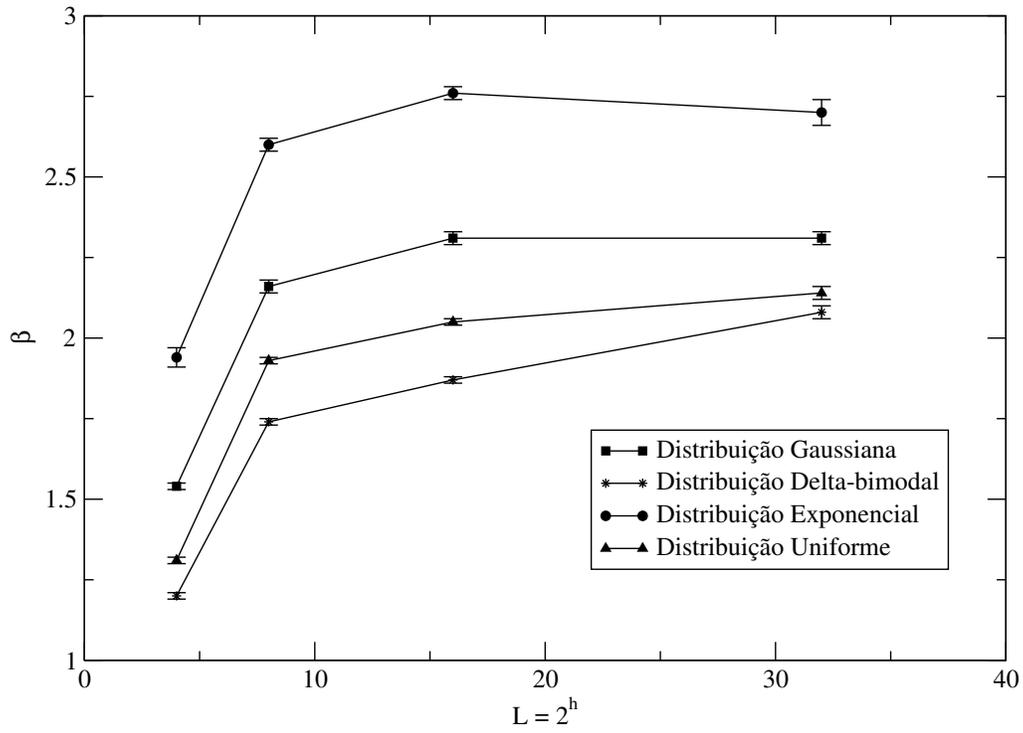


Figura 3.10: Expoente crítico β versus L (tamanho da rede), para as distribuições: delta-bimodal, exponencial, gaussiana e uniforme. Todas em $q = 3$ e $d = 5$.

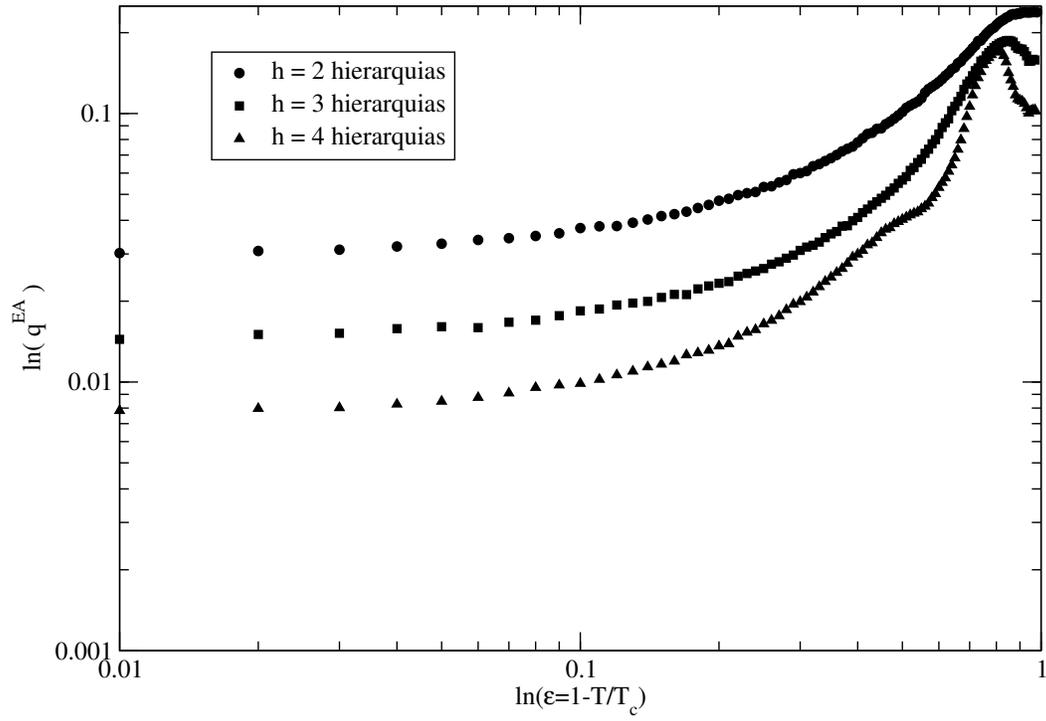


Figura 3.11: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição delta-bimodal em $q = 4$ e $d = 6$.

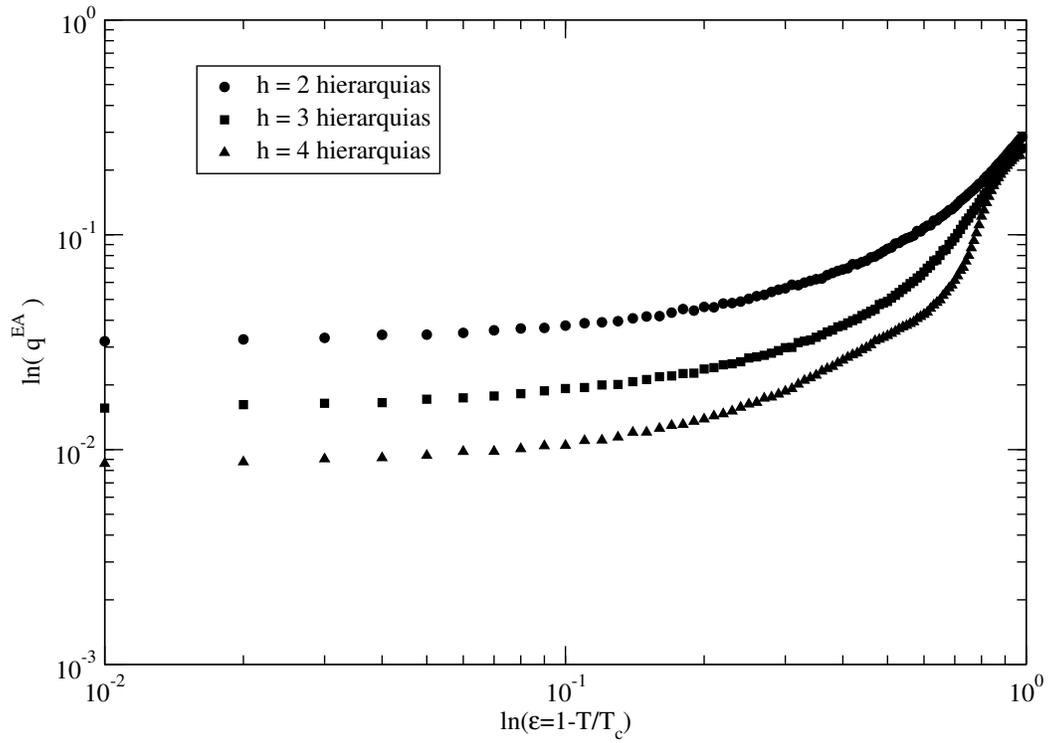


Figura 3.12: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição exponencial em $q = 4$ e $d = 6$.

