

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 4063 Ex 1

**INOMOGENEIDADES NO ESPAÇO
(desordem fraca; modelos de p spins) E
REPRESENTAÇÃO NO ESPAÇO DE FOCK EM
PROBLEMAS DA FÍSICA ESTATÍSTICA**

Paulo de Tarso Artencio Muzy

Tese apresentada ao Instituto de Física da
Universidade de São Paulo para a obtenção do título de
Doutor em Ciências
sob a orientação do
Prof. Dr. Silvio Roberto Azevedo Salinas

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas (Orientador – IFUSP)


Prof. Dra. Tânia Tomé Martins de Castro (IFUSP)

Prof. Dr. Diógenes Galetti (IFT/UNESP)

Prof. Dr. Ademir Eugênio de Santana (UnB)

Prof. Dr. Lindberg Lima Gonçalves (UFC)

São Paulo
Junho de 2004


Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

SBI-IFUSP



305M810T4063

530.13

M9944

D
P X L

FICHA CATALOGRÁFICA

**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Muzy, Paulo de Tarso Artencio

Inhomogeneidades no espaço (desordem fraca; modelo de p-spins) e representação no espaço de Fock em problemas da física estatística. São Paulo, 2004.

Teses (Doutorado) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física - Depto. de Física Geral

Orientador: Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas
Área de Concentração: Física.

Unitermos:

1. Modelo de Potts;
2. Modelos de mecânica estatística;
3. Modelos aleatórios;
4. Dinâmica estocástica
5. Diagrama de transformação de fase.

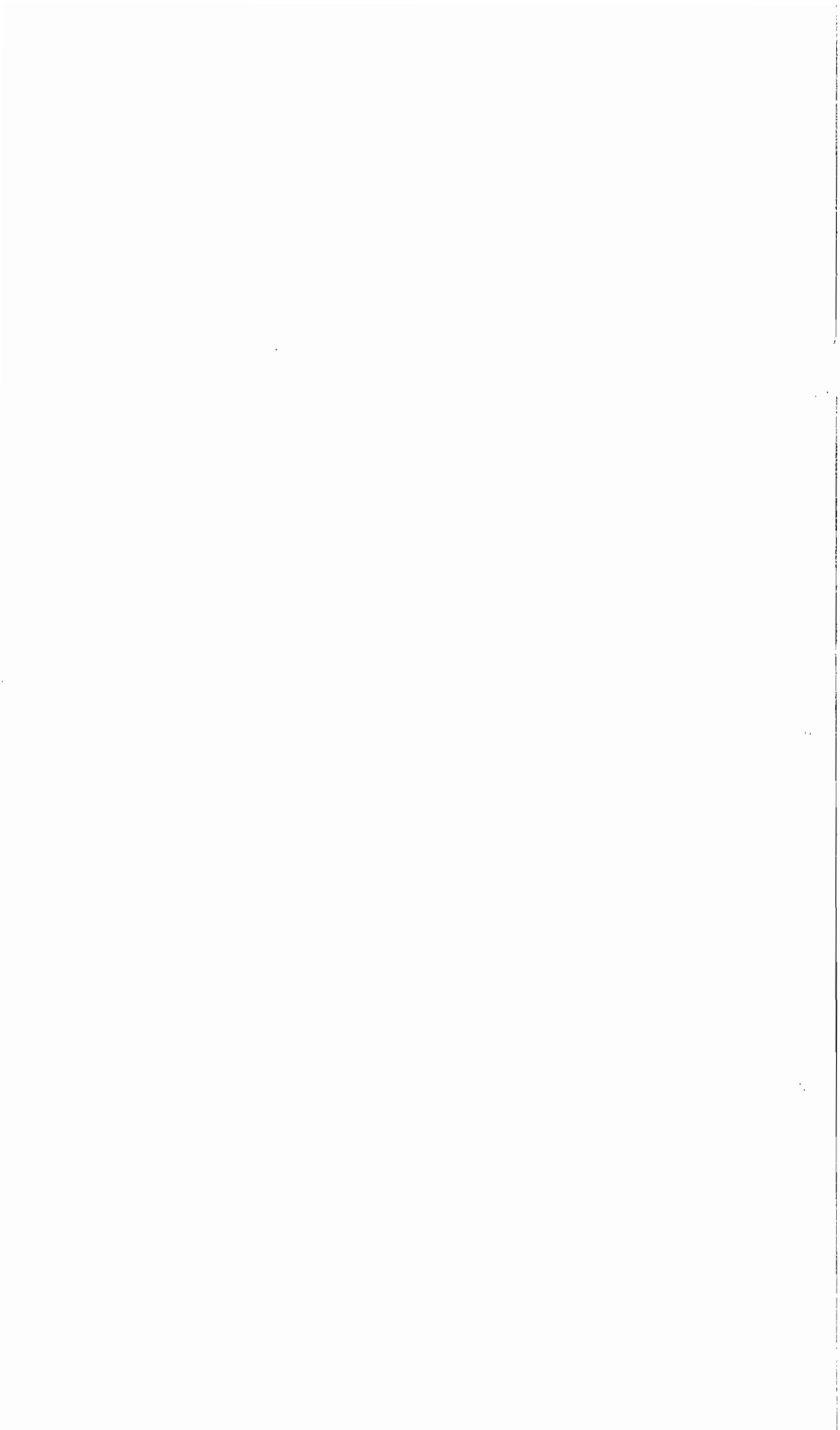
USP/IF/SBI-039/2004

Resumo

Investigamos a relevância da desordem (fraca) correlacionada ao longo de d_1 dimensões, em modelos ferromagnéticos de Potts sobre diversas redes hierárquicas (de d dimensões). Mostramos que para $d - d_1 = 1$ a aproximação de desordem fraca produz um ponto fixo não físico, indicando que o comportamento crítico não pode ser descrito por um esquema perturbativo. Para $d - d_1 > 1$, a desordem é relevante, produzindo um ponto fixo fisicamente aceitável. Estabelecemos um critério de relevância baseado no expoente de crossover.

Em seguida examinamos modelos aleatórios com interações competitivas de p spins esféricos, na versão de Curie-Weiss, que podem ser resolvidos sem o método de réplicas. Obtemos o diagrama de fases de modelos incluindo interações de 2 e 4 spins, supondo formas simples (de acordo com os esquemas de Hopfield ou de van Hemmen) para os termos aleatórios. Mostramos que as escolhas de Hopfield ou de van Hemmen não mudam a topologia dos diagramas de fase.

Finalmente, apresentamos uma revisão da construção do espaço de Fock para sistemas hamiltonianos, originalmente proposta por M. Schönberg a fim de obter a mecânica estatística clássica a partir da equação de Liouville. O mesmo tipo de formalismo pode ser aplicado à equação mestra de um sistema estocástico. Como exemplo, deduzimos o operador de evolução do modelo de Glauber linear na representação número.



Abstract

We investigate the relevance of (weak) correlated disorder, along d_1 dimensions, in ferromagnetic Potts models on d -dimensional hierarchical lattices. For $d - d_1 = 1$, we show that the weak disorder approximation leads to a non physical fixed point, which indicates that the critical behavior cannot be described perturbatively. For $d - d_1 > 1$, disorder is relevant, and the critical behavior is described by a physically acceptable fixed point. We derive a criterion of relevance of disorder, based on the crossover exponent.

We then consider the Curie-Weiss version of some p -spin spherical models, with random and competitive interactions, which can be solved without using the replica trick. We obtain the phase diagrams of model systems including 2 and 4-spin interactions, assuming simple forms (according to Hopfield and van Hemmen) for the random terms. These choices of random interactions do not affect the topology of the phase diagrams.

Finally, we review the construction of the Fock space for Hamiltonian systems, originally proposed by M. Schönberg in order to derive classical statistical mechanics from the Liouville equation. A similar formalism can be applied to the master equation of a stochastic system. As an example, we derive the evolution operator for the Glauber linear model in the number representation.

Apresentação

Esta Tese se compõe de três investigações independentes sobre o comportamento termodinâmico de modelos estatísticos na rede com desordem e sobre um formalismo para o tratamento de suas dinâmicas.

No primeiro capítulo abordamos a questão da mudança do comportamento crítico em modelos de Potts na presença de interações ferromagnéticas desordenadas. Demos continuidade a uma investigação, através de técnicas analíticas, dos efeitos de desordem correlacionada sobre o comportamento crítico. O exame de variações da geometria e da dimensão com que a correlação atinge a rede permite estabelecer comparações com nossos resultados anteriores e com resultados numéricos da literatura. Torna-se claro que o expoente de “crossover” determina a relevância da desordem no comportamento crítico.

No segundo capítulo consideramos a desordem e suas manifestações físicas em modelos desordenados com interações de p spins, que poderiam representar propriedades qualitativas de vidros reais. Para evitar o método das réplicas, consideramos interações desordenadas muito simples, de acordo com propostas de van Hemmen ou de Hopfield (com um número finito de padrões).

A análise termodinâmica dos modelos acima discutidos constitui o primeiro passo para a investigação das respectivas dinâmicas, que são particularmente interessantes no caso dos vidros de spin. Diversas abordagens dinâmicas têm se valido da representação dos operadores de evolução dos sistemas, em termos de operadores de criação e aniquilação, existentes no espaço de Fock, sujeitos a regras de comutação ou anticomutação. Na década de 1950, em um conjunto pioneiro de trabalhos, Mario Schönberg propôs uma extensão do teorema de Liouville no espaço de fase clássico, utilizando técnicas de segunda quantização e introduzindo o conceito de indistinguibilidade de partículas clássicas idênticas. O espaço de Fock, que até então era considerado uma característica intrínseca da física quântica, foi utilizado para descrever um sistema clássico, com rigor matemático e consistência física. Ao longo das últimas três décadas, com especial ênfase nos anos 90, essa mesma possibilidade foi redescoberta em diversos trabalhos, em particular no contexto de sistemas estocásticos, incluindo processos irreversíveis e reações químicas. Os operadores de evolução destes sistemas passaram a ser expressos em termos de operadores de criação e aniquilação de estados. Porém a questão da natureza desses operadores, do espaço onde estão definidos e sobre

que objetos atuam, não foi suficientemente esclarecida. Vamos apresentar, no terceiro e no quarto capítulos, uma descrição detalhada da proposta de Schönberg e apontar os argumentos que ela sugere e que possam contribuir para fundamentar a construção da representação de Fock para os sistemas e processos estocásticos.

Os resultados do primeiro capítulo desorrem de nossa dissertação de mestrado, também sob a orientação do Prof. Silvio Salinas. Para sua consecução contei com o apoio inestimável do Dr. André Pinho Vieira que persistiu em me transmitir algo de sua desenvoltura no tratamento dos modelos estatísticos. A ele devo o tratamento de peculiaridades computacionais, mas sobretudo o convencimento das minúcias que consagram o exame dos modelos de rede como um campo fértil de investigação.

O segundo capítulo se insere na área de interesse desenvolvida, presentemente, pelo Prof. Salinas com seus orientandos. É preciso lembrar, aqui, o Prof. Dr. José Roberto Leite, que nos deixou prematuramente, e que me apoiou, viabilizando condições objetivas para a conclusão deste trabalho.

Ao final do período de estudos tive a oportunidade de travar conhecimento com o Prof. Ademir Santana, o que possibilitou o exame dos artigos de Mario Schönberg nos dois últimos capítulos e sua aplicação ao modelo apresentado. A colaboração e orientação do Prof. Santana tornou possível materializar o interesse científico que desenvolvi com a convivência com o saudoso Prof. Mario, entre os anos 1972 e 1990, como seu aluno e amigo. Neste sentido, a abordagem destes artigos é uma homenagem ao Prof. Mario Schönberg no cinquentenário daquelas publicações e manifestação do compromisso que temos com a concepção de ciência que apreendemos com ele.

São insuficientes quaisquer menções que pretendam aquilatar meu débito moral com os professores Salinas e Santana, a quem só posso retribuir com amizade e respeito o que mereci de aconselhamento e apoio. O Prof. Salinas, a quem devo a oportunidade de me receber como seu estudante, associou entusiasmo e equilíbrio na minha orientação, tornando possível a consolidação dessa trindade de abordagens.

É necessário lembrar que a possibilidade de realizar este trabalho emana da lembrança que tenho de meu país, Hygino e Ida, da esperança que deposito em meus filhos, Paulo e Guilherme, e do carinho que recebo de minha esposa, a Profa. Eloisa Helena de Souza Cabral. A eles dedico esta Tese.

Introdução

Modelos de Potts com desordem correlacionada

A abordagem dos modelos consagrados do ferromagnetismo torna-se um problema reconhecidamente difícil quando se incluem elementos de desordem nas interações. Derrida e Gardner [1] propuseram um modelo de Potts ferromagnético, construído sobre a rede hierárquica do diamante, com interações aleatórias entre os primeiros vizinhos, e mostraram que era possível levar a cabo um tratamento perturbativo, analítico e controlado, nas vizinhanças da criticalidade. O procedimento é baseado em duas condições: a obtenção de relações de recorrência, fornecidas pela geometria especial da rede ¹; e uma forma especial de aleatoriedade fixa, que possibilita um truncamento convenientemente controlado nas vizinhanças da criticalidade ².

Para tratar a aleatoriedade, Derrida e Gardner consideraram uma distribuição especial de probabilidades que não se afastasse demasiado da média e cujos momentos dependessem da geometria da rede, através de um parâmetro pequeno. Este esquema é conhecido [1] como “expansão da desordem fraca”, justamente por se tratar de uma situação onde a desordem é

¹As redes hierárquicas são arranjos geométricos de pontos, no plano, produzidos por regras de construção que garantem a invariância de escala e ensejam o estabelecimento de relações exatas de recorrência entre estágios sucessivos. Conforme se pode observar nas figuras do capítulo seguinte, apresentamos vários exemplos dessas redes. Na rede do diamante, por exemplo, definidos dois pontos iniciais e um segmento, chamado ramo que os une, a aplicação sucessiva da regra que manda formar, a cada passagem, um determinado número de sítios e ramos novos, garante o processo iterativo de construção do arranjo de pontos da rede.

²Mostramos detalhadamente este processo em nossa Dissertação de Mestrado [2], bem como obtivemos as relações de recorrência exatas no espaço real da rede.

controlada através da expansão dos momentos em termos desse parâmetro pequeno. Associada a esta condição especial da desordem, a construção do modelo de interações sobre uma rede hierárquica possibilita obter expansões para os momentos da distribuição de probabilidades, que podem ser consistentemente truncadas (desprezando ordens mais altas na perturbação), gerando um sistema finito de equações, tratável analiticamente.

Com este procedimento é possível verificar [1, 2] que o modelo de Potts na rede hierárquica do diamante, com interações ferromagnéticas aleatórias entre primeiros vizinhos, que vamos denominar “modelo completamente aleatório”, apresenta dois pontos fixos que se realizam em regiões diferentes do domínio de parâmetros de expansão. A realização de um ou outro ponto fixo está relacionada à variação do expoente associado ao comportamento do calor específico do modelo uniforme subjacente. Isto era esperado com base na aplicação do critério heurístico de Harris [5], que indica a relevância da desordem, isto é, a mudança do comportamento crítico, quando o expoente crítico α associado ao calor específico muda de sinal. O sucesso do procedimento de Derrida e Gardner reside em trabalhar com uma distribuição de probabilidades sugerida pela geometria da rede e não imposta, unicamente, pela dificuldade de tratamento. Em segundo lugar, por identificar um parâmetro (pequeno) de expansão. Aí reside a escolha do modelo de Potts, que oferece um parâmetro natural, o número q de estados. Vale a pena lembrar que, na rede hierárquica do diamante, com dois ramos e duas ligações por ramo, o modelo de Potts com interações ferromagnéticas e uniformes entre primeiros vizinhos caracteriza-se por um expoente crítico α monotonicamente crescente com o número q de estados de Potts, que se anula para $q = 4 + 2\sqrt{2}$.

O modelo de Derrida e Gardner é completamente aleatório. Nosso programa de trabalho, na primeira parte desta Tese, consiste em investigar os efeitos da introdução de correlações entre as interações desordenadas, na linha de trabalho que já havia sido iniciada na nossa Dissertação de Mestrado [2]. Já tínhamos analisado um modelo de Potts de q estados, também vinculado à rede hierárquica, porém no qual a desordem se dá por camadas na rede. Neste “modelo de camadas aleatórias” as interações entre os sítios da rede pertencentes a uma determinada camada são uniformes, mas as camadas consecutivas não guardam entre si quaisquer relações de ordem, sucedendo-se aleatoriamente. Isto mimetiza, na rede hierárquica, o conhecido modelo de Ising de McCoy e Wu [6], com interações uniformes ao longo de linhas e aleatórias entre colunas de uma rede quadrada. Estendemos, para um modelo com desordem correlacionada, os requisitos analíticos que pos-

sibilitam a solução exata de Derrida e Gardner para o comportamento do modelo completamente aleatório.

Diferentemente do modelo de Derrida e Gardner, no modelo de camadas aleatorias na rede hierárquica [3] a consistência do truncamento da hierarquia de relações de recorrência depende de outro critério, que não se resume ao sinal do expoente crítico α . Além disso, quando a desordem é relevante, o novo ponto fixo situa-se numa região não física do espaço de parâmetros (o segundo momento da distribuição de probabilidades torna-se negativo), indicando a provável quebra do tratamento perturbativo. Intuitivamente pode-se argumentar que esta anomalia se relaciona com o fato de a desordem correlacionada em camadas induzir flutuações mais intensas, invalidando formas usuais de tratamento perturbativo.

Constatamos, portanto, através do modelo de camadas aleatórias na rede hierárquica, que o esquema de desordem fraca, no caso correlacionado, impede a realização física de um ponto fixo perturbativo. Além disso, na presença de desordem correlacionada, exige-se forma mais geral do critério de Harris para aquilatar a relevância dessa forma de desordem.

Após a publicação dos principais resultados da nossa dissertação de mestrado [3], decidimos analisar os efeitos de desordem correlacionada, ainda na abordagem perturbativa de desordem fraca, mas em contextos um pouco mais gerais. Nosso objetivo consistia em generalizar o critério de Harris sobre a relevância da desordem e verificar a natureza dos pontos fixos perturbativos. Há alguns anos, Andelman e Aharony [4] já haviam publicado uma investigação, puramente numérica, sobre os efeitos de desordem (parcialmente) correlacionada em modelos de Potts em determinadas redes hierárquicas. Na primeira parte desta Tese, utilizamos o esquema de desordem fraca para estudar analiticamente uma série de modelos que incluem os casos investigados por Andelman e Aharony.

Apresentamos então resultados analíticos e exatos para alguns modelos, com interação de Potts ou Ising sobre redes hierárquicas, que permitem verificar condições de relevância da desordem correlacionada. Exploramos, também, a faculdade das redes hierárquicas de propor parâmetros pequenos para conduzir as expansões, quando generalizamos a expansão da desordem fraca para outras geometrias além da já investigada rede do diamante.

Nas situações de desordem relevante aparece um cruzamento (ou “crossover”) no espaço dos parâmetros para novo ponto fixo, que poderá ou não se realizar fisicamente. Nos modelos totalmente desordenados (caso do trabalho de Derrida e Gardner) não há problemas. Na presença de desordem (parcialmente)

correlacionada, vale a relação de escala

$$\phi = \alpha + d_1 \nu, \quad (1)$$

onde ν é o expoente associado ao comprimento de correlação e d_1 é o número de dimensões correlacionadas. Torna-se, portanto, necessário considerar a dimensão das cadeias correlacionadas e a expressão do expoente de correlação para examinarmos a relevância de desordem e, inclusive, verificar analiticamente as conseqüências dos argumentos numéricos de Andelman e Aharony.

O fenômeno de cruzamento (crossover) entre pontos fixos de um diagrama dos fluxos no espaço dos parâmetros de um sistema pode ser investigado em modelos desordenados simples e analiticamente tratáveis, como estes sujeitos à desordem fraca e construídos sobre redes hierárquicas. É possível, neste casos, determinar as mudanças no comportamento crítico, induzidas pelas condições de desordem correlacionada dos modelos. Nossos resultados se mostram satisfatórios no que concerne ao programa original, pois a presença de correlação na desordem permitiu generalizar o critério de relevância, investigando modelos para os quais as condições sobre o expoente α não são suficientes para detectar alterações. Nestes casos, confirmamos, analiticamente, a necessidade de examinar a dimensão d_1 do conjunto das variáveis correlacionadas. Para estes modelos o expoente de crossover, ϕ , que não se confunde com α , é que deve ser examinado. Nossos resultados apontam diferenças qualitativas entre os casos em que (i) $d - d_1 = 1$, onde d é a dimensão do sistema, e o esquema perturbativo não funciona; e (ii) $d - d_1 > 1$, onde a desordem relevante produz um novo ponto fixo perturbativo, fisicamente aceitável. Estas situações estão de acordo com os resultados numéricos de Andelman e Aharony [4], possibilitando a proposta de uma generalização da forma usual do critério de Harris.

Modelos aleatórios de p spins esféricos

O estudo do comportamento de modelos estatísticos com interações aleatórias em blocos de $p \geq 3$ spins tem despertado bastante interesse, principalmente devido a possíveis conexões com propriedades de vidros reais. Por exemplo, há vários trabalhos sobre um modelo de $p \geq 3$ spins, dado pelo hamiltoniano de campo médio

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1, i_2, \dots, i_p} \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_p}, \quad (2)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$, $i = 1, 2 \dots N$ e $\{J_{i_1, i_2, \dots, i_p}\}$ é um conjunto de variáveis aleatórias, independentes e identicamente distribuídas, com uma probabilidade gaussiana. A exemplo do modelos de Sherrington-Kirkpatrick, com $p = 2$, a análise deste vidro de $p \geq 3$ spins requer a aplicação do método das réplicas, conseguindo-se uma solução fisicamente aceitável com pelo menos um nível de quebra de simetria entre réplicas. Sob o ponto de vista analítico, consegue-se ir um pouco mais adiante tomando variáveis esféricas de spin, isto é, supondo que $-\infty \leq \sigma_i \leq +\infty$, com o vínculo esférico

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N. \quad (3)$$

Nesse último caso, torna-se viável analisar as equações de uma dinâmica no estilo de Langevin a fim de fazer comparações com o comportamento de vidros reais. A literatura apresenta algumas razões que suscitam interesse na análise destes modelos: para $p \geq 3$ garante-se a ocorrência de uma transição de primeira ordem; as transições em alguns vidros reais apresentam, de fato, características de uma transição de primeira ordem; as equações dinâmicas para a evolução desses modelos têm semelhanças formais com as equações do tipo “mode-coupling” para vidros reais.

Em trabalho recente, Gillin e Sherrington [7] analisaram o diagrama de fases e as propriedades dinâmicas de um modelo esférico com interações de p e r spins ($p \geq 3$), dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1, i_2, \dots, i_p} \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_p} - \frac{J_0 (r-1)!}{N^{r-1}} \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_r \leq N} \sigma_{i_1} \dots \sigma_{i_r}, \quad (4)$$

onde as variáveis de spin são números reais que obedecem o vínculo esférico, e $\{J_{i_1, i_2, \dots, i_p}\}$ é um conjunto de acoplamentos fixos e independentes, associados a uma distribuição gaussiana com média nula e variância $p!J^2/2N^{p-1}$. Tanto o diagrama de fases, onde aparecem transições de primeira e segunda ordem, quanto o comportamento para tempos longos, podem ser analisados detalhadamente.

Na segunda parte da Tese propomo-nos a construir o diagrama de fases de versões mais simples dos modelos de Sherrington e Gillin, com interações aleatórias do tipo de van Hemmen (ou Hopfield, com um número limitado de padrões), a fim de evitar a utilização do método das réplicas. Nesta investigação preliminar, vamos manter a aleatoriedade para a interação de

$p = 2$ spins, considerando um termo uniforme de interação em blocos de r spins. Desta forma podemos abordar parte das razões que tornam estes modelos interessantes.

Tratamos, assim, uma sorte de modelos que associam interação aleatória, do tipo usualmente encontrado nos vidros de spins, com uma interação uniforme em blocos. A utilização de técnicas de ponto de sela e da lei dos grandes números permite obter a energia livre e construir os diagramas de fase. Mostramos que as escolhas de Hopfield ou van Hemmen não interferem nestes diagramas e encontramos transições: de segunda ordem, entre as fases desordenada e vítrea; de primeira ordem, na região de coexistência das fases ordenada e vítrea e também entre as fases ordenada e desordenada. No caso particular de um sistema binário, analisamos a coalescência de fase mista, garantindo a obediência ao comportamento termodinâmico esperado.

O espaço de Fock para modelos estatísticos.

Modelos estatísticos para vidros usuais, vidros de spin e polímeros desordenados, por exemplo, submetidos a resfriamento rápido, apresentam em geral uma dinâmica lenta de relaxação, associada ao congelamento de certos graus de liberdade. Schulz e Trimper [8] analisam um modelo de vidro de spin, denominado “facilitated Fredrickson-Andersen model”, considerando que as duas orientações de spin representam fases de baixa densidade (alta mobilidade, fase quasi-líquida) e fases de alta densidade (baixa mobilidade ou quasi-sólida), de modo a construir um modelo do tipo Ising dotado de uma dinâmica de viradas rápidas (“flip-flop dynamics”), com um comportamento vítreo.

Em geral a evolução temporal destes modelos estocásticos é introduzida através de uma equação diferencial parcial linear no tempo, denominada equação mestra, que pode ser escrita como

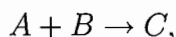
$$\partial_t P(n, t) = LP(n, t), \quad (5)$$

onde $P(n, t)$ denota a probabilidade de realização de uma configuração n no instante t , e L é o operador de evolução, usualmente denominado Liouvillian [21]. A linearidade da Eq. 5 suscita uma analogia com a equação de Schrödinger e permite que se explore para o seu tratamento, métodos teóricos bem desenvolvidos no contexto da mecânica quântica. Uma dessas técnicas

consiste na aplicação de métodos de segunda quantização [8], ou de representação no espaço número de ocupação (espaço de Fock) com propriedades de um espaço de Hilbert, para o tratamento do operador de evolução em termos de operadores de criação e aniquilação dos estados descritos pelas orientações dos spins.

Neste contexto merece destaque o trabalho de Doi [9], que compatibilizou estados de sistemas estocásticos, descritos por probabilidades, com a noção de espaço de Fock. Doi apresentou aplicações em processos de reação-difusão, usando a teoria quântica dos campos na forma canônica. Neste mesmo esforço se insere o trabalho de Grassberger e Scheunert [10] que se propuseram a construir, sistematicamente, os operadores de evolução no espaço de Fock com a introdução de operadores bosônicos de criação e aniquilação. Mais recentemente Cardy [16] também contribuiu para a área, apresentando uma multiplicidade de processos susceptíveis ao tratamento por operadores sujeitos a regras de comutação. Para revisão, é possível concentrar-se no ensaio de Mattis e Glasser [21].

O espaço onde residem os objetos matemáticos escritos para estas abordagens é o espaço de configuração natural dos sistemas e processos, onde o estado é descrito pela probabilidade de encontrar uma determinada configuração dos agentes físicos. O exemplo usual é o de uma reação química,



em que se combinam elementos para formar um determinado composto. Doi argumenta que esta combinação pressupõe o encontro de um número definido de partículas dos reagentes e neste sentido define a configuração do estado. Este tratamento da evolução temporal em um espaço número de ocupação pressupõe que se investiguem as bases da utilização do ferramental matemático do espaço de Fock no contexto clássico, já que as reações são eventos macroscópicos, de natureza eminentemente clássica.

O uso implícito da noção de representações com operadores sujeitos a regras de comutação em sistemas clássicos é anterior aos trabalhos de Doi, e provém, no caso do equilíbrio, do trabalho pioneiro de Lieb, Mattis e Schultz [13] que resolveram analiticamente o modelo de Ising bidimensional utilizando operadores fermiônicos obtidos a partir de transformações dos operadores de spin. Este procedimento tem sido utilizado em uma variedade de trabalhos; um estudo detalhado associando a equação mestra com hamiltonianos de redes de spin e métodos algébricos foi desenvolvido por Alcaraz e colaboradores [15].

No que concerne à construção de um espaço de Hilbert clássico, para conter os estados descritos pelas distribuições de probabilidade, Koopman estudara as transformações unitárias determinadas por hamiltonianos clássicos e associara a elas um espaço de Hilbert denominado, depois, espaço de Hilbert-Koopman [24]. Esta abordagem produziu desdobramentos, utilizados posteriormente por Della Riccia e Wiener [25], na análise do movimento browniano, por Hopfield e Bastini [26], em teoria cinética, e por Prigogine e colaboradores para estudar funcionais de Liapunov [27].

Por outro lado, é conhecida a abordagem de Martin, Siggia e Rose (MSR) [20] para obter a função de correlação de variáveis dinâmicas de sistemas clássicos, como funções que descrevem a resposta destes sistemas a um campo externo que age diretamente sobre as coordenadas. O cálculo solicitado é realizado com o concurso formal de um operador adjunto, associado ao campo que age sobre o sistema. Os operadores que representam estes dois campos apresentam um comutador não nulo e trazem para o tratamento de sistemas clássicos todo o ferramental da teoria quântica de campos.

Ao lado destas formulações que introduzem, de alguma forma, operadores sujeitos a regras de comutação, Janssen [17], De Dominicis [19], Peliti [11] e Dickman e Vidigal [12], apresentaram uma formulação funcional para os problemas de campos contínuos que satisfazem equações diferenciais estocásticas. Nesta abordagem um campo é usado para caracterizar o sistema, mas um campo adicional é necessário para o cálculo das funções resposta. Se na abordagem anterior temos uma duplicação de operadores com regras de comutação, nesta última abordagem temos uma duplicação de campos.

Entretanto, se por um lado as técnicas de espaço de Hilbert do número de ocupação, ou espaço de Fock, mostram-se extremamente promissoras e cada vez mais difundidas no estudo de processos estocásticos, vários aspectos tanto físicos como matemáticos permanecem obscuros, como bem apontam Andersen [23], Jensen [22] e Phythian [18]. Examinando a conexão entre as abordagens de Doi e MSR, já se apontou que o método de MSR não indica as bases matemáticas para a duplicação dos operadores, não apresenta a construção do espaço de Hilbert e da métrica utilizada, não indica os objetos matemáticos sobre os quais os operadores agem, não discute a compatibilidade entre os sistemas clássicos e a representação número, típica de estados físicos descrevendo partículas indistinguíveis apresentando simetria de bósons ou férmions, conceitos paradigmaticamente quânticos. Deve-se também notar que mesmo MSR não pleiteiam completeza nem rigor, expressando-se pela ausência de justificativas do seu procedimento.

Não raro os autores escapam dessas dificuldades com o argumento de funcionalidade do método, abordando os sistemas sobre bases fenomenológicas restritas a cada modelo. Isto tem garantido, de fato, o desenvolvimento das aplicações desses métodos do espaço de Fock. O entrave neste procedimento, contudo, é a impossibilidade de visão unificada dos diversos formalismos (aparentemente desconectados entre si) e a dificuldade de generalização para considerar situações de natureza complexa. Por exemplo, os métodos de espaço de Fock não têm sido plenamente construídos para as redes de spin, o que dificulta aplicar este formalismo para modelos de interesse.

Na última parte desta Tese, decidimos examinar a contribuição pioneira de M. Schönberg [14] para a construção da mecânica estatística clássica baseada na aplicação do método de segunda quantização à equação de Liouville no espaço de fase. Esta abordagem permite construir consistentemente o espaço de Fock, ou espaço número de ocupação de um sistema clássico, de maneira detalhada. Contribuí, também, para justificar o processo de duplicação de campos e seus operadores associados, bosônicos ou fermiônicos. O nosso trabalho tem aspectos históricos, resgatando os artigos originais de Schönberg e enfatizando a questão da consistência física na utilização da representação de números de ocupação num contexto clássico com indistinguibilidade. Neste sentido, examinamos a relação entre as formulações posteriores e estes artigos originais. Um dos propósitos é abordar essa questão da consistência física das teorias de espaço de Fock em sistemas clássicos (hamiltonianos e estocásticos) na expectativa de contribuir com argumentos físicos para o formalismo, de carácter geral, que atenda a construção do espaço número de ocupação de sistemas de spins.

Datados de 1953, os trabalhos de Schönberg nem sempre foram encontrados pelos pesquisadores posteriores. Em seu artigo de revisão [21], Martin e Glasser atribuem a Doi [9] a primeira utilização do espaço de Fock no contexto dos sistemas clássicos. Em comunicação privada conosco, D. Mattis, alertado da antecedência dos trabalhos de Schönberg, reconheceu a prioridade e nos incentivou a examinar esta contribuição à luz das descobertas posteriores. É importante frisar que não se trata de zelo historiográfico a atribuição da precedência. Trata-se, sobretudo, do reconhecimento de que as bases rigorosas da construção do espaço de Fock dos sistemas, hamiltonianos ou estocásticos, estavam dadas, explicitamente, desde o início dos anos 50, inclusive com as aplicações imediatas aos fenômenos de transporte claramente indicadas. Estava dado um formalismo matemático da mecânica estatística, geral e rigoroso, decorrente da compreensão da centralidade do espaço

de Fock para a expressão da evolução temporal de sistemas de partículas idênticas, clássicas ou quânticas.

Amparados no formalismo de Schönberg, procedemos primeiro a uma análise do teorema de Liouville, incluindo a sua compatibilidade com o conceito de amplitude de probabilidade. Com detalhes, construímos o espaço de Hilbert e a representação número no espaço de fase, o que conduz então a operadores de campo. Este procedimento garante bases matemáticas seguras para o uso da representação número num contexto fisicamente consistente com o teorema de Liouville. A partir daí, retomamos a contribuição de Schönberg por um caminho diferente. Tendo em vista o estudo de sistemas estocásticos, onde o estado é definido a partir de probabilidades de transição, mostramos como introduzir um operador de probabilidade a partir do qual se obtém a média de observáveis, representados também por operadores. O aparato teórico básico é então edificado explicitamente para sistemas descritos pela equação mestra. Esta extensão é possível, pois Schönberg [14] mostrou que o método de segunda quantização é uma propriedade geral das equações diferenciais parciais lineares no tempo. Este é o significado matemático da centralidade do espaço de Fock. Em particular, analisamos redes onde cada sítio admite a existência de mais de uma partícula (descrita por operadores com simetria de bósons), e redes excludentes, onde cada sítio admite somente uma partícula (neste caso os operadores apresentam simetria do tipo fermiônica). Com este procedimento, vários resultados apresentados na literatura, por vezes de forma intrincada ou “ad hoc”, são aqui deduzidos de modo transparente. O conforto teórico obtido nos permite então generalizar nosso procedimento para redes de spin. No final, apresentamos a aplicação destas idéias para a obtenção e tratamento de Liouvillianos, ou, operadores de evolução temporal, que expressam a dinâmica de sistemas estocásticos de interesse, como o modelo de Glauber linear.

Referências

- [1] B. Derrida and E. Gardner, *J. Phys. A : Math. Gen.* **17** 3223 (1984)
- [2] P. T. Muzy, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1998.
- [3] P. T. Muzy and S. R. Salinas, *Int. J. Mod. Phys. B* **13**, 397 (1999)
- [4] D. Andelman and A. Aharony, *Phys. Rev. B* **31**, 4305 (1985).
- [5] A. B. Harris, *J. Phys. C : Solid State Phys.* **7**, 1671 (1974).
- [6] B. M. McCoy and T. T. Wu, *Phys. Rev.* **176**, 631 (1968).
- [7] P. Gillin and D. Sherrington, *J. Phys. A* **33** 3081 (2000).
- [8] M. Schulz and S. Trimper, *Phys. Rev. E* **57** 6398 (1998).
- [9] M. Doi, *J. Phys. A* **9** 1465, 1479 (1976).
- [10] P. Grassberger and M. Scheunert, *Fortschr. Phys.* **28** 547 (1980).
- [11] L. Peliti, *J. Phys. (Paris)* **46** 1469 (1985).
- [12] R. Dickman and R. Vidigal, *Braz. J. Phys.* **33-1** 73 (2003).
- [13] E. Lieb, T. Schultz and D. Mattis, *Rev. Mod. Phys.* **36** 856 (1964).
- [14] M. Schönberg, *Il Nuovo Cimento* **9**, 1139 (1952); **10**, 419 (1953); **10**, 697 (1953).
- [15] F. Alcaraz, M. Droz, M. Hankel and V. Rittenberg, *Ann. Phys.* **230** 250 (1994).

-
- [16] J. Cardy, *Field theory and nonequilibrium statistical mechanics*, Oxford University Press, (2000).
- [17] H. K. Janssen, *Z. Phys. B* **23** 377 (1976).
- [18] R. Phythian, *J. Phys. A : Math. Gen.* **8** 1423 (1975).
- [19] C. De Dominicis, *J. Phys. (Paris)* **37** 247 (1976).
- [20] P. C. Martin, E. D. Siggia and H. A. Rose, *Phys. Rev. A* **8** 423 (1973).
- [21] D. C. Mattis and M. L. Glasser, *Rev. Mod. Phys.* **70** 979 (1998).
- [22] R. V. Jensen, *J. Stat. Phys.* **25** 183 (1981).
- [23] H. C. Andersen, *J. Math. Phys.* **41**1979 (2000).
- [24] B. O. Koopman, *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)* **17** (1931), 315.
- [25] G. Della Riccia, N. Wiener, *J. Math. Phys.* **7** (1966) 1372.
- [26] J. J. Hopfield, A. J. F. Bastini, *Phys. Rev.* **168**, 193 (1968).
- [27] B. Misra and I. Prigogine, *Lett. Math. Phys.* **7**, 421 (1983).

Capítulo 1

Modelos de Potts em redes hierárquicas com desordem correlacionada

1.1 Introdução

Os efeitos da desordem no comportamento crítico de modelos estatísticos têm sido objeto de estudos principalmente no que concerne à desordem nas interações entre os objetos físicos definidos nos sítios de uma rede. Harris [1] derivou um critério heurístico que indica ser a desordem, nestes casos, irrelevante para produzir mudanças no comportamento crítico quando o expoente α , associado ao calor específico do modelo puro (sem desordem), for negativo. Se $\alpha > 0$, a desordem se torna relevante e, na linguagem da teoria do grupo de renormalização (RG), é esperado que exista um determinado fluxo (crossover ou cruzamento) no diagrama de estados do sistema, na direção de um novo ponto fixo, atrativo de novas configurações manifestadas pela desordem. Este raciocínio mostrou-se válido para os modelos que apresentam desordem completa nas interações, no sentido de ausência de correlações [10].