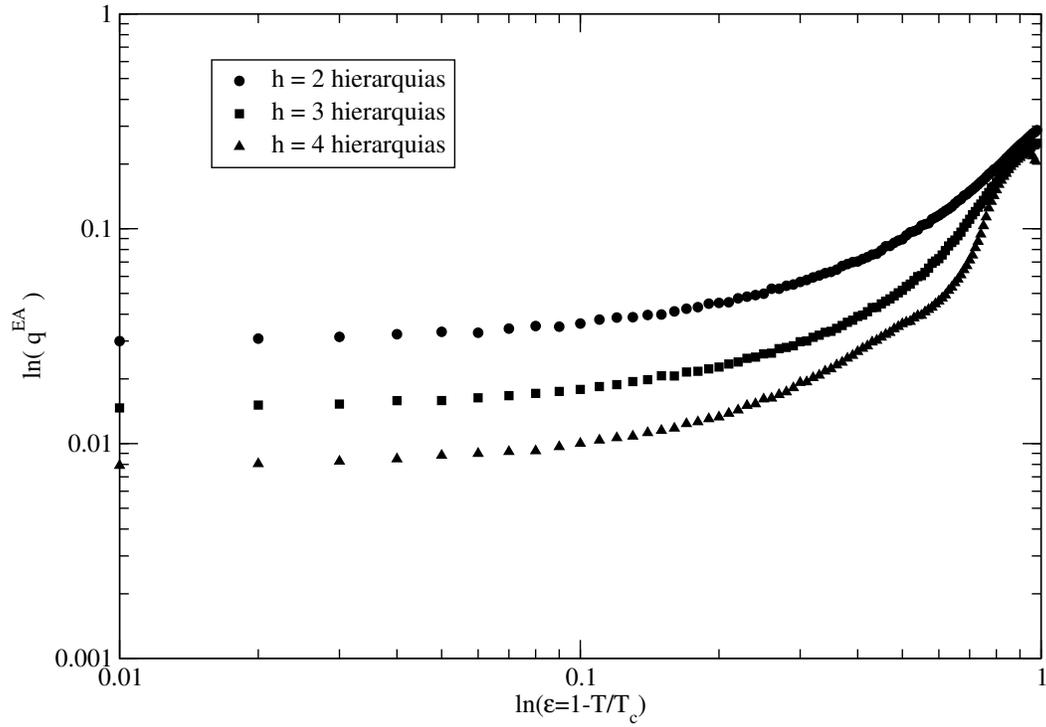


Figura 3.13: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição gaussiana em $q = 4$ e $d = 6$.

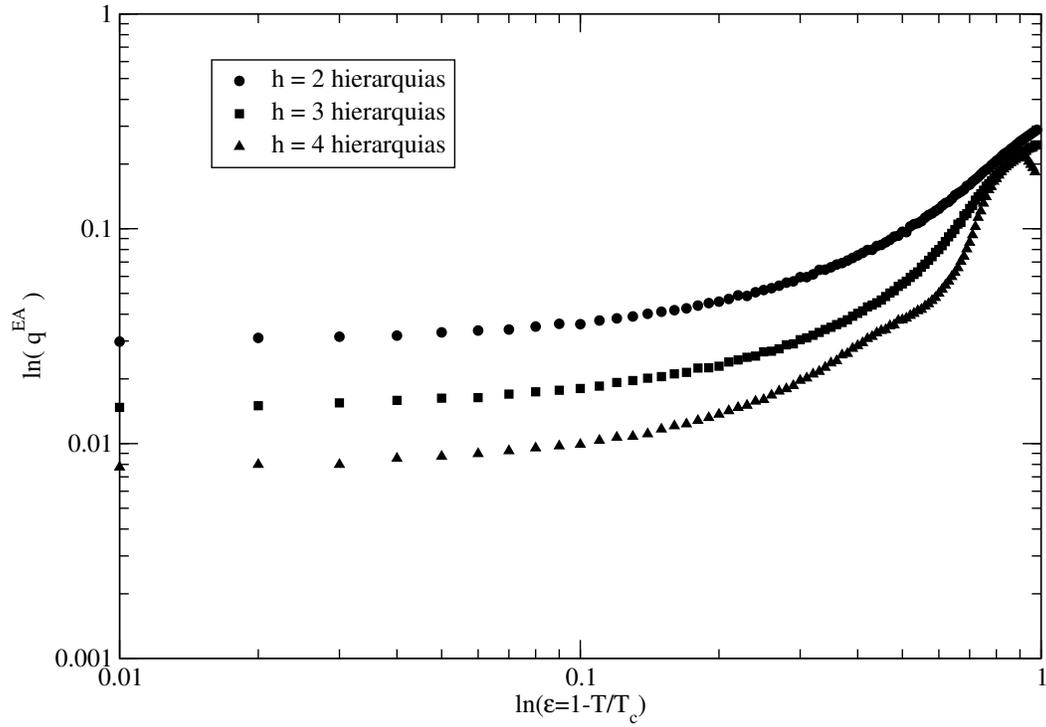


Figura 3.14: Comportamento do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson global em função da temperatura para várias hierarquias. Distribuição uniforme em $q = 4$ e $d = 6$.

O propósito a seguir é obter o expoente crítico ν associado ao comprimento de correlação.

A análise é feita analisando-se o comportamento de q_{EA} em função do tamanho da rede L , quando $T = T_c$. Este tamanho cresce com potências de h (número de hierarquias) cuja base é o fator de escala. Dentro deste contexto é obtido os seguintes resultados, levando-se em conta as quatro distribuições iniciais, já mencionadas ao longo deste trabalho.

Os gráficos das figuras 3.14 a 3.17 mostram como o parâmetro de ordem de Edwards-Anderson se comporta com o o aumento do tamanho da rede. Vê-se que nestes diagramas o parâmetro de ordem tende a ir a zero quando se aumenta o tamanho da rede, isto é razoável, pois parâmetro de ordem deve ir a zero em T_c , no limite termodinâmico . Este tipo de estudo para obtenção dos expoentes críticos é bem conhecido na literatura, tal qual obtido para o modelo vidro-de-spins **Ising**, é visto em [18,42].