A aplicação deste critério a determinados modelos na presença de correlações sugeriu que ele deveria ser generalizado para incluir situações [2, 3, 4, 5, 6] nas quais, α não seria imediatamente identificado com ϕ , o expoente de crossover, como é o caso com desordem completa. Em particular, variáveis aleatórias submetidas a uma correlação ao longo de d_1 das d dimensões es-

paciais de um sistema dão origem à relação de escala [2, 4],

$$\phi = \alpha + d_1\nu, \quad (1.1)$$

onde ν é o expoente associado ao comprimento de correlação do sistema puro. Usando a abordagem do grupo de renormalização do espaço real [7], Andelman and Aharony [4] investigaram numericamente vários modelos de Potts de q -estados dotados de interações de troca aleatórias e encontraram diferenças qualitativas entre os casos $d - d_1 > 1$ (que conduz a distribuições fixas de temperatura finita) e $d - d_1 = 1$ (que engloba o modelo de McCoy-Wu [9] e conduz a um ponto fixo de desordem infinita à temperatura nula). Intuitivamente podemos ilustrar o caso $d - d_1 = 1$ no qual, para uma concentração infinitesimal de ligações nulas, o sistema se decompõe em um setor de estruturas de dimensão $(d - 1)$, enquanto que o fluxo de evolução é redirecionado para o ponto fixo deste sistema redimensionado.

Nosso objetivo é investigar manifestações destes comportamentos, em modelos analiticamente solúveis, relacionados aos efeitos perturbativos da desordem fraca [10, 11], através do método de renormalização no espaço real, no comportamento crítico de um modelo de Potts de q -estados dotado de interações de troca desordenadas correlacionadas em camadas de várias redes hierárquicas. Modelos desse tipo, com desordem correlacionada em camadas, foram por nós investigados anteriormente [11] e [8]. Na situação examinada nesta tese pretendemos verificar a possibilidade de generalização deste comportamento, dependente da desordem correlacionada, tratando analiticamente modelos solúveis e derivando um critério mais geral que atenda ao fenômeno do crossover.

As relações de recorrência que conectam as interações, nos vários estágios de construção destas redes são dadas por equações semelhantes àquelas da aproximação de Migdal-Kadanoff para o caso de redes de Bravais e podem ser truncadas valendo-se da condição de desordem fraca. Obtemos, assim, relações para os momentos da distribuição de desordem na vizinhança de $\phi = 0$, na região onde a desordem é relevante. Dependendo da diferença entre a dimensionalidade do sistema (d) e o número de dimensões nas quais a desordem é correlacionada (d_1), distinguimos duas possibilidades: (i) para $d - d_1 = 1$, a condição de desordem fraca produz uma distribuição de probabilidades não física cujo ponto fixo é caracterizado por possuir uma variância negativa, sugerindo a existência de um ponto fixo não perturbativo no sentido de violar a condição inicial de desordem fraca; (ii) para $d - d_1 > 1$,

encontramos uma distribuição fisicamente aceitável dotada de um ponto fixo perturbativo. Estes nossos resultados analíticos [12], alcançados por uma abordagem diferente, estão de acordo com resultados numéricos conseguidos por Andelman e Aharony [4].

A organização das próximas seções é a seguinte. Derivamos na Sec.1.2 a Eq. (1.1), e obtemos o critério de relevância da desordem correlacionada envolvendo o número de variáveis aleatórias independentes na célula unitária da rede e a primeira derivada das relações de recorrência calculada no ponto fixo. Na Sec. 1.3 consideramos um modelo de Potts de q -estados para escrever o hamiltoniano de várias redes hierárquicas arranjadas em camadas e que obedecem à relação $d - d_1 = 1$. Observando a condição de desordem fraca, obtemos um novo ponto fixo relacionado à aleatoriedade que deve se realizar para q maior do que um valor q_0 , característico da expansão, que torna a desordem relevante. Reproduz-se, aqui, a situação que havíamos examinado anteriormente [11], pois, o ponto fixo fica localizado em uma região não física do espaço dos parâmetros do problema, sugerindo a necessidade de um tratamento não perturbativo no sentido apontado acima. Na Sec. 1.4 examinamos um problema similar para o qual $d_1 = 1$ e $d = 3$, obtendo uma situação fisicamente aceitável representada por um ponto fixo alcançado para $q > q_0$, como no caso completamente desordenado (sem correlação por camadas) estudado por Derrida and Gardner [10]. Porém, diferentemente, a correlação que introduzimos faz com que o critério de Harris não seja satisfeito. Somos levados então a propor um critério que considere a possibilidade de correlação. Na Sec. 1.5 estudamos um hamiltoniano de Ising ($q = 2$) modelando a interação entre os sítios de uma rede do diamante modificada com $b = 2$ ligações e l ramos (agora l , ao invés de q , é tomado como parâmetro de controle). Esta situação constitui outro exemplo de um sistema submetido à condição $d - d_1 = 1$. Assim, como na Sec. 1.2, a desordem fraca prediz um ponto fixo aleatório não físico. As conclusões que se seguem recolocam o critério generalizado para situações com desordem correlacionada, agrupando nossos resultados.

1.2 Critério para a relevância da desordem correlacionada

Para estabelecer contato com nosso trabalho anterior [11] e os resultados numéricos de Andelman e Aharony [4], consideramos um modelo d -dimensional no qual as interações são desordenadas e descritas por variáveis correlacionadas ao longo de d_1 direções espaciais. É recomendável cotejar os cálculos que se seguem com aqueles da publicação [11], oferecida no anexo e que aborda, em detalhes, um modelo determinado ao qual se aplicam as relações mais gerais que escreveremos. Admitimos que, submetido ao processo de renormalização com fator de escala b , o modelo permite obter uma relação de recorrência

$$R = R(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (1.2)$$

conectando a uma variável renormalizada x' , as $n = b^{d-d_1}$ variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas notadas como x e atribuídas à instância anterior do processo. Por esta razão, esta relação é invariante à permutação dos seus argumentos. Definindo os desvios $\varepsilon_i \equiv x_i - x_c$, onde $x_c = R(x_c, x_c, \dots, x_c)$ define o ponto crítico fixo do sistema puro, e expandindo R em uma série de Taylor em torno de x_c , temos

$$\varepsilon' \equiv x' - x_c = \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \left. \frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{x_c} \varepsilon_i \varepsilon_j + \dots, \quad (1.3)$$

$$\varepsilon'^2 = \sum_{i,j=1}^n \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \left. \frac{\partial R}{\partial x_j} \right|_{x_c} \varepsilon_i \varepsilon_j + \sum_{i,j,k=1}^n \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial x_j \partial x_k} \right|_{x_c} \varepsilon_i \varepsilon_j \varepsilon_k + \dots, \quad (1.4)$$

e de modo similar para potências maiores de ε' . Tomando a média sobre as variáveis aleatórias obtemos

$$\langle \varepsilon' \rangle = \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \langle \varepsilon \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial^2 R}{\partial x_i^2} \right|_{x_c} \langle \varepsilon^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{x_c} \langle \varepsilon \rangle^2 + \dots, \quad (1.5)$$

$$\langle \varepsilon'^2 \rangle = \sum_{i=1}^n \left(\left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \right)^2 \langle \varepsilon^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \left. \frac{\partial R}{\partial x_j} \right|_{x_c} \langle \varepsilon \rangle^2 + \dots, \quad (1.6)$$

e expressões correspondentes para os momentos de ordem mais alta dos desvios. Sendo $\langle \varepsilon \rangle$ uma medida da distância do ponto fixo, ele desempenha o papel da temperatura, enquanto $\langle \varepsilon^2 \rangle$ mede a intensidade da desordem.

O comportamento crítico do modelo é controlado pelos autovalores da matriz

$$M_{rs} = \frac{\partial \langle \varepsilon'^r \rangle}{\partial \langle \varepsilon^s \rangle}, \quad (1.7)$$

calculados no ponto fixo. O conjunto de relações de recorrência para os momentos dos desvios possui, sempre, uma solução $\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon^2 \rangle = \dots = 0$, que corresponde ao ponto fixo puro, no qual pode se mostrar [11] que M_{rs} é uma matriz cujos dois maiores autovalores são

$$\Lambda_1 = \left. \frac{\partial \langle \varepsilon' \rangle}{\partial \langle \varepsilon \rangle} \right|_{\text{puro}} = \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \quad (1.8)$$

e

$$\Lambda_2 = \left. \frac{\partial \langle \varepsilon'^2 \rangle}{\partial \langle \varepsilon^2 \rangle} \right|_{\text{puro}} = \sum_{i=1}^n \left(\left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} \right)^2. \quad (1.9)$$

Notemos que, de acordo com a simetria da relação de recorrência, para valores de i e j ,

$$\left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} = \left. \frac{\partial R}{\partial x_j} \right|_{x_c} = w, \quad (1.10)$$

e consideremos a validade da hipótese usual de escala, que permite escrever

$$\Lambda_1 = b^{y_t} \quad \text{e} \quad \Lambda_2 = \Lambda_1^\phi = b^{\phi y_t}, \quad (1.11)$$

para as relações que definem o expoente térmico y_t e o expoente de crossover ϕ .

Dada a invariância da relação de recorrência, podemos escrever para a soma sobre as $n = b^{d-d_1}$ variáveis independentes na Eq. (1.8)

$$b^{y_t} = \sum_{i=1}^n \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} = b^{d-d_1} \left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c},$$

de onde se conclui que

$$\left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c} = b^{y_t+d_1-d}.$$

Usando esta expressão e o mesmo argumento na Eq. (1.9) obtemos

$$\Lambda_2 = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial R}{\partial x_i} \Big|_{x_c} \right)^2 = b^{d-d_1} (b^{y_t+d_1-d})^2 = b^{2y_t+d_1-d},$$

ou

$$\phi y_t = 2y_t - (d - d_1), \quad (1.12)$$

ou ainda,

$$\phi = 2 - \frac{(d - d_1)}{y_t}.$$

Esta equação relaciona o expoente de crossover com a dimensão do conjunto de variáveis correlacionadas e permite obter, como caso particular para $d_1 = 0$, o critério de Harris. Usando a relação de hiperescala

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} = 2 - \frac{d \ln b}{\ln(nw)},$$

obtemos, neste caso, $\phi = \alpha$, que é a relação conseguida por Harris.

Se $d_1 \neq 0$ escrevemos

$$\phi = \alpha + \frac{d_1}{y_t} = \alpha + d_1 \nu = \frac{d - d_1}{d} \alpha + 2 \frac{d_1}{d}, \quad (1.13)$$

que mostra claramente que o critério de Harris ($\phi = \alpha > 0$) não é satisfeito na presença de desordem correlacionada ($d_1 \neq 0$). Esta relação é derivada também em um contexto diferente por Mukherji e Bhattacharjee [5]. O valor de $1/y_t$ é usualmente identificado com o expoente do comprimento de correlação ν , que é equivalentemente dado na Eq. (1.1). Isto também mostra que, para $d_1 > 0$, o expoente de crossover é maior do que α , indicando que a desordem correlacionada induz flutuações geométricas mais intensas do que a desordem não correlacionada, o que é razoável intuitivamente e está de acordo com os resultados analíticos que obtivemos em [8] e [11] tratando um modelo de Potts em uma rede hierárquica com desordem em camadas.

O critério geral para a relevância da desordem é, portanto, $\phi > 0$, ou seja

$$\alpha > -2 \frac{d_1}{d - d_1}, \quad (1.14)$$

(que recupera $\alpha = 0$ quando a desordem é completa, com $d_1 = 0$. Considerando as Eqs. (1.8)-(1.10), esta relação é equivalente a

$$nw^2 > 1, \quad (1.15)$$

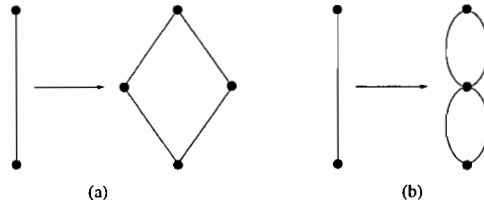


Figura 1.1: (a) rede do diamante. (b) rede entrelaçada.

conforme os resultados [8] particulares que obtivemos analisando apenas o comportamento da expansão. Neste sentido a expressão 1.14 generaliza o critério estabelecido por Derrida, Dickinson e Yeomans. [3].

No caso do sistema completamente desordenado, analisado por Derrida e Gardner [10] e para o qual $d_1 = 0$, o requisito expresso na Eq. (1.14) torna-se equivalente à forma usual do critério de Harris ($\alpha > 0$). Neste caso, esta forma mostra-se também equivalente ao argumento apontado por Derrida, Dickinson e Yeomans [3] de que a simetria completa da relação de recorrência nas suas variáveis é suficiente para garantir que a desordem interfira no comportamento crítico das redes hierárquicas. Porém, conforme apontamos em [8] é preciso cautela para apoiar-se no argumento de simetria destes autores, pois, mesmo redes simétricas, dotadas de relação simétrica de recorrência, não obedecem, necessariamente, ao critério de Harris, em virtude de possuírem expoente de crossover diferente do expoente associado ao calor específico, como fato decorrente da correlação da desordem. A única garantia razoável da relevância da desordem na mudança do comportamento crítico é a observação da relação 1.14 ou suas similares.

1.3 Modelos de Potts com desordem correlacionada: caso $d - d_1 = 1$

Os sucessivos estágios das redes hierárquicas são obtidos substituindo uma ligação existente, em um estágio anterior, por uma célula unitária original no estágio seguinte. Na Fig. 1.1(a), apresentamos os primeiros dois estágios da construção da rede conhecida pelo nome de rede do diamante (com $b = 2$ ligações e $l = 2$ ramos). A rede hierárquica do laço, com $b = 2$ ligações e $l = 2$ ramos, é ilustrada na Fig. 1.1(b).

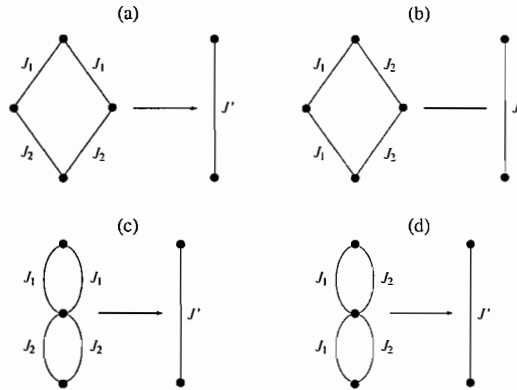


Figura 1.2: Redes hierárquicas do diamante (a) e (b) e entrelaçadas (c) e (d), com interações aleatórias correlacionadas.

Consideramos agora um modelo de Potts de q -estados, dado pelo hamiltoniano.

$$\mathcal{H}_P = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (1.16)$$

onde a soma é feita sobre os pares de sítios de primeiros vizinhos da rede hierárquica; as variáveis de spin σ_i assumem q valores; δ é o símbolo de Kronecker; e o conjunto $\{J_{ij} > 0\}$ tem por elementos as variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas que expressam o valor das interações entre os sítios. Estamos interessados em formas correlacionadas da desordem, seja em camadas (veja Figs. 1.2(a) e 1.2(c)) ou em ramos (veja Figs. 1.2(b) e 1.2(d)) das estruturas hierárquicas.

Introduzindo uma variável mais conveniente $x_i = \exp(\beta J_i)$, onde β é o inverso da temperatura absoluta, é imediato seguir com o processo de decimação das estruturas que reproduz a tomada da média térmica para obter as relações de recorrência procuradas. Um detalhamento maior deste cálculo, para a rede hierárquica particular do diamante, está registrado em [8]. Nesta seção consideramos os seguintes modelos:

- A. rede do diamante com camadas aleatórias, dada pelo diagrama da Fig. 1.2(a), cuja relação de recorrência é

$$x' = R_A(x_1, x_2) = \left(\frac{x_1 x_2 + q - 1}{x_1 + x_2 + q - 2} \right)^2; \quad (1.17)$$

B. rede do diamante com ramos aleatórios, Fig. 1.2(b), onde

$$x' = R_B(x_1, x_2) = \left(\frac{x_1^2 + q - 1}{2x_1 + q - 2} \right) \left(\frac{x_2^2 + q - 1}{2x_2 + q - 2} \right); \quad (1.18)$$

C. rede do laço com camadas aleatórias, Fig. 1.2(c), na qual

$$x' = R_C(x_1, x_2) = \frac{x_1^2 x_2^2 + q - 1}{x_1^2 + x_2^2 + q - 2}; \quad (1.19)$$

D. rede do laço com ramos aleatórios, Fig. 1.2(d), quando

$$x' = R_D(x_1, x_2) = \frac{x_1^2 x_2^2 + q - 1}{2x_1 x_2 + q - 2}. \quad (1.20)$$

Em todos estes modelos a desordem está correlacionada em apenas uma dimensão fractal ($d_1 = 1$), das $d = 2$ dimensões fractais da rede. De acordo com a Eq. (1.14), esperamos que a desordem seja relevante para $\alpha > -2$.

Considerando $x' = x_c + \varepsilon'$ e $x_i = x_c + \varepsilon_i$, realizamos a expansão de Taylor em torno do ponto fixo dos sistemas uniformes, dado por $x_c = R(x_c, x_c)$. Para todos estes modelos, com $n = 2$ valores independentes do parametro que define a interação de troca (em ramos, ou camadas diferentes), é imediato escrever a relação de recorrência em termos genéricos,

$$\begin{aligned} \varepsilon' &= w(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) + m(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2) + f(\varepsilon_1 \varepsilon_2^2 + \varepsilon_1^2 \varepsilon_2) \\ &+ p\varepsilon_1 \varepsilon_2 + c\varepsilon_1^2 \varepsilon_2^2 + k(\varepsilon_1^3 + \varepsilon_2^3) + a(\varepsilon_1^4 + \varepsilon_2^4), \end{aligned} \quad (1.21)$$

onde w, m, p, f, c, k e a são os coeficientes de Taylor que dependem da topologia de cada um dos modelos ilustrados na Fig. 1.2 e de acordo com o raciocínio da Sec. 1.2 e a Eq. (1.3). Particularmente interessa-nos $w =$

$$\left. \frac{\partial R}{\partial x_i} \right|_{x_c}.$$

A aproximação de desordem fraca [10] e [11] consiste em supor que

$$\langle \varepsilon \rangle \sim \langle \varepsilon^2 \rangle \sim \lambda, \quad (1.22)$$

$$\langle \varepsilon^3 \rangle \sim \langle \varepsilon^4 \rangle \sim \lambda^2, \quad (1.23)$$

ou, de maneira geral,

$$\langle \varepsilon^{2p-1} \rangle \sim \langle \varepsilon^{2p} \rangle \sim \lambda^p, \quad (1.24)$$

onde λ é um parâmetro adicional que permitirá uma expansão conveniente. Neste sentido podemos usar a Eq. (1.21) para escrever relações de recorrência para os momentos dos desvios, considerando termos até segunda ordem em λ . Para os quatro primeiros momentos valem as relações

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon' \rangle &= 2w \langle \varepsilon \rangle + p \langle \varepsilon \rangle^2 + 2m \langle \varepsilon^2 \rangle + 2f \langle \varepsilon \rangle \langle \varepsilon^2 \rangle \\ &+ c \langle \varepsilon^2 \rangle^2 + 2k \langle \varepsilon^3 \rangle + 2a \langle \varepsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (1.25)$$

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon'^2 \rangle &= 2w^2 \langle \varepsilon \rangle^2 + 2w^2 \langle \varepsilon^2 \rangle + 4w(m+p) \langle \varepsilon \rangle \langle \varepsilon^2 \rangle \\ &+ (2m^2 + 4fw + p^2) \langle \varepsilon^2 \rangle^2 + 4wm \langle \varepsilon^3 \rangle \\ &+ (4wk + 2m^2) \langle \varepsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (1.26)$$

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon'^3 \rangle &= 3w \langle \varepsilon \rangle \langle \varepsilon^2 \rangle + 3(m+p) \langle \varepsilon^2 \rangle^2 \\ &+ w \langle \varepsilon^3 \rangle + 3m \langle \varepsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (1.27)$$

e

$$\langle \varepsilon'^4 \rangle = 3w^2 \langle \varepsilon^2 \rangle^2 + w^2 \langle \varepsilon^4 \rangle. \quad (1.28)$$

É evidente a presença do ponto fixo não aleatório correspondente ao modelo puro,

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon^2 \rangle = \langle \varepsilon^3 \rangle = \langle \varepsilon^4 \rangle = 0. \quad (1.29)$$

Conforme afirmamos na seção anterior, este ponto fixo se torna instável com respeito à desordem para $2w^2 > 1$. A inspeção do comportamento assintótico de ordem λ da Eq. (1.26) mostra que o segundo momento renormalizado depende apenas de $\langle \varepsilon^2 \rangle$, com o coeficiente $2w^2$ e conduz ao requisito de estabilidade da solução que propusemos anteriormente. Esperamos, então, que esta condição corresponda a um valor crítico q_0 do número de estados do modelo de Potts, associado ao ponto fixo aleatório. Da expressão

$$x_c = R(x_c, x_c) \quad (1.30)$$

para o ponto fixo puro, podemos expressar de modo geral q como uma função de x_c e, usando a condição $2w^2 = 1$, determinar o valor crítico $x_c(q_0)$. Para ambos os modelos apresentados nas Figs. 1.2(a) e 1.2(b), temos

$$q = (\sqrt{x_c} - 1)(x_c - 1), \quad (1.31)$$

e $x_c(q_0) = 2.15127\dots$, correspondendo a um modelo de Potts com $q_0 = 0.53732\dots$ estados. Para ambos os modelos com estruturas entrelaçadas, dispostos nas Figs. 1.2(c) e 1.2(d), obtemos

$$q = (x_c - 1)(x_c^2 - 1), \quad (1.32)$$

com $x_c(q_0) = 1.46672\dots$, para um mesmo valor $q_0 = 0.53732\dots$. Na sequência do raciocínio podemos prever que a desordem será relevante para $q > q_0$.

Para fazer conexão entre a expansão na desordem e as características do modelo de q -estados, consideremos agora o parâmetro λ , que controla a condição de desordem fraca, expresso em termos das variáveis do modelo,

$$\lambda = x_c(q) - x_c(q_0) \simeq \left. \frac{dx_c}{dq} \right|_{q_0} (q - q_0) \equiv \left. \frac{dx_c}{dq} \right|_{q_0} \Delta q, \quad (1.33)$$

para que possamos investigá-lo na imediata vizinhança do valor crítico característico q_0 . Isto está justificado, pois a simetria do parâmetro de ordem é um dos fatores esperados para determinar a classe de universalidade dos modelos e Δq garante esta condição. Entretanto, graças à condição de desordem fraca, λ surge como um parâmetro algebricamente mais conveniente. Daí a conexão que a última equação indica. Inspeccionando as Eqs. 1.25-1.28, podemos escrever, até primeira ordem em λ , os coeficientes w e m como

$$w = \frac{1}{2}\sqrt{2} + w_1\lambda \quad \text{e} \quad m = m_0 + m_1\lambda. \quad (1.34)$$

Os coeficientes destas expansões em λ são: $w_1 = 0.13325\dots$, para as estruturas em diamante, e $w_1 = 0.39088\dots$, para as estruturas entrelaçadas. Os outros coeficientes são $m_0 = -0.19088\dots$ e $m_1 = 0.19865\dots$, para o modelo A; $m_0 = 0.01849\dots$ e $m_1 = 0.00758\dots$, para o modelo B; $m_0 = -0.48935\dots$ e $m_1 = 1.22433\dots$, para o modelo C; e $m_0 = 0.02711\dots$ e $m_1 = 0.02027\dots$, para o modelo D. Os coeficientes restantes podem ser calculados em ordem zero em λ (os valores numéricos com cinco casas decimais estão na Tabela 1.1).

Estamos agora em condição de obter, até a ordem conveniente em Δq , os valores não nulos dos momentos correspondentes ao ponto fixo aleatório. Substituindo as condições de desordem fraca expressas nas Eqs.(1.22) e (1.23), nas Eqs. (1.25)-(1.28) e impondo que haja consistência entre os coeficientes

coeficiente	modelo A	modelo B	modelo C	modelo D
a	-0.00926	0.00917	-0.92623	0.02894
c	0.08549	0.00016	1.38173	0.07163
k	0.04676	-0.01302	0.25648	-0.02801
f	-0.05370	0.00608	-0.33156	-0.04706
p	0.65117	0.23242	1.56929	0.53634

Tabela 1.1: Coeficientes da expansão de desordem fraca para os modelos da Fig. 1.2.

momento	modelo A	modelo B	modelo C	modelo D
$\langle \varepsilon \rangle / \Delta q$	-14.904	1.0208	-4.4401	0.34798
$\langle \varepsilon^2 \rangle / \Delta q$	-16.170	-11.434	-1.8791	-2.6575
$\langle \varepsilon^3 \rangle / (\Delta q)^2$	1444.5	325.73	46.390	39.946
$\langle \varepsilon^4 \rangle / (\Delta q)^2$	784.41	392.21	10.593	21.187

Tabela 1.2: Momentos dos desvios do ponto fixo aleatório para os modelos da Fig. 1.2 de acordo com a expansão de desordem fraca.

de mesma potência de Δq obtemos os termos para os valores fixos dos momentos de acordo com a Tabela 1.2.

Para empreender a análise de estabilidade linear, em torno dos pontos fixos obtidos, devemos calcular os autovalores Λ_1 a Λ_4 da matriz

$$M_{rs} = \frac{\partial \langle \varepsilon'^r \rangle}{\partial \langle \varepsilon^s \rangle}. \quad (1.35)$$

O critério de estabilidade permite antecipar que os autovalores (e também os expoentes críticos) são os mesmos para os modelos dos tipos A, B, C e D. Encontraremos sempre dois autovalores, Λ_3 e Λ_4 , cujo valor absoluto é menor do que a unidade. Em torno do ponto fixo puro,

$$\Lambda_1^{(p)} = \sqrt{2} + 0.31018\Delta q, \quad (1.36)$$

$$\Lambda_2^{(p)} = 1 + 0.43866\Delta q, \quad (1.37)$$

e o expoente associado ao calor específico será

$$\alpha_p = -2 + 2.53141\Delta q. \quad (1.38)$$

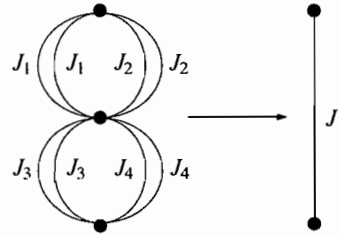


Figura 1.3: Rede entrelaçada com $d = 3$ e $d_1 = 1$

Em torno do ponto fixo aleatório,

$$\Lambda_1^{(r)} = \sqrt{2} + 0.83670\Delta q, \tag{1.39}$$

$$\Lambda_2^{(r)} = 1 - 0.43866\Delta q, \tag{1.40}$$

e

$$\alpha_r = -2 + 6.82843\Delta q. \tag{1.41}$$

De acordo com a Eq. (1.37), a desordem se torna relevante para $\Delta q > 0$. Assim, como mostra a Tabela 1.2, a expansão para desordem fraca produz valores negativos (e neste sentido não-físicos) para o segundo momento associado ao ponto fixo aleatório nos casos dos modelos dos tipos A a D. Isto sugere que o ponto fixo desses sistemas, para os quais $d - d_1 = 1$ é não perturbativo, de acordo com os cálculos numéricos de Andelman e Aharony [4] que predizem um ponto fixo associado a desordem infinita nestes casos. Outro padrão de comportamento não habitual resultante da expansão de desordem fraca é que ela prediz que o valor do expoente do calor específico na presença de desordem (α_r) é *maior* do que aquele calculado para o modelo puro (α_p), em desacordo com a expectativa que a desordem enfraqueça a transição.

1.4 Um modelo de Potts com desordem correlacionada: caso $d - d_1 > 1$

Para o exame do caso $d - d_1 > 1$ consideraremos um modelo de Potts que descreve as interações entre os sítios de uma rede hierárquica do tipo laço, ilustrada na Fig. 1.3. A célula unitária contém $n = 4$ variáveis aleatórias independentes $x_i \equiv \exp(\beta J_i)$, em termos das quais a relação de recorrência

é dada por

$$R(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{x_1 x_2 x_3 x_4 + q - 1}{x_1 x_2 + x_3 x_4 + q - 2}. \quad (1.42)$$

Seguindo os mesmos passos da seção anterior fica estabelecido que

$$q = (x_c - 1)(x_c^2 - 1), \quad (1.43)$$

$q_0 = 4 + 2\sqrt{2}$ e $x_c(q_0) = 1 + \sqrt{2}$. Realizando a expansão convenientemente truncada pela condição de desordem fraca e tomando a média sobre as variáveis desordenadas, obtemos o conjunto de relações de recorrência

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon' \rangle &= 4w \langle \varepsilon \rangle + 2(p_1 + 2p_2) \langle \varepsilon \rangle^2 + 4m \langle \varepsilon^2 \rangle + 4(f_1 + 2f_2) \langle \varepsilon \rangle \langle \varepsilon^2 \rangle \\ &+ 2(c_1 + 2c_2) \langle \varepsilon^2 \rangle^2 + 4k \langle \varepsilon^3 \rangle + 4a \langle \varepsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (1.44)$$

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon'^2 \rangle &= 12w^2 \langle \varepsilon \rangle^2 + 4w^2 \langle \varepsilon^2 \rangle + 8w(3m + p_1 + 2p_2) \langle \varepsilon \rangle \langle \varepsilon^2 \rangle \\ &+ [12m^2 + 8w(f_1 + 2f_2) + 2(p_1^2 + 2p_2^2)] \langle \varepsilon^2 \rangle^2 \\ &+ 8wm \langle \varepsilon^3 \rangle + (8wk + 4m^2) \langle \varepsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (1.45)$$

$$\langle \varepsilon'^3 \rangle = 9w \langle \varepsilon \rangle \langle \varepsilon^2 \rangle + 3(3m + p_1 + 2p_2) \langle \varepsilon^2 \rangle^2 + w \langle \varepsilon^3 \rangle + 3m \langle \varepsilon^4 \rangle, \quad (1.46)$$

e

$$\langle \varepsilon'^4 \rangle = 9w^2 \langle \varepsilon^2 \rangle^2 + w^2 \langle \varepsilon^4 \rangle. \quad (1.47)$$

Devemos notar que devido à simetria da rede ser inferior à das redes anteriores teremos um maior número de coeficientes e que q_0 fica determinado, agora, a partir da condição $4w^2 = 1$, que envolve, como coeficiente, o número de variáveis independentes. Nas vizinhanças do valor crítico do parâmetro de Potts q_0 , e em primeira ordem da variação Δq , obtemos

$$w = \frac{1}{2} + \frac{17\sqrt{2} - 24}{4} \Delta q \quad (1.48)$$

e

$$m = \frac{\sqrt{2} - 2}{8} + \frac{133 - 94\sqrt{2}}{16} \Delta q. \quad (1.49)$$

Os valores dos coeficientes remanescentes estão listados na Tabela 1.3.

$\left \frac{p_1}{\frac{3\sqrt{2}}{4} - 1} \right $	$\left \frac{p_2}{\frac{\sqrt{2}}{2} - 1} \right $	$\left \frac{c_1}{\frac{109\sqrt{2}-144}{32}} \right $	$\left \frac{c_2}{\frac{27\sqrt{2}-38}{32}} \right $	$\left \frac{f_1}{\frac{25-18\sqrt{2}}{16}} \right $	$\left \frac{f_2}{\frac{11-8\sqrt{2}}{16}} \right $	$\left \frac{k}{\frac{3-2\sqrt{2}}{16}} \right $	$\left \frac{a}{\frac{7\sqrt{2}-10}{64}} \right $
--	---	---	---	---	--	---	--

Tabela 1.3: Valores dos coeficientes da expansão de desordem fraca para o modelo da Sec. 1.4.

Os momentos dos desvios em torno do ponto fixo aleatório são dados por

$$\begin{aligned}
 \langle \varepsilon \rangle &= \frac{1}{7} (5 - 3\sqrt{2}) \Delta q, \\
 \langle \varepsilon^2 \rangle &= \frac{1}{7} (4 - \sqrt{2}) \Delta q, \\
 \langle \varepsilon^3 \rangle &= \frac{3}{49} (95\sqrt{2} - 128) (\Delta q)^2, \\
 \langle \varepsilon^4 \rangle &= \frac{6}{49} (9 - 4\sqrt{2}) (\Delta q)^2.
 \end{aligned} \tag{1.50}$$

A análise de estabilidade linear em torno do ponto fixo puro fornece os autovalores

$$\Lambda_1^{(p)} = 2 + (17\sqrt{2} - 24) \Delta q, \tag{1.51}$$

$$\Lambda_2^{(p)} = 1 + (17\sqrt{2} - 24) \Delta q, \tag{1.52}$$

e o expoente do calor específico,

$$\alpha_p = -1 + \frac{3}{2} \frac{17\sqrt{2} - 24}{\ln 2} \Delta q. \tag{1.53}$$

Em torno do ponto fixo aleatório temos

$$\Lambda_1^{(r)} = 2 - \frac{1}{7} (92 - 65\sqrt{2}) \Delta q, \tag{1.54}$$

$$\Lambda_2^{(r)} = 1 - (17\sqrt{2} - 24) \Delta q, \tag{1.55}$$

com

$$\alpha_r = -1 - \frac{3}{14} \frac{92 - 65\sqrt{2}}{\ln 2} \Delta q. \tag{1.56}$$

Estes resultados mostram que, mais uma vez, a desordem se torna relevante para $\Delta q > 0$, caso ao qual está associado um valor positivo (e fisicamente aceitável) para o segundo momento da distribuição dos desvios em

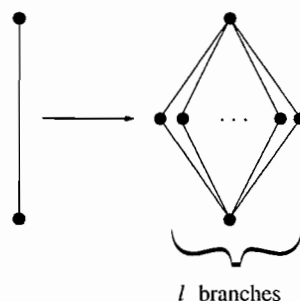


Figura 1.4: Rede generalizado diamante com $b = 2$ ligações e l ramos

torno do ponto fixo aleatório, agora plenamente atingível. Mais ainda, vale a relação $\alpha_r < \alpha_p$, de modo coerente com o modelo completamente desordenado ($d_1 = 0$) estudado por Derrida e Gardner [10] e também de acordo com os resultados numéricos. A condição de desordem fraca prediz um ponto fixo (perturbativo) associado ao comportamento crítico na presença de desordem finita, com valores dos expoentes críticos que se aproximam continuamente daqueles do modelo puro para $\Delta q \rightarrow 0$.

1.5 Um modelo de Ising com desordem correlacionada

O conjunto de relações de recorrência dado pelas Eqs. (1.25) a (1.28), com uma redefinição conveniente de parâmetro, pode ser usado para tratar um modelo de Ising para interações em uma rede do diamante dotada de estrutura mais geral, com $b = 2$ ligações e l ramos, apresentando desordem correlacionada em interações de troca ferromagnéticas correlacionadas em camadas, como ilustrado na Fig. 1.4. Esta estrutura também se enquadra na condição $d - d_1 = 1$. Enquanto o modelo de Potts apresenta o parâmetro natural q , usado para controlar a variação das grandezas físicas, neste novo caso introduzimos, intencionalmente, a modificação na topologia da rede para dispormos de um novo parâmetro, o número de ramos l , responsável pelo mesmo efeito.

Assim, seja o hamiltoniano.

$$\mathcal{H}_I = - \sum_{(i,j)} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.57)$$

com $\sigma_i = \pm 1$. A variável conveniente é agora a transmissividade [16], $t_i = \tanh \beta J_i$, e o processo de decimação dos sítios intermediários (correspondente à soma sobre os valores das variáveis do tipo spin de Ising) conduz à relação de recorrência

$$t' = R_l(t_1, t_2) = \tanh\{l \tanh^{-1}(t_1 t_2)\}. \quad (1.58)$$

Como na Sec. 1.3, escrevemos $t' = t_c + \varepsilon$ onde t_c é a transmissividade crítica do modelo uniforme. Construindo as médias dos desvios e usando a condição de desordem fraca obtemos as Eqs. (1.25) a (1.28).

Os parâmetros críticos para a relevância da desordem, $l_0 = 1.44976 \dots$ e $t_c(l_0) = 0.79951 \dots$, vêm das Eqs. (1.58) e (1.15). O parâmetro pequeno, característico da desordem pode ser escolhido como

$$\lambda = t_c(l) - t_c(l_0) = \left. \frac{dx_c}{dl} \right|_{l_0} (l - l_0) \equiv \left. \frac{dx_c}{dl} \right|_{l_0} \Delta l. \quad (1.59)$$

Novamente vale lembrar que nos valem os parâmetros λ , conveniente para manipulações algébricas, embora Δl seja a variável relevante do ponto de vista do modelo. Os coeficientes da expansão de Taylor nas Eqs. (1.25) a (1.28) são dados por $w = \sqrt{2}/2 - 0.54522\lambda$, $m = -0.49698 - 0.65422\lambda$, $a = 0.11520$, $c = -1.64903$, $k = -0.12543$, $f = -1.61924$, e $p = -0.10953$. Os momentos em torno do ponto fixo aleatório são dados por

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon \rangle &= -0.64971 \Delta l, \\ \langle \varepsilon^2 \rangle &= -0.27076 \Delta l, \\ \langle \varepsilon^3 \rangle &= -0.30084 (\Delta l)^2, \\ \langle \varepsilon^4 \rangle &= +0.21993 (\Delta l)^2. \end{aligned} \quad (1.60)$$

Prosseguindo, a análise linear de estabilidade fornece os autovalores $\Lambda_1^{(p)} = \sqrt{2} + 0.71884 \Delta l$ e $\Lambda_2^{(p)} = 1 + 1.01659 \Delta l$, para o ponto fixo puro, e $\Lambda_1^{(r)} = \sqrt{2} + 1.20537 \Delta l$ e $\Lambda_2^{(r)} = 1 - 1.01659 \Delta l$, para o ponto fixo aleatório. A desordem então é relevante para $\Delta l > 0$, mas ainda obtemos $\langle \varepsilon^2 \rangle < 0$ nesta área de relevância.

Os expoentes críticos associados ao calor específico são

$$\alpha_p = -1.07163 + 2.51471\Delta l \quad (1.61)$$

e

$$\alpha_r = -1.07163 + 5.56379\Delta l. \quad (1.62)$$

Para $\Delta l < 0$, que corresponde a $\alpha < -1.07163 \dots$, o ponto fixo puro é estável e o modelo aleatório apresenta o mesmo comportamento crítico do seu equivalente puro. Para $\Delta l > 0$, que corresponde a $\alpha > -1.0713 \dots$ (produzindo, novamente, $\alpha_r > \alpha_p$), referimo-nos a uma nova classe de comportamento crítico aleatório no qual porém, o ponto fixo apresenta característica não perturbativa, como sugerido pelo caráter não físico dos resultados da expansão de desordem fraca.

1.6 Conclusões

Utilizamos a condição de desordem fraca e as técnicas do grupo de renormalização no espaço real para investigar os efeitos da desordem correlacionada no comportamento crítico de alguns modelos de Potts com q estados com interações ferromagnéticas desordenadas ao longo de d_1 das d dimensões espaciais da rede. Escrevemos relações exatas de recorrência para o cálculo da função de partição sobre estruturas hierárquicas dos tipos diamante e laço, valendo-nos da equivalência entre a tomada de médias térmicas e o procedimento de Migdal-Kadanoff para retículos de Bravais correspondentes.