Foi utilizado o gráfico do tipo log-log com a finalidade de obter uma relação linear, o coeficiente angular desta reta dará justamente a razão:

$$-\frac{\beta}{\nu}$$

Que combinando com os resultados obtidos na tabela 3.1, para o expoente β , pode-se estimar expoente ν associado ao comprimento de correlação, com suas respectivas barras de erro, as quais são também mostradas na tabela 3.1.

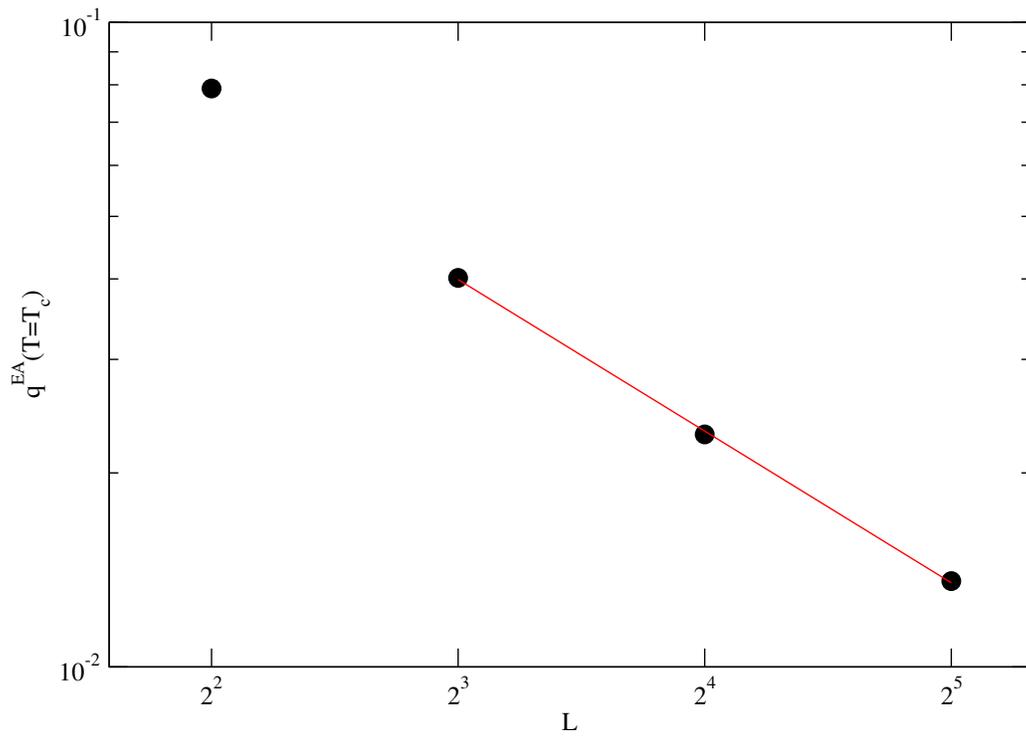


Figura 3.15: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição delta-bimodal em $q = 3$ e $d = 5$.

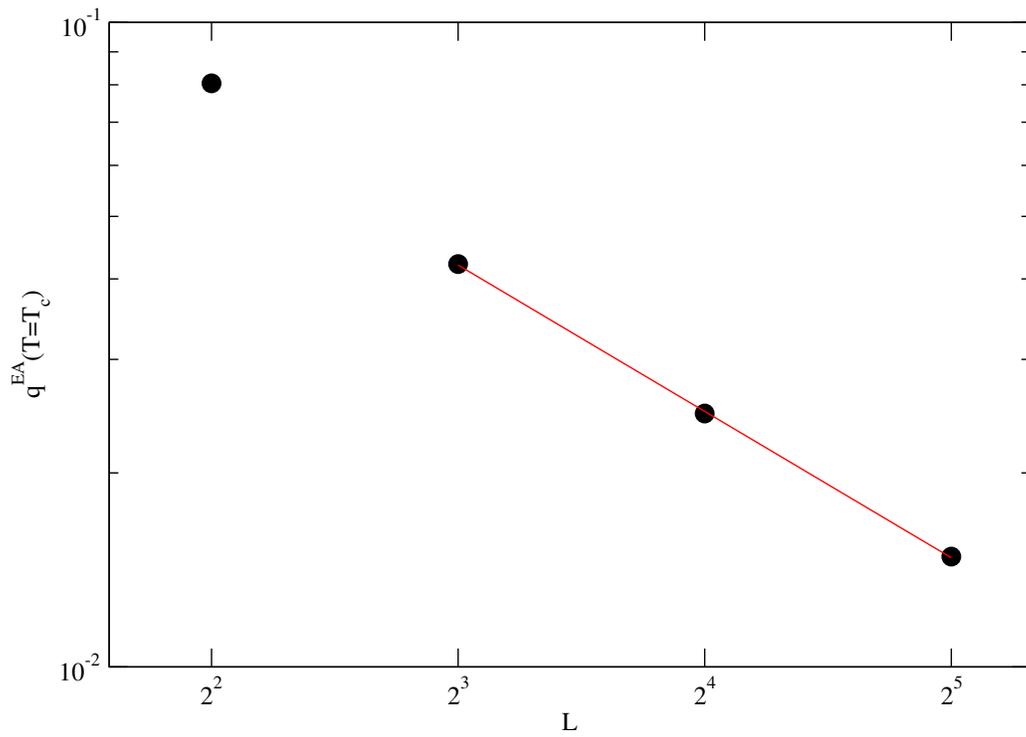


Figura 3.16: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição exponencial em $q = 3$ e $d = 5$.

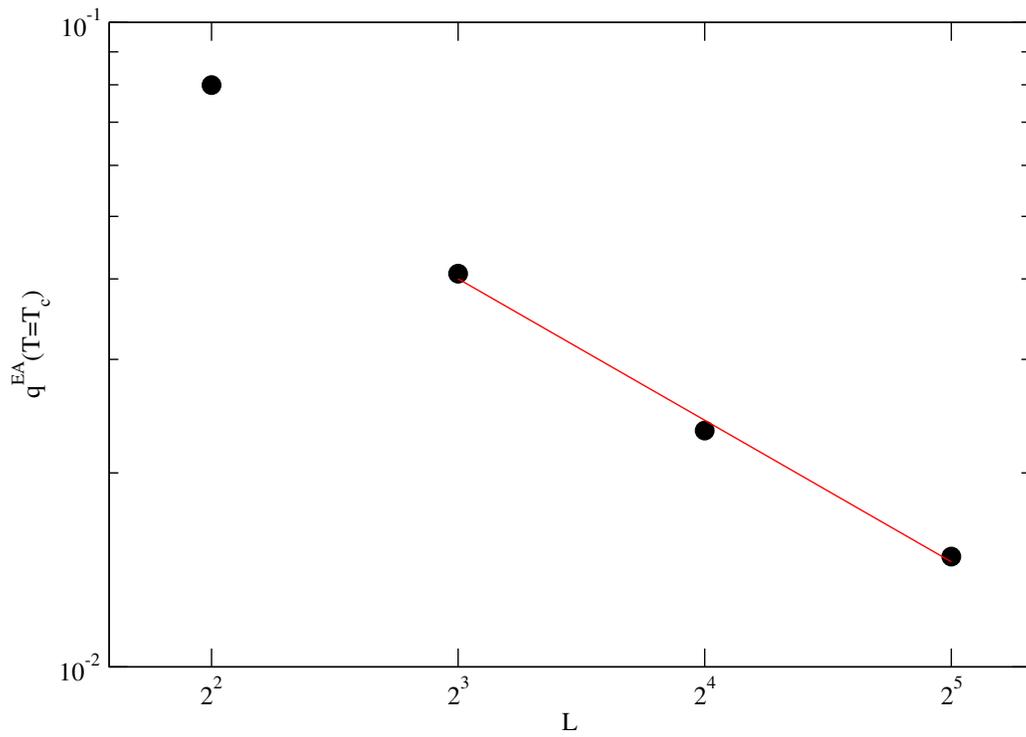


Figura 3.17: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição gaussiana em $q = 3$ e $d = 5$.

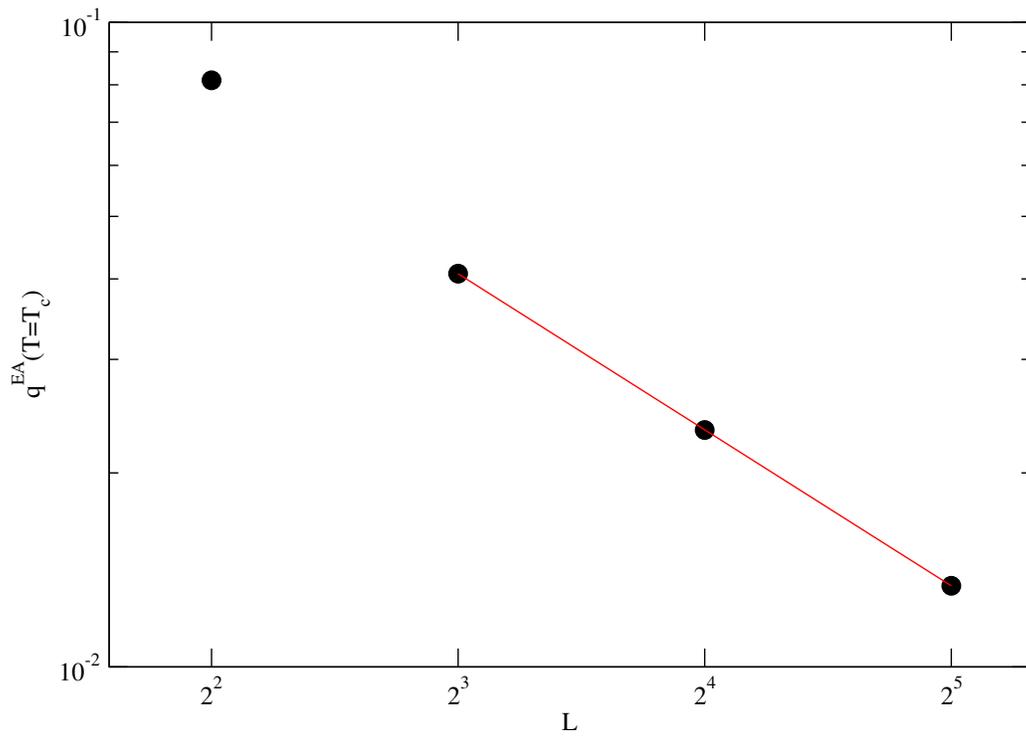


Figura 3.18: Comportamento do parâmetro de Edwards-Anderson no ponto crítico em função do tamanho da rede (hierarquias). Distribuição uniforme em $q = 3$ e $d = 5$.

Capítulo 4

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação foram investigadas as propriedades críticas do modelo de Potts de q -estados desordenado com interações aleatórias fixas, segundo uma distribuição de probabilidades simétrica. Foram consideradas quatro distribuições de probabilidade: Delta-bimodal, Gaussiana, Exponencial e Uniforme. O modelo foi definido em uma rede hierárquica diamante de fator de escala $b = 2$ e dimensão fractal arbitrária.

Para tal foi utilizada uma metodologia que engloba o esquema de Migdal-Kadanoff para o grupo de renormalização no espaço real e um procedimento recursivo exato para calcular a magnetização local em função da temperatura.

O método dos reservatórios foi utilizado para obter a temperatura crítica do sistema partindo de uma das distribuições iniciais escolhidas.

Os valores observados em um diagrama de fluxo num espaço de parâmetros apropriado mostravam um ponto crítico bem definido, que dependendo do ponto inicial tomado, o fluxo evoluía ou para fase condensada ou para fase paramagnética. Para cada escolha da distribuição inicial a temperatura crítica foi determinada nos casos em que foi observada para valores de $q = 2, 3$ e 4 e $d_F = 2 \sim 6$. Dentro deste contexto foi construído uma representação das quatro distribuições iniciais, mostrando como a partir de cada distribuição a temperatura flui, revelando a região onde ocorre o ponto de sela, onde estará o ponto crítico real que governa a criticalidade do modelo. Esta temperatura crítica poderá ser futuramente obtida obtendo-se a distribuição de ponto-fixa.

Com o auxílio desta análise a dimensão crítica inferior do modelo para alguns casos particulares foi estimada. Nestes casos foi encontrado o intervalo limite entre a dimensão mínima onde pode ocorrer a transição de fases e

máxima dimensão onde ela não é observada. Realizando-se este estudo foi possível verificar que aparece um valor para dimensão crítica em que para qualquer número de estados $q > 2$ ocorre a transição, visto na figura 2.12.

De posse da temperatura crítica torna-se possível determinar os expoentes críticos, fazendo-se uso do parâmetro de ordem de Edwards-Anderson. Estes expoentes foram obtidos calculando-se de maneira exata a magnetização local e, por conseguinte, o parâmetro de ordem através de relações de recorrência numéricas obtidas no capítulo 3. Mas os expoentes encontrados estão associados a cada distribuição inicial escolhida, não revelando a universalidade esperada. Esta universalidade deve ser comprovada buscando-se a distribuição de ponto fixo, para qual a distribuição inicial flui após um certo número de passos, até se chegar num ponto que seja o ponto crítico genuíno. Este ponto crítico é bem visto no diagrama de fases mostrado na figura 2.5, vê-se que para qualquer distribuição inicial escolhida, a temperatura caminha um certo número de iterações e passa próxima deste ponto, observamos que após quatro iterações cada trajetória aproxima-se do ponto crítico.