A condição de desordem fraca conduz a resultados analíticos permitindo truncar convenientemente as relações de recorrência para os momentos da função de distribuição de probabilidades. Derivamos uma expressão generalizada para o critério de Harris, para a relevância da desordem correlacionada, a partir de argumentos de escala. Mostramos que o parâmetro importante para este critério é o número de variáveis independentes na célula unitária e que a relação que o deriva é fornecida pela primeira derivada das relações de recorrência no ponto fixo puro. São também apresentados os cálculos que permitem comparar os nossos resultados analíticos com os valores numéricos encontrados por Andelman and Aharony.

Para o modelo de Potts de q -estados sobre várias redes hierárquicas dotadas de interações de troca ferromagnéticas aleatórias e correlacionadas por $d_1 = 1$ das $d = 2$ dimensões, obtemos um novo ponto fixo aleatório para q

maior do que um valor característico q_0 , a partir do qual a desordem torna-se relevante. Este ponto fixo, entretanto, está localizado em uma região não física do espaço dos parâmetros, o que sugere consideremos esta situação análoga à apresentada numericamente por Andelman e Aharony, de um ponto fixo não perturbativo associado à desordem infinita. O caráter não-físico do ponto, indica que um tratamento não-perturbativo deve permitir alcançar um terceiro ponto fixo, de natureza física, que responda pelo comportamento crítico que a instabilidade do ponto fixo uniforme indica. Outrossim, para um modelo de Potts de q estados sobre uma rede hierárquica do diamante com $d_1 = 1$ e $d = 3$, obtivemos um ponto fixo fisicamente aceitável para $q > q_0$, do mesmo modo que no modelo completamente aleatório (sem desordem correlacionada) investigado por Derrida e Gardner. Apesar disso, para esse modelo com desordem correlacionada, o critério de Harris não é satisfeito, devendo ser substituído pelo requisito que apresentamos. Consideramos, ainda, um modelo de Ising ($q = 2$) sobre uma rede do diamante com $b = 2$ ligações e l ramos (onde l , no lugar de q , é o parâmetro de controle). Esse é um outro exemplo de um sistema que satisfaz a relação $d - d_1 = 1$. Da mesma forma, a expansão de desordem fraca prediz um ponto fixo aleatório com características não físicas.

Resumindo nossos resultados, apontamos que, na vizinhança do ponto no qual a desordem se torna relevante, a expansão sob a condição de desordem fraca produz sempre um ponto fixo aleatório, porém existem duas possibilidades quanto à realização deste ponto como modificador do comportamento crítico do modelo, a depender da diferença entre d e d_1 : (i) se $d - d_1 = 1$, o ponto fixo é caracterizado por estar associado a uma distribuição de probabilidades cuja variância é negativa, sugerindo, portanto, comportamento não físico e a existência de outro ponto fixo não perturbativo associado à desordem infinita; (ii) se $d - d_1 > 1$, o tratamento prediz um ponto fixo perturbativo aceitável. Deve ser mencionado que o mesmo comportamento ocorre em redes hierárquicas mais gerais, como aquelas dotadas de algumas ligações não interagentes, consideradas por Griffiths e Kauffman [14]. Ainda, no caso no modelo de Ising quântico com desordem nas ligações, que corresponde ao limite de extrema anisotropia do modelo bidimensional de McCoy e Wu ($d - d_1 = 1$), Fisher [15] obteve uma distribuição de probabilidades que possui um ponto fixo associado à variância infinita. É certamente interessante investigar se considerações semelhantes valem para outros modelos, como, por exemplo, os que definem o problema de polímeros diretos em condições aleatórias [5] sobre redes hierárquicas ou mesmo retículos de Bravais.

Referências

- [1] A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [2] T. C. Lubensky, Phys. Rev. B **11**, 3573 (1975).
- [3] B. Derrida, H. Dickinson, and J. Yeomans, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, L53 (1985).
- [4] D. Andelman and A. Aharony, Phys. Rev. B **31**, 4305 (1985).
- [5] S. Mukherji and S. M. Bhattacharjee, Phys. Rev. E **52**, 1930 (1995).
- [6] A. Efrat, Phys. Rev. E **63**, 066112 (2001).
- [7] D. Andelman and A. N. Berker, Phys. Rev. B **29**, 2630 (1984).
- [8] P. T. Muzy, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física da Universidade de São Paulo, São Paulo, 1998.
- [9] B. M. McCoy and T. T. Wu, Phys. Rev. **176**, 631 (1968).
- [10] B. Derrida and E. Gardner, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 3223 (1984).
- [11] P. T. Muzy and S. R. Salinas, Int. J. Mod. Phys. B **13**, 397 (1999).
- [12] P. T. Muzy, A. P. Vieira, S. R. Salinas, Phys. Rev. E, **65**, 046120 (2002)
- [13] A. Efrat and M. Schwartz, Phys. Rev. E **62**, 2952 (2000).
- [14] R. B. Griffiths and M. Kaufman, Phys. Rev. B **26**, 5022 (1982); M. Kaufman and R. B. Griffiths, Phys. Rev. **B24**, 496 (1981).
- [15] D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **69**, 534 (1992); Phys. Rev. B **51**, 6411 (1995).

- [16] C. Tsallis and A. C. N. Magalhães, Phys. Repts. **268**, 305 (1996).

Capítulo 2

Modelos aleatórios de p spins esféricos

2.1 Introdução

Neste capítulo pretendemos construir o diagrama de fases de versões dos modelos de Sherrington e Gillin, com interações aleatórias do tipo de van Hemmen, ou Hopfield, a fim de evitar a utilização do método das réplicas. Vamos manter a aleatoriedade para a interação de $p = 2$ spins, considerando um termo uniforme de interação em blocos de r spins. Estes modelos mimetizam algum comportamento dos vidros de spin, principalmente a manifestação de uma transição de primeira ordem entre as fases ordenada e desordenada.

Tratamos modelos que associam interação aleatória, do tipo usualmente encontrado nos vidros de spins, com uma interação uniforme em blocos. A utilização de técnicas de ponto de sela e da lei dos grandes números permite obter a energia livre e construir os diagramas de fase, através de uma abordagem geométrica. Mostramos que as escolhas de Hopfield ou van Hemmen não interferem nestes diagramas. No caso particular de um sistema binário, analisamos a coalescência de fase mista, garantindo a obediência ao comportamento termodinâmico esperado.

2.2 Modelos de Edwards-Anderson e Sherrington-Kirkpatrick

Vidros de spin [15] são compostos magnéticos diluídos (íons de Mn em matrizes de cobre; compostos isolantes do tipo $Eu_xSr_{1-x}S$), estudados a partir da década de 70, cujo comportamento peculiar tem sido atribuído à presença de interações competitivas (ferro e antiferromagnéticas) e desordenadas. Nas transições de fase ordinárias, entre estados ferromagnéticos e paramagnéticos, existe uma quebra espontânea de simetria para valores da temperatura $T < T_c$, de modo que nesta região o sistema pode ser encontrado em algum dos dois estados caracterizados por uma magnetização, que mede o valor médio dos spins e vale $\langle \sigma_i \rangle = \pm m$. A existência destes dois estados separados é conhecida como quebra da ergodicidade, no sentido em que entre eles não há mecanismos de acessibilidade. Os vidros de spin apresentam, qualitativamente, para valores abaixo da temperatura crítica, uma grande quantidade destes estados definidos por mínimos da energia livre. À medida que a temperatura é reduzida novos mínimos se formam. Este processo de fragmentação do espaço de estados é contínuo e denominado ultrametricidade [11]. Desta maneira o equilíbrio não é recuperado para o sistema que se localiza em um destes estados, dado que se apresentam, sempre, outras possibilidades de minimização da energia livre.

Por outro lado, experimentalmente se verifica que algumas grandezas termodinâmicas, como o calor específico, por exemplo, tornam-se independentes do tempo, como se o sistema estivesse em equilíbrio. Também experimentalmente se verifica que amostras destes materiais, quando resfriadas em um estado vítreo, na presença de um campo magnético, guardam uma magnetização remanente por longo tempo de relaxação após o término da ação do campo. Este fenômeno é conhecido como “envelhecimento” e determina uma dinâmica lenta para os vidros de spin, relacionada à ausência de equilíbrio térmico.

O sucesso das abordagens tradicionais da mecânica estatística para o tratamento de modelos na rede, dotados de simetria translacional, não se verificou nestes materiais. Os vidros de spin não são dotados desta forma de invariância, devido à presença da aleatoriedade “congelada” que produz o fenômeno da “frustração”, que ocorre quando ao cumprir um circuito fechado entre sítios retornamos à posição inicial com uma orientação de spin invertida em relação à orientação com a qual partimos. A frustração, associ-

ada às possibilidades de ligações ferro e antiferromagnéticas aleatoriamente distribuídas, indica uma perda de transitividade em relações binárias reflexivas e simétricas. Estas peculiaridades têm consumido esforço teórico e se traduzido em novos conceitos, técnicas e desafios.

O modelo de Edwards e Anderson [2] para um vidro de spin na presença de campo externo, proposto em 1975, pode ser resumido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.1)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ são variáveis de Ising (no trabalho original eram vetores clássicos) e a primeira soma deve ser realizada sobre pares de sítios de uma rede cristalina. A desordem é representada por um conjunto de variáveis aleatórias $\{J_{ij}\}$, independentes e identicamente distribuídas. A competição é garantida pela escolha da distribuição de probabilidades gaussiana,

$$p(J_{ij}) = [2\pi\Delta^2]^{-1/2} \exp \left[-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2\Delta^2} \right]. \quad (2.2)$$

Dada uma configuração de valores de J_{ij} , deve-se realizar a soma sobre spins para escrever a energia livre

$$g \{J_{ij}\} = -\frac{1}{\beta N} \ln Z \{J_{ij}\}, \quad (2.3)$$

onde

$$Z \{J_{ij}\} = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[\sum_{(i,j)} \beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_i \right], \quad (2.4)$$

pressupondo-se o limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$. No entanto, a energia livre de interesse físico, associada a medidas que se realizam numa amostra macroscópica, com interações aleatórias mas fixas, que não se termalizam durante o tempo experimental, deve ser dada pela média fixa (congelada ou “quenched”),

$$g = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta N} \langle \ln Z \{J_{ij}\} \rangle. \quad (2.5)$$

Para realizar esta última média sobre a distribuição das interações, Edwards e Anderson introduziram o “método de réplicas”. A idéia consiste em notar que

$$\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (Z^n - 1) = \ln Z. \quad (2.6)$$

Portanto, ao invés de tomar a média $\langle \ln Z \rangle$, que é muito difícil, consideram-se n réplicas (independentes) do sistema original (com n inteiro) e toma-se a média de $\langle Z^n \rangle$, que é muito mais fácil, supondo-se que não haja problemas com a troca de limites ($N \rightarrow \infty$ e $n \rightarrow 0$) e com a continuação analítica de n inteiro para $n \rightarrow 0$. De fato, a troca de limites mostrou-se inofensiva, mas a continuação analítica tem sido uma grande fonte de dificuldades. Usando o índice α (ou β) para designar as réplicas sobre as quais é calculada a média, é fácil perceber que

$$\begin{aligned} \langle Z^n \rangle &= \prod_{(ij)} \int p(J_{ij}) dJ_{ij} \sum_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n \sum_{(i,j)} \beta J_{ij} \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha + \beta H \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N \sigma_i^\alpha \right] \\ &= \sum_{\{\sigma_i^\alpha\}} \exp \left[\sum_{\alpha=1}^n \sum_{(i,j)} \frac{1}{k_B t} J_0 \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{k_B t} \Delta \right)^2 \sum_{(i,j)} \sum_{\alpha, \beta=0}^n \sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \sigma_i^\beta \sigma_j^\beta + \frac{1}{k_B t} H \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^N \sigma_i^\alpha \right] \end{aligned} \quad (2.7)$$

ou seja, que a média sobre a desordem introduz uma interação no espaço das réplicas. Edwards e Anderson propuseram uma aproximação rudimentar de campo médio,

$$\sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha \sigma_i^\beta \sigma_j^\beta \rightarrow \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \langle \sigma_j^\alpha \sigma_j^\beta \rangle = \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta q_{\alpha\beta}, \quad (2.8)$$

dando origem a um parâmetro de ordem que deve ser tomado na versão denominada de réplica-simétrica, para a qual $q_{\alpha\beta} = q$ para α e β distintos. Fazendo conexão com o argumento qualitativo usado acima, esta simetria representa o fato de todos os mínimos da energia livre estarem associados a um mesmo valor do parâmetro de ordem. Na aproximação de campo médio, tanto a susceptibilidade quanto o calor específico a campo nulo apresentam anomalias em determinada temperatura crítica, apontando o caráter termodinâmico da transição de fase. Experimentalmente, o calor específico não apresenta qualquer anomalia. Por outro lado, de acordo com os argumentos qualitativos, há marcantes anomalias no comportamento dinâmico dos vidros de spin, apontando as dificuldades na utilização da própria mecânica estatística de equilíbrio para a consideração desses sistemas.

Sabe-se que a aproximação de campo médio para um modelo ferromagnético de spins pode ser obtida através da solução exata de um modelo em que se consideram interações iguais, mas muito fracas, da ordem de $1/N$, entre todos os pares de spins. No espírito deste modelo de Curie-Weiss, Sherrington e Kirkpatrick [3] propuseram um hamiltoniano de Edwards-Anderson

com interações entre todos os pares de spins,

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.9)$$

e uma distribuição gaussiana de probabilidades, dada pela Eq.(2.2), com

$$J_0 \rightarrow \frac{1}{N} J_0 \quad \text{e} \quad \Delta \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} J, \quad (2.10)$$

onde se fez a escolha dos fatores dependentes de N a fim de garantir a existência do limite termodinâmico. Utilizando várias vezes a notável identidade gaussiana

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-x^2 + 2ax] dx = \sqrt{\pi} \exp(a^2), \quad (2.11)$$

e supondo que não haja dificuldades com a troca de limites e a continuação analítica, o cálculo da energia livre reduz-se à maximização de uma função das variáveis m_α , com $\alpha = 1, \dots, n$, e $q_{(\alpha\beta)}$, com $(\alpha\beta) = 1, 2, \dots, (n^2 - n)/2$, ou seja,

$$g = -\frac{1}{4} \beta J^2 - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{\beta n} \max \left\{ -\frac{1}{2} \beta J_0 \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 - (\beta J)^2 \sum_{(\alpha\beta)} q_{\alpha\beta}^2 + \ln \text{Tr} \exp(\beta H_{eff}) \right\}, \quad (2.12)$$

com

$$\beta H_{eff} = \sum_{\alpha} \beta J_0 m_{\alpha} \sigma_{\alpha} + \sum_{(\alpha\beta)} (\beta J)^2 q_{\alpha\beta} \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} + \beta H \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha}, \quad (2.13)$$

onde o traço é uma soma sobre variáveis de spin e o índice $(\alpha\beta)$ refere-se a um par de réplicas distintas. As condições de extremização (primeira derivada nula) levam às equações de estado

$$m_{\alpha} = \frac{1}{Z_{eff}} \text{Tr} \sigma_{\alpha} \exp(\beta H_{eff}) = \langle \sigma_{\alpha} \rangle_{eff} \quad (2.14)$$

e

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{Z_{eff}} \text{Tr} \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} \exp(\beta H_{eff}) = \langle \sigma_{\alpha} \sigma_{\beta} \rangle_{eff}, \quad (2.15)$$

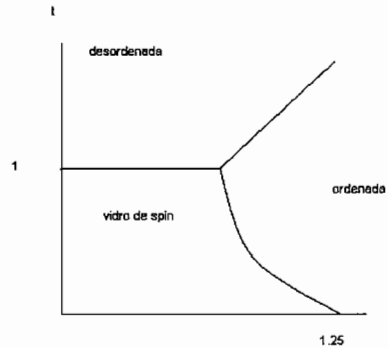


Figura 2.1: Diagrama de fase do modelo de Sherrington e Kirkpatrick de acordo com [3], em termos das coordenadas $t = k_B T/J$ e $r = J_0/J$.

onde

$$Z_{eff} = \text{Tr} \exp(\beta H_{eff}). \quad (2.16)$$

A solução usual, supondo simetria de réplicas, isto é, escolhendo $m_\alpha = m$ e $q_{(\alpha\beta)} = q$, produz o diagrama de fases esquematizado na Figura 2.1. Para $J_0 = 0$, há uma transição (de segunda ordem) entre as fases paramagnética ($m = q = 0$) e vidro de spins ($m = 0$, mas $q \neq 0$). Para J_0 suficientemente grande, surge uma fase ferromagnética ($m \neq 0$). Infelizmente, Sherrington e Kirkpatrick notaram que, para temperaturas suficientemente baixas, a entropia podia se tornar negativa, embora o modelo fosse construído em termos de um número discreto de graus de liberdade.

O defeito da solução réplica-simétrica do modelo de Sherrington e Kirkpatrick foi claramente colocado em trabalho seminal de Jairo de Almeida e David Thouless [4], publicado há vinte e cinco anos, onde se realiza uma análise da estabilidade do máximo da função energia livre. Calculando os autovalores da matriz hessiana associada às segundas derivadas da energia livre, de Almeida e Thouless mostraram que há uma troca de sinais na região vidro de spins, indicando a instabilidade da solução réplica-simétrica. Logo depois, baseando-se em uma idéia de Blandin, Parisi propôs um esquema de quebra da simetria entre réplicas, conduzindo a uma nova solução com entropia positiva (e que se anula no estado fundamental). A solução de Parisi sobrevive aos testes de estabilidade e tem sido aceita como a continuação

analítica correta para o modelo de Sherrington e Kirkpatrick. Característica nova e importante desta solução é o estado fundamental, com um número infinito de mínimos de acordo com uma estrutura “ultramétrica” (persistindo mesmo na presença de campos). Apesar do interesse teórico do problema, e de sua extensão a outros domínios como redes neurais e diversos problemas de otimização, ainda há enorme debate sobre a relevância de um modelo com interações de longo alcance para a explicação de fenômenos em sistemas magnéticos reais. Não cabem aqui maiores digressões sobre essa questão. Há cálculos de escala, além de argumentos heurísticos, para modelos com interações de curto alcance (modelos de gotas), que seriam mais realistas para explicar o comportamento de sistemas magnéticos. Os modelos de gotas prevêem um estado fundamental muito mais simples, não degenerado, além da inexistência de fase ordenada na presença de campo externo (à semelhança de um ferromagneto simples). No entanto, principalmente devido a longos tempos de equilíbrio, tanto as experiências quanto as simulações numéricas são ainda incapazes de decidir entre as previsões do modelo de campo médio de Sherrington e Kirkpatrick e os cálculos de escala para os modelos de gotas.

2.3 Modelo de van Hemmen

Como alternativa muito simples ao modelo de Sherrington e Kirkpatrick, van Hemmen [5],[6] manteve o mesmo hamiltoniano de Ising,

$$\mathcal{H} = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.17)$$

com uma interação entre (todos os) pares da forma

$$J_{ij} = \frac{1}{N} J_0 + \frac{1}{N} J (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i), \quad (2.18)$$

onde $\{\xi_i\}$ e $\{\eta_i\}$ são variáveis aleatórias congeladas, independentes e identicamente distribuídas, que podem assumir os valores ± 1 com igual probabilidade.

Dada uma configuração de variáveis aleatórias, e descartando termos que vão desaparecer no limite termodinâmico, a função de partição associada a este hamiltoniano de van Hemmen pode ser escrita como

$$Z = \text{Tr} \exp \left\{ \frac{\beta J_0}{2N} S^2 + \frac{\beta J}{4N} [(Q_1 + Q_2)^2 - (Q_1 - Q_2)^2] + \beta H S \right\}, \quad (2.19)$$

onde o traço é uma soma sobre spins e estamos definindo as novas variáveis

$$S = \sum_{i=1}^N \sigma_i; \quad Q_1 = \sum_{i=1}^N \xi_i \sigma_i; \quad Q_2 = \sum_{i=1}^N \eta_i \sigma_i. \quad (2.20)$$

Utilizando a identidade gaussiana, as somas sobre as variáveis de spin se fatorizam. No caso de spins de Ising, temos

$$\begin{aligned} Z = & \left(\frac{\beta J_0 N}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dm \frac{\beta J N}{i} \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dQ_2 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \beta J_0 N m^2 - \right. \\ & \left. -\frac{1}{2} \beta J N Q_1^2 + \frac{1}{2} \beta J N Q_2^2 \right\} 2^N \prod_{j=1}^N \cosh [\beta J_0 m + \beta J Q_1 (\xi_j + \eta_j) + \\ & \quad + \beta J Q_2 (\xi_j - \eta_j) + \beta H]. \end{aligned} \quad (2.21)$$

No limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, podemos aplicar a lei dos grandes números, ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \ln \cosh [\beta J_0 m + \beta J Q_1 (\xi_j + \eta_j) + \beta J Q_2 (\xi_j - \eta_j) + \beta H] \rightarrow \\ \rightarrow E \{ \ln \cosh [\beta J_0 m + \beta J Q_1 (\xi + \eta) + \beta J Q_2 (\xi - \eta) + \beta H] \}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde $E \{ \dots \}$ é um valor esperado em relação às variáveis aleatórias. A auto-mediância desse modelo, dispensando a utilização do método das réplicas, produz resultados muito simples. A energia livre é dada pelo ponto de sela da forma integral

$$Z = (\dots) \int dm \int dQ_1 \int dQ_2 \exp [-\beta N g], \quad (2.23)$$

onde

$$g = \frac{1}{2} J_0 m^2 + J Q_1^2 - J Q_2^2 - \frac{1}{\beta} \ln 2 -$$

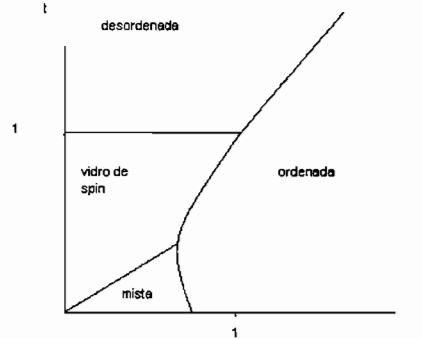


Figura 2.2: Diagrama de fase do modelo de van Hemmen de acordo com [5], em termos das coordenadas $t = k_B T/J$ e $r = J_0/J$.

$$-\frac{1}{\beta} E \{ \ln \cosh [\beta J_0 m + \beta J Q_1 (\xi + \eta) + \beta J Q_2 (\xi - \eta) + \beta H] \}. \quad (2.24)$$

O diagrama de fases associado a este modelo de van Hemmen está desenhado na Figura 2.2.

Antes de encerrar esta seção, são necessários alguns comentários:

(i) Poderiam ter sido obtidos essencialmente os mesmos resultados com interações da forma

$$J_{ij} = \frac{1}{N} J_0 + \frac{1}{N} J (\xi_i \xi_j + \eta_i \eta_j), \quad (2.25)$$

que corresponderiam a um modelo de Hopfield com apenas dois padrões [9],[10], proposto no contexto de redes neurais. O número de padrões procura mimetizar a fragmentação da ultrametricidade. Em geral, o modelo de Hopfield seria dado por

$$J_{ij} = \frac{1}{N} J_0 + \frac{J}{Np} \sum_{n=1}^p \xi_i^{(n)} \xi_j^{(n)}. \quad (2.26)$$

Se o número p de padrões for finito (na realidade se for de ordem inferior a $\ln N$), o modelo continua sendo auto-mediante, não sendo necessário o recurso ao método das réplicas [12],[13].

(ii) Os modelos de van Hemmen e de Hopfield (com número finito de padrões) certamente não têm a riqueza do estado fundamental do modelo de Sherrington e Kirkpatrick. No entanto, apresentam a mesma topologia qualitativa do diagrama de fase, prestando-se a análises muito mais simples de algumas características dos vidros de spin. Apenas nesse sentido é que vamos utilizar uma classe de modelos dessa natureza.

(iii) No seu trabalho original, van Hemmen evita a utilização da identidade gaussiana, com os seus problemas de transformação de variáveis e integração no espaço complexo, recorrendo a um formalismo mais controlado matematicamente, que se torna particularmente adequado para o tratamento dos nossos modelos de p spins. Em trabalho de meados da década de oitenta, Salinas e Wreszinski [7] utilizaram o formalismo de van Hemmen para estudar o problema do modelo de Curie–Weiss (spins de Ising com interações ferromagnéticas entre todos os vizinhos) na presença de um campo aleatório. Na seção seguinte, a título de introdução ao tratamento dos nossos modelos, vamos retomar este problema, no caso de um modelo de Curie–Weiss de p spins, simplificando o formalismo de van Hemmen.

2.4 Modelo de p spins em um campo aleatório.

Vamos abordar o modelo ferromagnético de p spins que se constitui em nosso objeto e cujo hamiltoniano, na versão de Curie–Weiss de campo médio, na presença de um campo externo aleatório, é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{p!N^{p-1}} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^p - \sum_{i=1}^N H_i \sigma_i, \quad (2.27)$$

onde $J > 0$, e $\{H_i\}$ é um conjunto de variáveis aleatórias fixas, independentes e identicamente distribuídas, com média nula e variância H^2 . No caso de variáveis de spin do tipo Ising vale a relação $\sigma_i = \pm 1$ para todos os sítios da rede. No caso esférico, as variáveis de spin são números reais irrestritos, que obedecem a condição esférica

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N. \quad (2.28)$$

Os inteiros p e N designam, respectivamente, o número de variáveis que interagem em bloco e o número total de spins do sistema.

Dada uma configuração de campos aleatórios, $\{H_i\}$, temos a função de partição

$$Z = \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta J}{p! N^{p-1}} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^p + \beta \sum_{i=1}^N H_i \sigma_i \right], \quad (2.29)$$

onde o traço é uma soma sobre os valores assumidos pelas variáveis de spin. Introduzindo as novas variáveis

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad \text{e} \quad q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H_i \sigma_i,$$

temos a forma mais simples

$$Z = \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta J N}{p!} m^p + \beta N q \right], \quad (2.30)$$

que ainda pode ser expressa como

$$Z = \int \int dm dq \exp \left[\frac{\beta J N}{p!} m^p + \beta N q \right] \Omega(m, q) \quad (2.31)$$

onde usamos a função δ de Dirac para escrever

$$\Omega(m, q) = \sum_{\{\sigma_i\}} \left[\delta \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i - Nm \right) \delta \left(\sum_{i=1}^N H_i \sigma_i - Nq \right) \right]. \quad (2.32)$$

Vamos calcular a “densidade de estados” Ω para o caso esférico, isto é, quando o traço é dado por

$$\sum_{\{\sigma_i\}} \rightarrow \int \cdots \int_{\sum \sigma_i^2 = N} d\sigma_1 \cdots d\sigma_N \rightarrow \int \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_1 \cdots d\sigma_N \delta \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - N \right). \quad (2.33)$$

Nesse caso temos

$$\begin{aligned} \Omega(m, q) &= \int \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_1 \cdots d\sigma_N \left\{ \delta \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - N \right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \delta \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i - Nm \right) \delta \left(\sum_{i=1}^N H_i \sigma_i - Nq \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

e a densidade de estados é um funcional dos vínculos de integração do sistema. Utilizando a representação integral da função δ de Dirac,

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ikx) dx,$$

para cada um dos vínculos, e associando k_1 à condição de esfericidade, k_2 à definição da variável m e k_3 à definição da variável q , inserimos um fator de convergência α , que será anulado no final dos cálculos, para obter

$$\begin{aligned} \Omega(m, q) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} dk_1 dk_2 dk_3 \exp\{-ik_1 N - ik_2 N m - ik_3 N q\} \times \\ &\times \prod_{j=1}^N \left(\int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_j \exp\{ik_1 \sigma_j^2 + ik_2 \sigma_j + ik_3 H_j \sigma_j - \alpha \sigma_j^2\} \right). \end{aligned}$$

Calculando explicitamente as integrais gaussianas em σ_j , e invocando a lei dos grande números, para uma distribuição de probabilidades da variável aleatória H_j com média nula e variância H^2 , podemos usar a relação

$$\frac{1}{4N} \frac{\sum_{j=1}^N (k_2 + k_3 H_j)^2}{\alpha - ik_1} = \frac{1}{4} \frac{k_2^2 + k_3^2 H^2}{\alpha - ik_1} \quad (2.35)$$

para mostrar que

$$\Omega = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} dk_1 dk_2 dk_3 \exp[N\Phi(m, q; k_1, k_2, k_3)], \quad (2.36)$$

onde

$$\Phi = -ik_1 - ik_2 m - ik_3 q - \frac{1}{4} \frac{k_2^2 + k_3^2 H^2}{\alpha - ik_1} + \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\pi}{\alpha - ik_1} \right]. \quad (2.37)$$

Utilizando o método do ponto de sela, plenamente justificado no limite termodinâmico, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial k_1} &= -i - \frac{i}{4} \frac{k_2^2 + k_3^2 H^2}{(\alpha - ik_1)^2} - \frac{1}{2} \frac{(-i)}{\alpha - ik_1} = 0, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial k_2} &= -im - \frac{1}{2} \frac{k_2}{\alpha - ik_1} = 0, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial k_3} &= -iq - \frac{1}{4} \frac{2k_3 H^2}{\alpha - ik_1} = 0. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Finalmente, tomando $\alpha = 0$, temos

$$\begin{aligned} k_1 &= -\frac{i}{2}D, \\ k_2 &= imD, \\ k_3 &= i\frac{q}{H^2}D, \end{aligned} \quad (2.39)$$

com

$$D = \left(-1 + m^2 + \frac{q^2}{H^2} \right)^{-1}. \quad (2.40)$$

Portanto, no limite termodinâmico podemos escrever

$$\Omega(m, q; N) = C \exp(N\Phi_s), \quad (2.41)$$

onde C é um prefator que não depende de N , e

$$\Phi_s(m, q) = \frac{1}{2} [1 + \ln(2\pi)] + \frac{1}{2} \ln \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{H^2} \right). \quad (2.42)$$

Retornando à expressão original da função de partição, eq. (2.31), temos

$$Z(T, p, N) = \int \int dm dq \exp \left\{ -\beta J N \left[\frac{1}{\beta J} \Phi_s + \frac{1}{p!} m^p + \frac{q}{J} \right] \right\}, \quad (2.43)$$

que nos permite obter uma densidade de energia livre,

$$g = -\frac{1}{2\beta J} [1 + \ln(2\pi)] - \frac{1}{2\beta J} \ln \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{H^2} \right) - \frac{1}{p!} m^p - \frac{q}{J}. \quad (2.44)$$

Utilizando uma notação mais conveniente, $h = H/J$, $t = 1/\beta J$, e substituindo q/J por q , as primeiras derivadas de g fornecem as equações de estado

$$\frac{tm}{1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}} = \frac{m^{p-1}}{(p-1)!} \quad (2.45)$$

e

$$\frac{tq}{h^2} = 1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}. \quad (2.46)$$

Na fase desordenada, com $m = 0$, temos

$$q = q_0 = -\frac{t}{2} + \frac{t}{2} \sqrt{1 + \frac{4h^2}{t^2}}. \quad (2.47)$$

Na fase ordenada ($m \neq 0$), temos

$$m^{2(p-1)} - m^{2(p-2)} + (p-1)!tm^{p-2} = -h^2 [(p-1)!]^2, \quad (2.48)$$

com

$$q = q_f = \frac{(p-1)!h^2}{m^{p-2}}. \quad (2.49)$$

Para $p = 3$, a expansão da densidade de energia livre g em termos de m

$$g = -\frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)] + \frac{t}{2}(1 + q^2 + q^4)m^2 - \frac{1}{6}m^3 + \frac{t}{2}\left(\frac{1}{2} + q^2\right)m^4 + \dots$$

permite verificar que o coeficiente do termo m^2 não mudará de sinal com o valor do parâmetro t . Isto indica que a transição para $p = 3$ será sempre de primeira ordem. A condição $p > 3$ apenas incluirá na expressão de g , dada pela Eq. (2.44), potências equivalentes de m no termo $m^p/p!$, não afetando o termo logarítmico que contribui para a expansão. O coeficiente do termo m^2 será sempre o calculado acima e não mudará de sinal com variação do parâmetro t , não permitindo o aparecimento de transições de segunda ordem. Portanto, para $p \geq 3$, apresentam-se apenas transições de primeira ordem. Esta é uma motivação para apreciarmos hamiltonianos que associem, a termos de interação binária, outros termos advindos da consideração de blocos de $p > 3$ sítios. Na sequência vamos aplicar este resultado para alguns modelos com valores determinados do parâmetro p .

2.4.1 Caso $p = 2$.

Este caso é elementar e o único a apresentar transição de segunda ordem. Trata-se de minimizar a expressão

$$g(t, m, q) = -\frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)] - \frac{t}{2} \ln \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2} \right) - \frac{1}{2}m^2 - q \quad (2.50)$$

para as variáveis m e q .

A Eqs. (2.45) e (2.46) fornecem

$$\frac{\partial g}{\partial m} = -m + \frac{tm}{1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}} = 0 \quad (2.51)$$

e

$$\frac{\partial g}{\partial q} = \frac{tq}{h^2 \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}\right)} - 1 = 0 \quad (2.52)$$

Para analisar a estabilidade das soluções temos que verificar o sinal da forma quadrática

$$G = \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} (dm)^2 + \frac{\partial^2 g}{\partial q \partial m} dm dq + \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} (dq)^2,$$

ou seja, estudar o sinal dos autovalores da matriz hessiana

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} & \frac{\partial^2 g}{\partial q \partial m} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial q \partial m} & \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} \end{vmatrix},$$

cuja soma e o produto são

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} \quad (2.53)$$

$$\lambda_1 \lambda_2 = D = \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial m \partial q} \right)^2. \quad (2.54)$$

As possíveis combinações dos sinais mostram que o produto dos autovalores (ou o determinante da matriz, de acordo com a Eq. 2.54), quando maior do que zero, indicará a existência de um extremo da forma quadrática. Ele corresponderá a um mínimo de acordo com o fato de ser a expressão $\frac{\partial^2 g}{\partial m^2}$ positiva, ou máximo, se $\frac{\partial^2 g}{\partial m^2}$ (e $\frac{\partial^2 g}{\partial q^2}$ consequentemente) for negativa. As derivadas segundas são dadas por

$$\frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = \frac{t \left(1 + m^2 - \frac{q^2}{h^2}\right)}{\left(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}\right)^2} - 1, \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q^2} = \frac{t \left(1 - m^2 + \frac{q^2}{h^2}\right)}{h^2 \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}\right)^2} \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial m \partial q} = \frac{2mtq}{h^2 \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}\right)^2} \quad (2.57)$$

A solução desordenada, correspondente a $m = 0$ e

$$q = -\frac{t}{2} + \frac{1}{2} (t^2 + 4h^2)^{\frac{1}{2}}$$

é aceita em todo o plano e conduz a

$$\frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = \frac{h^2}{q} - 1 \quad (2.58)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q^2} = \frac{t \left(1 + \frac{q^2}{h^2}\right)}{h^2 \left(1 - \frac{q^2}{h^2}\right)^2} > 0 \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial m \partial q} = 0 \quad (2.60)$$

o que garante a estabilidade da fase desordenada para

$$1 - h^2 < t. \quad (2.61)$$

Para $m \neq 0$, a Eq. (2.49) fornece $q = h^2$ e a solução da Eq. (2.51) apresenta uma fase ordenada, com magnetização

$$m^2 = 1 - h^2 - t. \quad (2.62)$$

Substituindo convenientemente estes valores nas Eqs.(2.55) a (2.57), o exame da Eq. (2.54) mostra que o determinante

$$D = 2(1 - h^2 - t)(t + h^2)$$

será positivo e corresponderá ao mínimo da energia livre para a fase ordenada, na região

$$1 - h^2 - t > 0,$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} &= \frac{2}{t} (1 - h^2 - t) > 0 \\ \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} &= \frac{1}{h^2} (t + 2h^2) > 0. \end{aligned}$$

Verifica-se, neste limite, a transição de fase de segunda ordem, com m se anulando, de acordo com a Eq. (2.62), na fronteira das regiões separadas

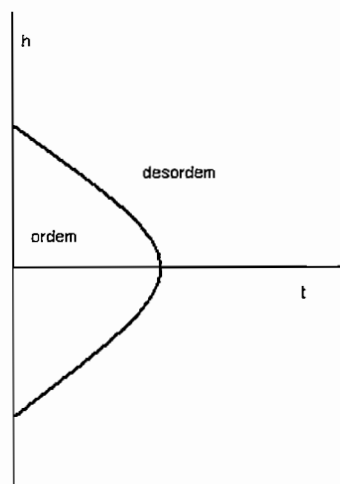


Figura 2.3: Diagrama de fase do modelo $p = 2$ com campo

pela curva $1 - h^2 - t = 0$. No plano das variáveis h e t , a Figura 2.3 resume, qualitativamente, esta situação¹.

2.4.2 Modelos com interações uniformes em blocos de $p = 2$ e $p' = 4$ spins.

A existência de transição de segunda ordem apenas para modelos com $p = 2$ sugere que consideremos hamiltonianos que associem, a esses termos usuais de interação binária, interações em blocos de mais sítios, que introduzam condições para transições de primeira ordem. Vamos considerar um modelo que comporta interações constantes e ferromagnéticas J_2 e J_4 (ambos

¹Nos diagramas de fase as linhas finas na cor preta denotarão linhas de transição de primeira ordem e as linhas cheias de cor preta denotarão linhas de transição de segunda ordem.

positivos) em blocos de 2 e de 4 spins, definido pelo hamiltoniano.

$$H = \frac{-J_2}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 - \frac{J_4}{4!N^3} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^4 - \sum_{i=1}^N H_i \sigma_i, \quad (2.63)$$

que produz, em unidades de J_2 e de acordo com o cálculo do funcional dos vínculos, para a energia livre a expressão

$$g(t, m, q) = -\frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)] - \frac{t}{2} \ln \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2} \right) - \frac{1}{2} m^2 - \frac{1}{4!} r m^4 - q, \quad (2.64)$$

onde $r = J_4/J_2$.

Campo nulo.

Examinemos primeiramente a situação de campo nulo ($q = 0$). A expansão da energia livre

$$g(t, m) = \left(\frac{t}{2} - \frac{1}{2} \right) m^2 + \left(\frac{t}{4} - \frac{r}{24} \right) m^4 + \frac{t}{6} m^6 + \dots, \quad (2.65)$$

permite determinar o parâmetro $t_c = 1$ (temperatura crítica) e o ponto tri-crítico que corresponde a este valor crítico do parâmetro t , para $r = 6$. A condição de extremização

$$\frac{\partial g}{\partial m} = -m - \frac{r}{6} m^3 + \frac{tm}{1 - m^2} = 0$$

é satisfeita identicamente para $m = 0$, mostrando a existência, em todo o plano, de uma fase desordenada que corresponde a um mínimo de g quando

$$\frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = -1 - \frac{r}{2} m^2 + t \frac{1 + m^2}{(1 - m^2)^2} > 0$$

ou, quando

$$t > t_c = 1. \quad (2.66)$$

Para $m \neq 0$ a condição de extremização produz a equação biquadrada

$$\frac{r}{6} m^4 + \left(1 - \frac{r}{6} \right) m^2 + (t - 1) = 0, \quad (2.67)$$

que deve ser obedecida na fase ordenada. O limite de estabilidade desta fase é dado pela condição

$$\Delta = \left(1 - \frac{r}{6}\right)^2 - \frac{2r}{3}(t - 1) > 0, \quad (2.68)$$

que garante a existência de soluções reais da equação (2.67).

De modo geral, dada uma equação biquadrada

$$a_4 m^4 + a_2 m^2 + a_0 = 0$$

onde as raízes $m_{\pm}^{(i)}$ estão relacionadas com as raízes $x^{(i)}$ da equação quadrática associada pela transformação de variáveis $m^2 = x$, ou $m_{\pm}^{(i)} = \pm\sqrt{x^{(i)}}$, por $m_+^{(i)} = -m_-^{(i)}$, as relações de Girárd, entre essas raízes e os coeficientes da Eq. (2.67), fornecem

$$[m^{(1)}]^2 + [m^{(2)}]^2 = -\frac{a_2}{a_4} = -\frac{6}{r} \left(1 - \frac{r}{6}\right) \quad (2.69)$$

$$[m^{(1)}]^2 [m^{(2)}]^2 = \frac{a_0}{a_4} = \frac{6}{r} (t - 1) \quad (2.70)$$

Para que se combine o requisito de soluções reais com as condições (2.69) e (2.70), cabe verificar o comportamento da Eq.(2.68) em duas regiões. Para $t < 1$, necessariamente $r < 6$ e teremos duas soluções reais, por exemplo $m_+^{(1)} = -m_-^{(1)}$, e uma solução imaginária que não nos interessa. Para $t > 1$ e $r > 6$ podemos ter duas raízes nas mesmas condições acima, ou, quatro raízes, pois ambas as relações (2.69) e (2.70) são positivas. Portanto, a fase ordenada é estável para dois valores possíveis da magnetização na região $t < 1$ e para dois ou quatro valores de m na região $t > 1$. Na primeira região de estabilidade da fase ordenada recupera-se a transição de segunda ordem para a fase desordenada conseguida anteriormente. Nesta situação, $t > 1$, podemos resolver a relação (2.68) que pode se escrever

$$r^2 + (12 - 24t)r + 36 > 0,$$

para valores do parâmetro r , verificando que ela será positiva para

$$r > r_+ = 12t - 6 + 12\sqrt{t^2 - 1}. \quad (2.71)$$

Esta curva define a linha de estabilidade, para $t > 1$, da fase ordenada, no diagrama de fase nas variáveis r e t , expresso pela Figura 2.5 Resta agora

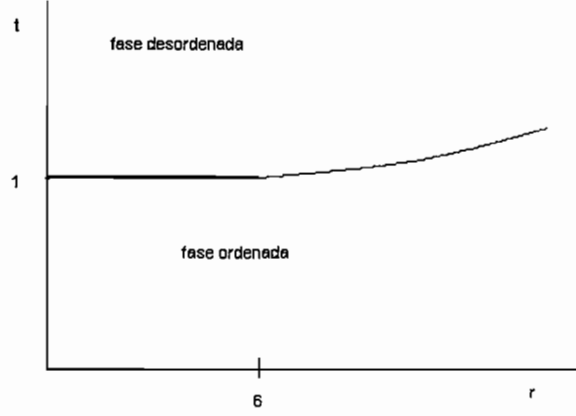


Figura 2.4: Diagrama de fase, a campo nulo, do modelo uniforme com interações em blocos de $p = 2$ e $p' = 4$ sítios.

examinar a existência de uma linha de transição de primeira ordem, induzida pela consideração da interação quártica, nesta região onde coexistem as fases desordenada de acordo com (2.66) e ordenada de acordo com (2.71).

Na condição expressa pela Eq. (2.68) o maior valor real do parâmetro m (que deve maximizar a energia livre) é

$$m_f = \frac{\sqrt{3}}{6t} \left\{ t \left[r - 6t + (r^2 - 12rt - 108t^2 + 144t)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (2.72)$$

e a energia livre da fase ordenada deve valer

$$g_f(t, m_f) = -\frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)] - \frac{t}{2} \ln(1 - m_f^2) - \frac{1}{2} m_f^2 - \frac{1}{4!} r m_f^4, \quad (2.73)$$

($-\frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)]$ é a energia livre da fase desordenada a campo nulo). A igualdade dessas funções de estado fornece a equação da curva

$$t = -\frac{r}{26} + \frac{8}{13} + \frac{2}{39} (3r^2 - 18r + 144)^{\frac{1}{2}},$$

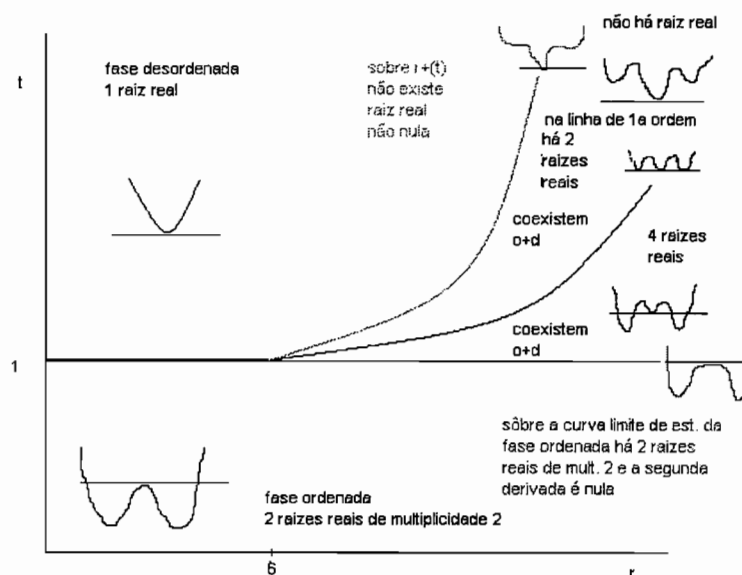


Figura 2.5: Posição relativa dos mínimos não nulos da energia livre, ilustrados sobre o diagrama de fase do modelo da Figura 2.4

no diagrama de fase, que marca a transição de fase de primeira ordem. A Figura 2.4 apresenta estas regiões. Do ponto de vista da termodinâmica do modelo, o comportamento dos mínimos da energia livre deve obedecer ao esquema apresentado na Figura 2.5² que resume a discussão anterior da estabilidade em relação às raízes da Eq.(2.67).

Campo aleatório.

De posse destes resultados vamos considerar o caso inicial do modelo na presença do campo aleatório, conforme expresso pelo hamiltoniano. dado na Eq. (2.63) e com energia livre dado pela expressão (2.64), conforme o método para a obtenção do funcional dos vínculos de integração. O tratamento da

²Nos diagramas de fase, além das observações da nota anterior, as linhas tênues denotam linhas limite de estabilidade entre fases.

estabilidade solicita que sejam obedecidas as condições

$$\frac{\partial g}{\partial m} = -m - \frac{r}{6}m^3 + \frac{tm}{1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2}} = 0 \quad (2.74)$$

$$\frac{\partial g}{\partial q} = -1 + \frac{tq}{h^2(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2})} = 0. \quad (2.75)$$

A segunda dessas condições é idêntica à Eq. (2.46) e não depende do valor do parâmetro p , portanto, na fase desordenada ($m = 0$), quando a primeira condição é uma identidade, vale a expressão (2.47) para a variável $q = q_0$. Para a fase ordenada a solução do sistema acima para a variável q , é dada por

$$q = -\frac{t}{2} + \frac{1}{2} [t^2 + 4h^2(m^2 - 1)]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.76)$$

A minimização de g solicita que as derivadas segundas

$$\frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = -m - \frac{r}{2}m^2 + t \frac{(1 + m^2 - \frac{q^2}{h^2})}{(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2})^2}, \quad (2.77)$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q^2} = \frac{t}{h^2} \frac{1 - m^2 + \frac{q}{h^2}}{(1 - m^2 - \frac{q}{h^2})^2} \quad (2.78)$$

e o determinante

$$D = \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} \frac{\partial^2 g}{\partial q^2} - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial q \partial m} \right)^2,$$

onde

$$\frac{\partial^2 g}{\partial q \partial m} = \frac{t}{h^4} \frac{2mq}{1 - m^2 - \frac{q}{h^2}}, \quad (2.79)$$

assumam valores positivos para $m = 0$ e $q = q_0$. É fácil ver que, na fase desordenada, a relação (2.78) é imediatamente satisfeita, pois, só envolve expressões positivas e que a derivada cruzada (2.79) é nula. Portanto o comportamento da energia livre depende apenas da Eq. (2.77). Dela se deduz, novamente, que a fase desordenada é estável, independentemente do valor de r , fora da região $1 - h^2 - t = 0$.

Para a fase ordenada a Eq. (2.74) conduz à expressão

$$m^6 + \frac{1}{r}(12 - r)m^4 + \frac{6}{r^2}(rt + 6 - 2r)m^2 + \frac{36}{r^2}(h^2 + t - 1) = 0. \quad (2.80)$$

Ela pode ser tratada [14], para $x = m^2$, como uma equação cúbica

$$ax^3 + bx^2 + cx + d = 0,$$

ou, colocada na forma

$$y^3 + 3py + 2q = 0$$

para $y = x + b/2a$, $2q = 2b^3/27a^3 - bc/3a^2 + d/a$ e $3p = (3ac - b^2)/3a^2$ ([14]). As soluções reais não nulas, \bar{m}_f , indicam a estabilidade de fase ordenada. A cúbica pode apresentar uma solução real; três soluções reais diferentes; ou, uma solução real de multiplicidade dois ao lado de uma terceira. Este último caso, quando se apresenta a coalescência de duas raízes reais em um só valor, é aquele que marca o limite de estabilidade da fase ordenada. Isto ocorre para

$$\begin{aligned} p^3 + q^2 = & -972rh^4 + (864 + 432r + 72r^2 + 4r^3 - 108r^2t - 648rt)h^2 + \\ & + 36rt^2 + 12r^2t^2 + r^3t^2 - 24r^2t^3 = 0 \end{aligned} \quad (2.81)$$

que determina a superfície limite de estabilidade da fase ordenada. É fácil ver que a expressão acima calculada para $h = 0$, reproduz a expressão do discriminante da Eq. (2.67), que produziu a condição usada para o tratamento a campo nulo.

O diagrama de fase que está exposto na Figura 2.6³ mostra, esquematicamente, uma linha de pontos tricríticos onde terminam as linhas de transição de segunda ordem para um dado valor de h . Os valores da razão $r = r_{tc}$ que define estes pontos tricríticos, para um dado valor da temperatura $t = t_c$ são calculados através da inspeção da Eq. (2.80) e obedecem às relações

$$t_c = 1 - h^2 \quad (2.82)$$

$$h^2 = \frac{6}{r_{tc}} - 1, \quad (2.83)$$

de onde temos

$$t_c = 2 - \frac{6}{r_{tc}}, \quad (2.84)$$

Na figura também são mostradas linhas de transição de primeira ordem para valores de h , na região onde $1 - h^2 - t < 0$ e $r > r_{tc}$, transição esta que

³A linha tênue denota linha de pontos tricríticos.

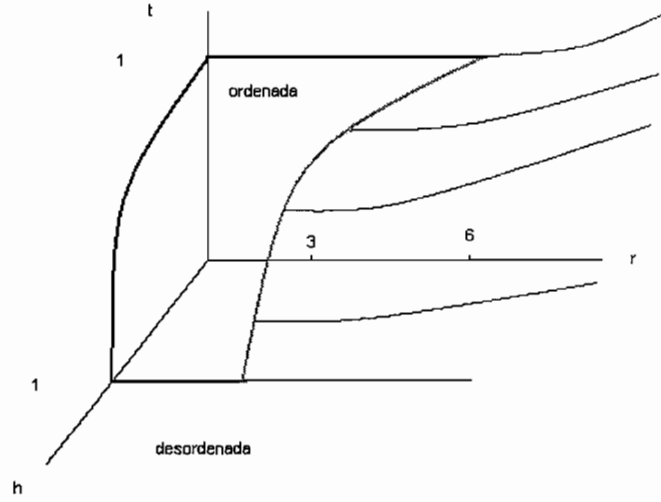


Figura 2.6: Diagrama de fase do modelo na presença de campo aleatório de média nula.

decorre de igualar

$$g_p = -q_0 - \frac{t}{2} \ln \left(1 - \frac{q_0^2}{h^2} \right) - \frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)] \quad (2.85)$$

e

$$g_f = g_p - \frac{1}{2} \overline{m}_f^2 - \frac{1}{4!} \overline{m}_f^4 - q_f - \frac{t}{2} \ln \left(1 - \overline{m}_f^2 - \frac{q_f^2}{h^2} \right) - \frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)], \quad (2.86)$$

onde q_0 é dado pela Eq.(2.47), \overline{m}_f é a solução da Eq. (2.80) e

$$q_f = -\frac{t}{2} + \frac{t}{2} \left(1 + \frac{4h^2}{t^2} - \frac{4h^2 m_f^2}{t^2} \right)^{\frac{1}{2}}$$

vem da solução das Eqs. (2.74) e (2.75). A linha de transição de primeira ordem, entre as fases que coexistem limitadas pela superfície representada na Eq. (2.81) e pela linha $t > 1$, pode ser obtida numericamente, e o diagrama de fases a mostra de modo esquemático.

O estudo do estado fundamental deste modelo solicita que tratemos a Eq. (2.76) que pode ser escrita como

$$q = -\frac{t}{2} + h(1 - m^2)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{t^2}{4h^2(1 - m^2)} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Para valores pequenos de t , obtemos a expansão

$$q = -\frac{t}{2} + h(1 - m^2)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{t^2}{8h^2(1 - m^2)} + \dots \right), \quad (2.87)$$

que permite considerar a dependência em t do argumento do logaritmo na Eq. (2.64) para obter

$$1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2} = \frac{1}{h}(1 - m^2)^{\frac{1}{2}}t + o(t^2).$$

Portanto, desprezando grandezas de ordem superior a t no termo logarítmico da expressão da energia livre, temos

$$\begin{aligned} \frac{t}{2} \ln \left(1 - m^2 - \frac{q^2}{h^2} \right) &= \frac{t}{2} \ln \left(\frac{1}{h}(1 - m^2)^{\frac{1}{2}}t \right) \\ &= \frac{t}{2} \ln \left(\frac{1}{h}(1 - m^2)^{\frac{1}{2}} \right) + \frac{t}{2} \ln t, \end{aligned}$$

o que faz com que a dependência logarítmica de g se anule para $t = 0$. Anula-se também, nesta situação, o termo

$$\frac{t}{2}[1 + \ln(2\pi)],$$

e toda a dependência do estado fundamental em relação ao campo vem da expansão (2.87) quando $t = 0$, ou de

$$q = h(1 - m^2)^{\frac{1}{2}}.$$

Assim, a expansão da energia livre (2.64) em torno de $t = 0$ fornece

$$g = -\frac{1}{2}m^2 - \frac{1}{4!}rm^4 - h(1 - m^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.88)$$

cuja expansão na vizinhança de $m = 0$ oferece

$$g = -h + \left(-\frac{1}{2} + \frac{h}{2}\right) m^2 + \left(-\frac{r}{24} + \frac{h}{8}\right) m^4 + o(h^2) \quad (2.89)$$

mostrando a existência de uma transição de segunda ordem induzida pelo campo, à temperatura nula, para $h = 1$, que termina no ponto $r = 3$; $h = 1$, de acordo com os cálculos anteriores que resultaram na Eq. (2.83).

A anulação da primeira derivada da energia livre,

$$\frac{\partial g}{\partial m} = -m - \frac{r}{6} m^3 + hm(1 - m^2)^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.90)$$

garante a solução desordenada ($m = 0$) em todo o plano; a consideração da segunda derivada

$$\frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = -1 - \frac{r}{2} m^2 + hm^2(1 - m^2)^{-\frac{3}{2}} + h(1 - m^2)^{-\frac{1}{2}},$$

mostra que esta solução é um mínimo estável quando $h > 1$. Portanto, a superfície de transição de segunda ordem que conseguimos para temperaturas não nulas intersecta o plano $t = 0$ na linha de transição de segunda ordem à temperatura nula dada por $h = 1$. Esta linha, de acordo com a conclusão da análise da Eq. (2.89), termina no ponto tricrítico $r = 3$.

A condição $\partial g / \partial m = 0$ conduz à equação de estado para a magnetização

$$\frac{r^2}{36} m^6 + \left(\frac{r^2}{36} + \frac{r}{3}\right) m^4 + \left(\frac{r}{3} + 1\right) m^2 - h^2 + 1 = 0 \quad (2.91)$$

cuja solução real e não nula m_f define a fase ordenada do estado fundamental do modelo.

Na sequência da mesma análise anterior que obteve as linhas de transição de primeira ordem, a igualdade das energias livre da fase ordenada

$$g_f = -\frac{1}{2} m_f^2 - \frac{1}{4!} r m_f^4 - h(1 - m_f^2)^{\frac{1}{2}}$$

e da fase desordenada

$$g_p^{(0)} = -h,$$

obtidas da Eq. (2.90), fornece a linha de transição de primeira ordem induzida pelo campo no estado fundamental. Esta linha, que também pode ser obtida numericamente, está expressa, de modo esquemático, na Figura 2.6.

2.5 Modelo com interação aleatória em blocos de $p = 2$ spins e interação uniforme em blocos de $p' = 4$ spins.

2.5.1 Escolha de Hopfield

Estamos agora em condição de abordar os modelos sugeridos na introdução, que associam desordem binária à interação uniforme. Para sistemas com interação aleatória entre pares e um termo de interação uniforme em blocos de $p = 4$ spins, escrevemos o hamiltoniano.

$$H = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \frac{J_4}{4!N^3} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^4, \quad (2.92)$$

submetido à condição esférica

$$\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N$$

e obedecendo à escolha de Hopfield de dois padrões

$$J_{ij} = \frac{1}{2N} J (\xi_i \xi_j + \eta_i \eta_j).$$

As variáveis ξ_i e η_i assumem, como antes, os valores ± 1 e ambos os coeficientes, J e J_4 , são positivos. Alguma álgebra permite ver que, introduzindo variáveis mais convenientes,

$$m_1 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i \sigma_i, \quad (2.93)$$

$$m_2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i \sigma_i, \quad (2.94)$$

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.95)$$

escrevemos

$$\begin{aligned}
\beta \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j &= \frac{\beta J}{2N} \sum_{(i,j)} (\xi_i \xi_j + \eta_i \eta_j) \sigma_i \sigma_j = \\
&= \frac{\beta J}{4N} \sum_{i,j=1}^N (\xi_i \sigma_i \xi_j \sigma_j + \eta_i \sigma_i \eta_j \sigma_j) - \frac{\beta J}{4N} \sum_{i,j=1}^N (\xi_i^2 + \eta_i^2) = \\
&= \frac{\beta J N}{4} (m_1^2 + m_2^2) - \frac{\beta J}{2}. \tag{2.96}
\end{aligned}$$

Deste modo, usando os argumentos que nos permitiram escrever as Eqs.(2.30) a (2.43), obtemos

$$Z(T, N) = \int \int dm dm_1 dm_2 \exp \left[\frac{\beta J N}{4} (m_1^2 + m_2^2) + \frac{\beta J_4 N}{4!} m^4 \right] \Omega(m, m_1, m_2), \tag{2.97}$$

com

$$\begin{aligned}
\Omega(m, m_1, m_2) &= \int \cdots \int_{-\infty}^{\infty} d\sigma_1 \cdots d\sigma_N \delta \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - N \right) \delta \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i - Nm \right) \times \\
&\quad \times \delta \left(\sum_{i=1}^N \xi_i \sigma_i - Nm_1 \right) \delta \left(\sum_{i=1}^N \eta_i \sigma_i - Nm_2 \right). \tag{2.98}
\end{aligned}$$

O cálculo do funcional dos vínculos de integração segue os mesmos argumentos e produz, de acordo com (2.42),

$$\Phi_s = \frac{1}{2} [1 + \ln(2\pi)] + \frac{1}{2} \ln(1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2), \tag{2.99}$$

o que permite, fazendo $r = J_4/J$, escrever a energia livre do modelo,

$$g = -\frac{r}{24} m^4 - \frac{1}{4} (m_1^2 + m_2^2) - \frac{t}{2} \ln(1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2) - \frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)]. \tag{2.100}$$

É esta última expressão que será analisada do ponto de vista da existência, da estabilidade e da realização, no espaço das variáveis termodinâmicas r e t , das fases que se associam aos valores dos parâmetros m , m_1 e m_2 . A fase desordenada, ou paramagnética, se manifesta para $m = m_1 = m_2 = 0$ e

a fase ordenada, ou ferromagnética, para soluções não nulas de m , enquanto $m_1 = m_2 = 0$. Inversamente, para soluções não nulas de m_1 e m_2 , quando $m = 0$, apresentam-se as fases tipo vidro de spin, ou vítreas, justamente aquelas que procuramos encontrar nestes modelos. A solução das equações de estado com todos os parâmetros são diferentes de zero será denominada, de acordo com van Hemmen, fase mista. As equações de estado são determinadas pela anulação das derivadas parciais,

$$\frac{\partial g}{\partial m} = -\frac{rm^3}{6} + \frac{tm}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0, \quad (2.101)$$

$$\frac{\partial g}{\partial m_1} = -\frac{m_1}{2} + \frac{tm_1}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0, \quad (2.102)$$

$$\frac{\partial g}{\partial m_2} = -\frac{m_2}{2} + \frac{tm_2}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0. \quad (2.103)$$

Devemos minimizar a expressão

$$g(m, m_1, m_2; r, t) = g_p + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial g}{\partial x_j} \Big|_{*x_j} + \frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 g}{\partial x_j^2} \Big|_{*x_j} + \sum_{j,k=1}^3 \frac{\partial^2 g}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{*x_j x_k} \right) + \dots$$

onde $x_1 = m$, $x_2 = m_1$ e $x_3 = m_2$, em relação a esses parâmetros. O asterísco indica que a grandeza apontada é calculada de acordo com as condições específicas da fase em relação aos parâmetros. Anulados os coeficientes dos termos lineares, pelas equações imediatamente anteriores, a condição de mínimo de g será definida pelo sinal da forma quadrática nas derivadas segundas. Novamente [16], para o hessiano

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} & \frac{\partial^2 g}{\partial m_1 \partial m} & \frac{\partial^2 g}{\partial m_2 \partial m} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial m_1} & \frac{\partial^2 g}{\partial m_1^2} & \frac{\partial^2 g}{\partial m_2 \partial m_1} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial m_2} & \frac{\partial^2 g}{\partial m_1 \partial m_2} & \frac{\partial^2 g}{\partial m_2^2} \end{vmatrix},$$

a forma quadrática será definida positiva e a energia livre será um mínimo quando os submenores principais desta matriz,

$$M_{11} = \frac{\partial^2 g}{\partial m^2}, \quad (2.104)$$

$$M_{22} = \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} \frac{\partial^2 g}{\partial m_1^2} - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial m_1 \partial m} \right)^2 \quad (2.105)$$

e

$$\begin{aligned}
M_{33} = & \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial m_1^2} \frac{\partial^2 g}{\partial m_2^2} - \left(\frac{\partial^2 g}{\partial m_2 \partial m_1} \right)^2 \right) - \\
& - \frac{\partial^2 g}{\partial m_1 \partial m} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial m \partial m_1} \frac{\partial^2 g}{\partial m_2^2} - \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial m_2} \frac{\partial^2 g}{\partial m_2 \partial m_1} \right) + \\
& + \frac{\partial^2 g}{\partial m_2 \partial m} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial m \partial m_1} \frac{\partial^2 g}{\partial m_1 \partial m_2} - \frac{\partial^2 g}{\partial m \partial m_2} \frac{\partial^2 g}{\partial m_1^2} \right), \quad (2.106)
\end{aligned}$$

forem positivos. Nos cálculos de estabilidade vamos usar a simetria da matriz do Hessiano para notar $A = \partial^2 g / \partial m^2$, $B = \partial^2 g / \partial m_1^2$, $C = \partial^2 g / \partial m_2^2$, $D = \partial^2 g / \partial m_1 \partial m$, $E = \partial^2 g / \partial m_2 \partial m$ e $F = \partial^2 g / \partial m_2 \partial m_1$. Nesta notação os critérios se traduzem em

$$A > 0, \quad (2.107)$$

$$AB - D^2 > 0, \quad (2.108)$$

$$A(BC - F^2) - D(DC - EF) + E(DF - BE) > 0 \quad (2.109)$$

que generaliza o critério obtido nas Eqs. (2.53) e (2.54).

Para o modelo com energia livre dada pela Eq. (2.100), de acordo com os valores dos parâmetros, são possíveis as seguintes fases, cujas regiões de estabilidade estão representadas na Figura (2.7)

I.1. Fase ordenada, na qual $m \neq 0$ e $m_1 = m_2 = 0$. As Eqs. (2.102) e (2.103) são identicamente satisfeitas e a Eq. (2.101) fornece a equação de estado

$$m^4 - m^2 + 6\frac{t}{r} = 0, \quad (2.110)$$

cuja solução real

$$m = 1/2 + 1/2 \left(1 - 24\frac{t}{r} \right)^{1/2}$$

para

$$\Delta = 1 - 24\frac{t}{r} > 0$$

ou $t < r/24$, determina a magnetização desta fase. A análise das segundas

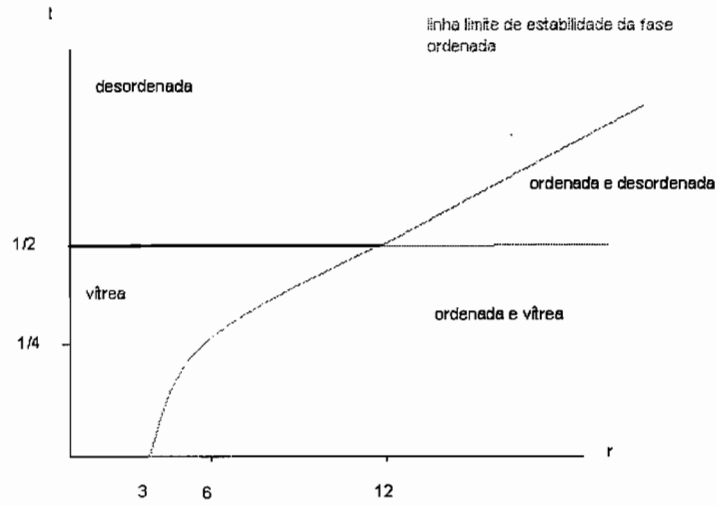


Figura 2.7: Regiões de coexistência e linhas limites de estabilidade das fases.

derivadas, na notação escolhida,

$$A = -\frac{r}{2}m^2 + \frac{t(1+m^2)}{(1-m^2)^2}, \tag{2.111}$$

$$C = B = -\frac{1}{2} + \frac{t}{1-m^2}, \tag{2.112}$$

$$D = E = F = 0, \tag{2.113}$$

para o critério que envolve os submenores, reduz-se a pedir que A e B que sejam ambos positivos. Com alguma álgebra podemos mostrar que

$$A = \frac{32rt\sqrt{r^2 - 24rt}}{4(r - \sqrt{r^2 - 24rt})^2} > 0,$$

sempre. Continuando,

$$B = \frac{-r + \sqrt{\Delta} + 4tr}{2(r - \sqrt{\Delta})}$$

apresentará dois limites de positividade. Para $\sqrt{\Delta} > r - 4tr$, B é sempre positivo na região $t > 1/4$, garantindo que aí a fase ordenada apresenta um

mínimo na sua região de existência, ou seja para

$$t < r/24.$$

Para $r > 4tr$, ou $t < 1/4$, necessitamos $\Delta > (r - 4tr)^2$, ou

$$t < \frac{1}{2} - \frac{3}{2r}, \quad (2.114)$$

para que B continue positivo. Observando que os dois limites de estabilidade se encontram em $r = 6$, esta condição impõe que a fase ordenada será mínima na região definida pela desigualdade (2.114) para o segmento $3 \leq r \leq 6$. Para $r > 6$ esta fase corresponde a um mínimo na região $t < r/24$.

Nestas condições a energia livre da fase ordenada é dada por

$$g_f = g_p - \frac{1}{96r}(2r^2 + 2r\sqrt{r^2 - 24rt} - 24tr) - \frac{t}{2} \ln\left(\frac{r - \sqrt{r^2 - 24rt}}{2r}\right), \quad (2.115)$$

onde $g_p = -\frac{t}{2}[1 + \ln(2\pi)]$.

I.2. Fases mistas, para as quais $m \neq 0$, $m_1 \neq 0$ e $m_2 \neq 0$, ou, $m \neq 0$, $m_1 \neq 0$ e $m_2 = 0$, ou vice versa. As Eqs. (2.101) a (2.103), que agora se escrevem

$$\frac{r}{6}m^2 = \frac{1}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2}$$

e

$$2t = 1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2$$

indicam uma degenerescência nos parâmetros m_1 e m_2 de modo que

$$m_1^2 + m_2^2 = 1 - \frac{3}{r} - 2t, \quad (2.116)$$

para

$$m^2 = \frac{3}{r}. \quad (2.117)$$

Ambas estas expressões devem ser positivas, pois procuramos soluções reais, de forma que estas fases mistas se estabilizam na mesma região,

$$1 - \frac{3}{r} - 2t > 0, \quad (2.118)$$

que é a mesma dada pela Eq. (2.114). O cálculo das derivadas segundas

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{3 - 2tr}{2tr}, \\
 B &= \frac{m_1^2}{2t}, \\
 C &= \frac{m_2^2}{2t}, \\
 D &= \frac{m_1}{2t} \sqrt{\frac{3}{r}}, \\
 E &= \frac{m_2}{2t} \sqrt{\frac{3}{r}}, \\
 F &= \frac{m_1 m_2}{2t}
 \end{aligned} \tag{2.119}$$

mostra que $A > 0$, pois, de acordo com a condição (2.118), $t < 3/2r$, porém o critério relativo ao segundo submenor não é satisfeito, pois

$$AB - D^2 = -2tr < 0.$$

Estas fases mistas são, portanto, máximos na região de sua estabilidade, não se realizando.

I.3. Fase desordenada, na qual $m = m_1 = m_2 = 0$. Para esta fase as equações de estado são identicamente satisfeitas, como também as condições (2.107) e (2.108) para as derivadas parciais segundas,

$$A = t, \tag{2.120}$$

$$C = B = -\frac{1}{2} + t, \tag{2.121}$$

$$D = E = F = 0, \tag{2.122}$$

garantindo a minimização para $t > 1/2$. A energia livre desta fase é dada por

$$g_p = -\frac{t}{2}(1 + \ln 2\pi). \tag{2.123}$$

II. Fases vítreas. Estas fases estão associadas à anulação do parâmetro m , enquanto que os parâmetros m_1 e m_2 podem ser ambos, concomitante ou alternadamente, diferentes de zero. Quando m_1 e m_2 são diferentes de

zero, a Eq. (2.101) é identicamente satisfeita, enquanto que as Eqs.(2.102) e (2.103) conduzem a

$$m_1^2 + m_2^2 = 1 - 2t, \quad (2.124)$$

mostrando uma degenerescência. Se algum desses parâmetros, por exemplo m_1 se anula juntamente com m , temos

$$m_2^2 = 1 - 2t. \quad (2.125)$$

De toda forma, como as expressões acima devem ser positivas, estas fases correspondem a mínimos para $t < 1/2$. No primeiro caso (2.124), a inspeção das segundas derivadas,

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2}, \\ B &= \frac{m_1^2}{2t}, \\ C &= \frac{m_2^2}{2t}, \\ D &= E = 0, \\ F &= \frac{m_1 m_2}{2t} \end{aligned}$$

indica que esta situação representa um mínimo na região de existência, pois as condições (2.107) a (2.109) estão imediatamente satisfeitas. A situação submetida à condição de apenas um parâmetro diferir de zero, dado pela equação (2.125), com

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2}, \\ B &= \frac{m_1^2}{2t}, \\ C &= D = E = F = 0, \end{aligned}$$

satisfaz prontamente as condições de minimização, apontando que a fase vítrea se realiza para $t < 1/2$, com energia livre dada por

$$g_{sg} = g_p - \frac{1}{4}(1 - 2t) - \frac{t}{2} \ln(2t). \quad (2.126)$$

Conforme afirmamos, a Figura 2.7 indica as regiões de coexistência das fases para este modelo e resume a discussão acima.

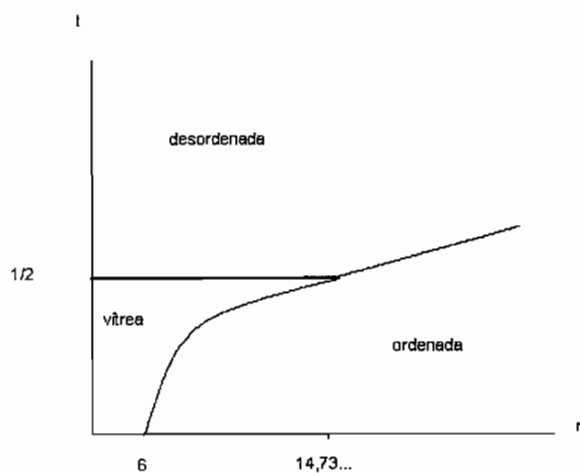


Figura 2.8: Diagrama de fase para as escolhas de Hopfield ou van Hemmen.

Portanto, devemos investigar a realização das fases, ordenada e desordenada, no plano $r \times t$ na intersecção das regiões $t > \frac{1}{2}$ e $t < \frac{r}{24}$, e das fases, vítrea e desordenada na região $t < \frac{1}{2} - \frac{3}{2r}$ para $3 \leq r \leq 6$ e na região $t < \frac{r}{24}$ para $r > 6$. Esta investigação indicará as linhas de transição de fase de primeira ordem, conseguidas a partir da igualdade das respectivas energias livres. A análise numérica permite desenhar o diagrama de fases expresso pela Figura 2.8. O modelo apresenta uma transição de segunda ordem entre as fases ordenada e desordenada ao longo da linha $t = 1/2$ para $0 \leq r \leq 14,7324\dots$ que encontra uma linha de transição de primeira ordem para $r > 14,7324\dots$. No ponto $(t = 1/2 ; r = 14,7324\dots)$ a linha de segunda ordem termina sobre uma fronteira de primeira ordem, separando as fases vítrea e ordenada, para $0 < t < 1/2$, e as fases desordenada e ordenada para $t > 1/2$, de acordo com a Figura 2.8.

2.5.2 Escolha de van Hemmen

O mesmo modelo tratado acima pode ser abordado supondo para o valor da interação aleatória, J_{ij} , entre sítios, que aparece no hamiltoniano. (2.92), a

escolha de van Hemmen[5]

$$J_{ij} = \frac{1}{N} J (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i).$$

Pequenas modificações na Eq. (2.96) permitem escrever

$$\begin{aligned} \beta \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j &= \frac{\beta J}{2N} \sum_{(i,j)} (\xi_i \eta_j + \xi_j \eta_i \eta_j) \sigma_i \sigma_j = \\ &= \frac{\beta J}{4N} \sum_{i,j=1}^N (\xi_i \sigma_i \eta_j \sigma_j + \eta_i \sigma_i \xi_j \sigma_j) - \frac{\beta J}{4N} \sum_{i,j=1}^N (\xi_i \eta_i + \eta_i \xi_i) = \\ &= \frac{\beta J N}{2} (m_1 m_2) - \frac{\beta J}{2}. \end{aligned} \quad (2.127)$$

O cálculo do funcional dos vínculos de integração se reproduz e, valendo-nos da relação (2.99) e seguindo o mesmo raciocínio que nos levou da Eq. (2.97) à Eq. (2.100), obtemos uma expressão análoga a essa última para a energia livre do modelo,

$$g = -\frac{r}{24} m^4 - \frac{1}{2} m_1 m_2 - \frac{t}{2} \ln(1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2) - \frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)]. \quad (2.128)$$

As equações de estado,

$$\frac{\partial g}{\partial m} = -\frac{rm^3}{6} + \frac{tm}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0, \quad (2.129)$$

$$\frac{\partial g}{\partial m_1} = -\frac{m_2}{2} + \frac{tm_1}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0, \quad (2.130)$$

$$\frac{\partial g}{\partial m_2} = -\frac{m_1}{2} + \frac{tm_2}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0, \quad (2.131)$$

e as derivadas parciais de segunda ordem,

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{\partial^2 g}{\partial m^2} = -\frac{r}{2}m^2 + \frac{t(1+m^2-m_1^2-m_2^2)}{(1-m^2-m_1^2-m_2^2)^2}, \\
 B &= \frac{\partial^2 g}{\partial m_1^2} = \frac{t(1-m^2+m_1^2-m_2^2)}{(1-m^2-m_1^2-m_2^2)^2}, \\
 C &= \frac{\partial^2 g}{\partial m_2^2} = \frac{t(1-m^2-m_1^2+m_2^2)}{(1-m^2-m_1^2-m_2^2)^2}, \\
 D &= \frac{\partial^2 g}{\partial m_1 \partial m} = \frac{2tm m_1}{(1-m^2-m_1^2-m_2^2)^2}, \\
 E &= \frac{\partial^2 g}{\partial m_2 \partial m} = \frac{2tm m_2}{(1-m^2-m_1^2-m_2^2)^2}, \\
 F &= \frac{\partial^2 g}{\partial m_1 \partial m_2} = -\frac{1}{2} + \frac{2tm_2 m_1}{(1-m^2-m_1^2-m_2^2)^2},
 \end{aligned}$$

submetem-se à mesma análise das condições de estabilidade e minimização da energia livre, delimitando-se as seguintes situações:

I.1. Fase ordenada, na qual $m \neq 0$ e $m_1 = m_2 = 0$. Reproduz as mesmas condições do caso anterior, com energia livre dada pela Eq. (2.115).

I.2. Fase mista, para a qual $m \neq 0$, $m_1 \neq 0$ e $m_2 \neq 0$. Nela $m^2 = 3/r$ e $m_1 = m_2 = \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{3}{2r} - t}$. Para satisfazer

$$A = -\frac{3}{2} + \frac{3}{r} + t > 0$$

devemos ter

$$t > 3/2 - 3/r$$

o que está em desacordo com

$$m_1^2 = m_2^2 = \frac{1}{2} - \frac{3}{2r} - t > 0$$

que faz

$$t < \frac{1}{2} - \frac{3}{2r},$$

mostrando que a energia livre correspondente apresenta um máximo na sua região de existência.