Como uma perspectiva para este trabalho apontamos para a determinação numérica da distribuição de probabilidades do ponto-fixo e a determinação da sua temperatura crítica e dos expoentes críticos associados.

Outro ponto bastante interessante deste estudo é a fase condensada do modelo. Desde o trabalho de Camelo Neto [31], foi encontrado para as distribuições, Delta-bimodal, Gaussiana e Uniforme e aqui também observado para a distribuição exponencial, que o fluxo das distribuições renormalizadas na bacia de atração da fase ordenada evolui, no espaço de parâmetros considerado, de forma caótica estando confinado em uma região de temperatura finita, embora muito baixa. Torna-se necessário determinar a natureza caótica desta região ou atrator, e, mais importante, que tipo de fase será esta. Este será um tema de continuação deste trabalho. O que é que sugerido em [30] é que este objeto é o resultado da competição entre a entropia e os acoplamentos, visto que para a situação em que ele é encontrado o sistema não possui uma escolha de um estado preferencial para minimizar a energia.

Outra proposta a ser desenvolvida é verificar a aplicação do modelo de Potts em outros tipos de redes hierárquicas para verificar se comportamento semelhante ocorrido na fase condensada ocorrerá em outros tipos de rede, bem como determinar os valores para a dimensão crítica inferior, temperaturas e expoentes críticos, e comparar com resultados obtidos com o modelo de Potts aplicado na rede diamante.

Apêndice A

Relações de Recorrência para a Função de Correlação

Neste apêndice estará descrito o cálculo da função de correlação usado na expressão para magnetização local descrita em (3.75).

No cálculo da magnetização estava-se vendo o cálculo da função de correlação entre os sítios raízes μ' e μ . Precisa-se desdobrar esta interação entre os sítios internos da rede, ou seja, a interação $\sigma_j \rightarrow \mu'$ e a interação $\sigma_j \rightarrow \mu$, então será calculado agora estas funções de correlação.

Inicialmente relembro da equação (3.44), levando-se em consideração a interação entre σ_j e μ :

$$\Delta_{\sigma_j, \mu} = \mathbf{q} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \delta_{\mu, 0} \rangle - \langle \delta_{\sigma_j, \mu} \rangle \quad (\text{A.1})$$

Fazendo uso da equação:

$$\langle \delta_{\sigma_j, 0} \delta_{\mu, 0} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\sigma\}} \delta_{\sigma_j, 0} \delta_{\mu, 0} \exp(-\beta \mathbf{H}) \quad (\text{A.2})$$

Aplicando o hamiltoniano de interação descrito em (3.7) em (A.2), e arumando a expressão consegue-se a expressão:

$$\begin{aligned}
\langle \delta_{\sigma_j,0} \delta_{\mu,0} \rangle &= \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\mu\}} \delta_{\mu,0} \exp(\mathbf{h}_\mu \delta_{\mu,0} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \lambda \delta_{\mu,\mu'}) \\
&\quad \sum_{\{\sigma_j\}} \delta_{\sigma_j,0} \exp \left[\sum_{i=1}^p (\mathbf{q} \mathbf{K}_i \delta_{\mu',\sigma_i} + \mathbf{q} \mathbf{L}_i \delta_{\mu,\sigma_i}) \right] \quad (\text{A.3})
\end{aligned}$$

A qual pode ainda ser escrita como:

$$\begin{aligned}
\langle \delta_{\sigma_j,0} \delta_{\mu,0} \rangle &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{h}_\mu} \sum_{\{\mu\}} \exp(\mathbf{h}_\mu \delta_{\mu,0} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \lambda \delta_{\mu,\mu'}) \\
&\quad \sum_{\{\sigma_j\}} \delta_{\sigma_j,0} \exp \left[\sum_{i=1}^p (\mathbf{q} \mathbf{K}_i \delta_{\mu',\sigma_i} + \mathbf{q} \mathbf{L}_i \delta_{\mu,\sigma_i}) \right] \quad (\text{A.4})
\end{aligned}$$

Que fazendo uso da equação (3.23), e aplicando-a em (A.4), chega-se a expressão:

$$\mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j,0} \delta_{\mu,0} \rangle = \frac{\partial}{\partial \mathbf{h}_\mu} (\mathbf{Z} \delta_{\sigma_j,0}) \quad (\text{A.5})$$

Fazendo uso da equação (3.60) em (A.5), tem-se:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j,0} \delta_{\mu,0} \rangle &= \frac{\partial}{\partial h_\mu} \left[(q-1) \exp(\lambda) \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} + A_j B_j \frac{Z}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \right. \\
&\quad (q-1) \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \exp(h_{\mu'}) A_j + (q-1) \exp(h_\mu) B_j \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} + \\
&\quad \left. (q-1)(q-2) \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \right] \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

Efetuada a derivada é obtido a expressão:

$$\begin{aligned}
\mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j,0} \delta_{\mu,0} \rangle &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{h}_\mu} \left[\mathbf{A}_j \mathbf{B}_j \frac{\mathbf{Z}}{\phi_1^j} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \right. \\
&\quad \left. (\mathbf{q}-1) \mathbf{B}_j \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \exp(\mathbf{h}_\mu) \right] \quad (\text{A.7})
\end{aligned}$$

Substituindo a equação (3.47) em (A.7), chega-se a equação:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \delta_{\mu, 0} \rangle &= \mathbf{A}_j \mathbf{B}_j \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_{\mu} + \lambda) + \\ &(\mathbf{q} - 1) \mathbf{B}_j \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \exp(\mathbf{h}_{\mu}) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Aplicando-se as equações (3.47) e (3.54) em (A.8), consegue-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j, 0} \delta_{\mu, 0} \rangle &= \mathbf{A}_j \mathbf{B}_j \frac{\mathbf{Z}}{\phi_1^j} \langle \delta_{\mu, 0} \delta_{\mu', 0} \rangle + \\ &\frac{\mathbf{B}_j}{\phi_2^j} \mathbf{Z} (\langle \delta_{\mu, 0} \rangle - \langle \delta_{\mu, 0} \delta_{\mu, 0} \rangle) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Agrupando-se os termos semelhantes, então:

$$\langle \delta_{\sigma_j, 0} \delta_{\mu, 0} \rangle = \mathbf{B}_j \left[\left(\frac{\mathbf{A}_j}{\phi_1^j} - \frac{1}{\phi_2^j} \right) \langle \delta_{\mu, 0} \delta_{\mu', 0} \rangle + \frac{1}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu, 0} \rangle \right] \quad (\text{A.10})$$

Da mesma maneira pode ser calculado $\langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle$, então:

$$\langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\sigma\}} \delta_{\mu, \sigma_j} \exp(-\beta \mathbf{H}) \quad (\text{A.11})$$