I.3. Fase desordenada, na qual $m = m_1 = m_2 = 0$ e as Eqs.(2.129) a (2.131) são identicamente atendidas. Nestas condições,

$$\begin{aligned} A &= B = C = t, \\ D &= E = 0, \\ F &= -\frac{1}{2}, \end{aligned}$$

e o critério (2.109) garante a estabilidade, novamente, para $t > 1/2$, com energia livre dada pela Eq. (2.123).

II. Fase vítrea, na qual $m = 0$, $m_1 \neq 0$ e $m_2 \neq 0$. A Eq. (2.129) é identicamente satisfeita, enquanto que as Eqs. (2.130) e (2.131) resultam em

$$m_1^2 = m_2^2 = \frac{1}{2} - t,$$

que deve ser necessariamente positivo, indicando que $t < 1/2$ é a condição de estabilidade. Os critérios de minimização reproduzem os cálculos da seção anterior, garantindo a realização da fase vítrea na mesma região e determinando que sua energia livre siga a Eq. (2.126).

O último parágrafo da seção anterior se aplica, integralmente, ao modelo com escolha de van Hemmen e o diagrama de fase é idêntico ao do modelo submetido à escolha de Hopfield, mostrado na Figura 2.8. Este diagrama, comum aos modelos tratados, mostra que as escolhas de Hopfield ou van Hemmen, para a interação aleatória entre dois sítios, não mudam o comportamento termodinâmico do sistema.

2.6 Modelos esféricos binários de Hopfield e van Hemmen

Uma variante do modelo anterior é conseguida mantendo-se a interação aleatória binária e substituindo-se a interação em blocos de quatro sítios por uma interação uniforme, também binária. Esta nova situação se assemelha, por outro lado, ao modelo binário aleatório que foi originalmente tratado na literatura e se constituiu no motivo de aplicação das escolhas de Hopfield e van Hemmen. Aparentemente os modelos originais de van Hemmen e Hopfield, com o vínculo esférico, ainda não foram examinados na literatura.

Vamos então considerar o hamiltoniano.

$$H = \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \frac{J_0}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2, \quad (2.132)$$

submetido, inicialmente, à escolha de Hopfield de dois padrões. Pelo raciocínio anterior temos

$$g = -\frac{r}{2} m^2 - \frac{1}{4} (m_1^2 + m_2^2) - \frac{t}{2} \ln (1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2) - \frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)], \quad (2.133)$$

o que nos leva a considerar

$$\frac{\partial g}{\partial m} = -rm + \frac{tm}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0, \quad (2.134)$$

$$\frac{\partial g}{\partial m_1} = -\frac{m_1}{2} + \frac{tm_1}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0, \quad (2.135)$$

$$\frac{\partial g}{\partial m_2} = -\frac{m_2}{2} + \frac{tm_2}{1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2} = 0. \quad (2.136)$$

Temos então as seguintes fases:

I.1. Fase ordenada, para $m \neq 0$ e $m_1 = m_2 = 0$. As Eqs. (2.135) e (2.136) são identidades e a Eq. (2.134) requer que

$$m^2 = 1 - \frac{t}{r} \quad (2.137)$$

que deve ser positivo, fazendo com que esta fase seja estável para $t < r$. Utilizando a notação anterior, temos

$$A = \frac{2r}{t}(r - t),$$

$$B = C = r - \frac{1}{2},$$

$$D = E = F,$$

indicando a existência de mínimo para $t < r$ para garantir que $A > 0$ e $r > 1/2$ para garantir que $AB > 0$. A energia livre da fase ordenada é

$$g_f = -\frac{r}{2} + \frac{t}{2} - \frac{t}{2} \ln\left(\frac{t}{r}\right) + g_p, \quad (2.138)$$

onde, novamente, $g_p = -\frac{t}{2}[1 + \ln(2\pi)]$.

I.2. Fase mista, para $m \neq 0$, $m_1 \neq 0$ e $m_2 \neq 0$. A relação (2.134) combinada com as relações (2.135) e (2.136), as quais se igualam, indicando que esta situação existe para $r = 1/2$ e $t < 1/2$ e fornecendo a relação de degenerescência

$$m^2 + m_1^2 + m_2^2 = 1 - 2t. \quad (2.139)$$

Considerando

$$\begin{aligned} A &= \frac{m^2}{2t}, \\ B &= \frac{m_1^2}{2t}, \\ C &= \frac{m_2^2}{2t}, \\ D &= \frac{mm_1}{2t}, \\ E &= \frac{mm_2}{2t}, \\ F &= \frac{m_2m_1}{2t}, \end{aligned}$$

é imediato constatar que os critérios (2.107) a (2.109) estão satisfeitos e a fase mista, diferentemente dos modelos anteriores, é um mínimo na sua região de existência. A energia livre se escreve

$$g_m = -\frac{1}{4} + \frac{t}{2} - \frac{t}{2} \ln(2t) + g_p. \quad (2.140)$$

I.3. A fase desordenada, com todos os parâmetros nulos e energia interna $g_p = -\frac{t}{2}[1 + \ln(2\pi)]$, transforma em identidades as Eqs. (2.129) a (2.131) e traz

$$\begin{aligned} A &= t - r, \\ B &= C = t - \frac{1}{2}, \\ D &= E = F = 0. \end{aligned}$$

A fase desordenada é estável para $t > r$ e $t > 1/2$, novamente para que tenhamos $A > 0$ e $AB > 0$.

II. Fases vítreas, com

$$m = 0, m_1 \neq 0 \text{ e } m_2 \neq 0, \quad (2.141)$$

ou apenas um dos parâmetros m_1 ou m_2 não nulos. O primeiro caso se manifesta para $t < 1/2$, o que decorre da relação

$$m_1^2 + m_2^2 = 1 - 2t.$$

obtida como equação de estado. Considerando

$$\begin{aligned} A &= -r + \frac{1}{2}, \\ B &= \frac{m_1^2}{2t}, \\ C &= \frac{m_2^2}{2t}, \\ D &= E = 0, \\ F &= \frac{m_1 m_2}{2t}, \end{aligned}$$

esta situação equivale a um mínimo para $r < 1/2$ na região $t < 1/2$. O segundo caso tem o parâmetro não nulo, por exemplo m_2 , dado por $m_2^2 = 1 - 2t$ e

$$\begin{aligned} A &= -r + \frac{1}{2}, \\ B &= 0, \\ C &= \frac{m_2^2}{2t}, \\ D &= E = F = 0, \end{aligned}$$

fazendo com que o mínimo fique na mesma região $r < 1/2$ e $t < 1/2$. Para ambos, a energia livre é

$$g_{sg} = -\frac{1}{4} + \frac{t}{2} - \frac{t}{2} \ln(2t) + g_p, \quad (2.142)$$

idêntica a g_m .

O diagrama de fase é apresentado na Figura 2.9.

Se procedermos à escolha de van Hemmen, obtemos

$$g = -\frac{r}{2}m^2 - \frac{1}{2}m_1 m_2 - \frac{t}{2} \ln(1 - m^2 - m_1^2 - m_2^2) - \frac{t}{2} [1 + \ln(2\pi)],$$

que produzirá alterações algébricas, as quais se mostrarão irrelevantes para a termodinâmica do modelo, mantendo-se diagrama de fase idêntico ao anterior.

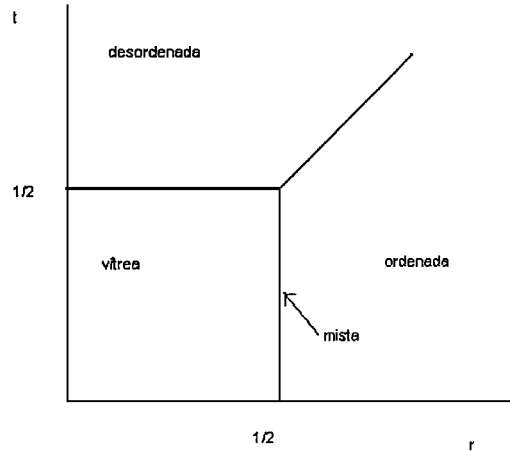


Figura 2.9: Diagrama de fase para o modelo com $p = p' = 2$, com escolha de Hopfield ou van Hemmen.

Não existem, para este modelo, seguindo a escolha de Hopfield, ou, de van Hemmen, regiões onde se sobreponham áreas de estabilidade, com coexistência de mínimos. A linha limite

$$t = \frac{1}{2}, \quad r < \frac{1}{2},$$

entre as fases vítrea e desordenada é uma linha de transição de segunda ordem. Assim também, a linha

$$t = r, \quad r > \frac{1}{2},$$

define uma transição de segunda ordem entre as fases ordenada e desordenada, com a magnetização na fase ordenada dada pela Eq.(2.137) convergindo a zero no limite. Ambas as linhas encontram-se no ponto tríplice $r = 1/2$, $t = 1/2$ com a reta $r = 1/2$ para $t < 1/2$, onde transitam as fases ordenada, vítrea e mista. É necessário verificar a natureza deste ponto, de acordo com a natureza da transição nesta última linha, pois, a regra de fases de Gibbs proíbe o encontro de mais do que duas linhas de segunda ordem em um ponto

tríplice. É imediato verificar que, sobre $r = 1/2$ para $t < 1/2$ vale

$$g_f = g_m = g_{sg}, \quad (2.143)$$

e que a entropia, $s = -\left(\frac{\partial g}{\partial t}\right)_h$, associada a estas fases e calculada nesta representação a campo constante, vale

$$s = \frac{1}{2} \ln 2t + \text{constante}, \quad (2.144)$$

não se manifestando calor latente na transição. Verificando o comportamento da magnetização anotamos a existência de uma descontinuidade, sobre a reta em questão, dada pelo desencontro das condições (2.137) e (2.141). A magnetização da fase ordenada

$$m^2 = 1 - 2t \neq 0, \quad (2.145)$$

não converge para zero no limite, indicando uma descontinuidade na transição. Quem se anula é a soma dos parâmetros na fase mista dada pela Eq. (2.139). Portanto, a fase mista identificada originalmente por van Hemmen, conforme apresentado na Figura (2.2), agora, diferentemente, neste modelo esférico, coalesce sobre a linha em questão e persiste associada à condição (2.145), permitindo que a transição seja de primeira ordem, garantindo obediência à termodinâmica.

A Fig (2.10), abaixo, apresenta a descontinuidade da magnetização devido à transição de primeira ordem entre as fases vítrea, mista e ordenada.

2.7 Conclusão

Os modelos tratados neste capítulo associam à interação aleatória binária, que conduz a comportamentos termodinâmicos de vidros de spins, outras interações, uniformes, em blocos de p spins. Os termos binários são considerados na condição esférica e submetidos a escolhas, de Hopfield ou van Hemmen, usuais no tratamento de vidros de spins. Essas condições especiais, tomadas na aproximação de campo médio, permitem prescindir do argumento de réplicas e construir as funções partição por argumentos geométricos e pelo método de integração do ponto de sela.

Mostramos que o comportamento termodinâmico não diferencia as escolhas particulares para a aleatoriedade. Encontramos transições de primeira

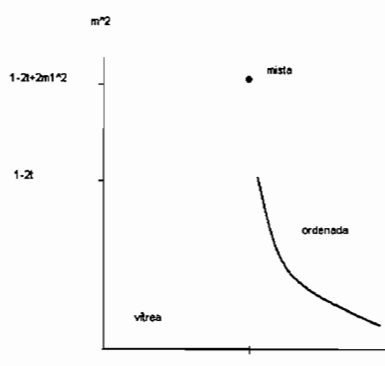


Figura 2.10: Magnetização para $t < 1/2$

ordem entre a fase ordenada e as fases vítrea e desordenada. A transição de segunda ordem entre as fases vítrea e desordenada se mantém. Mostramos que um caso particular do modelo binário de van Hemmen apresenta a coalescência da fase mista sobre uma linha de transição de primeira ordem entre as fases vítrea e ordenada, de acordo com argumentos termodinâmicos.

O modelo com interações uniformes, J_2 e J_4 , de blocos de dois e quatro spins é tratado analiticamente. A campo nulo é traçado o diagrama de fases e determinada, analiticamente, a linha de transição de primeira ordem entre as fases ordenada e desordenada. Na presença de um campo aleatório de média nula, o diagrama de fase apresenta uma linha de pontos tricríticos onde se iniciam linhas de transição de primeira ordem entre as fases. As demais transições, induzidas pelo campo, pela razão $r = J_2/J_4$, ou pela temperatura, são de segunda ordem para valores dos parâmetros aquém daqueles que definem o ponto tricrítico nas diversas situações.

Referências

- [1] P. Gillin and D. Sherrington, *J. Phys. A* **33** 3081 (2000).
- [2] S. F. Edwards and P. W. Anderson, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **50**, 965 (1975)
- [3] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975)
- [4] J. R. L. de Almeida and D. J. Thouless, *J. Phys. A* **11**, 983 (1978)
- [5] J. L. van Hemmen, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 409 (1982)
- [6] J. L. van Hemmen, *Z. Phys. B* **50**, 311 (1983)
- [7] S. R. Salinas e Wreszinski, *J. Stat. Phys.* **41**, 299 (1985).
- [8] T. A. S. Haddad, A. P. Vieira e S. R. Salinas, *Physica A*, 2004 aceito para publicação
- [9] J. J. Hopfield, D. I. Feinstein and R. G. Palmer, *Nature* **304**, 158 (1974)
- [10] J. J. Hopfield, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **79**, 2554 (1982)
- [11] R. Rammal, G. Toulouse and M. A. Virasoro, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 765 (1986)
- [12] D. J. Amit, *Phys. Rev. A* **32**, 1007 (1985)
- [13] D. J. Amit, H. Gutfreund and H. Sompolinsky, *Annals of Physics*, **173**, 30 (1987)
- [14] L. Xiquan, *Form. Math.* **9**, 389 (2001)

- [15] V. Dotsenko, *An introduction to the theory of spin glasses and neural networks*, World Scientific, Singapore (1994)
- [16] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of integrals, series and products* 5^aed. Academic Press, Boston (1994)

Capítulo 3

Representação número e a equação de Liouville

3.1 Introdução

Nesse capítulo pretendemos apresentar uma revisão da aplicação do método de segunda quantização à equação de Liouville, estabelecido por M. Schönberg [1], examinando a relação desses resultados com desenvolvimentos que surgiram em consequência dos artigos de Doi [31], Martin, Siggia e Rose (MSR) [32] e Grassberger e Scheunert [37]. Nossa análise está centrada na questão da compatibilidade física da representação número com os sistemas clássicos. Nesta perspectiva, amparados no método de Schönberg, mas seguindo um caminho diferente, inicialmente discutimos detalhadamente a construção do espaço de Hilbert e da representação número no espaço de fase, que nos conduzem aos operadores de campo. O aparato teórico básico é construído, de modo que resultados apresentados na literatura, por vezes de forma intrincada ou *ad hoc*, são aqui obtidos explicitamente, e servirão de fundamento para a análise de sistemas estocáticos, tema a ser explorado no próximo capítulo.

Organizamos a apresentação da seguinte maneira. Na seção 2 os conceitos de densidade de probabilidade, amplitude de probabilidade e equação de Liouville são discutidos. Na seção 3 o espaço de Hilbert clássico é construído. Na seção 4 o conceito de propagador é desenvolvido, e a representação número e operadores de campo no espaço de fase são tratados na seção 5. A conexão com os formalismos que decorreram dos estudos de Doi e MSR é

apresentada na seção 6.

3.2 A Equação de Liouville

Um resultado básico em mecânica clássica é o teorema de Liouville, estabelecendo que a densidade de pontos no espaço de fase (Γ) é uma grandeza conservada. Especificamente, denotemos um ponto em Γ por $(q, p) = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$, onde $q = (q_1, \dots, q_N)$ são as coordenadas generalizadas e $p = (p_1, \dots, p_N)$ são os momentos canonicamente associados a q . Considerando uma densidade de pontos em Γ , dada por $n(q, p) = n(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$, o teorema de Liouville garante que

$$\frac{d}{dt}n(q, p; t) = 0. \quad (3.1)$$

Usando as equações de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial}{\partial p^i}H(q, p), \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial}{\partial q^i}H(q, p), \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.2)$$

onde $H(q, p)$ é o hamiltoniano., a equação (3.1) pode ser reescrita como,

$$\partial_t n(q, p; t) = \{H(q, p), n(q, p; t)\}_N, \quad (3.3)$$

(onde também usamos a notação $\partial_x = \partial/\partial x$), com $\{g(q, p), h(q, p; t)\}_N$ sendo os parênteses de Poisson definidos por

$$\begin{aligned} \{g(q, p), h(q, p; t)\}_N &= \frac{\partial g}{\partial q} \frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial p} \frac{\partial h}{\partial q} \\ &= \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial g}{\partial q_i} \frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i} \frac{\partial h}{\partial q_i} \right). \end{aligned}$$

Considerando a normalização de $n(q, p; t)$, podemos introduzir a função

$$f(q, p; t) = \frac{n(q, p; t)}{\int dq dp n(q, p; t)},$$

que resulta em

$$\int dq dp f(q, p; t) = 1.$$

Logo, $f(q, p; t)$ pode ser interpretada como uma densidade de probabilidade no espaço de fase [39]. Dessa forma, a função $f(q, p; t)$ define o estado de um sistema clássico de N partículas, evoluindo no tempo de acordo com a equação de movimento

$$\partial_t f(q, p; t) = \{H(q, p), f(q, p; t)\}, \quad (3.4)$$

também conhecida como equação de Liouville. Neste contexto, um observável descrito por uma função $A(q, p; t)$ tem um valor médio no estado $f(q, p; t)$ dado por um funcional linear da densidade

$$\langle A \rangle = \int dq dp A(q, p; t) f(q, p; t). \quad (3.5)$$

A compatibilidade desta descrição de Liouville-Poisson da mecânica clássica com as equações de Hamilton é alcançada quando o estado f for uma função δ de Dirac, isto é,

$$f(q, p; t) = \delta(q - q(t))\delta(p - p(t)),$$

onde $q(t)$ e $p(t)$ são soluções das equações (3.2). Nesta situação, temos o que se chama de *estado puro*. A equação (3.4), contudo, pode descrever situações mais gerais que as equações de Hamilton, em particular contemplando estados termalizados (os chamados *estados de mistura*). Este é o caso, por exemplo, do ensemble canônico de Gibbs descrevendo o equilíbrio termodinâmico, onde o estado é dado por [39]

$$f(q, p) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta H(q, p)], \quad (3.6)$$

que é uma solução da equação (3.4) para o equilíbrio, isto é, tal que $\{H(q, p), f(q, p; t)\} = 0$. Na notação usual da física estatística, $\beta = 1/k_B T$, onde T é a temperatura absoluta e k_B é a constante de Boltzmann, e a função de partição Z é um fator de normalização.

A partir deste formalismo de Liouville-Poisson, observando que a equação (3.4) expressa a conservação de probabilidade no espaço de fase, é possível implementar outra generalização para a descrição dos sistemas clássicos, com base na noção de amplitude de probabilidade. Na realidade, a amplitude de probabilidade é uma extensão do conceito de probabilidade, introduzida no contexto da mecânica quântica. Mas o conceito em si, em princípio, pode

prescindir da referência à escala de tamanho do mundo atômico, que a constante de Planck introduz e que caracteriza a origem quântica do conceito. Neste sentido o conceito de amplitude é passível de ser utilizado em outros contextos. Schönberg [1] utilizou este fato, e seu formalismo pode ser entendido como o estabelecimento de uma equação de evolução para uma função complexa, designada $\theta(q, p; t)$, tal que

$$f(q, p; t) = \theta^*(q, p; t)\theta(q, p; t) = |\theta(q, p; t)|^2. \quad (3.7)$$

Esta função deve descrever o estado de um sistema físico, consignando uma analogia formal entre a equação de Liouville e a equação de Schrödinger. Neste sentido, se pode observar que, se $\theta(q, p; t)$ for uma solução da equação (3.4), isto é, se

$$\partial_t \theta(q, p; t) = \{H(q, p), \theta(q, p; t)\}, \quad (3.8)$$

então $f(q, p; t)$, definida pela equação (3.7), também é uma solução da mesma equação. A prova deste resultado é direta. Considerando as equações (3.7) e (3.8), temos

$$\begin{aligned} \partial_t f(q, p; t) &= \theta^* \frac{\partial}{\partial t} \theta + \theta \frac{\partial}{\partial t} \theta^* \\ &= \theta^* \{H, \theta\} + \theta \{H, \theta^*\} \\ &= \{H, \theta\theta^*\} = \{H, f\}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

A média de um observável clássico pode então ser dada a partir de uma forma bilinear, compatível com a equação (3.5), isto é, temos

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int dq dp \theta^*(q, p; t) A(q, p; t) \theta(q, p; t) \\ &= \int dq dp A(q, p; t) \theta^*(q, p; t) \theta(q, p; t) \\ &= \int dq dp A(q, p; t) f(q, p; t). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Este resultado, junto com a equação (3.8), mostra que a noção de amplitude de probabilidade no espaço de fase pode ser de fato utilizada para descrever sistemas clássicos no contexto do formalismo de Liouville-Poisson.

Em resumo, vemos que a equação de Liouville pode ser interpretada de quatro maneiras distintas:

(i) como uma equação válida para qualquer constante de movimento, $C(q, p)$, ou seja, $dC(q, p)/dt = 0$, de modo que $\partial_t C(q, p) = \{H, C\}$;

(ii) como a equação que descreve a evolução de pontos, $n(q, p)$, no espaço de fase (ver a equação (3.3));

(iii) como a equação para a evolução e conservação da densidade de probabilidade no espaço de fase, $f(q, p)$ (ver a equação (3.4));

(iv) como a equação de evolução para a amplitude de probabilidade no espaço de fase (ver a equação (3.8)). Na sequência analisaremos as consequências deste último resultado.

3.3 Espaço de Hilbert Clássico

O conceito de amplitude de probabilidade, como discutido na seção anterior, pode ser explorado plenamente se desenvolvermos a noção de espaço de Hilbert no espaço de fase, a ser denotado por $\mathcal{H}(\Gamma)$, a partir das funções complexas de quadrado integrável definidas em Γ . Para tanto, considere uma base definida por $|q, p\rangle$, tal que

$$\int dqdp |q, p\rangle \langle q, p| = 1,$$

e

$$\theta(q, p) = \langle q, p|\theta\rangle.$$

O produto escalar

$$\langle \psi|\theta\rangle = \int dqdp \langle \psi|q, p\rangle \langle q, p|\theta\rangle \quad (3.11)$$

$$= \int dqdp \psi^*(q, p) \theta(q, p) \quad (3.12)$$

é considerado finito e cada $|\theta\rangle$ será normalizado, isto é, $\langle \theta|\theta\rangle = 1$.

Um espaço de Hilbert associado às transformações unitárias de um sistema clássico foi investigado por Koopman [2], porém, as funções acessórias, lá introduzidas, não descreviam explicitamente estados do sistema. Por outro lado a métrica neste espaço, denominado de espaço de Hilbert-Koopman, é dada por

$$\langle \psi|\theta\rangle = \int dqdp f(q, p; t) \psi^*(q, p) \theta(q, p),$$

diferentemente da equação (3.12), não permitindo a completa analogia formal com a mecânica quântica, pois o cálculo da média dos operadores resulta em funcionais lineares e não bilineares dos estados do sistema (das amplitudes).

Podemos construir uma outra base, designada $|k, \eta\rangle$, a partir de ondas planas no espaço de fase,

$$\langle k, \eta | q, p \rangle = \frac{1}{2\pi} \exp [i(qk + \eta p)].$$

Assim escrevemos

$$\begin{aligned} \theta(q, p; t) &= \langle q, p | \theta(t) \rangle \\ &= \int dk d\eta \langle q, p | k, \eta \rangle \langle k, \eta | \theta(t) \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dk d\eta \theta(k, \eta; t) \exp [i(qk + \eta p)]. \end{aligned}$$

No sistema de referência de coordenadas (q, p) cada função em Γ representada por $a(q, p)$ dá origem a um operador múltiplo da unidade, $\mathbf{1}$, que será denotado por

$$a(q, p) \rightarrow A(q, p) = a(q, p) \cdot \mathbf{1},$$

de tal maneira que $A(q, p)\theta(q, p; t) = a(q, p)\theta(q, p; t)$.

Um operador em geral pode ser especificado por $A(q, p)$, tal que

$$\begin{aligned} \langle q, p | A | \theta(t) \rangle &= \int dq' dp' \langle q, p | A | q', p' \rangle \langle q', p' | \theta \rangle \\ &= \int dq' dp' \langle q, p | A | q', p' \rangle \theta(q', p'; t). \end{aligned}$$

Se A for um operador diagonal na base $|q, p\rangle$, então

$$\langle q, p | A | q', p' \rangle = A(q', p') \delta(q - q') \delta(p - p').$$

Neste caso podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle q, p | A | \theta(t) \rangle &= \int dq' dp' A(q', p') \delta(q - q') \delta(p - p') \theta(q', p'; t) \quad (3.13) \\ &= A(q, p) \theta(q, p; t). \end{aligned}$$

Em conseqüência, a equação (3.8) pode ser escrita como

$$i\partial_t \theta(q, p; t) = L(q, p) \theta(q, p; t), \quad (3.14)$$

onde

$$L(q, p) = i\{H(q, p), \cdot\};$$

sendo que o fator i foi introduzido de tal modo que o liouvilliano $L(q, p)$ seja um operador hermitiano. Usando então a equação (3.13), a equação (3.14), sem referência à base em $\mathcal{H}(\Gamma)$, fica dada por

$$i\partial_t|\theta(t)\rangle = L|\theta(t)\rangle. \quad (3.15)$$

Esta é uma equação básica da mecânica estatística clássica de Schönberg, constituindo uma generalização da equação de Liouville. Na próxima seção analisaremos com mais detalhes a solução desta equação.

3.4 O Propagador

A solução formal da equação (3.15) é dada por

$$|\theta(t)\rangle = U(t, t_0)|\theta(t_0)\rangle, \quad (3.16)$$

com o operador unitário

$$U(t, t_0) = \exp [i(t - t_0)L]. \quad (3.17)$$

Além disso, deve-se considerar que um operador arbitrário A satisfaz a condição $A(t) = A(t_0)$. Nesta situação, os estados evoluem no tempo e os operadores são fixos. Isto define o que se chama de descrição de Schrödinger clássica. Para realçar este fato, os estados serão indexados por um “s” e escritos como $|\theta(t)\rangle_s$. Podemos ainda introduzir a descrição de Heisenberg e de interação (ou de Dirac). O procedimento é idêntico ao caso quântico com a equação de Schrödinger.

O estado na descrição de Heisenberg é definido a partir do estado de Schrödinger por

$$|\theta(t)\rangle_H = U(t_0, t)|\theta(t)\rangle_S, \quad (3.18)$$

de tal modo que $|\theta(t)\rangle_H = |\theta(t_0)\rangle_S$, onde usamos a propriedade $U(t_0, t)U(t, t_0) = 1$, significando que o estado é mantido invariante. Para manter a condição de medida invariante (isto é, manter o valor médio de um observável independentemente do tipo de descrição que se usa) os operadores na descrição de Heisenberg evoluem no tempo de acordo com

$$A(t) = U(t, t_0)^{-1}A(t_0)U(t, t_0), \quad (3.19)$$

satisfazendo, portanto, a equação

$$\dot{A}(t) = [L, A(t)]. \quad (3.20)$$

Como caso particular vamos escrever essa equação para os operadores de posição q e momento p , correspondendo às equações de Hamilton, ou seja,

$$\dot{q}(t) = [L, q(t)], \quad \dot{p}(t) = [L, p(t)].$$

Note que q e p comutam entre si.

Para introduzir a descrição de interação vamos considerar que o liouvilliano possa ser escrito como

$$L = L_0 + L',$$

onde $L_0 = i\{H_0, \}$ descreve a parte livre e $L' = i\{H', \}$ representa a interação. Na descrição de interação clássica o vetor de estado é dado por

$$|\theta(t)\rangle = U_I(t, t_0)|\theta(t_0)\rangle,$$

com

$$i\partial_t U_I(t, t_0) = L_I U_I(t, t_0), \quad (3.21)$$

onde L_I é definido como

$$L_I = \exp [i(t - t_0)L_0] L' \exp [-i(t - t_0)L_0].$$

Uma vez mais, para manter a invariância da medida, os operadores evoluem no tempo com a parte livre do liouvilliano, isto é,

$$A(t) = U_0(t, t_0)^{-1} A(t_0) U_0(t, t_0),$$

com $U_0(t, t_0) = \exp [i(t - t_0)L_0]$. Estes formalismo é algumas vezes referido como *mecânica ondulatória no espaço de fase clássico*[17].

3.5 Representação Número em $\mathcal{H}(\Gamma)$

Usando a notação da seção anterior, para um sistema de N partículas, a equação (3.14) pode ser escrita, nas variáveis $\xi_i = (q_i, p_i)$ como

$$i\partial_t \theta(\xi_1, \dots, \xi_N; t) = L(\xi_1, \dots, \xi_N) \theta(\xi_1, \dots, \xi_N; t). \quad (3.22)$$

Considerando que o liouvilliano seja um operador simétrico na troca dos índices de partículas, isto é, supondo que

$$L(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = L(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N), \quad (3.23)$$

temos duas possibilidades,

$$\theta(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N; t) = \pm \theta(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N; t), \quad (3.24)$$

que descrevem bósons (+) ou férmions (-). A consequência principal deste fato é que podemos considerar partículas clássicas como sendo indistinguíveis. Como na mecânica quântica de partículas idênticas, esta simetria é introduzida por uma questão de experiência, justificada pela invariância da média dada pela equação (3.10) quando se permutam partículas idênticas.

A interação dinâmica, por sua vez, não modifica a natureza (fermiônica ou bosônica) das partículas. Então, a equação (3.22) fornece mais soluções do que realmente é necessário. Um caminho para evitar esta dificuldade, e encontrar somente as soluções de interesse físico, consiste em procurar um mecanismo para tratar o vínculo de simetria descrito pela equação (3.24). Um procedimento desse tipo fornece uma equação de movimento tendo soluções descrevendo estados com simetrias definidas; ou seja, estados tipicamente bosônicos ou fermiônicos. Tais estados são contruídos através do que se chama de representação número. Na terminologia da mecânica quântica a representação número é também chamada de “segunda quantização”. Esta denominação pode ser evitada, pois, mesmo numa situação quântica, a representação número rigorosamente não é um esquema de quantização no sentido do princípio de correspondência de Dirac em que a constante de Planck desempenha um papel central. Uma designação apropriada seria, simplesmente, *representação de Fock*. Para que o termo “segunda quantização” não origine confusões, ou incômodos, é preciso reconhecer no formalismo um método geral de tratamento das equações diferenciais parciais lineares no tempo, que descrevem a evolução de sistemas físicos, entre os quais estão aqueles constituídos por partículas clássicas.

Vamos considerar então um sistema clássico de N partículas bosônicas descritas pelo hamiltoniano.

$$H(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_{l=1}^N \frac{\mathbf{p}_l^2}{2m} + \sum_{l < l'} V(\mathbf{q}_l - \mathbf{q}_{l'}), \quad (3.25)$$

que leva ao liouvilliano

$$L(\xi_1, \dots, \xi_N) = i \{H(\xi_1, \dots, \xi_N), \cdot\}_N, \quad (3.26)$$

onde $q_i \equiv \mathbf{q}_i$, $p_i = \mathbf{p}_i$. O liouvilliano pode ainda ser escrito como

$$L(\xi_1, \dots, \xi_N) = \sum_{l=1}^N L^0(\xi_l) + \sum_{l < l'} L^{int}(\xi_l, \xi_{l'}), \quad (3.27)$$

$$L^0(\xi) = i \{H_0, \cdot\}_1, \quad (3.28)$$

$$L^{int}(\xi, \xi') = i \{V(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \cdot\}_2. \quad (3.29)$$

As funções de onda de uma partícula no espaço de fase serão denotadas por $\theta_{E_i}(\xi_i)$, onde E_i designa o conjunto de números que caracterizam a partícula clássica. A condição de ortogonalidade para estas funções é dada por

$$\int d\xi_1 \dots d\xi_N \theta_{E_i}^*(\xi_1, \dots, \xi_N) \theta_{E_j}(\xi_1, \dots, \xi_N) = \delta_{E_i E_j}. \quad (3.30)$$

Seja a expansão

$$\theta(\xi_1, \dots, \xi_N; t) = \sum_{E'_1 \dots E'_N} C(E'_1 \dots E'_N; t) \theta_{E'_1}(\xi_1) \theta_{E'_2}(\xi_2) \dots \theta_{E'_N}(\xi_N), \quad (3.31)$$

onde toda a dependência temporal foi transferida para os novos coeficientes $C(E'_1 \dots E'_N; t)$ que satisfazem a condição

$$\sum_{E'_1 \dots E'_N} |C(E'_1 \dots E'_N; t)|^2 = 1. \quad (3.32)$$

A partir da equação (3.22), convenientemente multiplicada por $\prod_{i=1}^N \theta_{E_i}^*(\xi_i)$, tomando-se E_i fixo, podemos escrever

$$\begin{aligned} & i \left(\prod_{i=1}^N \theta_{E_i}^*(\xi_i) \right) \partial_t \sum_{E'_1 \dots E'_N} C(E'_1 \dots E'_N; t) \left(\prod_{i=1}^N \theta_{E'_i}(\xi_i) \right) = \\ & \left(\prod_{i=1}^N \theta_{E_i}^*(\xi_i) \right) \left(\sum_{l=1}^N L^0(\xi_l) \right) \sum_{E'_1 \dots E'_N} C(E'_1 \dots E'_N; t) \left(\prod_{i=1}^N \theta_{E'_i}(\xi_i) \right) + \end{aligned}$$

$$+ \left(\prod_{i=1}^N \theta_{E_i}^*(\xi_i) \right) \left(\sum_{l < l'} L^{int}(\xi_l, \xi_{l'}) \right) \sum_{E'_1 \dots E'_N} C(E'_1 \dots E'_N; t) \left(\prod_{i=1}^N \Psi_{E'_i}(\xi_i) \right).$$

Utilizando a condição de ortogonalidade, com o conjunto E_i fixo, obtemos

$$\begin{aligned} i\partial_t C(E_1 \dots E_N; t) &= \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_W \int d\xi_i \theta_{E_i}^*(\xi_i) (L_i^0) \Psi_w(\xi_i) C(E_1 \dots E_{k-1} W E_{k+1} \dots E_N; t) + \\ &+ \sum_{i \neq j=1}^N \sum_{W, W'} \int \int d\xi_i d\xi_j \theta_{E_i}^*(\xi_i) \theta_{E_j}^*(\xi_j) (L_{ij}^{int}) \theta_w(\xi_i) \theta_{w'}(\xi_j) C(E_1 \dots W \dots W' \dots E_N; t). \end{aligned}$$

Seguindo Fetter e Walecka [40], estamos em condição de introduzir a representação número. Seja $|n_1, \dots, n_\infty\rangle$ uma base ortonormal que representa explicitamente o número n_i de partículas associadas a um dado conjunto fixo de números E_i . Os coeficientes $C(E_1 \dots E_N; t)$ serão de agora em diante designados $\bar{C}(n_1 \dots n_\infty; t)$; será imposta a condição (3.32), de acordo com a nova contagem, sobre a função

$$f(n_1, \dots, n_\infty; t) = \left(\frac{N!}{n_1! \dots n_\infty!} \right)^{\frac{1}{2}} \bar{C}(n_1 \dots n_\infty; t). \quad (3.33)$$

Nesta representação número de ocupação no espaço de Fock, podemos introduzir naturalmente o funcional $|\chi(t)\rangle$ que expressa o estado do sistema e é dado por

$$|\chi(t)\rangle = \sum_{n_1 \dots n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (3.34)$$

A sua evolução temporal obedece a equação de Liouville, escrita na forma

$$\begin{aligned} i\partial_t |\chi(t)\rangle &= \\ &= \sum_i \langle i | L^0 | i \rangle n_i f(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle \\ &+ \sum_{i \neq j} \left(\langle i | L^0 | j \rangle (n_i + 1)^{\frac{1}{2}} n_j^{\frac{1}{2}} \right) \\ &\times f(n_1, \dots, n_\infty; t) |n_1, \dots, n_i + 1 \dots n_j - 1 \dots n_\infty\rangle \\ &+ \sum_{ijkl} \left(\langle ij | L^{int} | kl \rangle n_i^{\frac{1}{2}} n_j^{\frac{1}{2}} (n_k + 1)^{\frac{1}{2}} (n_l + 1)^{\frac{1}{2}} \right) f(n_1, \dots, n_\infty; t) \\ &\times |n_1, \dots, n_i - 1 \dots n_j - 1, \dots, n_k + 1, \dots, n_l + 1, \dots, n_\infty\rangle. \end{aligned} \quad (3.35)$$

As somas que aparecem são feitas sobre o número de partículas indistinguíveis e não mais sobre as partículas contadas individualmente de modo que, por exemplo, considerando as igualdades e desigualdades entre os índices i , j , k e l , a última soma tem 15 enumerações possíveis. Neste sentido L^0 é um operador de um corpo que representa o termo livre do operador de Liouville e L^{int} um operador de dois corpos que representa o termo de interação. A forma final da representação número de ocupação é obtida pela introdução dos operadores de criação e aniquilação que agem sobre os vetores de base,

$$\begin{aligned} b_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots, n_\infty\rangle &= (n_i + 1)^{\frac{1}{2}} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots, n_\infty\rangle \\ b_i |n_1, \dots, n_\infty\rangle &= n_i^{\frac{1}{2}} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots, n_\infty\rangle, \end{aligned} \quad (3.36)$$

e obedecem as relações de comutação de bósons,

$$[b_k, b_{k'}^+] = b_k b_{k'}^+ - b_{k'}^+ b_k = \delta_{kk'} \quad (3.37)$$

$$[b_k, b_{k'}] = [b_k^+, b_{k'}^+] = 0, \quad (3.38)$$

conduzindo a uma equação de Liouville na forma

$$i\partial_t |\chi(t)\rangle = \left[\sum_{i,j} b_i^+ \langle i|L^0|j\rangle b_j + \sum_{ijkl} b_i^+ b_j^+ \langle ij|L^{int}|kl\rangle b_l b_k \right] |\chi(t)\rangle. \quad (3.39)$$

Para o tratamento do caso fermiônico, considerando o sinal negativo na Eq. (3.24), a função de onda antissimétrica de n partículas correspondente à Eq. (3.31) é dada pelo determinante de Slater,

$$\theta(\xi_1, \dots, \xi_N; t) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \theta_{(1)}(\xi_1) & \dots & \theta_{(1)}(\xi_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ \theta_{(n)}(\xi_1) & \dots & \theta_{(n)}(\xi_n) \end{vmatrix},$$

onde $\theta_{(i)}(\xi_j)$ indica o estado de uma partícula j com energia E_i . De acordo com de Boer ([20]), o estado na representação número de ocupação,

$$|n_1, \dots, n_i, \dots, n_\infty\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_p (-1)^p [|\theta_{(1)}(\xi_1)\rangle \dots |\theta_{(n)}(\xi_n)\rangle],$$

onde p é a ordem da permutação, permite construir a expansão equivalente àquela dada pela Eq. (3.34). Fica assim definido o estado fermiônico $|\chi(t)\rangle$

que obedece à Eq. (3.35) e que, com a introdução de operadores que anticomutam,

$$[b_k, b_{k'}^+]_+ = b_k b_{k'}^+ + b_{k'}^+ b_k = \delta_{kk'} \quad (3.40)$$

$$[b_k, b_{k'}]_+ = [b_k^+, b_{k'}^+]_+ = 0, \quad (3.41)$$

pode ser colocado na mesma forma da Eq. (3.39) da evolução temporal dos funcionais de estado no espaço de Fock.