Aplicando o hamiltoniano de interação definido em (3.7) em (A.11), tem-se a expressão:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle &= \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\mu\}} \sum_{\{\sigma_i\}} \delta_{\mu, \sigma_j} \exp[\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu, 0} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu', 0} + \\ &\lambda \delta_{\mu', \mu} + \sum_{i=1}^{\mathbf{p}} (\mathbf{q} \mathbf{K}_i \delta_{\mu, \sigma_i} + \mathbf{q} \mathbf{L}_i \delta_{\mu', \sigma_i})] \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Que pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle = & \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{Z}} \frac{\partial}{\partial (\mathbf{qK}_j)} \sum_{\{\mu\}} \sum_{\{\sigma_i\}} \exp [\mathbf{h}_\mu \delta_{\mu, \mathbf{0}} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu', \mathbf{0}} + \\ & \lambda \delta_{\mu' \mu'} + \sum_{i=1}^{\mathbf{p}} \mathbf{q} (\mathbf{K}_i \delta_{\mu, \sigma_i} + \mathbf{L}_i \delta_{\mu', \sigma_i})] \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Que fazendo uso de (3.9) em (A.13), pode-se escrever:

$$\langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{Z}} \frac{\partial}{\partial (\mathbf{qK}_j)} \mathbf{Z} \quad (\text{A.14})$$

Utilizando-se da equação (3.59), conjuntamente com a regra da cadeia em (A.14), então:

$$\langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle = \frac{\mathbf{B}_j}{\mathbf{Z}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{B}_j} \quad (\text{A.15})$$

Recorrendo a equação (3.21) e diferenciando-a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{B}_j} = & (\mathbf{q} - 1) \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{B}_j} \exp(\lambda) + \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_\mu + \lambda) \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{B}_j} + \\ & (\mathbf{q} - 1) \exp(\mathbf{h}_{\mu'}) \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{B}_j} + (\mathbf{q} - 1) \exp(\mathbf{h}_\mu) \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{B}_j} + \\ & (\mathbf{q} - 1)(\mathbf{q} - 2) \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{B}_j} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Utilizando (3.19) e (3.20), consegue-se as equações:

$$\frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{B}_j} = \frac{\partial \phi_1^j}{\partial \mathbf{B}_j} \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^{\mathbf{p}} \phi_1^i \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{B}_j} = \frac{\partial \phi_2^i}{\partial \mathbf{B}_j} \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^p \phi_2^i \quad (\text{A.18})$$

Fazendo uso das equações (3.65) e (3.66) respectivamente, tem-se:

$$\frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{B}_j} = \mathbf{A}_j \tilde{\Phi}_1 \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{B}_j} = \tilde{\phi}_2 \quad (\text{A.20})$$

Utilizando os resultados obtidos em (A.19) e (A.20), e aplicando-os em (A.16), em seguida agrupando os termos semelhantes, conseqüentemente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{B}_j} = & [(\mathbf{q} - 1) \exp(\lambda) + \exp(\mathbf{h}_\mu + \mathbf{h}_{\mu'} + \lambda)] \mathbf{A}_j \tilde{\Phi}_1 + \\ & (\mathbf{q} - 1) [\exp(\mathbf{h}_{\mu'}) + \exp(\mathbf{h}_\mu) + (\mathbf{q} - 2)] \tilde{\Phi}_2 \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Aplicando a equação (A.21) em (A.15), em seguida substituindo os campos mostrados em (3.52), (3.54) e (3.56), também realizando algumas operações, chega-se em:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle = & \frac{\mathbf{B}_j}{\mathbf{Z}} \left[\mathbf{A}_j \frac{\tilde{\Phi}_1}{\Phi_1} \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle + \frac{\tilde{\Phi}_2}{\Phi_2} \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', 0} \rangle + \right. \\ & \frac{\tilde{\Phi}_2}{\Phi_2} \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu, 0} \rangle + (\mathbf{q} - 1) (\mathbf{q} - 2) \tilde{\Phi}_2 - \\ & \left. 2 \frac{\tilde{\Phi}_2}{\Phi_2} \mathbf{Z} \langle \delta_{\mu', 0} \delta_{\mu, 0} \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Substituindo (3.62) em (A.22), rearranjando alguns termos e efetuando alguns cancelamentos, consegue-se:

$$\langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle = \mathbf{B}_j \left[\left(\mathbf{A}_j \frac{\tilde{\Phi}_1}{\Phi_1} - \frac{\tilde{\Phi}_2}{\Phi_2} \right) \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle + \frac{\tilde{\Phi}_2}{\Phi_2} \right] \quad (\text{A.23})$$

Utilizando-se das definições em (3.19), (3.20), (3.41) e (3.42), o seguinte resultado é obtido:

$$\frac{\tilde{\Phi}_1}{\Phi_1} = \frac{1}{\phi_1^j} \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{\tilde{\Phi}_2}{\Phi_2} = \frac{1}{\phi_2^j} \quad (\text{A.25})$$

Tomando (A.24) e (A.25) em (A.23), conseqüentemente obtém-se:

$$\langle \delta_{\mu, \sigma_j} \rangle = \mathbf{B}_j \left[\left(\frac{\mathbf{A}_j}{\phi_1^j} - \frac{1}{\phi_2^j} \right) \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle + \frac{1}{\phi_2^j} \right] \quad (\text{A.26})$$

Com base nos resultados obtidos pode-se agora obter a função de correlação para a interação $\mu \rightarrow \sigma_j$. Então substituindo as expressões obtidas em (A.10) e (A.26) em (A.1), obtém-se:

$$\begin{aligned} \Delta_{\mu, \sigma_j} = \mathbf{B}_j & \left[(\mathbf{q} \langle \delta_{\mu, \mathbf{0}} \delta_{\mu', \mathbf{0}} \rangle - \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle) \left(\frac{\mathbf{A}_j}{\phi_1^j} - \frac{1}{\phi_2^j} \right) + \right. \\ & \left. \frac{1}{\phi_2^j} (\mathbf{q} \langle \delta_{\mu, \mathbf{0}} \rangle - 1) \right] \quad (\text{A.27}) \end{aligned}$$

A equação (A.27) pode ser reescrita fazendo uso das definições em (3.22) e (3.44), obtendo-se assim a função de correlação Δ_{μ, σ_j} :

$$\Delta_{\mu, \sigma_j} = \mathbf{B}_j \left[\left(\frac{\mathbf{A}_j}{\phi_1^j} - \frac{1}{\phi_2^j} \right) \Delta_{\mu, \mu'} + \frac{(\mathbf{q} - 1)}{\phi_2^j} \mathbf{m}_\mu \right] \quad (\text{A.28})$$

O propósito agora é obter uma relação para a função de correlação para a interação $\mu \rightarrow \sigma_j$, semelhante aquela obtida logo acima, em (A.28).

Neste contexto precisa-se calcular as médias termodinâmicas $\langle \delta_{\mu',0} \delta_{\sigma_j} \rangle$ e $\langle \delta_{\mu',\sigma_j} \rangle$. O processo de obter essas médias é similar aos efetivados na primeira parte deste apêndice.