Consideremos agora os operadores de campo,

$$\widehat{\Psi}(\xi) = \sum_k \theta_k(\xi) b_k, \quad (3.42)$$

$$\widehat{\Psi}^+(\xi) = \sum_k \theta_k^*(\xi) b_k^+, \quad (3.43)$$

satisfazendo relações de comutação, ou anticomutação, dadas por

$$\begin{aligned} [\widehat{\Psi}(\xi, t), \widehat{\Psi}^+(\xi', t)]_{\pm} &= \delta(\xi - \xi') \\ &= \delta(q - q') \delta(p - p'), \end{aligned}$$

onde o sinal de $+(-)$ é usado para o anticomutador (comutador). Este resultado é deduzido a partir das Eqs.(3.37) e (3.38), ou (3.40) e (3.41), respectivamente expressando as simetrias de bósons ou férmions. O termo entre parênteses na Eq.(3.39) pode ser escrito como

$$\sum_{ij} b_i^+ \int d\xi \theta_{E_i}^*(\xi) L^0 \theta_{E_j}(\xi) b_j \quad (3.44)$$

$$+ \sum_{ijkl} b_i^+ b_j^+ \int \int d\xi d\xi' \theta_{E_i}^*(\xi) \theta_{E_j}^*(\xi') L^{int} [\theta_{E_k}(\xi') \theta_{E_l}(\xi)] b_l b_k, \quad (3.45)$$

ou, usando as Eqs.(3.42) e (3.43), como

$$\int d\xi \widehat{\Psi}^+(\xi) L^0 \widehat{\Psi}(\xi) + \int \int d\xi d\xi' \widehat{\Psi}^+(\xi) \widehat{\Psi}^+(\xi') L^{int} [\widehat{\Psi}(\xi') \widehat{\Psi}(\xi)]. \quad (3.46)$$

Então, considerando as expressões iniciais para o liouvilliano, dadas pelas

Eqs. (3.28) e (3.29), encontramos a expressão do operador

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & -i \int d\xi \widehat{\Psi}^+(\xi) \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\widehat{\Psi}(\xi) \right) + \\ & + \frac{i}{2} \int \int d\xi d\xi' \widehat{\Psi}^+(\xi) \widehat{\Psi}^+(\xi') \times \\ & \times \left[\frac{\partial V(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{\partial \mathbf{q}} \widehat{\Psi}(\xi') \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\widehat{\Psi}(\xi) \right) + \frac{\partial V(\mathbf{q} - \mathbf{q}')}{\partial \mathbf{q}'} \widehat{\Psi}(\xi) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \widehat{\Psi}(\xi') \right] \end{aligned} \quad (3.47)$$

que também pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & i \int d\xi \widehat{\Psi}^+(\xi) \left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \widehat{\Psi}(\xi) \right\}_1 + \\ & + \frac{i}{2} \int \int d\xi d\xi' \widehat{\Psi}^+(\xi) \widehat{\Psi}^+(\xi') \left\{ V(\mathbf{q} - \mathbf{q}'), \widehat{\Psi}(\xi') \widehat{\Psi}(\xi) \right\}_2, \end{aligned} \quad (3.48)$$

produzindo a evolução do funcional de onda $|\chi(t)\rangle$ no espaço de Fock,

$$i\partial_t |\chi(t)\rangle = \mathcal{K} |\chi(t)\rangle. \quad (3.49)$$

A escolha do sinal nas regras de comutação obedecidas pelos operadores de campo $\widehat{\Psi}$ e $\widehat{\Psi}^+$ determina a estatística seguida pelo sistema.

O formalismo número de ocupação permite definir um operador para a contagem do número de partículas

$$\widehat{N}_n = \int d\xi \widehat{\Psi}^+(\xi', t) \widehat{\Psi}(\xi, t), \quad (3.50)$$

cujos autoestados $|\chi_n(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n; t)\rangle$ possuem um número determinado de partículas e obedecem à equação

$$\widehat{N}_n |\chi_n(\xi; t)\rangle = n |\chi_n(\xi; t)\rangle. \quad (3.51)$$

As soluções da Eq.(3.49) descrevem estados com um número indeterminado de partículas indistinguíveis, com simetrias incorporadas nos operadores de campo, que podem ser expressos por uma expansão (semelhante à expansão de Fock da segunda quantização), nos autoestados do operador \widehat{N}_n , que formam uma base ortonormal, de acordo com

$$|\chi(t)\rangle = \theta_0(t) |\chi_0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \int d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_n \theta_n(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) |\chi_n(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n; t)\rangle. \quad (3.52)$$

É possível mostrar que os objetos $\theta_n(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ são as funções de onda que satisfazem a equação de Liouville para um número determinado de partículas [1]. Então, seguindo o raciocínio que nos levou da Eq.(3.7) à Eq.(3.8), e supondo que o conjunto $\theta_n(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ seja normalizado, podemos construir a função

$$f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n; t) = \theta^*(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n; t)\theta(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n; t) = |\theta_n(\xi; t)|^2,$$

que também é solução daquela equação de Liouville. Temos, portanto, uma descrição de um sistema com um número determinado de partículas através de $\theta_n(\xi; t)$, que é equivalente a uma função de onda no espaço de fase da mecânica estatística clássica, agora com as condições de simetria incorporadas. Na passagem para o formalismo da teoria de campos, o autoestado $|\chi_n(t)\rangle$ descreve o mesmo sistema no espaço de Fock de n partículas. Neste sentido a teoria ondulatória no espaço de fase é equivalente ao formalismo da representação número de partículas no espaço de Hilbert quando $|\chi_n(t)\rangle$ é um autoestado do operador \hat{N}_n . Conseqüentemente, as funções apresentadas na Eq. (3.52) são naturalmente introduzidas pelo argumento físico da indistinguibilidade clássica, justificando, plenamente, a construção do espaço de Hilbert clássico, dotado da métrica (3.12).

Conforme este raciocínio, a expansão expressa na Eq.(3.52) permite afirmar que o estado $|\chi(t)\rangle$, que existe no espaço de Fock de um número indeterminado de partículas, descreve um estado composto de vários sistemas com números diferentes de partículas, um ensemble grande-canônico no sentido da mecânica estatística, que guarda as simetrias de comutação ou anticomutação. É possível, neste sentido, estabelecer regras de interpretação física deste formalismo, semelhantes àquelas da teoria quântica. Essas regras, introduzidas por Schönberg [1], são:

- A probabilidade de encontrar n partículas em uma célula $d\xi$ do espaço de fase é dada por $|\theta_n(\xi; t)|^2 d\xi$.
- As grandezas físicas são dadas por operadores hermitianos \hat{A} , cujos autovalores A são os valores numéricos da grandeza, mensuráveis. A probabilidade de obtermos o valor A no estado $\chi(t)$ é dada por $\langle \chi | P_A | \chi \rangle$ onde P_A é o projetor associado ao autovalor A .

Estas regras de interpretação física do formalismo permitem superar, ainda na mecânica clássica, o paradoxo de Gibbs sem o recurso à contagem

dos estados de acordo com argumentos quânticos. A introdução natural das simetrias físicas, decorrente da indistinguibilidade, de acordo com a descrição do sistema no espaço número de ocupação, é suficiente. Evidentemente, a estatística clássica de Boltzmann é recuperada quando não impomos as condições de simetria sobre a função de onda de n objetos (que agora seriam distinguíveis).

Esta abordagem permite estabelecer dois sentidos para o uso dos ensembles de Gibbs: um sentido relacionado à especificação incompleta do estado inicial por meio de uma distribuição de probabilidades; outro sentido referente à construção de sistemas semelhantes para a fundamentação mecânica da termodinâmica. A descrição termodinâmica [1], associada ao segundo sentido, independe do conhecimento microscópico completo do sistema; além disso, este conhecimento não é solicitado, mesmo se estivesse disponível. Deve-se notar que a amplitude de probabilidade que define o estado no espaço de Hilbert carrega a informação da posição e velocidade das partículas e também define a sua simetria estatística natural (bósons ou férmions). Esta amplitude clássica é, portanto, mais rica do que a densidade de probabilidade, que não guarda esta informação. A consideração da amplitude, em substituição à densidade de probabilidades, permite tomar por idênticas as trajetórias no espaço de fase (no caso de bósons), ou excluí-las (no caso de férmions), prescindindo do recurso à especificação incompleta do estado, a fim de justificar a contagem correta dos estados possíveis. Colocado nestes termos, o conceito de probabilidade não decorre, para o estabelecimento dos fundamentos da termodinâmica, da expressão incompleta do estado, mas é um atributo da ação do grupo de permutações sobre as partículas indistinguíveis, persistindo fundamentalmente tanto na mecânica quântica quanto na mecânica estatística clássica [27] e [29].

Sob um ponto de vista formal, a teoria de Schönberg é estruturada a partir do espaço de Hilbert construído em termos de funções complexas de quadrado integrável, as amplitudes de probabilidade no espaço de fase clássico. Koopman estudara as transformações unitárias determinadas por hamiltonianos clássicos e associara a elas um espaço de Hilbert denominado, depois, espaço de *Hilbert-Koopman* [2]. Schönberg, por outro lado, partiu de propriedades lineares da equação de Liouville para introduzir o formalismo clássico de segunda quantização e as funções complexas como amplitudes de probabilidade. Esta abordagem produziu desdobramentos examinados por Loinger [3] e Pauri e Lugarini [4], no estudo de representações unitárias de grupos de simetria e por Ziesche [22], que mostrou ser ela equivalente ao tratamento de

Bogolioubov para o cálculo de médias de observáveis clássicos.

No contexto das proposta de Schönberg, métodos de teoria de campos no espaço de fase, como propagadores e técnicas perturbativas, foram desenvolvidos por R. Paul [14], no Canadá, e por J. D. Manguiera Vianna, A. Santana e colaboradores [15]-[19], no Brasil. Paul utilizou a forma de quantização canônica e propagadores para analisar perturbativamente a equação de Boltzmann e suas soluções. Vianna, Santana e seus colaboradores desenvolveram o formalismo em diversas direções: no contexto de resposta linear; na utilização de métodos algébricos, como c^* -álgebras e teoria de representações; na consideração do operador do não equilíbrio de Zubarev para estudar a equação de Fokker-Planck. Além disso, também implementaram uma generalização relativística a partir da dinâmica de campos térmicos [18], que é um formalismo em teoria quântica de campos a temperatura finita, proposto em 1975 por Takahashi e Umezawa [30], em contraste com a teoria de Schönberg, que é um tipo de dinâmica clássica de campos térmicos.

3.6 Os formalismos de Doi e outros

Na introdução apontamos, de acordo com Mattis [37], que formalismos semelhantes foram desenvolvidos, ou redescobertos nos últimos cinquenta anos, com o objetivo de calcular médias de grandezas físicas em sistemas estatísticos clássicos, representadas em termos de operadores. Estes esforços se diferenciam principalmente no tocante à introdução da amplitude clássica de probabilidades e ao tratamento consistente das simetrias que decorrem da comutação, ou anticomutação, dos operadores de evolução. Seu interesse reside no instrumental da teoria de campos que é colocado à disposição do tratamento estatístico destes sistemas.

Os trabalhos de M. Doi [31], que em 1976 aplicou diretamente o método de segunda quantização no modo bosônico a sistemas clássicos que evoluem de acordo com equações diferenciais lineares no tempo, e de Grassberger e Scheunert [35], que em 1980 construíram liouvillianos bosônicos de sistemas clássicos, apresentam formalismos, aplicações e exemplos muito semelhantes, segundo os próprios autores.

O trabalho de 1973 de Martin, Siggia e Rose (MSR) [32] segue uma motivação diferente. Tanto Doi quanto Grassberger e Scheunert já haviam reconhecido a semelhança desta formulação com seus próprios trabalhos e haviam apontado que MSR partiam da descrição de Heisenberg da evolução tem-

poral dos operadores a fim de construir um conjunto auto-consistente de equações para os observáveis, com base na introdução *ad hoc* de dois campos anti-comutativos, como na segunda quantização da mecânica quântica.

Mais recentemente, Schütz e Trimper [23] e [24] construíram operadores de evolução fermiônicos, ou “hamiltonianos quânticos”, estendendo as prescrições de Grassberger e Scheunert para diversos modelos estatísticos que eram representados com operadores comutativos. Seu método parte da equação mestra do modelo e argumenta sobre a ação dos operadores de criação e aniquilação anticomutativos, compondo termos que reproduzem a evolução temporal dos modelos em modos de produção e destruição de estados em situações onde o sítio da rede é de tal forma pequeno que é possível, apenas, a presença de uma única partícula, ou do vazio.

Rose [25], baseando-se em Doi, mostrou em 1979 que o formalismo de MSR pode ser obtido adicionando ao liouvilliano, expresso na representação número pela Eq. (3.48), termos dependentes do tempo que correspondam a fontes e sumidouros de partículas, garantindo a equivalência dos métodos de Doi e MSR. Mas são sem dúvida Pythian [26] e Andersen [36] que, procurando colocar em bases rigorosas os argumentos de MSR, demonstram que o método decorre da representação número através da expressão do propagador e da sua ação sobre os operadores para a construção da descrição dinâmica semelhante àquela de Heisenberg para a evolução dos operadores quânticos.

Para estabelecer contacto com o trabalho original de MSR, consideremos um sistema dotado de variáveis dinâmicas $q_n(t)$, com valores iniciais q_n^0 , cuja variação temporal é dada por

$$\dot{q}_n(t) = \Omega(q_n(t); t), \quad (3.53)$$

que é uma função das próprias variáveis e do tempo. Para este sistema podemos escrever a equação de Liouville e, de acordo com os argumentos das seções anteriores, introduzir o espaço de Hilbert e o propagador $U(t)$ dado na Eq.(3.16), que promove a evolução

$$\Omega_t(q_n(t); t) = U(t)\Omega(\phi_n^0). \quad (3.54)$$

As funções reais Ω pertencem ao espaço de Hilbert com métrica

$$(\Omega(\phi), \Theta(\phi)) = \int d\phi \rho(\phi) \Omega(\phi) \Theta(\phi),$$

onde $\rho(\phi)$ é uma densidade de probabilidade. O propagador e seu inverso permitem fazer a conexão entre as descrições de Schödinger e Heisenberg,

através da Eq. (3.19), descrevendo a evolução temporal dos operadores que agem sobre o sistema. Considerando a variação do propagador, valem as relações

$$\begin{aligned}\dot{U}(t)\Omega(q_n^0) &= \frac{d}{dt}\Omega(q_n(t)) = \sum_n \dot{q}_n(t) \frac{\partial\Omega(q_n(t))}{\partial q_n} = \\ &= \sum_n \Omega(q_n(t)) \frac{\partial\Omega(q_n(t))}{\partial q_n} = U(t) \sum_n \Omega(q_n(t)) \frac{\partial\Omega(q_n(t))}{\partial q_n},\end{aligned}$$

onde, por economia omitimos a dependência paramétrica. Usando a convenção de soma sobre índices repetidos, podemos escrever

$$\dot{U}(t)\Omega(q_n^0) = U(t)\mathcal{L}(t)$$

onde

$$\mathcal{L}(t) = \Omega(q_n(t)) \frac{\partial\Omega(q_n(t))}{\partial q_n}.$$

Para o inverso do propagador vale a relação

$$U^{-1}(t)\Omega(q_n) = -\mathcal{L}(t)U(t).$$

Ainda, buscando conexão com MSR, sejam os operadores \widehat{q}_n , multiplicativo para as condições iniciais e $\widehat{\partial}/\widehat{\partial}q_n$. Na descrição de Heisenberg podemos escrever os operadores com dependência temporal

$$\widehat{A}_n(t) = U(t)\widehat{q}_n U^{-1}(t) \quad (3.56)$$

e

$$\widehat{B}_n(t) = U(t) \frac{\widehat{\partial}}{\partial q_n} U^{-1}(t), \quad (3.57)$$

e verificar que $\widehat{A}_n(t)$ corresponde à multiplicação por $q_n(t)$,

$$\widehat{A}_n(t)\Omega(q_n) = q_n(t)\Omega(q_n). \quad (3.58)$$

Também é fácil ver que valem as regras de comutação no mesmo instante de tempo,

$$[\widehat{A}_n(t), \widehat{A}_m(t)] = [\widehat{B}_n(t), \widehat{B}_m(t)] = 0 \quad (3.59)$$

e

$$[\widehat{A}_n(t), \widehat{B}_m(t)] = \delta_{nm}\mathbf{1}. \quad (3.60)$$

Podemos agora construir as equações de evolução destes operadores,

$$\dot{\hat{A}}_n(t) = U(t) [\mathcal{L}(t), \hat{q}_n] U^{-1}(t) = [L(t), \hat{A}_n(t)], \quad (3.61)$$

onde $L(t) = U(t)\mathcal{L}(t)U^{-1}(t)$ e $\hat{B}_n(t)$ obedece a equação análoga. Decorre daí que podemos expressar

$$L(t) = \Omega(q_n(t), t) \hat{B}_n(t), \quad (3.62)$$

permitindo escrever as equações de movimento para os operadores,

$$\dot{\hat{A}}_n(t) = \Omega(q_n(t), t) \hat{B}_n(t) \quad (3.63)$$

e

$$\dot{\hat{B}}_n(t) = -\frac{\partial \Omega(q_m(t))}{\partial q_n} \hat{B}_m(t). \quad (3.64)$$

Consideremos agora, de acordo com MSR, um operador ψ (que não leva a notação que vimos associando aos operadores, para manter contato com a notação de MSR) que obedece a equação de movimento

$$\dot{\psi}(1) = U_1(1) + \int d2 U_2(1, 2) \psi(2) + \int d2 \int d3 U_3(1, 2, 3) \psi(2) \psi(3), \quad (3.65)$$

onde $\psi(1)$ refere-se ao observável no momento t_1 com coordenadas espaciais x_1 , e onde

$$U_2(1, 2) \propto \delta(t_1 - t_2)$$

e

$$U_3(1, 2, 3) \propto \delta(t_1 - t_2) \delta(t_2 - t_3).$$

MSR apresentam como exemplo de sistemas cujas variáveis obedecem à Eq.(3.65) o oscilador anarmônico amortecido, um sistema de partículas interagindo através de forças entre dois corpos e um fluido de Navier-Stokes.

Se ao operador multiplicativo $\hat{A}(t)$ estiver associada uma grandeza que evolui de acordo com o esquema de MSR, vamos considerar que

$$\hat{A}(t) = \psi(t). \quad (3.66)$$

De acordo com a Eq. (3.64), existe o operador associado

$$\hat{B}(t) = \hat{\psi}(t), \quad (3.67)$$

onde a notação sobre o operador de MSR ($\widehat{\psi}(t)$) indica o hermitiano (do operador $\psi(t)$). Usando as Eqs. (3.63) e (3.64), Pythian [26] mostrou que esta nova grandeza deve obedecer

$$\widehat{\psi}(1) = - \int d2U_2(2,1)\widehat{\psi}(2) - 2 \int d2 \int d3U_3(2,3,1)\widehat{\psi}(2)\psi(3),$$

que é a equação apresentada por MSR para o desenvolvimento do seu par de operadores especiais. Os operadores $\psi(t)$ e $\widehat{\psi}(t)$ estarão sujeitos ainda às regras de comutação

$$\begin{aligned} [\widehat{\psi}_n(t), \widehat{\psi}_m(t)] &= 0, \\ [\psi_n(t), \widehat{\psi}_m(t)] &= \delta_{nm}\mathbf{1}. \end{aligned}$$

Neste sentido [25], o formalismo de MSR decorre do formalismo número de ocupação, pois podemos obter a equação de evolução dos campos acessórios de MSR a partir da introdução dos operadores que obedecem a regras naturais (3.59) e (3.60) daquele formalismo no espaço de Fock dotado do propagador expresso na Eq. (3.19). Mais ainda, os operadores de MSR encontram justificativa para sua introdução na forma de operadores de campo associados à dinâmica do sistema clássico de partículas idênticas.

A construção do espaço de Fock permite, portanto, sugerir um raciocínio para a introdução dos campos de MSR. A partir da argumentação física da indistinguibilidade dos estados de partículas idênticas é necessária a introdução dos operadores de campo sujeitos a regras de comutação, ou anticomutação, como método para o tratamento da evolução temporal do sistema determinada pelo propagador.

Tendo por base o método discutido neste capítulo, a seguir vamos apresentar um estudo detalhado sobre a noção de espaço de Fock associada à descrição de processos estocásticos.

Referências Bibliográficas

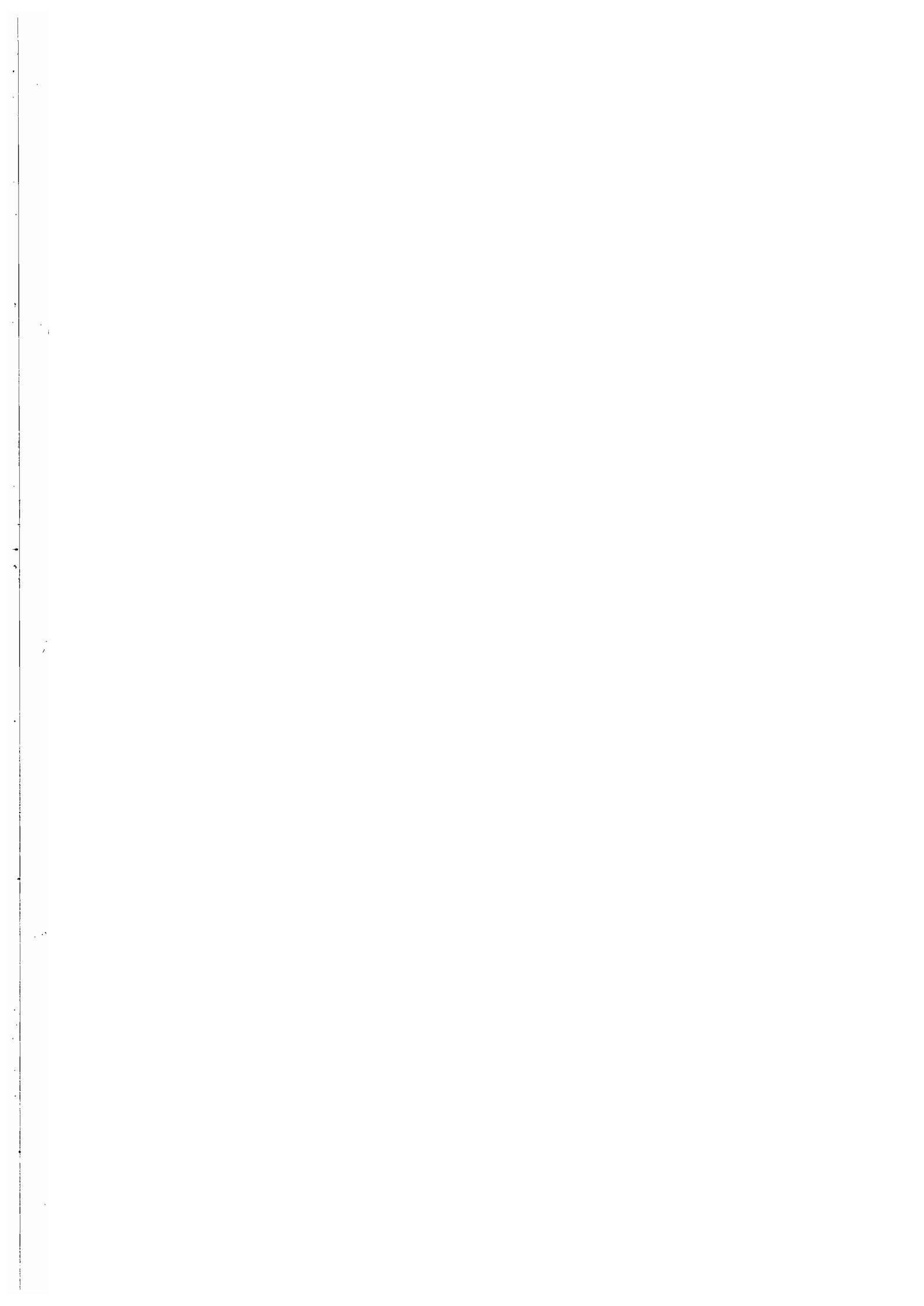
- [1] M. Schönberg, N. Cimento, **9**, (1952), 1139 ; **10** (1953), 419; **10** (1953), 697.
- [2] B. O. Koopman, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) **17** (1931), 315.
- [3] A. Loinger , Ann. Phys. (N.Y.) **20** (1962), 132.
- [4] G. Lugarini and M. Pauri, Ann. Phys. (N.Y.) **44** (1967) 226.
- [5] G. Della Riccia, N. Wiener, J. Math. Phys. **7** (1966) 1372.
- [6] J. J. Hopfield, A. J. F. Bastini, Phys. Rev. **168** (1968) 193.
- [7] B. Misra, Proc. Natl. Acad. Sciences (USA) **17** (1978) 315.
- [8] C. George and I. Prigogine, Physica **A99** (1979), 369.
- [9] B. Misra and I. Prigogine, Lett. Math. Phys. **7** (1983) 421.
- [10] T. Ali and E. Prugovečki, Physica A **89** (1977) 501.
- [11] D. Bohm and B. J. Hiley, Found. Phys. **11** (1981), 179.
- [12] T. N. Sherry and E.C.G. Sudarshan, Phys. Rev. **D18** (1978), 4580.
- [13] E. C. G. Sudarshan and N. Mukunda, *Classical Dynamics: A modern Perspective* (John Wiley and sons, New York, 1974).
- [14] R. Paul, *Field Theoretical Methods in Chemical Physics*, (Elsevier, Amsterdam, 1982).
- [15] A. Matos Neto and J. D. M. Vianna, N. Cimento **86B** (1985), 117.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [16] A. E. Santana, A. Matos Neto and J. D. M. Vianna, *Int. J. Theor. Phys.* **28** (1989), 787.
- [17] A. E. Santana, A. Matos Neto and J. D. M. Vianna, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **14** (1992) 72.
- [18] A. E. Santana, F. C. Khanna, H. Chu. and Y. C. Chang, *Ann. Phys. (NY)* **246** (1996) 481.
- [19] L.M. Abreu, A.E. Santana, A. Ribeiro Filho, *Ann. Phys.(N.Y.)* **297** (2002) 396.
- [20] J. de Boer, in J. de Boer and G. Uhlenbeck,(orgs), *Studies in Statistical Mechanics*, vol. III, North Holand, Amsterdan (1965), 213-275.
- [21] P. Ziesche, *Commun. Math. Phys.* **5**, 191-204, (1967)
- [22] P. Ziesche, *Annalen der Physic*, **7-20**, Heft 5/6, 292, (1967)
- [23] M. Schutz and S. Trimper, *Physical Review B* **53**, 8421 (1996)
- [24] F. Alcaraz, M. Droz and M. Hankel, *Ann. Phys.* 230, 250 (1994)
- [25] H. Rose, *J. Stat. Phys.* **20-4**, 415, (1979)
- [26] R. Phythyan, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **8-9**, 1423, (1975)
- [27] D. Bohm and W. Schutzer, *Nuovo Cimento, Suppl.II*, (1955) 1004.
- [28] T. Petrovsky e I. Prigogine, *The Liouville space extension of quantum mechanics*, *Advances in Chemical Physics* vol. XCIX, 1977, New York. Ver também: A. Bohm e M. Gadella, *Lecture Notes in Physics*, vol. **348**, 1989, Springer, Berlin
- [29] E. T. Jaynes, *Phys. Rev.* **106-4** (1957) 620.
- [30] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: Micro, Macro and Thermal Physics* (AIP, New York, 1993).
- [31] M. Doi, *J. Phys. A* **9** (1976), 1465; **9** (1976), 1479.
- [32] C. Martin, E. D. Siggia and H. A. Rose, *Phys. Rev. A* **8** (1973) 423.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [33] L. Peliti, *J. Physique* **46** (1985) 1469.
- [34] R. Dickmann e R. Vidigal, *Braz. J. Phys.* **33-1** (2003) 73.
- [35] P. Grassberger and M. Scheunert, *Fort. Phys.* **28** (1980) 547.
- [36] H. C. Andersen, *J. Math. Phys.* **41** (2000) 1979.
- [37] D. C. Mattis and M. L. Glasser, *Rev. Mod. Phys.* **70** (1998) 979.
- [38] A. Suna, *Phys. Rev. B* **1** (1970) 1716.
- [39] S. R. A. Salinas, *Introduction to Statistical Physics* (Springer, New York, 2001)
- [40] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particles Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [41] T. Tomé e M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* (EdUSP, São Paulo, 2001).



Capítulo 4

Representação número e processos estocásticos

4.1 Introdução

No capítulo anterior vimos como a linguagem do espaço de Fock e dos operadores, simétricos ou antissimétricos, de criação e destruição de partículas pode ser compatibilizada com a dinâmica clássica e como a construção do espaço número de ocupação se manifesta no tratamento da equação de Liouville, produzindo as consequências físicas que apontamos.

Porém, outros sistemas físicos obedecem a equações diferenciais de evolução, lineares no tempo, mas que não têm origem na descrição hamiltoniana que origina a equação de Liouville. É o caso dos processos descritos por equações fenomenológicas estocásticas, para a evolução das probabilidades que definem os estados do sistema. Isto sugere a aplicação desta metodologia a outros sistemas clássicos, que não sejam regidos pela equação de Liouville, como uma reação química, por exemplo. O ponto de partida, nestes casos, não é o espaço de fase do sistema clássico, como fizemos no capítulo anterior, mas o espaço de configurações do sistema. No caso apontado de equações fenomenológicas estocásticas, o estado nesse espaço de configurações é dado como uma função da probabilidade de um determinado arranjo do sistema. É para esse novo espaço de configurações que devemos examinar a possibilidade de construir um espaço de Fock associado.

A construção do espaço de Fock para os sistemas hamiltonianos, apresentados no capítulo anterior, pode ser estendida para processos estocásticos

de acordo com Schönberg [1], que mostrou ser o método de representação número de ocupação uma propriedade geral das equações diferenciais parciais lineares na variável tempo. Construir este espaço número de ocupação, tendo por base esta propriedade das equações diferenciais lineares que representam sistemas físicos estocásticos em um espaço de configuração, significa: definir o vetor que identifica o estado neste espaço de configuração; introduzir o operador de probabilidades a partir do qual se estabelece a média dos observáveis físicos; definir os operadores de aniquilação e criação de estados neste espaço de configuração e suas regras de comutação ou anticomutação; e estabelecer o operador de evolução temporal, equivalente ao liouvilliano, na representação destes operadores.

Expresso de modo análogo, utilizar este método significa [1] mostrar que, dada uma equação diferencial parcial, linear no tempo,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\{x_i\}, t) = K(\{x_i\}, t) \Psi(\{x_i\}, t), \quad (4.1)$$

onde Ψ é uma função de n variáveis $\{x_i, i = 1, \dots, n\}$, contínuas ou discretas e $K(\{x_i\}, t)$ é um operador linear

$$K(\{x_i\}, t) = \sum_{\alpha=1}^s \frac{1}{\alpha!} \sum_{l_1 \dots l_\alpha} K^{(\alpha)}(x_{l_1} \dots x_{l_\alpha}, t), \quad (4.2)$$

com $K^{(\alpha)}(x_{l_1} \dots x_{l_\alpha}, t)$ representando operadores simétricos nas variáveis e tomados em todas as combinações, podemos introduzir os operadores usuais $\psi(x_i)$ e $\psi^*(x_i)$, hermitianos conjugados, do método de “segunda quantização”, caracterizados pelas regras de comutação, ou anticomutação,

$$[\psi(x_i), \psi^*(x'_i)]_{\pm} = \delta(x_i - x'_i), \quad (4.3)$$

$$[\psi(x_i), \psi(x'_i)]_{\pm} = [\psi^*(x_i), \psi^*(x'_i)]_{\pm} = 0, \quad (4.4)$$

de modo que, similarmente ao que fizemos no capítulo anterior, podemos escrever

$$i \frac{d}{dt} |\chi(t)\rangle = \mathcal{K} |\chi(t)\rangle. \quad (4.5)$$

Schönberg [1] mostrou que para

$$\mathcal{K} = \sum_{\alpha=1}^s \mathcal{K}_{\alpha} \quad (4.6)$$

$$\mathcal{K}_{\alpha} = \frac{1}{\alpha!} \int \psi^*(x_1) \dots \psi^*(x_{\alpha}) K^{(\alpha)}(x_1 \dots x_{\alpha}) \psi(x_{\alpha}) \dots \psi(x_1) dx_1 \dots dx_{\alpha}. \quad (4.7)$$

a solução da Eq.(4.1) pode ser obtida a partir de qualquer solução da Eq.(4.5) que satisfaça a equação de autovalores

$$N_{op} |\chi(t)\rangle = N |\chi(t)\rangle \quad (4.8)$$

para o operador número usual do método

$$N_{op} = \int \psi^* (\{x_i\}) \psi (\{x_i\}) dx_1 \dots dx_n. \quad (4.9)$$

Este resultado é obtido, repetindo-se a mesma demonstração que fizemos no capítulo anterior e que, portanto, deixamos de fazer. Basta que não sejam especificadas as equações de movimento e nem seja expresso o liouvilliano pelo parênteses de Poisson, de modo que obteremos as relações gerais (4.6) e (4.7) para o operador de evolução. As soluções serão, agora, simétricas ou antissimétricas, de acordo com o sinal das regras de comutação escolhidas, dadas na Eqs. (4.3) e (4.4). As Eqs. (4.6) e (4.7) são, portanto, representações dos operadores de evolução no espaço de Fock, enquanto os estados são dados, como antes, por

$$|\chi(t)\rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{r!}} \int \Psi(x_1 \dots x_r, t) |\chi_r(x_1 \dots x_r)\rangle dx_1 \dots dx_r \quad (4.10)$$

que são as soluções gerais da Eq. (4.5), onde

$$|\chi_r(x_1 \dots x_r)\rangle = \psi^*(x_1) \dots \psi^*(x_r) |\chi_0\rangle$$

é o estado formado a partir do vácuo $|\chi_0\rangle$ pela ação dos operadores $\psi^*(x_i)$. O espaço de Hilbert destes funcionais de estado, simétricos ou antissimétricos, convenientemente normalizado, é o espaço de Fock procurado.

4.2 A equação mestra

Tomemos um exemplo elementar no qual o espaço de configuração indica, intuitivamente, a representação número. Seja um sistema físico que possa ser encontrado em algum de seus dois estados possíveis, como por exemplo a variável de spin usual de um sítio que utilizamos nos modelos de rede. Supondo que este processo seja termicamente ativado, ele é um processo markofiano, onde o estado, em um determinado instante, depende apenas

da situação no instante anterior. Isto significa que podemos definir uma probabilidade $\phi_n(t + \Delta t)$ de encontrar o sistema na configuração n no instante apontado, após haver ocorrido uma transição do estado em que o sistema se encontrava no instante t . Suponhamos ainda que o sistema transite da configuração n para outra n' com probabilidade p e na transição inversa com probabilidade q . Então podemos escrever que $\phi_n(t + \Delta t)$ se relaciona linearmente com $\phi_n(t)$ de modo que valem

$$\phi_n(t + \Delta t) = (1 - p)\phi_n(t) + q\phi_{n'}(t), \quad (4.11)$$

$$\phi_{n'}(t + \Delta t) = p\phi_n(t) + (1 - q)\phi_{n'}(t), \quad (4.12)$$

que podem ser escritas como uma equação vetorial para o vetor probabilidade $|\phi(t)\rangle$ cujas componentes são as probabilidades dos estados $\phi_n(t)$ e $\phi_{n'}(t)$.

A equação mestra é dada pela relação linear

$$|\phi(t + \Delta t)\rangle = T |\phi(t)\rangle \quad (4.13)$$

onde

$$T = \begin{vmatrix} 1 - p & q \\ p & 1 - q \end{vmatrix}$$

é a matriz associada de transição. Esta dinâmica pode ser estendida para uma sucessão discreta de instantes de tempo e para uma formulação contínua nesta variável. No contínuo temporal definimos as taxas de transição $w_{nn'} = p_{n \rightarrow n'} / \Delta t$ e reescrevemos (4.11) e (4.12) como

$$\phi_n(t + \Delta t) = \sum_{n'} w_{nn'} \Delta t \phi_{n'}(t). \quad (4.14)$$

Fazendo o limite para $\Delta t \rightarrow 0$ obtemos a forma contínua da equação mestra

$$\frac{d\phi_n(t)}{dt} = \sum_{n'} W_{nn'} \phi_{n'}(t), \quad (4.15)$$

ou

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = W \phi(t),$$

considerando as matrizes que têm por elementos as respectivas projeções nos estados. Os elementos da matriz W , ou matriz de evolução [41], garantem

que a soma das probabilidades está normalizada na evolução temporal, ou seja, $\sum_n \phi_n(t) = 1$ e $\phi_n(t) \in [0, 1]$. A matriz W possui elementos fora da diagonal não negativos representando as taxas de transição entre os estados conectados. Os elementos diagonais são não positivos e definem a vida média de um estado, $\tau_n^{-1} = \sum_{n \neq n'} w_{nn'}$, ou seja, a soma das taxas de aniquilação daquele estado. A soma dos elementos em cada coluna produz zero, indicando a conservação da probabilidade total.

Colocada na forma

$$\frac{d|\phi(t)\rangle}{dt} = W|\phi(t)\rangle \quad (4.16)$$

a equação mestra admite uma interpretação análoga à equação de Schrödinger, devido à sua linearidade. Este é o ponto de partida da construção do espaço número de ocupação da equação mestra e do tratamento operatorial da evolução dos estados dos sistemas físicos que ela conecta.

Mas a equação mestra não se resume, evidentemente, ao resultado desta motivação singular. Ela pode ser obtida [44] e [45] como uma forma equivalente da equação de Chapman-Kolmogorov para processos de Markov. Consideremos, de forma geral, um processo para o qual possamos quantificar nossa expectativa para o resultado dos eventos que o definem. Neste sentido introduzimos uma função $\phi(A)$ que designa a densidade de probabilidade de ocorrência do evento A . A grandeza cujo valor é um número determinado pelo resultado de um evento ao qual está associado uma função $\phi(A)$ é chamada uma variável estocástica. Um sistema físico descrito por equações que relacionem estas grandezas é um sistema estocástico. Para a densidade de probabilidade $\phi_n(\{y_i, t_i\})$ associada às variáveis Y_i , que apresentam os valores y_i nos instantes de tempo t_i , é possível mostrar a propriedade de redução das probabilidades

$$\int_n \phi(y_1, t_1; \dots, y_n, t_n) dy_n = \phi_{n-1}(y_1, t_1; \dots, y_{n-1}, t_{n-1}), \quad (4.17)$$

estando garantida a propriedade de normalização

$$\int_1 \phi_1(y_1, t_1) dy_1 = 1. \quad (4.18)$$

Consideremos, agora, a identidade que define a densidade de probabilidade condicional $\phi_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)$ de que o valor y_2 da variável Y medido no instante t_2 esteja condicionado ao fato dela apresentar o valor y_1 no instante t_1 ,

$$\phi_1(y_1, t_1) \phi_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) = \phi_2(y_1, t_1; y_2, t_2). \quad (4.19)$$

Combinando (4.17) e (4.19) escrevemos para as densidades de probabilidades em instantes diferentes

$$\phi_1(y_2, t_2) = \int \phi_1(y_1, t_1) \phi_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) dy_1. \quad (4.20)$$

Os processos de Markov são aqueles para os quais a densidade de probabilidade condicional é completamente definida pelo valor da variável aleatória no instante imediatamente anterior. Esta é outra forma de afirmar que não existem correlações entre os valores das variáveis estocásticas entre outros instantes que não o primeiro imediatamente seqüenciado. Neste caso o processo fica determinado por apenas duas funções $\phi_1(y, t)$ e $\phi_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2)$ e é provada a equação de Chapman-Kolmogorov,

$$\phi_{1|1}(y_1, t_1 | y_3, t_3) = \int \phi_{1|1}(y_1, t_1 | y_2, t_2) \phi_{1|1}(y_2, t_2 | y_3, t_3) dy_2 \quad (4.21)$$

É fácil ver que (4.20) também pode ser escrita em sua versão discreta,

$$\phi_1(n, t + \Delta t) = \sum_{m=1}^M \phi_1(m, t) \phi_{1|1}(m, t | n, t + \Delta t), \quad (4.22)$$

que pode ser diferenciada para obter

$$\frac{\partial \phi_1(n, t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\phi_1(n, t + \Delta t) - \phi_1(n, t)}{\Delta t} \quad (4.23)$$

$$= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \sum_{m=1}^M (\phi_1(m, t) \phi_{1|1}(m, t | n, t + \Delta t) - \delta_{m,n}) \quad (4.24)$$

O tratamento deste limite foi estudado por Pauli [46] usando a teoria de perturbações e simplificado por van Hove [47], no que diz respeito às condições necessárias para realizar uma expansão na série de potências da dependência temporal da probabilidade condicional

$$\phi_{1|1}(m, t | n, t + \Delta t) = \delta_{m,n} \left[1 - \Delta t \sum_{m=1}^M w_{m,l}(t) \right] + w_{m,l}(t) \Delta t + \dots \quad (4.25)$$

onde $w_{m,l}(t)$ é a taxa de transição da configuração m para l . Esta grandeza depende crucialmente [44] da validade da equação (4.21). Usando (4.25) em

(4.24) obtemos

$$\frac{\partial \phi_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M [\phi_1(m, t)w_{m,n}(t) - \phi_1(n, t)w_{n,m}(t)] \quad (4.26)$$

que é a equação mestra. Considerando a matriz de evolução

$$W_{m,n}(t) = w_{m,n}(t) - \delta_{m,n} \sum_{n'=1}^M w_{n,n'}(t), \quad (4.27)$$

podemos escrever como anteriormente

$$\frac{\partial \phi_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M \phi_1(m, t)W_{m,n}(t), \quad (4.28)$$

ou, usando a notação de Dirac $\phi_1(n, t) = \langle \phi(t) | n \rangle$ que nos leva a escrever a probabilidade condicional da Eq. (4.21) como $\phi_{1|1}(y, t | y', t') = \langle y | \phi(t', t) | y' \rangle$ obtemos a equação mestra, na forma de uma equação diferencial linear no tempo, para a evolução do operador de probabilidade condicional $\phi(t', t)$ dos processos estocásticos

$$\frac{\partial \phi(t_0, t)}{\partial t} = \phi(t_0, t)W(t). \quad (4.29)$$

Portanto, se os processos estocásticos são descritos pela equação mestra, pode-se aplicar o método geral de segunda quantização, de modo a construir o espaço de Hilbert no espaço de configuração próprio destes processos, ou seja estabelecer o formalismo número de ocupação no espaço de Fock.

4.3 O espaço de Fock

Vamos considerar, por exemplo, uma reação química descrita por



onde moléculas do tipo A reagem com moléculas do tipo B dando origem a uma molécula do tipo X , estável e inerte. O número n_B de moléculas do tipo B é mantido fixo, ao longo de um caminho que garante a homogeneidade da solução. Neste caso a localização das partículas é uma grandeza

de pouca importância. O estado do sistema é descrito pela probabilidade $\phi_1(n, t)$ de encontrar n moléculas do tipo A no instante de tempo t . Vamos utilizar de agora em diante, por questão de conveniência, a seguinte notação: $\phi_1(n, t) = \phi_n(t)$. Supondo um processo markofiano, a evolução da reação (4.30) é descrita pela equação mestra na sua forma usual de balanço entre contribuições para a evolução dos estados

$$\partial_t \phi_n(t) = \sum_m [w_{nm} \phi_m(t) - w_{mn} \phi_n(t)], \quad (4.31)$$

onde $w_{nm} = w_{n_B} \delta_{m, n+1}$ é a taxa de transição. Este mesmo tipo de equação pode, por exemplo, descrever um decaimento exponencial, como no caso da emissão nuclear radiativa [37, 35, 33]. Para este tipo de reação, a representação número parece tão natural, como no caso da física de partículas relativísticas, onde o espaço de Fock foi inicialmente introduzido. Para implementar o formalismo de espaço de Fock no contexto da equação (4.31), precisamos primeiramente observar que o conceito de partículas distinguíveis (estatística de Boltzmann) é central na descrição usual de processos estocásticos. A fim de adaptar o método que já foi introduzido no capítulo anterior, vamos considerar a média de um observável clássico a partir de $\theta(q, p) = f^c(q, p)$, com $c = 1/2$ (considerando que a amplitude $\theta(q, p)$ seja real). Podemos então flexibilizar o valor de c e definir a média de um observável,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int dq dp f^c(q, p; t) A(q, p; t) f^{1-c}(q, p; t) \\ &= \int dq dp A(q, p; t) f^c(q, p; t) f^{1-c}(q, p; t) \\ &= \int dq dp A(q, p; t) f(q, p; t), \end{aligned} \quad (4.32)$$

onde o expoente c tem sido usado na dinâmica de campos térmicos [18, 30]. Temos, portanto, uma descrição em termos de probabilidades e não mais em termos de amplitudes. No lugar da base de estados $|q, p\rangle$, usaremos uma base da representação número de ocupação $|n\rangle$, no espaço de configuração do processo estocástico. A configuração de um estado fica, portanto, caracterizada por um conjunto de variáveis de ocupação $\{n_i, i = 1, 2, \dots, n\}$, onde o índice i indica o sítio e n_i , o número de ocupação deste sítio, assume valores inteiros. Na linguagem do espaço de Fock, temos o produto tensorial

$$|n\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_n\rangle. \quad (4.33)$$

Para descrever o estado em termos de probabilidades (ao invés de amplitudes como foi feito no capítulo anterior para sistemas descritos pela equação de Liouville), vamos modificar a condição de ortonormalidade da base $|n\rangle$ e escrever

$$\langle m|n\rangle = n!\delta_{nm}. \quad (4.34)$$

Por consistência, segue que

$$\mathbf{1} = \sum_n \frac{1}{n!} |n\rangle \langle n|, \quad (4.35)$$

observando também que

$$\begin{aligned} \langle m|1|n\rangle &= \langle m| \sum_r \frac{1}{r!} |r\rangle \langle r|n\rangle \\ &= \sum_r \frac{1}{r!} r! n! \delta_{mr} \delta_{rn} = n! \delta_{nm}. \end{aligned}$$

Então, a operação traço de um operador A fica dada por

$$Tr A = \sum_n \frac{1}{n!} \langle n|A|n\rangle. \quad (4.36)$$

Considere agora um operador $\widehat{\phi}^c$, associado a um operador de probabilidade $\widehat{\phi}$ através da relação $\widehat{\phi} = \widehat{\phi}^c \widehat{\phi}^{1-c}$, diagonal na base $|n\rangle$, tal que os autovalores de $\widehat{\phi}^c$ sejam dados por $\widehat{\phi}^c |n\rangle = \phi_n^c |n\rangle$. Do mesmo modo, considere que os observáveis do sistema sejam descritos por operadores diagonais na base número e denotados como $\widehat{A}|n\rangle = A_n |n\rangle$. A média de um observável num estado ϕ será definida como

$$\langle A \rangle_\phi = Tr \phi^c \widehat{A} \widehat{\phi}^{1-c}. \quad (4.37)$$

Usando as equações (4.34) e (4.36), obtemos

$$\langle A \rangle_\phi = \sum_n \phi_n A_n, \quad (4.38)$$

que corresponde à média esperada.

Dessa forma o expoente c pode viabilizar o uso da representação número quando o estado apresenta uma simetria do tipo Boltzmann. Para isso, a

situação mais conveniente consiste em supor $c = 0$, de tal modo que a equação (4.37) fica dada por

$$\langle A \rangle_\phi = \text{Tr} \widehat{A} \widehat{\phi},$$

levando novamente à equação (4.38) (ver o terceiro artigo na referência [1], onde um método similar foi proposto, mas com a matriz de densidade; ver também [30]).

Neste ponto é apropriado introduzir os vetores¹,

$$|I\rangle = \sum_n |n\rangle, \quad (4.39)$$

$$|\bar{I}\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} |n\rangle, \quad (4.40)$$

tal que, considerando um operador probabilidade ϕ , escrevemos

$$|\bar{\phi}\rangle = \widehat{\phi}|\bar{I}\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} \phi_n |n\rangle, \quad (4.41)$$

$$|\phi\rangle = \widehat{\phi}|I\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle. \quad (4.42)$$

A partir dessas definições, podemos deduzir os resultados

$$\langle I|I\rangle = \sum_{n,m} \langle m|n\rangle = \sum_n n!, \quad \langle \bar{I}|\bar{I}\rangle = \sum_n \frac{1}{n!}, \quad (4.43)$$

$$\langle \bar{I}|I\rangle = \sum_{n,m} \frac{1}{n!} \langle m|n\rangle = \sum_n \delta_{nn}, \quad (4.44)$$

$$\langle n|\bar{I}\rangle = 1, \quad \langle n|I\rangle = n!, \quad \langle 0|I\rangle = \langle 0|\bar{I}\rangle = 1, \quad (4.45)$$

$$\langle \psi|\phi\rangle = \sum_{n,m} \psi_m \phi_n \langle m|n\rangle = \sum_n n! \psi_n \phi_n, \quad (4.46)$$

$$\phi_n = \frac{1}{n!} \langle n|\phi\rangle, \quad \phi_n = \sum_n \langle n|\bar{\phi}\rangle. \quad (4.47)$$

¹Na literatura diferentes notações são usadas para os estados $|I\rangle$ e $|\bar{I}\rangle$. Por se mostrar mais conveniente estamos usando uma notação adaptada da dinâmica de campos térmicos [30].

Note que a grandeza $\langle \bar{I}|I \rangle$ é equivalente ao traço. De fato,

$$\langle \bar{I}|\widehat{A}\widehat{\phi}|I \rangle = \langle \bar{I}|\widehat{A}|\phi \rangle = \sum_{n,m} \frac{1}{n!} \langle m|\widehat{A}\widehat{\phi}|n \rangle = \sum_n A_n \phi_n. \quad (4.48)$$

A conservação da probabilidade é expressa por

$$\langle \bar{I}|\widehat{\phi}|I \rangle = \langle \bar{I}|\phi \rangle = \sum_n \phi_n = 1. \quad (4.49)$$

Isto fixa e justifica a escolha da normalização que se adotou, ou seja, $\langle 0|I \rangle = \langle 0|\bar{I} \rangle = 1$. Além disso,

$$\langle 0|\phi \rangle = \langle 0|\widehat{\phi}|I \rangle = \sum_n \phi_n \langle 0|n \rangle = \phi_0. \quad (4.50)$$

Do mesmo modo, $\langle 0|\bar{\phi} \rangle = \phi_0$. Este resultado será útil na fixação das condições iniciais do estado do sistema, assim como para descrever a condição de conservação de probabilidades².

4.3.1 Estados simétricos

Para a obtenção de estados simétricos que obedecem a Eq.(4.31), os operadores de criação e destruição de bósons, para um sítio, são introduzidos obedecendo a regras de comutação

$$[a, a] = [a^*, a^*] = 0, [a, a^*] = 1.$$

Entretanto, para respeitá-las, devemos ter

$$a|n \rangle = n|n-1 \rangle, a^*|n \rangle = |n+1 \rangle.$$

²Quando da redação final destas notas encontrei referências, [49], [50] e [51], que utilizam relações de comutação q -deformadas,

$$[a^*, a]_q = a^*a - qa a^*, \quad (4.51)$$

na construção de operadores de evolução, para o tratamento do efeito Hall quântico fracionário e para aplicações à supercondutividade para dimensões baixas. Deixo de examinar estas possibilidades nesta Tese, apontando que é possível a generalização do formalismo dependente da Eq. 4.51, que poderá ser objeto de investigação futura.

Observe que

$$\langle n|a^* = n\langle n-1|$$

e

$$\langle n|a = \langle n+1|.$$

Em termos do operador de criação, o estado $|\bar{I}\rangle$ pode ser escrito como

$$|\bar{I}\rangle = \sum_n n!|n\rangle = \sum_n n!(a^*)^n|0\rangle = e^{a^*}|0\rangle.$$

Isto sugere a introdução dos estados coerentes propostos por Glauber, $|\bar{\alpha}\rangle = e^{\alpha a^*}|0\rangle$, tal que

$$a|\bar{\alpha}\rangle = \alpha|\bar{\alpha}\rangle$$

e

$$\partial_\alpha^k |\bar{\alpha}\rangle|_{\alpha=1} = (a^*)^k |\bar{I}\rangle.$$

Entre as propriedades destes estados, primeiramente apontados por Schrödinger como estados que não se espalhavam com o tempo, estão duas particularidades que os tornam importantes no contexto destas notas. Primeiramente, os estados coerentes são funções de uma variável contínua e não um conjunto de autovetores de algum operador. Portanto, não são ortogonais, mas constituem um conjunto supercompleto que pode ser utilizado para a expansão do estado de um sistema. É justamente no limite clássico que eles assumem a ortogonalidade. Em segundo lugar, os estados coerentes estão associados a um mínimo de incerteza e, portanto, são os estados quânticos mais próximos dos estados clássicos. Estas propriedades tornam os estados coerentes úteis na construção do método de integrais de trajetória na representação holomórfica quando se faz o limite clássico das equações quânticas [33, 34].

A partir destes resultados podemos mostrar que a função definida por $G(\phi, \alpha) = \langle \alpha|\phi\rangle$ é a função geratriz usualmente introduzida a partir das probabilidades ϕ_n . De fato, temos

$$\begin{aligned} \partial_\alpha^k G(\phi, \alpha)|_{\alpha=1} &= \langle \bar{I}|(a^*)^k|\phi\rangle = \langle \bar{I}|(a^*)^k \sum_n \phi_n |n\rangle \\ &= \sum_{n,m} \frac{1}{m!} n(n-1)\dots(n-k+1) \phi_n \langle m|n-k+1\rangle \\ &= \sum_n n(n-1)\dots(n-k+1) \phi_n \\ &= \langle n(n-1)\dots(n-k+1) \rangle_\phi = n_k(\phi), \end{aligned}$$

onde $n_k(\phi)$ é o k -momento binomial (ou fatorial) [41]. Por outro lado, podemos ainda escrever

$$n_k(\phi) = \langle n|a^k|\bar{\alpha}\rangle|_{\alpha=1}.$$

Observe que o operador número usual, $N = a^*a$, gera o mesmo resultado que o operador a , isto é,

$$n_1(\phi) = \langle \bar{I}|a^*a|\phi\rangle = \langle \bar{I}|a|\phi\rangle = \langle n|a|\bar{\alpha}\rangle|_{\alpha=1}.$$

Considerando o estado

$$|\phi(t)\rangle = \widehat{\phi}(t)|n\rangle = \sum_n \phi_n(t)|n\rangle,$$

temos

$$\partial_t|\phi(t)\rangle = \sum_n \partial_t\phi_n(t)|n\rangle.$$

A partir das equações de movimento do tipo (4.31) podemos escrever $\sum_n \partial_t\phi_n(t)|n\rangle = L|\phi(t)\rangle$, para obter

$$\partial_t|\phi(t)\rangle = L|\phi(t)\rangle.$$

Esta equação tem solução formal dada por

$$|\phi(t)\rangle = e^{(t-t_0)L}|\phi(t_0)\rangle.$$

A condição inicial ficará especificada da seguinte maneira. Em $t = t_0$, temos

$$\begin{aligned} |\phi(t_0)\rangle &= \widehat{\phi}(t_0)|n\rangle = \sum_n \phi_n(t_0)|n\rangle \\ &= \sum_n \phi_n(t_0)(a^*)^n|0\rangle = \phi(a^*; t_0)|0\rangle. \end{aligned}$$

Assim, por exemplo, se $|\phi(t_0)\rangle = (a^*)^{N_0}|0\rangle$, correspondendo a um estado de N_0 partículas, temos $\phi_n(t_0) = \delta_{n,N_0}$ e $\phi(a^*; t_0) = (a^*)^{N_0}$.

Vamos agora analisar a seguinte reação



onde N partículas do tipo X transformam-se (decaem ou crescem) para um número M a uma taxa w . A equação mestra é do mesmo tipo [35] que a equação (4.31), ou seja ,

$$\partial_t\phi_n(t) = \sum_m w_{nm}\phi_m - \phi_n \sum_m w_{mn}, \quad (4.53)$$

onde

$$w_{nm} = w\delta_{n+N, m+M}.$$

Explicitamente podemos escrever

$$\begin{aligned} \sum_m w_{nm}\phi_m &= \sum_m w \frac{m(m-1)\dots(m-N+1)}{N!} \delta_{n+N, m+M} \phi_m \\ &= w \sum_m \frac{m(m-1)\dots(m-N+1)}{N!} \delta_{n, m+M-N} \phi_m \end{aligned} \quad (4.54)$$

e

$$\begin{aligned} \phi_n \sum_m w_{mn} &= \phi_n \sum_m w \frac{n(n-1)\dots(n-N+1)}{N!} \delta_{m+N, n+M} \\ &= w \sum_m \frac{m(m-1)\dots(m-N+1)}{N!} \delta_{m, n} \phi_m. \end{aligned} \quad (4.55)$$

No entanto, observe que

$$\sum_m \langle n | (a^*)^M a^N | m \rangle = \sum_m m(m-1)\dots(m-N+1) n! \delta_{n, m+M-N}. \quad (4.56)$$

Usando $\phi_n = \frac{1}{n!} \langle n | \phi \rangle$ e as equações (4.54), (4.55) e (4.56), podemos reescrever a equação (4.53) na forma

$$\partial_t \frac{1}{n!} \langle n | \phi(t) \rangle = \frac{1}{n!} \sum_m \langle n | \frac{w}{N!} (a^{*M} - a^{*N}) a^N | m \rangle \frac{1}{m!} \langle m | \phi \rangle.$$

Com a equação (4.35), finalmente obtemos

$$\partial_t |\phi(t)\rangle = \frac{w}{N!} (a^{*M} - a^{*N}) a^N |\phi(t)\rangle,$$

ou seja, o operador de evolução é dado por

$$\mathcal{L} = \frac{w}{N!} (a^{*M} - a^{*N}) a^N = \frac{w}{N!} a^{*M} a^N - a^{*N} a^N, \quad (4.57)$$

que possui interpretação evidente. O termo $(w/N!)a^{*M}a^N$ descreve a destruição de N partículas e a criação de M partículas no estado $|\phi(t)\rangle$. O segundo termo, $(w/N!)a^{*N}a^N$, não muda o número de partículas. A diferença dos dois termos perfaz a taxa de evolução, de tal modo que $\langle 0 | \mathcal{L} = 0$, o que

é fisicamente necessário para que a probabilidade seja conservada em todo instante de tempo. De fato, se inicialmente $\langle 0|\phi(0)\rangle = \phi_0$, então, para $t \neq t_0$, temos

$$\langle 0|\phi(t)\rangle = \langle 0|e^{t\mathcal{L}}|\phi(0)\rangle = \langle 0|\phi(0)\rangle = \phi_0.$$

Um caso de particular interesse é aquele em que $M = 0$ e $N = 1$, de modo que

$$\mathcal{L} = w(a - a^*a).$$

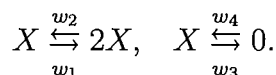
Esta é a situação em que \mathcal{L} descreve um decaimento exponencial. Isto pode ser observado calculando $n(t) = n_1(\phi) = \langle \bar{I}|a\phi(t)|I\rangle$. Consideramos então como condição inicial o resultado do fim da seção anterior, ou seja, supomos que em $t = 0$ o estado seja descrito por um vetor contendo N_0 partículas, isto é,

$$|\phi_0\rangle = \phi(0)|I\rangle = \sum_n \phi_n(0)|I\rangle = (a^*)^{N_0}|0\rangle,$$

tal que $\phi_n(0) = \delta_{n,N_0}$. Assim,

$$\begin{aligned} n(t) &= \langle \bar{I}|ae^{tw(a-a^*a)}\phi(0)|I\rangle \\ &= \sum_m \langle 0|e^{\alpha}ae^{tw(a-a^*a)}\phi(0)|m\rangle = N_0e^{-t/\xi}. \end{aligned}$$

A análise desses modelos simples, como o decaimento exponencial, é importante para se adquira desenvoltura no uso da linguagem de representação número neste novo contexto, construindo assim outros modelos. Por exemplo, Grassberger e Scheunert[35] fornecem para a reação



(conhecida como modelo de Schlögl), o operador de evolução

$$\mathcal{L} = w_1(a^{*2} - a^*)a + \frac{1}{2}w_2(a^* - a^{*2})a + w_3(1 - a^*)a + w_4(a^* - 1).$$

Note que, de acordo com a solução dada na Eq. (4.52), cada taxa de transição do modelo de Schlögl proporciona um termo para o liouvilliano, de acordo com a Eq. (4.57). As soluções de modelos como este, com interação (neste caso cúbica), são encontradas a partir das técnicas perturbativas desenvolvidas na teoria quântica. Uma apresentação detalhada de alguns desses procedimentos será empreendida no futuro.

É importante observar que se a probabilidade depender do ponto no espaço, por exemplo de um sítio em uma rede, então podemos escrever, como usual, um novo índice nos operadores de criação e destruição associados a esta localização, ou seja, podemos escrever a_i e a_i^* . Assim, no limite termodinâmico somos conduzidos a introduzir operadores de campo, que em geral são definidos como superposições do tipo $\Psi(x, t) = \sum \Psi_i(x, t)a_i$, como no caso do espaço de fase, e sem contradição por se tratar de sistemas clássicos.

4.3.2 Estados antissimétricos

Para a consideração de estados antissimétricos que obedecem à equação mestra (4.31), os operadores de criação e destruição de férmions (para sistemas de dimensão zero, ou apenas um sítio) são introduzidos, como no capítulo anterior, através das relações de anticomutação

$$[b, b]_+ = [b^*, b^*]_+ = 0, \quad (4.58)$$

$$[b, b^*]_+ = 1, \quad (4.59)$$

As regras de normalização são definidas por

$$b|n\rangle = n|n-1\rangle, \quad (4.60)$$

$$b^*|n\rangle = (1-n)|n+1\rangle. \quad (4.61)$$

e

$$\langle n|b = \langle n+1|(1-n), \quad (4.62)$$

$$\langle n|b^* = \langle n-1|n. \quad (4.63)$$

O operador número é definido como $N = b^*b$, resultando em

$$N|n\rangle = b^*b|n\rangle \quad (4.64)$$

$$= n(2-n)|n\rangle. \quad (4.65)$$

Logo, os autovalores de N são 0 e 1 de modo que cada sítio está vazio ou ocupado por apenas uma partícula. A configuração do sistema é caracterizada, como no caso de bósons, por um conjunto de variáveis de ocupação $\{n_i, i = 1, \dots, n\}$ mas com $n_i = 0$ ou 1, $\forall i$, de modo que se o i -ésimo sítio estiver vazio $n_i = 0$; se ocupado, $n_i = 1$. Cada configuração é dada por $n =$

$\{n_1, n_2, \dots, n_n\}$, de tal modo que o estado do sistema é definido pela probabilidade de ocorrência da configuração específica n : $\phi_n(t) = \phi(n_1, n_2, \dots, n_n; t)$, satisfazendo a equação mestra, dada pela Eq. (4.26)

O programa anterior se reproduz e seguiremos com a mesma notação. Consideramos novamente sistemas de dimensão zero. O estado do sítio é descrito por um operador de probabilidade $\widehat{\phi}(t)$, definido sobre um espaço de Hilbert \mathcal{H} e diagonal na representação número, isto é, $n \rightarrow |n\rangle$ com

$$\widehat{\phi}(t)|n\rangle = \phi_n(t)|n\rangle. \quad (4.66)$$

Vamos também requerer que os observáveis da teoria sejam descritos por operadores hermitianos \widehat{A} , também diagonais na representação número,

$$\widehat{A}|n\rangle = A_n|n\rangle, \quad (4.67)$$

onde A_n é um autovalor de \widehat{A} na base $|n\rangle$.

Exigindo compatibilidade com os resultados usuais, supomos a condição

$$\langle m|n\rangle = n!\delta_{nm}. \quad (4.68)$$

As Eqs. (4.34) a (4.50) se mantêm, levando em conta que, por exemplo a Eq. (4.35) lê-se agora

$$1 = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \quad (4.69)$$

enquanto as Eqs. (4.39), (4.41) e (4.43), respectivamente, são

$$|I\rangle = |0\rangle + |1\rangle = |\bar{I}\rangle \quad (4.70)$$

$$|\bar{\phi}\rangle = \phi|\bar{I}\rangle = \phi_0|0\rangle + \phi_1|1\rangle = |\phi\rangle, \quad (4.71)$$

e

$$\langle I|I\rangle = \langle \bar{I}|\bar{I}\rangle = \langle \bar{I}|I\rangle = 2. \quad (4.72)$$

Voltando ao problema de uma rede com N sítios, lembramos que o estado é dado pelo produto tensorial (4.33) e que os operadores anticomutam no mesmo sítio, mas *comutam* para sítios distintos. Isto resulta em operadores conhecidos como paulions, definidos pelas seguintes regras de comutação:

$$\begin{aligned} [c_i, c_i^*]_+ &= 1, \\ [c_i, c_i]_+ &= [c_i^*, c_i^*]_+ = 0, \\ [c_i, c_j] &= [c_i^*, c_j^*] = [c_i, c_j^*] = 0, \quad i \neq j. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Esses operadores podem ser usados para definir as matrizes de Pauli através das relações

$$\sigma_1^j = c_j^* + c_j, \quad (4.74)$$

$$\sigma_2^j = i(c_j - c_j^*), \quad (4.75)$$

$$\sigma_3^j = -1 + 2c_j^*c_j. \quad (4.76)$$

e são operadores de criação,

$$c_j^* = \frac{1}{2} (\sigma_1^j + i\sigma_2^j),$$

ou de aniquilação,

$$c_j = \frac{1}{2} (\sigma_1^j - i\sigma_2^j).$$

Este resultado é útil para o estudos de redes de spin e para a identificação de simetrias dos operadores de evolução ([48]).

Outro resultado de interesse é escrever a relação de Jordan-Wigner entre paulions e operadores puramente fermiônicos válida para a rede unidimensional. Esta relação é dada por [37]

$$c_j = b_j \exp(i\pi \sum_{m<j} b_m^* b_m) \quad (4.77)$$

$$c_j^* = b_j^* \exp(-i\pi \sum_{m<j} b_m^* b_m). \quad (4.78)$$

Assim, se os operadores c_j são paulions, então necessariamente os operadores b_j satisfazem a álgebra de férmions e valem as relações

$$\begin{aligned} c_j^* c_j &= b_j^* b_j, \\ c_{j\pm 1}^* c_j &= b_{j\pm 1}^* b_j, \\ \exp(2\pi i c_j^* c_j) &= \exp(2\pi i b_j^* b_j). \end{aligned} \quad (4.79)$$

Definindo o vetor

$$|\phi(t)\rangle = \hat{\phi}(t)|I\rangle \quad (4.80)$$

$$= \sum_n \phi_n(t) |n\rangle, \quad (4.81)$$

obtemos

$$\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle = \sum_n \partial_t \phi_n(t)|n\rangle = \sum_{n,m} \{w(n,m)\phi_m(t)|n\rangle - w(m,n)\phi_n(t)|n\rangle\}. \quad (4.82)$$

Se

$$\sum_n \frac{\partial}{\partial t} \phi_n(t)|n\rangle = \mathcal{L}|\phi(t)\rangle, \quad (4.83)$$

então a equação mestra fica escrita como

$$\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle = \mathcal{L}|\phi(t)\rangle, \quad (4.84)$$

onde \mathcal{L} é o operador de evolução para o sistema de paulions. Na próxima seção vamos aplicar estes resultados na dinâmica de Glauber linear.

4.4 O modelo de Glauber linear

Um modelo para o comportamento de um conjunto de sítios que alternam os valores atribuídos às suas variáveis clássicas de spin no tempo foi apresentado por Glauber [52]. Ele considera um sistema de spins de Ising e atribui uma determinada taxa de transição entre os estados de um sítio (“flip”, ou virada) que depende da energia de interação e da temperatura. Esta dinâmica é tratada por uma equação mestra e pode ser resolvida exatamente para um modelo unidimensional com interação entre primeiros vizinhos³. No âmbito dos modelos estatísticos, podemos considerar este processo de virada como um processo elementar de reação, ou resposta, espontânea, que pode ser útil para construir modelos mais complexos. Um outro processo elementar possível seria dado pela mudança da posição espacial, ou pela troca de partículas entre sítios diferentes, semelhantemente a um processo de difusão examinado por Doi [31], Kawasaki [53] e [43]. O processo de reação-difusão [37], pode ser descrito como a combinação destes processos elementares nas equações de reação-difusão, no qual o processo de difusão conduz os reagentes para um sítio, onde ocorre o processo químico e a reação mimetiza o processo de transformação. Vamos nos ater, como aplicação do formalismo, à construção do operador de evolução para o processo elementar de Glauber.

³Para uma discussão do modelo de Glauber e outros modelos que evoluem com dinâmicas semelhantes, ver [41] e [42]

Seja uma rede unidimensional de N sítios, onde cada sítio possui spin $\sigma_m = \pm 1$, $m = 1, \dots, N$, com interação de Ising. A evolução temporal da probabilidade de transição da configuração obtida pela virada de um sítio é descrita pela equação mestra

$$\partial_t \phi(\sigma, t) = \sum_m \{w_m(\sigma^m) \phi_m(\sigma^m) - w_m(\sigma) \phi(\sigma, t)\}, \quad (4.85)$$

onde $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ e a notação utilizada é tal que $w_m(\sigma^m, t)$ é a taxa de transição e descreve $w_m(\sigma, t)$ com o spin do m -ésimo sítio invertido para $-\sigma$. O chamado modelo de Glauber linear [54] e [43] é definido pelo estabelecimento da taxa de inversão

$$w_m(\sigma) = \frac{\alpha}{2} \left(1 - \frac{\lambda}{2d} \sigma_m \sum_{\delta} \sigma_{m+\delta}\right), \quad (4.86)$$

onde α é um parâmetro que define a escala temporal e λ , situado no intervalo $0 \leq \lambda \leq 1$, um outro parâmetro que permite a conexão com outras modalidades de definição desta taxa. A soma se dá sobre os primeiros vizinhos nas d dimensões do modelo. Para $d = 1$ recupera-se o modelo unidimensional de Glauber [54], com taxa de inversão

$$w_m(\sigma) = \frac{\alpha}{2} \left[1 - \frac{\lambda}{2} (\sigma_m \sigma_{m-1} + \sigma_m \sigma_{m+1})\right], \quad (4.87)$$

reversível, para $\lambda = \tanh(2\beta J)$, e com simetria de inversão.

Nosso objetivo aqui é escrever as equações (4.85) e (4.87) no seguinte espaço. Perseguindo a perspectiva anterior, vamos definir o estado $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$ e o operador de spin $\hat{\sigma}_m$, que agindo sobre ele mede o m -ésimo spin e é diagonal,

$$\hat{\sigma}_m |\sigma_1, \dots, \sigma_{m-1}, \pm 1, \sigma_{m+1}, \dots, \sigma_N\rangle = \pm 1 |\sigma_1, \dots, \sigma_{m-1}, \pm 1, \sigma_{m+1}, \dots, \sigma_N\rangle. \quad (4.88)$$

Definimos também a ação do operador de alternância do valor de spin, \hat{F}_m (spin-flip), que implementa o processo elementar de Glauber,

$$\hat{F}_m |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m, \dots, \sigma_N\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_m, \dots, \sigma_N\rangle. \quad (4.89)$$

Finalmente vamos introduzir o estado

$$|\phi(t)\rangle = \sum_{\sigma} \widehat{\phi}(\sigma, t) |\sigma\rangle \quad (4.90)$$

$$= \widehat{\phi}(t) \sum_{\sigma} |\sigma\rangle \quad (4.91)$$

$$= \widehat{\phi}(t) |I\rangle. \quad (4.92)$$

Como antes, vamos usar o estado $|I\rangle$ agora dado por definido

$$\begin{aligned} |I\rangle &= \sum_{\sigma} |\sigma\rangle \\ &= | + 1\rangle + | - 1\rangle. \end{aligned}$$

Além disso, ainda assumimos que o operador de probabilidade $\widehat{\phi}(t)$ e o operador \widehat{w}_j , são diagonais na base $|\sigma\rangle$, de modo que

$$\widehat{\phi}(\widehat{\sigma}, t) |\sigma\rangle = \phi(\sigma, t) |\sigma\rangle, \quad (4.93)$$

$$\widehat{w}_j(\widehat{\sigma}) |\sigma\rangle = w_j(\sigma) |\sigma\rangle, \quad (4.94)$$

onde

$$\widehat{w}_m(\widehat{\sigma}) = \frac{\alpha}{2} \left[1 - \frac{\lambda}{2} (\widehat{\sigma}_m \widehat{\sigma}_{m-1} + \widehat{\sigma}_m \widehat{\sigma}_{m+1}) \right], \quad (4.95)$$

de modo que os autovalores de $\widehat{w}_m(\widehat{\sigma})$ estão dados na Eq.(4.87).

Multiplicando então a Eq.(4.85), escrita em termos dos operadores $\widehat{\phi}(\widehat{\sigma}, t)$ e $\widehat{w}_j(\widehat{\sigma})$, por $|\sigma\rangle$ e somando nas configurações possíveis, temos para o primeiro membro

$$\sum_{\sigma} \partial_t \phi(\sigma, t) |\sigma\rangle = \sum_{\sigma} \partial_t \widehat{\phi}(\widehat{\sigma}, t) |\sigma\rangle = \partial_t |\phi(t)\rangle. \quad (4.96)$$

No segundo membro devemos utilizar o operador \widehat{F}_m para obter o estado do primeiro termo com a mesma posição de spin do estado do segundo termo. Devemos também cuidar para que \widehat{F}_m atue sobre o estado que já sofreu a medida do spin pelo operador \widehat{w}_m , produzindo o produto $\widehat{F}_m \widehat{w}_m$ correto.

Assim

$$\begin{aligned}
\partial_t |\phi(t)\rangle &= \sum_m \sum_\sigma \{w_m(\sigma^m) \phi(\sigma^m, t) - w_m(\sigma) \phi(\sigma, t)\} |\sigma\rangle \\
&= \sum_m \sum_\sigma \{w_m(\sigma^m) \phi(\sigma^m, t) |\sigma\rangle - w_m(\sigma) \phi(\sigma, t) |\sigma\rangle\} \\
&= \sum_m \sum_\sigma \{ \hat{F}_m \hat{w}_m \hat{\phi}(t) |\sigma\rangle - \hat{w}_m \hat{\phi}(t) |\sigma\rangle \} \\
&= \sum_m \{ \hat{F}_m \hat{w}_m - \hat{w}_m \} |\phi(t)\rangle,
\end{aligned} \tag{4.97}$$

resultando na equação mestra dada na forma

$$\partial_t |\phi(t)\rangle = \mathcal{L} |\phi(t)\rangle, \tag{4.98}$$

onde

$$\mathcal{L} = \sum_m (\hat{F}_m - 1) \hat{w}_m. \tag{4.99}$$

Este operador de evolução no espaço de Fock descreve o processo de Glauber definido a partir da especificação da taxa de inversão $w_m(\sigma^m, t)$.

4.4.1 Representação em termos de paulions

Trataremos agora explicitamente o modelo de Glauber linear definido na Eq. (4.87) escrito em termos de paulions (e portanto utilizando a base de Fock para os operadores de criação e aniquilação). A relação entre a base $|\sigma\rangle$ e $|n\rangle$ é obtida da relação de completeza da base $|n\rangle$

$$1 = \sum_n \frac{1}{n!} |n\rangle \langle n| = |0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|,$$

quando escrevemos,

$$|\sigma\rangle = \sum_n \frac{1}{n!} |n\rangle \langle n|\sigma\rangle. \tag{4.100}$$

A equação de autovalores de $\hat{\sigma}$, dada pela Eq. (4.88) escrita como $\hat{\sigma} |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle$ com $\sigma = \pm 1$, fornece,

$$\hat{\sigma} \sum_n \frac{1}{n!} |n\rangle \langle n|\sigma\rangle = \sigma \sum_n \frac{1}{n!} |n\rangle \langle n|\sigma\rangle. \tag{4.101}$$

Multiplicando a Eq.(4.101) por $\langle m|$ temos,

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{\sigma} \sum_n \frac{1}{n!}|n\rangle\langle n|\sigma\rangle &= \sigma \sum_n \frac{1}{n!}\langle m|n\rangle\langle n|\sigma\rangle \\ &= \sigma\langle m|\sigma\rangle\end{aligned}$$

Assim, uma solução consistente é dada por

$$\langle m|\sigma\rangle = \delta_{2m-1,\sigma}$$

com

$$\hat{\sigma}_m = 2c_m^*c_m - 1. \quad (4.102)$$

Resulta então da Eq.(4.100) que

$$\begin{aligned}|\sigma = 1\rangle &= \sum_n \frac{1}{n!}\langle n|1\rangle|n\rangle = |n = 1\rangle, \\ |\sigma = -1\rangle &= \sum_n \frac{1}{n!}\langle n|-1\rangle|n\rangle = |n = 0\rangle,\end{aligned}$$

e da Eq.(4.102), $\hat{\sigma}|n = 1\rangle = 1|1\rangle$ e para $\sigma = -1$, $\hat{\sigma}|n = 0\rangle = -1|0\rangle$.