A princípio será usado:

$$\langle \delta_{\mu',0} \delta_{\sigma_j,0} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\sigma\}} \delta_{\mu',0} \delta_{\sigma_j,0} \exp(-\beta \mathbf{H}) \quad (\text{A.29})$$

Usando-se o hamiltoniano de interação definido em (3.9) aplicado em (A.29), a seguinte equação é obtida:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\sigma_j,0} \rangle &= \frac{1}{\mathbf{Z}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{h}_{\mu'}} \sum_{\{\mu\}} \exp(\mathbf{h}_{\mu} \delta_{\mu,0} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \lambda \delta_{\mu',\mu}) \\ &\quad \sum_{\{\sigma_j\}} \delta_{\sigma_j,0} \exp \left[\sum_{i=1}^p \mathbf{q} (\mathbf{K}_i \delta_{\mu',\sigma_i} + \mathbf{L}_i \delta_{\mu,\sigma_i}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Que fazendo uso da equação (3.24), na equação (A.30), obtem-se:

$$\langle \delta_{\mu',0} \delta_{\sigma_j,0} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{h}_{\mu'}} (\mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j,0} \rangle) \quad (\text{A.31})$$

Derivando (3.60) em relação a $h_{\mu'}$, a expressão seguinte é obtida:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{h}_{\mu'}} (\mathbf{Z} \langle \delta_{\sigma_j,0} \rangle) &= \mathbf{A}_j \mathbf{B}_j \frac{\partial}{\partial \mathbf{h}_{\mu'}} \left(\frac{\mathbf{Z}}{\phi_1^j} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle \right) + \\ &\quad (\mathbf{q} - 1) \mathbf{A}_j \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \exp(\mathbf{h}_{\mu'}) \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Aplicando em (A.32) a equação (3.47), obtem:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\sigma_j,0} \rangle = & \frac{1}{\mathbf{Z}} \left[\mathbf{A}_j \mathbf{B}_j \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} \exp(\mathbf{h}_\mu + \mathbf{h}_{\mu'} + \lambda) + \right. \\ & \left. (\mathbf{q} - 1) \mathbf{A}_j \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \exp(\mathbf{h}_{\mu'}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Recorrendo as equações (3.47) e (3.56), colocando-as em (A.33), gera-se a expressão:

$$\langle \delta_{\mu',0} \delta_{\sigma_j,0} \rangle = \mathbf{A}_j \left[\left(\frac{\mathbf{B}_j}{\phi_1^j} - \frac{1}{\phi_2^j} \right) \langle \delta_{\mu',0} \delta_{\mu,0} \rangle + \frac{1}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',0} \rangle \right] \quad (\text{A.34})$$

Agora será tomado o segundo passo para o cálculo da função de correlação, o cálculo da média $\langle \delta_{\mu',j} \rangle$.

A princípio usa-se:

$$\langle \delta_{\mu',\sigma_j} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \sum_{\{\sigma\}} \delta_{\mu,\sigma_j} \exp(-\beta \mathbf{H}) \quad (\text{A.35})$$

Que aplicando o hamiltoniano de interação definido em (3.9), tem por consequência:

$$\begin{aligned} \langle \delta_{\mu',\sigma_j} \rangle = & \sum_{\{\mu\}} \exp(\mathbf{h}_\mu \delta_{\mu,0} + \mathbf{h}_{\mu'} \delta_{\mu',0} + \lambda \delta_{\mu,\mu'}) \\ & \sum_{\{\sigma_j\}} \delta_{\mu',\sigma_j} \exp \left[\sum_{i=1}^p \mathbf{q} (\mathbf{K}_i \delta_{\mu',\sigma_i} + \mathbf{L}_i \delta_{\mu,\sigma_i}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Podendo ser reescrita como:

$$\langle \delta_{\mu',\sigma_j} \rangle = \frac{1}{\mathbf{Z}} \frac{\partial}{\partial (\mathbf{q} \mathbf{K}_j)} \mathbf{Z} \quad (\text{A.37})$$

Usando a definição (3.58) e a regra da cadeia em (A.37), então:

$$\langle \delta_{\mu', \sigma_j} \rangle = \frac{\mathbf{A}_j}{\mathbf{Z}} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{A}_j} \quad (\text{A.38})$$

Derivando a relação (3.21), então:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{A}_j} = & \left[(\mathbf{q} - \mathbf{1}) + \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_\mu) \exp(\lambda) \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{A}_j} + \right. \\ & \left. (\mathbf{q} - \mathbf{1}) [\exp(\mathbf{h}_{\mu'}) + \exp(\mathbf{h}_\mu) + (\mathbf{q} - \mathbf{2})] \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{A}_j} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Utilizando-se as definições (3.19) e (3.20), tem-se:

$$\frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{A}_j} = \mathbf{B}_j \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} \quad (\text{A.40})$$

e,

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{A}_j} = \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \quad (\text{A.41})$$

Então:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{Z}}{\partial \mathbf{A}_j} = & [(\mathbf{q} - \mathbf{1}) + \exp(\mathbf{h}_{\mu'} + \mathbf{h}_\mu)] \exp(\lambda) \mathbf{B}_j \frac{\Phi_1}{\phi_1^j} + \\ & (\mathbf{q} - \mathbf{1}) [\exp(\mathbf{h}_{\mu'}) + \exp(\mathbf{h}_\mu) + (\mathbf{q} - \mathbf{2})] \frac{\Phi_2}{\phi_2^j} \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

Com este resultado obtido em (A.42), utilizando a equação (3.62), e aplicando-os em (A.38), então obtém-se:

$$\langle \delta_{\mu', \sigma_j} \rangle = \mathbf{A}_j \left[\left(\frac{\mathbf{B}_j}{\phi_1^j} - \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} \right) \langle \delta_{\mu', \mu} \rangle + \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} \right] \quad (\text{A.43})$$

Com esta equação (A.43) e (A.34), então tem-se expressões suficientes para o cálculo da função de correlação. Desta maneira substituindo-os em

(3.44), levando-se em consideração a interação $\mu' \rightarrow \sigma_j$:

$$\Delta_{\mu',\sigma_j} = \mathbf{A}_j \left[\mathbf{q} \left(\frac{\mathbf{B}_j}{\phi_1^j} - \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} \right) \langle \delta_{\mu',\mathbf{0}} \delta_{\mu,\mathbf{0}} \rangle + \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} \langle \delta_{\mu',\mathbf{0}} \rangle - \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} (\mathbf{q} \langle \delta_{\mu',\mathbf{0}} \rangle - \mathbf{1}) \right] \quad (\text{A.44})$$

Fazendo uso das definições (3.22) e (3.44) em (A.44), então encontra-se a relação de recorrência para a função de correlação, levando-se em consideração a interação $\mu' \rightarrow \sigma_j$

$$\Delta_{\mu',\sigma_j} = \mathbf{A}_j \left[\left(\frac{\mathbf{B}_j}{\phi_1^j} - \frac{\mathbf{1}}{\phi_2^j} \right) \Delta_{\mu',\mu} + \frac{\mathbf{m}_{\mu'}}{\phi_2^j} \right] \quad (\text{A.45})$$

Bibliografia

[1] Ashcroft, Neil W. e Mermin N. David, Solid State Physics (Brooks/Cole, Itacha) (1976).

[2] T. D. Schultz, D. C. Mathis e E. H. Lieb, Two Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions, Rev. Mod. Phys. , 36,856(1964).

[3] J. M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions (Clarendon Press, Oxford), 1995.

[4] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, The Theory of Critical Phenomena An Introduction to the Renormalization Group (Clarendon Press, Oxford), 1995.

[5] Kenneth G. Wilson, The Renormalization Group: Critical Phenomena and Kondo Problem, Rev. Mod. Phys., 47(4), 773, 1975.

[6] Jan Froyland, Introduction to Chaos and Coherence, (Institute of Physics Publishing,),1992.

[7] H. Takayasu, Fractals in the Physical Sciences.(Manchester University Press), 1989.

[8] Bertrand Berche e Christophe Chatelain, Phase Transitions in the two-dimensional Random Potts Models, cond-mat/0207421 v1, 2002.

[9] C. Brangian, W. Kob, K. Binder, Evidence Against a Glass Transition in the 10-state short-range Potts Glass, Europhysics Lett., 59(4),235, 546, (2002).

- [10] F. Y. Wu, The Potts Model, *Rev. Mod. Phys.*, 54(1), 235, 1982.
- [11] H. Eugene Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Claredon Press, Oxford), 1971.
- [12] Kerson Huang, *Statistical Mechanics second edition*,(John Wiley and Sons), 1987.
- [13] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Termal Physics* (Mcgraw-Hill), 1965.
- [14] Marcelo Gomes, Romildo Nogueira, Sérgio Coutinho, *Fractais Notas de Curso, 45^a SBPC 27^a Reunião anual da SBF*, Recife, 1993.
- [15] Steven H. Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos with Aplications to Physics, Biology, Chemistry, and Enginnering*, Perseus Publishing, Cambridge, 2000.
- [16] Ladário da Silva, Evaldo Mendonça Fleury Curado, Sérgio Coutinho, Welles Antônio Matinez Morgado, *Criticality and Multifactality of the Potts ferromagnetic model on fractal lattices*, *Phys. Rev. B*, 53(10) 6345, 1996.
- [17] Robert B. Griffiths, Miron Kaufman, *Spin Systems on Hierachical lattices. Introduction and thermodynamic limit*, *Phys. Rev. B*, 26 (9) 5022, 1982.
- [18] Edvaldo Nogueira Júnior, *Estudo de Modelos de Vidro-de-Spins com interações de Longo e curto alcance*, Tese de Doutorado (UFPE), 1996.
- [19] Osmundo Donato da Silva Neto, *Vidros de Spins em Redes Hierárquicas: aspectos configuracionais, Críticos e Multifractais*, Tese de Doutorado (UFPE), 1999.
- [20] J. R. Melrose, *Hierarquical Lattices: some examples with a comparison of intrinsic dimension and conectivity and Ising Model exponents*, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 16, 3077-3083, 1983.

- [21] Constantino Tsallis, A. C. N. de magalhães, Pure and Random Potts-like models: real-space renormalization-group approach, Phys. Report, 268, 305-430, 1996.
- [22] J. W. Essam and C. Tsallis, The Potts model and flows: I. The pair correlation function, J. Phys. A Math. Gen. 19, 409-422, 1986.
- [23] Daniel S. Fisher, Geoffrey M. Grinstein, Anil Khurana, Theory of Random Magnets, Physics Today, 56-67, december 1988.
- [24] K. Binder, A. P. Young, Spin Glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions, Rev. Mod. Phys., 58, 4, october 1986.
- [25] K. H. Fischer, J. A. Hertz, Spin Glasses, (Cambridge University Press), 1993.
- [26] Michel J. P. Gingras, Erick S. Sørensen, Evidence for a genuine ferromagnetic to paramagnetic reentrant phase transition in a Potts spin-glass model, Phys. Rev. B, 57, 17, 1998.
- [27] J. R. L. Almeida, S. Coutinho, Spin Glass: an Unfinished Story, Brazilian Journal of Physics, 24, 4, 1994.
- [28] B. W. Southern and A. P. Young, Real Space rescaling study of spin glasses behaviour in three dimensions, Journal Physics C: Solid State, 10, 2179, 1977.
- [29] E. Nogueira Jr., Sérgio Coutinho, F. D. Nobre, E. M. F. Curado, Universality in short-range Ising spin-glasses, Physica A, 271, 125-132, 1999.
- [30] Jayanth R. Banavar, Alan J. Bray, Heisenberg and Potts spin glasses: A renormalization-group study, Phys. Rev. B, 38, 4, 1988.
- [31] Gustavo Camelo Neto, Sistemas Complexos Desordenados: Aspectos Dinâmicos e Termodinâmicos, Tese de Doutorado, maio 2003.
- [32] L. Onsager Critical statistical. I: A two-dimensional model with order-disorder transition. Phys. Rev., 65, 117-149, 1944.

- [33] (A ser publicado em *Physica A* (2004)) Gustavo Camelo Neto, Washington de Lima, S. Coutinho e W. A. M. Morgado, Potts Spin Glass: A Renormalization Group Approach.
- [34] E. M. F. Curado e J. L Meunier, *Physica A*, 149, 164, 1988.
- [35] S. F. Edwards and P. W. Anderson, Theory of spin glasses, *J. Phys. F*, 965-974, 1975.
- [36] D. Sherington and Kirkpatrick. Solvable model of a spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35,1792-1796, 1975.
- [37] A. P. Young, Series on directions in condensed matter physics. In a spin glasses and Random Fields, volume 12, world Scientific Publishing Co., 1998.
- [38] Gustavo Camelo Neto, Modelo de Ising em redes fractais: caso puro e vidro de spin, Tese de Mestrado, 1999.
- [39] Rodrigo de Paula Almeida Lima, Modelo de vidro de spins de Ising no “Sierpinski gasket”, Tese de Mestrado, 1999.
- [40] W. A. Morgado, S. Coutinho, E. M. F. Curado. Multifractal magnetization on hierarquical lattices. *J. Stat. Phys.*, 61, 913-921, 1990.
- [41] E. Nogueira Jr., S. Coutinho, F. D. Nobre e E. M. F. Curado, Short Range Ising Spin Glasses: a critical expoent study, *Physica A*, 257, 365-370, 1998.
- [42] E. Nogueira Jr., S. Coutinho, F. D. Nobre e E. M. F. Curado, Universality short-range Ising spin glasses, *Physica A*, 125-132, 1999.