Com estes resultados podemos imediatamente reescrever os operadores do modelo de Glauber em termos de paulions. Consideremos $d = 1$. O operador associado à taxa de inversão de Glauber $\hat{w}_m = \hat{w}_m(\hat{\sigma})$ da Eq. (4.95) fica escrito como

$$\begin{aligned}\hat{w}_m(c, t) &= \frac{\alpha}{2}\left\{1 - \frac{\lambda}{2}[(2c_m^*c_m - 1)(2c_{m-1}^*c_{m-1} - 1) \right. \\ &\quad \left. + (2c_m^*c_m - 1)(2c_{m+1}^*c_{m+1} - 1)]\right\} \\ &= \frac{\alpha}{2}\left\{1 - 2\lambda[\hat{n}_m\hat{n}_{m-1} + \hat{n}_m\hat{n}_{m+1} \right. \\ &\quad \left. - \hat{n}_m - \frac{1}{2}\hat{n}_{m-1} - \frac{1}{2}\hat{n}_{m+1} + \frac{1}{2}]\right\},\end{aligned} \quad (4.103)$$

onde $\hat{n}_k = c_k^*c_k$ é o operador número com autovalores 0 e 1. Para o operador de alteração de valor do spin fica dado explicitamente como

$$\hat{F}_m = c_m + c_m^*. \quad (4.104)$$

Esta relação pode ser obtida solicitando-se que \hat{F}_m , hermitiano, seja dado por uma combinação linear de paulions. O liouvilliano, dado na Eq.(4.99),

pode então ser escrito nesta nova representação de paulions,

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \sum_m (\hat{F}_m - 1) \hat{w}_m \\ &= \frac{\alpha}{2} \sum_m (c_m + c_m^* - 1) \left\{ 1 - 2\lambda [\hat{n}_m \hat{n}_{m-1} + \hat{n}_m \hat{n}_{m+1} \right. \\ &\quad \left. - \hat{n}_m - \frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} - \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} + \frac{1}{2}] \right\}.\end{aligned}\quad (4.105)$$

Em termos de operadores de férmions, definidos nas Eqs. (4.58) a (4.63), e de acordo com as Eqs. (4.77) e (4.79), este operador se escreve como

$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \frac{\alpha}{2} \sum_m (b_m^* \exp(-i\pi \sum_{k<m} b_k^* b_k) + b_m \exp(i\pi \sum_{k<m} b_k^* b_k) - 1) \\ &\quad \times \left\{ 1 - 2\lambda [\hat{n}_m \hat{n}_{m-1} + \hat{n}_m \hat{n}_{m+1} \right. \\ &\quad \left. - \hat{n}_m - \frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} - \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} + \frac{1}{2}] \right\},\end{aligned}\quad (4.106)$$

onde aqui $\hat{n}_m = b_m^* b_m$. Podemos observar que o operador associado à taxa de inversão é dado na Eq. (4.103) em termos de combinações de operadores de contagem de número de paulions. Isto é esperado, já que a taxa de inversão é uma medida da situação de ocupação dos sítios primeiros vizinhos para estimar a oportunidade de alteração. O operador de evolução (4.105) apresenta, também, termos exclusivamente de contagem de paulions ou férmions e termos cúbicos que resultam da ação do operador de alteração de spin, definido na Eq. (4.104), representando a interação dos spins devido à transição. Quando escrito em termos de férmions, conforme a Eq. (4.106), o operador de evolução do modelo de Glauber linear permite a utilização rigorosa de métodos de perturbação da teoria quântica de campos, baseando-se, por exemplo, na construção de integrais de trajetória escritas com o auxílio de variáveis de Grassmann, elementos naturais do contexto fermiônico. Esta é uma possibilidade que será explorada em outro lugar. O que faremos na sequência é aplicar este formalismo de espaço de Fock para estudar a evolução temporal da magnetização e da função de correlação de pares no modelo de Glauber.

4.4.2 Magnetização e função de correlação de pares

Nosso objetivo aqui é examinar o procedimento de espaço de Fock aplicado ao modelo de Glauber linear, exemplificando com detalhes a metodologia de

cálculo em uma situação não trivial. Como conseqüência, além de deduzir resultados conhecidos na literatura [54] e [43], via um procedimento baseado em argumentação física diferente, mostramos que o método apresenta algumas vantagens que podem ser generalizadas para outros contextos.

A quantidade básica no formalismo é o operador número de ocupação, que se relaciona com o operador de spin por

$$\hat{n}_m = c_m^* c_m = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_m + 1).$$

Vamos então calcular a evolução temporal da média de \hat{n}_m no estado $|\phi(t)\rangle$, solução da equação mestra $\partial_t |\phi(t)\rangle = \mathcal{L}|\phi(t)\rangle$, onde \mathcal{L} é dado pela Eq.(4.105).

O valor médio de \hat{n}_m , $\langle \hat{n}_m \rangle$, é dado por

$$\langle \hat{n}_m \rangle = \langle \bar{I} | \hat{n}_m | \phi(t) \rangle,$$

com a derivada temporal dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \rangle &= \langle \bar{I} | \hat{n}_m \frac{\partial}{\partial t} | \phi(t) \rangle \\ &= \langle \bar{I} | c_m^* c_m \mathcal{L} | \phi(t) \rangle \\ &= \langle \bar{I} | c_m^* c_m \sum_n (\hat{F}_n - 1) \hat{w}_n | \phi(t) \rangle. \end{aligned}$$

Observe que se $m \neq n$,

$$[c_m^* c_m, (\hat{F}_n - 1) \hat{w}_n] = 0.$$

Logo podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \rangle &= \langle \bar{I} | \sum_{n \neq m} (\hat{F}_n - 1) c_m^* c_m \hat{w}_n | \phi(t) \rangle \\ &\quad + \langle \bar{I} | c_m^* c_m (\hat{F}_m - 1) \hat{w}_m | \phi(t) \rangle. \end{aligned}$$

Contudo

$$\begin{aligned} \langle \bar{I} | \sum_{n \neq m} (\hat{F}_n - 1) &= \sum_{n \neq m} \langle \bar{I} | (c_n^* + c_n - 1) \\ &= \sum_{n \neq m} (\langle 0 | + \langle 1 |) (c_n^* + c_n - 1) = 0, \end{aligned}$$

resultando em

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \rangle &= \langle \bar{I} | c_m^* c_m (\hat{F}_m - 1) \hat{w}_m | \phi(t) \rangle \\
&= \langle \bar{I} | c_m^* c_m (c_m^* + c_m - 1) \hat{w}_m | \phi(t) \rangle \\
&= \langle \bar{I} | c_m^* c_m c_m^* \hat{w}_m | \phi(t) \rangle - \langle \bar{I} | c_m^* c_m \hat{w}_m | \phi(t) \rangle \\
&= \langle \bar{I} | c_m^* (1 - c_m^* c_m) \hat{w}_m | \phi(t) \rangle - \langle \bar{I} | c_m^* c_m \hat{w}_m | \phi(t) \rangle \\
&= \langle \bar{I} | c_m^* \hat{w}_m | \phi(t) \rangle - \langle \bar{I} | c_m^* c_m \hat{w}_m | \phi(t) \rangle, \tag{4.107}
\end{aligned}$$

onde usamos $[c_m^* c_m]_+ = 0$, e $c_m^* c_m c_m = 0$.

Para prosseguir, vamos utilizar as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned}
\langle \bar{I} | c_m^* &= (\langle 0 | + \langle 1 |) c_m^* = \langle 0 |, \\
\langle 0 | c_m^* c_m &= 0, \\
\langle 1 | c_m^* c_m &= \langle 1 |, \\
\langle \bar{I} | c_m^* c_m &= (\langle 0 | + \langle 1 |) c_m^* c_m = \langle 1 |.
\end{aligned}$$

Do segundo membro da equação (4.107), então, encontramos:

$$\begin{aligned}
\langle \bar{I} | c_m^* \hat{w}_m | \phi(t) \rangle &= \langle 0 | \hat{w}_m | \phi(t) \rangle \\
&= \frac{\alpha}{2} \{ 1 - 2\lambda [\hat{n}_m \hat{n}_{m-1} + \hat{n}_m \hat{n}_{m+1} \\
&\quad - \hat{n}_m - \frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} - \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} + \frac{1}{2}] \} | \phi(t) \rangle \\
&= \langle 0 | \frac{\alpha}{2} \{ 1 - 2\lambda [-\frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} - \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} + \frac{1}{2}] \} | \phi(t) \rangle,
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\langle \bar{I} | c_m^* c_m \hat{w}_m | \phi(t) \rangle &= \langle 1 | \hat{w}_m | \phi(t) \rangle \\
&= \frac{\alpha}{2} \{ 1 - 2\lambda [\hat{n}_m \hat{n}_{m-1} + \hat{n}_m \hat{n}_{m+1} \\
&\quad - \hat{n}_m - \frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} - \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} + \frac{1}{2}] \} | \phi(t) \rangle \\
&= \langle 0 | \frac{\alpha}{2} \{ 1 - 2\lambda [\frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} + \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} - \frac{1}{2}] \} | \phi(t) \rangle.
\end{aligned}$$

Reunindo estes resultados de volta na equação (4.107), obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \rangle &= \langle 0 | \{ 1 - 2\lambda [-\frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} - \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} + \frac{1}{2}] \} \\
&\quad - \langle 1 | \{ 1 - 2\lambda [\frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} + \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} - \frac{1}{2}] \} | \phi(t) \rangle \\
&= (\langle 0 | - \langle 1 |) | \phi(t) \rangle \\
&\quad + 2\lambda \langle 0 | (\frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} + \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} - \frac{1}{2}) | \phi(t) \rangle \\
&\quad + 2\lambda \langle 1 | (\frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} + \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} - \frac{1}{2}) | \phi(t) \rangle.
\end{aligned}$$

Usando

$$\begin{aligned}
\langle 0 | - \langle 1 | &= -(\langle 0 | - \langle 1 |) \\
&= -\langle \bar{I} | (2\hat{n}_m - 1),
\end{aligned}$$

resulta em

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \rangle &= -\langle \bar{I} | (2\hat{n}_m - 1) | \phi(t) \rangle \\
&\quad + \langle \bar{I} | 2\lambda (\frac{1}{2} \hat{n}_{m-1} + \frac{1}{2} \hat{n}_{m+1} - \frac{1}{2}) | \phi(t) \rangle,
\end{aligned}$$

que leva finalmente a

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \rangle = -\langle \hat{n}_m \rangle + \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} \langle \hat{n}_{m+\delta} \rangle + \frac{1-\lambda}{2}. \quad (4.108)$$

A equação para a magnetização pode imediatamente ser deduzida, lembrando que $\hat{\sigma}_m = 2\hat{n}_m - 1$, o que leva à conhecida equação [54]

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\sigma}_m \rangle = -\langle \hat{\sigma}_m \rangle + \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} \langle \hat{\sigma}_{m+\delta} \rangle. \quad (4.109)$$

Usaremos o mesmo procedimento para calcular agora a evolução da função de correlação de pares, definida aqui por $\langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle$. Assim temos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle &= \langle \bar{I} | \hat{n}_m \hat{n}_n \frac{\partial}{\partial t} | \phi(t) \rangle \\
&= \langle \bar{I} | c_m^* c_m c_n^* c_n \mathcal{L} | \phi(t) \rangle \\
&= \langle \bar{I} | c_m^* c_m c_n^* c_n \sum_r (\hat{F}_r - 1) \hat{w}_r | \phi(t) \rangle.
\end{aligned}$$

Para $r \neq m, n$, temos que

$$\langle \bar{I} | c_m^* c_m c_n^* c_n \sum_{r \neq m, n} (\hat{F}_r - 1) \hat{w}_r | \phi(t) \rangle = \langle \bar{I} | \sum_{r \neq m, n} (\hat{F}_r - 1) c_m^* c_m c_n^* c_n \hat{w}_r | \phi(t) \rangle = 0,$$

o que leva a

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle &= \langle \bar{I} | c_m^* c_m c_n^* c_n (\hat{F}_m - 1) \hat{w}_m | \phi(t) \rangle \\ &\quad + \langle \bar{I} | c_m^* c_m c_n^* c_n \sum_r (\hat{F}_n - 1) \hat{w}_n | \phi(t) \rangle. \end{aligned}$$

Com as relações de comutação e anticomutação dos paulions, encontramos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle &= -2 \langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle + \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} [\langle \hat{n}_m \hat{n}_{n+\delta} \rangle + \langle \hat{n}_n \hat{n}_{m+\delta} \rangle] \\ &\quad + \frac{1-\lambda}{2} (\langle \hat{n}_m \rangle + \langle \hat{n}_n \rangle). \end{aligned} \quad (4.110)$$

A relação desta equação com a equação de evolução da função de correlação de pares usual, $\langle \hat{\sigma}_m \hat{\sigma}_n \rangle$, é dada da seguinte forma. A partir da Eq. (4.108) a Eq. (4.110) pode ser rescrita como

$$\begin{aligned} \frac{4}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle &= \frac{2}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_m \rangle + \frac{2}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{n}_n \rangle - 8 \langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle + 4 \langle \hat{n}_m \rangle + 4 \langle \hat{n}_n \rangle \\ &\quad + \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} [4 \langle \hat{n}_m \hat{n}_{n+\delta} \rangle + 4 \langle \hat{n}_n \hat{n}_{m+\delta} \rangle \\ &\quad - 2 \langle \hat{n}_{n+\delta} \rangle - 2 \langle \hat{n}_{m+\delta} \rangle - 2 \langle \hat{n}_m \rangle - 2 \langle \hat{n}_n \rangle + 2]. \end{aligned}$$

Por outro lado, desde que $\hat{\sigma}_m = 2\hat{n}_m - 1$ e

$$\langle \hat{\sigma}_m \hat{\sigma}_n \rangle = 4 \langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle - 2 \langle \hat{n}_m \rangle - 2 \langle \hat{n}_n \rangle + 1,$$

encontramos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\sigma}_m \hat{\sigma}_n \rangle &= -2 \langle \hat{\sigma}_m \hat{\sigma}_n \rangle \\ &\quad + \frac{\lambda}{2} \sum_{\delta} [\langle \hat{\sigma}_m \hat{\sigma}_{n+\delta} \rangle + \langle \hat{\sigma}_n \hat{\sigma}_{m+\delta} \rangle], \end{aligned} \quad (4.111)$$

a equação para a função de correlação usual.

O método no espaço de Fock proporciona, assim, um formalismo alternativo consistente, dado pelas equações (4.108) e (4.110) no estudo da magnetização, com a possibilidade de ser utilizado plenamente no caso bidimensional. Na análise das soluções das equações de evolução temporal para $\langle \hat{n}_m \rangle$ e $\langle \hat{n}_m \hat{n}_n \rangle$ podemos utilizar os métodos desenvolvidos por Oliveira [54] na análise das equações (4.109) e (4.111).

Referências Bibliográficas

- [1] M. Schönberg, *Il Nuovo Cimento*, **9** 1139 (1952); **10** 419 (1953); **10** 697 (1953).
- [2] B. O. Koopman, *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)* **17** 315 (1931).
- [3] A. Loinger, *Ann. Phys. (N.Y.)* **20** 132 (1962).
- [4] G. Lugarini and M. Pauri, *Ann. Phys. (N.Y.)* **44** 226 (1967).
- [5] G. Della Riccia, N. Wiener, *J. Math. Phys.* **7** 1372 (1966).
- [6] J. J. Hopfield, A. J. F. Bastini, *Phys. Rev.* **168** 193 (1968).
- [7] B. Misra, *Proc. Natl. Acad. Sciences (USA)* **17** 315 (1978).
- [8] C. George and I. Prigogine, *Physica A* **99** 369 (1979).
- [9] B. Misra and I. Prigogine, *Lett. Math. Phys.* **7** 421 (1983).
- [10] T. Ali and E. Prugovečki, *Physica A* **89** 501 (1977).
- [11] D. Bohm and B. J. Hiley, *Found. Phys.* **11** 179 (1981).
- [12] T. N. Sherry and E.C.G. Sudarshan, *Phys. Rev. D* **18** 4580 (1978).
- [13] E. C. G. Sudarshan and N. Mukunda, *Classical Dynamics: A modern Perspective* (John Wiley and sons, New York, 1974).
- [14] R. Paul, *Field Theoretical Methods in Chemical Physics*, (Elsivier, Amsterdam, 1982).
- [15] A. Matos Neto and J. D. M. Vianna, *N. Cimento* **86B** 117 (1985)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [16] A. E. Santana, A. Matos Neto and J. M. Vianna, *Int. J. Theor. Phys.* **28** 787 (1989).
- [17] A. E. Santana, A. Matos Neto and J. M. Vianna, *Rev. Bras. Ens. Fis.* **14** 72 (1992)
- [18] A. E. Santana, F. C. Khanna, H. Chu. and Y. C. Chang, *Ann. Phys. (NY)* **246** 481(1996)
- [19] L.M. Abreu, A.E. Santana, A. Ribeiro Filho, *Ann. Phys.(N.Y.)* **297** 396 (2002).
- [20] J. De Boer, in J. de Boer e G. Uhlenbeck,(orgs), *Studies in statistical mechanics*, vol. III, North Holand, Amesterdan (1965), 213-275.
- [21] P. Ziesche, *Commun. Math. Phys.* **5**, 191-204, (1967)
- [22] P. Ziesche, *Annalen der Physic*, **7-20**, Heft 5/6, 292, (1967)
- [23] M. Schutz and S. Trimper, *Physical Review B* **53**, 8421 (1996)
- [24] F. Alcaraz, M. Droz and M. Hankel, *Ann. Phys.* **230** 250 (1994)
- [25] H. Rose, *J. Stat. Phys.* **20-4** 415 (1979)
- [26] R. Phythyan, *J. Phys. A: Math. Gen.* **8-9** 1423 (1975)
- [27] D. Bohm, W. Schutzer, *Nuovo Cimento, Suppl.II* 1004 (1955).
- [28] T. Petrovsky e I. Prigogine, *The Liouville space extension of quantum mechanics*, *Advances in Chemical Physics* vol. XCIX, 1977, New York. Ver também: A. Bohm e M. Gadella, *Lecture Notes in Physics*, vol. 348, 1989, Springer, Berlin
- [29] E. T. Jaynes, *Phys. Rev.* **106-4** 620 (1957).
- [30] H. Umezawa, *Advanced Field Theory: Micro, Macro and Thermal Physics* (AIP, New York, 1993).
- [31] M. Doi, *J. Phys. A* **9** 1465 (1976); and **9** 1479 (1976).
- [32] C. Martin, E. D. Siggia and H. A. Rose, *Phys. Rev. A* **8** 423 (1973).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [33] L. Peliti, *J. Physique* **46** 1469 (1985).
- [34] R. Dickmann e R. Vidigal, *Braz. J. Phys.* **33-1** 73 (2003).
- [35] P. Grassberger and M. Scheunert, *Fort. Phys.* **28** 547 (1980).
- [36] H. C. Andersen, *J. Math. Phys.* **41** 1979 (2000).
- [37] D. C. Mattis and M. L. Glasser, *Rev. Mod. Phys.* **70** 979 (1998).
- [38] A. Suna, *Phys. Rev. B* **1** 1716 (1970).
- [39] S. R. A. Salinas, *Introduction to Statistical Physics* Springer, New York, 2001.
- [40] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particles Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [41] T. Tomé, M. J. Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade* EdUSP, São Paulo, 2001.
- [42] T. Tomé, Irreversibilidade: Modelos de rede com dinâmicas estocástica, Tese de Livre Docência, IFUSP- Instituto de Física da Universidade de São Paulo, 1996.
- [43] A. Brunstein, Comportamento crítico e transições de fase dinâmicas em autômatos celulares probabilísticos Tese de doutoramento, IFUSP - Instituto de Física da Universidade de São Paulo, 1999.
- [44] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1981. N. G. van Kampen, *Physica* **XX** 603 (1954).
- [45] L. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1998, 2nd ed.
- [46] W. Pauli, *Festschrift zum 60. Geburtstage A. Sommerfelds*, 30, Hirzel, Leipzig, 1928.
- [47] L. van Hove, *Physica* **XXI** 517 (1955).
- [48] E. Lieb, T. Schultz and D. Mattis, *Ann. Phys. (NY)* **16** 407 (1961).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [49] H. S. Green, Phys. Rev. **90** 270 (1953).
- [50] A. P. Polychronakos, hep-th/9902157.
- [51] B. I. Halperin, Phys. Rev. Lett. **52** 1583 (1984).
- [52] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4** 294 (1963).
- [53] K. Kawasaki, Phys. Rev. **145** 224 (1966).
- [54] M. J. de Oliveira, Phys. Rev. E **67** 066101 (2003).

Conclusão

Modelos de Potts com desordem correlacionada

Apresentamos resultados analíticos e exatos para alguns modelos, com interação de Potts ou Ising sobre redes hierárquicas, que permitem verificar condições de relevância da desordem correlacionada. Exploramos, também, a faculdade das redes hierárquicas de propor parâmetros pequenos para conduzir as expansões, quando generalizamos a expansão da desordem fraca para outras geometrias além da rede do diamante.

Nas situações de desordem relevante aparece um cruzamento (ou “crossover”) no espaço dos parâmetros para novo ponto fixo, que poderá ou não se realizar fisicamente. Nos modelos totalmente desordenados (caso do trabalho de Derrida e Gardner) não há problemas. Na presença de desordem (parcialmente) correlacionada, vale a relação de escala

$$\phi = \alpha + d_1 \nu, \quad (1)$$

onde ν é o expoente associado ao comprimento de correlação e d_1 é o número de dimensões correlacionadas.

O fenômeno de cruzamento (crossover) entre pontos fixos de um diagrama dos fluxos no espaço dos parâmetros de um sistema é investigado em modelos desordenados simples e analiticamente tratáveis, como estes sujeitos à desordem fraca e construídos sobre redes hierárquicas. Determinamos as mudanças no comportamento crítico, induzidas pelas condições de desordem correlacionada dos modelos. Nossos resultados se mostram satisfatórios no que concerne ao programa original, pois a presença de correlação na desordem permitiu generalizar o critério de relevância, investigando modelos para os quais as condições sobre o expoente α não são suficientes para detectar

alterações. Nestes casos, confirmamos, analiticamente, a necessidade de examinar a dimensão d_1 do conjunto das variáveis correlacionadas. Para estes modelos o expoente de crossover, ϕ , que não se confunde com α , é que deve ser examinado. Nossos resultados apontam diferenças qualitativas entre os casos em que (i) $d - d_1 = 1$, onde d é a dimensão do sistema, e o esquema perturbativo não funciona; e (ii) $d - d_1 > 1$, onde a desordem relevante produz um novo ponto fixo perturbativo, fisicamente aceitável. Estas situações estão de acordo com resultados numéricos de Andelman e Aharony, possibilitando a proposta de uma generalização da forma usual do critério de Harris, que toma o expoente de crossover, ϕ , como o parâmetro que muda de sinal para modelos nos quais a desordem é relevante, indicando também a aceitabilidade do tratamento perturbativo.

Como decorrência desta análise é possível estabelecermos duas alternativas de continuidade deste trabalho. A primeira é investigar modelos outros, que não necessariamente de spins acoplados aos sítios da rede hierárquica. Por exemplo, os cálculos de desordem fraca podem ser repetidos para um modelo de polímeros diretos sobre a rede.

Modelos aleatórios de p spins esféricos

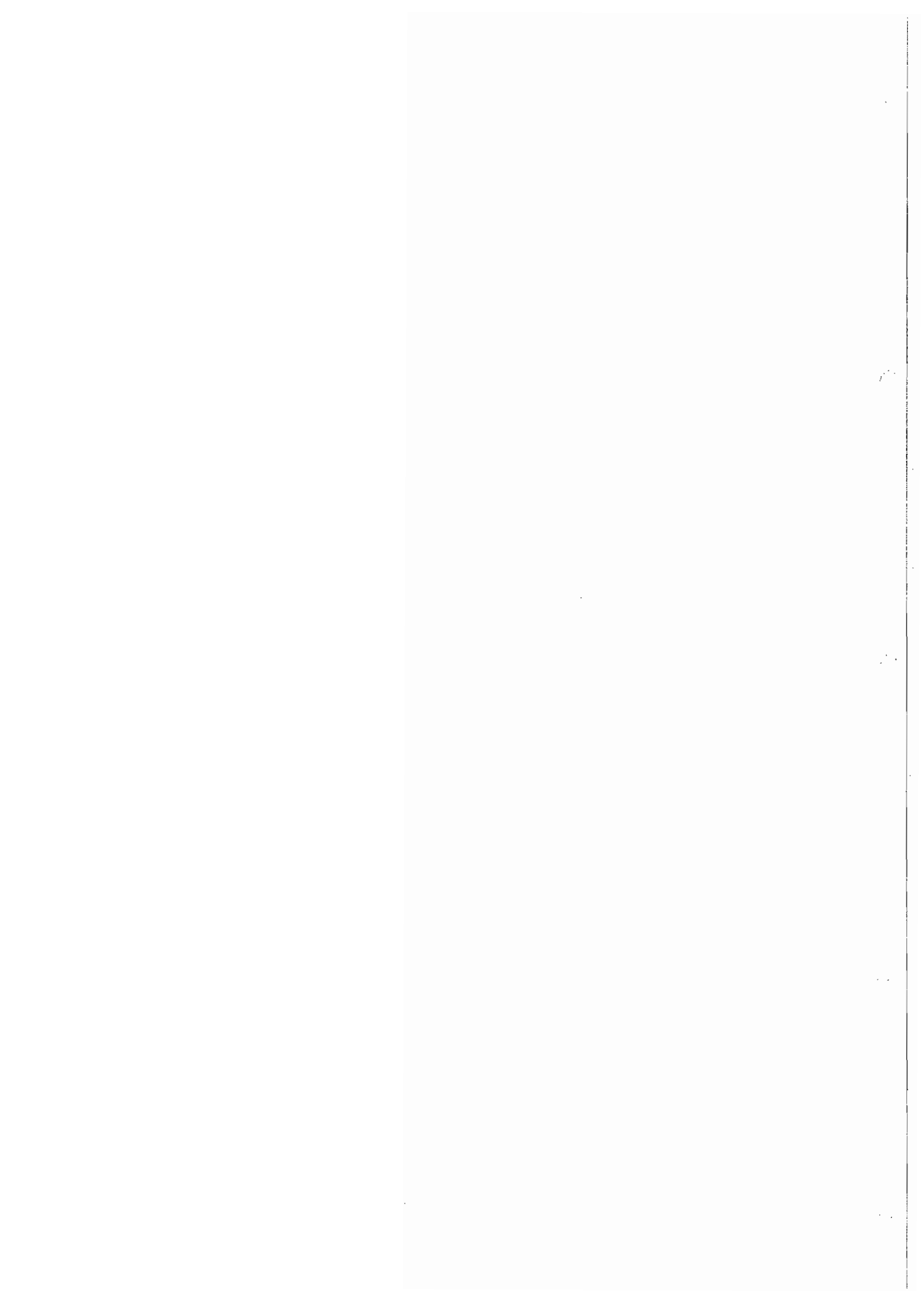
Tratamos modelos que associam interações aleatórias, do tipo usualmente encontrado nos vidros de spins, com uma interação uniforme em blocos. A utilização de técnicas de ponto de sela e da lei dos grandes números permite obter a energia livre e construir os diagramas de fase. Mostramos que as escolhas de Hopfield ou van Hemmen não interferem nestes diagramas e encontramos transições: de segunda ordem, entre as fases desordenada e vítrea; de primeira ordem, na região de coexistência das fases ordenada e vítrea e também entre as fases ordenada e desordenada. No caso particular de um sistema binário, analisamos a coalescência de fase mista. Também seria importante investigar o comportamento dinâmico de todos estes modelos.

Seria interessante verificar as condições sobre o número de spins, para $p > 3$, envolvidos pela interação uniforme em blocos, que possibilitam o surgimento de fases mistas estáveis e investigar, na sequência, a natureza das transições.

O espaço de Fock para modelos estatísticos.

Examinamos a contribuição pioneira de M. Schönberg para a construção da mecânica estatística clássica baseada na aplicação do método de segunda quantização à equação de Liouville no espaço de fase. Esta abordagem permite construir consistentemente o espaço de Fock, ou espaço número de ocupação de um sistema clássico. Contribuí, também, para justificar o processo de duplicação de campos e seus operadores associados, bosônicos ou fermiônicos, nos tratamentos correntes que utilizam métodos de teoria de campos em modelos estatísticos. Tendo em vista o estudo de sistemas estocásticos, o aparato teórico básico é apresentado para sistemas descritos pela equação mestra. Esta extensão é possível, pois Schönberg mostrou a possibilidade de construção do espaço de Fock para as soluções de equações diferenciais parciais lineares no tempo. Com este procedimento, vários resultados apresentados na literatura, por vezes de forma intrincada ou “ad hoc”, podem ser apresentados de modo explícito.

Como possibilidade de desenvolvimentos futuros podemos apontar, do ponto de vista do formalismo, a construção deste método para a álgebra q -deformada, aplicável em modelos de supercondutividade, e a obtenção da representação em termos de integrais funcionais, o que seria um passo para a aplicação das técnicas perturbativas usuais. Com relação à aplicação do método aos fenômenos de transporte, é factível obter a forma do operador de evolução da equação de Fokker-Planck, o que resultaria no tratamento das equações de Langevin e de Smoluchowski. É também possível construir o operador de evolução para o processo elementar de difusão, de modo a tratar um modelo que o associe ao processo elementar de Glauber, criando uma dinâmica de reação-difusão. A expressão desses operadores em termos de férmions permite a introdução de variáveis de Grassmann e o tratamento de modelos estatísticos com modos de evolução dotados de antissimetrias, através de técnicas de perturbação correntes em teoria quântica de campos, que também merecem ser exploradas.



FERROMAGNETIC POTTS MODEL ON A HIERARCHICAL LATTICE WITH RANDOM LAYERED INTERACTIONS

P. T. MUZY and S. R. SALINAS

*Instituto de Física, Universidade de São Paulo,
Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, SP Brazil*

Received 13 January 1999

We analyze the critical behavior of a q -state Potts model with correlated disordered ferromagnetic exchange interactions along the layers of a diamond hierarchical lattice. For a special class of weakly disordered distributions, we use the topological properties of the lattice to write a set of recursion relations for the moments of the probability distribution of the interaction parameters. We identify a small parameter, $q - q_0$, where $q_0 = 0.537\dots$, to expand and decouple the recursion relations. For $q < q_0$, there is just a trivial stable fixed point, associated with the critical behavior of the uniform model. For $q > q_0$ (that corresponds, in a uniform case, to a specific heat critical exponent $\alpha > -2$), the existence of a stable disordered fixed point indicates a change in the critical behavior. We make some remarks on the validity of the Harris criterion for hierarchical lattices.

1. Introduction

In a recent publication, Magalhães, Salinas and Tsallis (MST) investigated the critical behavior of the q -state Potts model on a diamond hierarchical lattice with a distribution of layered ferromagnetic exchange interactions according to some two-letter substitutional sequences.¹ Taking advantage of the hierarchical structure of the lattice and along the lines of a previous work for the Ising model,² it has been possible to establish an exact criterion to gauge the relevance of the geometric fluctuations of the (ferromagnetic) exchange interactions. In particular, if the interactions are chosen according to the period-doubling sequence, $A \rightarrow AB$ and $B \rightarrow AA$, for $q > q_a = 4 + 2\sqrt{2}$, the critical behavior is changed with respect to the uniform model. As the specific heat exponent α_u is positive for the uniform model with $q > q_a$, this condition is identical to the well known Harris criterion³ for the relevance of disorder fluctuations in spin models on a Bravais lattice.⁴

Using the hierarchical character of the structure and within a controlled “weak disorder” approximation, Derrida and Gardner (DG) analyzed a ferromagnetic Potts model on the diamond lattice with fully disordered exchange interactions.⁵ Also, the critical behavior changes (with respect to the uniform case) for $q > q_a =$

$4 + 2\sqrt{2}$ (that is, $\alpha_u > 0$), in presumed agreement with an application of the heuristic Harris criterion. In fact, Derrida, Dickinson and Yeomans,⁶ claim that the Harris criterion (relevance of disorder for uniform models with $\alpha_u > 0$) should work for spin models on much more general hierarchical structures.

It is certainly interesting to investigate the connections between the work of MST, for an aperiodic distribution of exchange interactions and the work of DG, for disordered exchange interactions. In particular, it is peculiar to detect a change in critical behavior for $\alpha_u > 0$ in both cases. In the work of MST, the geometrical fluctuations are taken along the bonds of the diamond hierarchical lattice (in analogy with a layered structure on a Bravais lattice). Therefore, to make a closer contact between these calculations, we investigate a layered disordered model. We consider only two (instead of four) independent random exchange variables on the bonds of the unit diamond cell. In a certain sense, we mimic, on the diamond hierarchical lattice, the well known work of McCoy and Wu⁷ for a layered disordered Ising model on a square lattice.

In Sec. 2, we give some definitions and review some thermodynamic properties of the uniform ferromagnetic q -state Potts model on the diamond hierarchical lattice. As it is well known, the exact recursion relations for these hierarchical lattices correspond to the approximate Migdal-Kadanoff real-space renormalization-group recursion relations on a Bravais lattice.⁸ Several properties of spin models on these hierarchical structures, including proofs for the existence of the thermodynamic limit and the convexity of the free energy, have been published in a series of papers of Griffiths and Kaufman.⁹ In Sec. 3, we define the random layered model and write recursion relations between successive lattice generations. The quenched average over disorder produces a set of (very complicated) coupled equations for all moments of the distribution of the coupling constants. The controlled "weak disorder" approximation of DG is introduced in Sec. 4 to decouple this system of equations. We show the existence of a small parameter of expansion, $\lambda \propto q - q_0$, where $q_0 = (-2^{14/4} + 2^{11/4} + 2^{9/4})(2^{3/4} - 1)^{-3} = 0.53732 \dots$ corresponds to $\alpha_u = -2$ for the associated uniform model. To lowest order in λ , there is a trivial fixed point (associated with the critical behavior of the uniform model) and a novel fixed point associated with disorder. In Sec. 5, we analyze the stability of these fixed points to determine the critical behavior. For $q > q_0$, the trivial fixed point becomes unstable, the critical behavior being determined by the new (disordered) fixed point. Some conclusions are presented in Sec. 6. In particular, the standard formulation of the Harris criterion (relevance of disorder for $\alpha_u > 0$) is not applicable to the disordered layered model. We show that this is compatible with a different interpretation of the work of Derrida, Dickinson and Yeomans.⁶ The previous identification between the results of MST, for the aperiodic period-doubling sequence and DG, for the fully disordered model, is just a coincidence related to similar forms of the recursion relations in the neighborhood of the fixed point.

2. The Uniform Potts Model on the Diamond Lattice

The successive generations of the diamond hierarchical lattice are obtained from the substitution of an existing bond in the previous generation by four new bonds in the next generation. In Fig. 1 we show some stages of this construction.

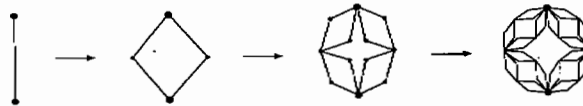


Fig. 1. Some stages of the construction of the diamond hierarchical lattice.

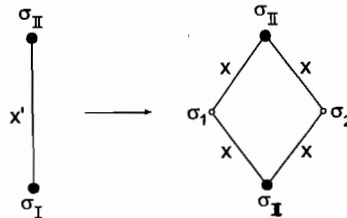


Fig. 2. Graphical representation of the recursion relation between two successive generations of the lattice.

Consider the Hamiltonian of the uniform ferromagnetic Potts model on the diamond hierarchical lattice,

$$\mathcal{H}_u = -J \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \tag{1}$$

where $J > 0$, the sum is over nearest-neighbor sites, the spin variables σ_i assume q values, $1, 2, 3, \dots, q$ and $\delta_{\sigma_i \sigma_j}$ is a Kronecker delta. At a generation of order n , the partition function is given by

$$Z_n(x) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[\beta J \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i \sigma_j} \right], \tag{2}$$

where $x = \exp(\beta J)$ and β is the inverse of the absolute temperature.

Now we write recursion relations between successive generations of the hierarchical lattice (see Fig. 2). Summing over the intermediate spin variables, σ_1 and σ_2 , we have

$$x' = \mathcal{R}_u(x) = \left(\frac{x^2 + q - 1}{2x + q - 2} \right)^2. \tag{3}$$

and

$$Z_n(x) = Z_{n-1}(x') [A(x)]^{4^{n-2}}, \tag{4}$$

400 *P. T. Muzy & S. R. Salinas*

where

$$A(x) = (2x + q - 2)^2, \quad (5)$$

for $n = 1, 2, 3, \dots$.

Introducing the definition of the reduced free energy per bond of the n th generation,

$$f_n(x) = \frac{1}{4^{n-1}} \ln Z_n(x), \quad (6)$$

we have

$$f_n(x) = g(x) + \frac{1}{4} f_{n-1}(x'), \quad (7)$$

with

$$g(x) = \frac{1}{2} \ln(2x + q - 2). \quad (8)$$

Therefore, we write the series solution

$$f_N(x) = \sum_{n=0}^N \frac{1}{4^n} g[\mathcal{R}_u^{(n)}(x)], \quad (9)$$

where $\mathcal{R}_u^{(n)}(x)$ is the n th iterate of the recursion relations. In the thermodynamic limit,

$$f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[g(x) + \frac{1}{4} f_{n-1}(x') \right], \quad (10)$$

we can write

$$f(x) = g(x) + \frac{1}{4} f[\mathcal{R}_u(x)] = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{4^i} g[\mathcal{R}_u^{(i)}(x)]. \quad (11)$$

The critical exponent associated with the specific heat comes from an analysis of this free energy. In the neighborhood of the critical point, the asymptotic form of the singular part of the free energy is supposed to behave as

$$f_{\text{sg}}(x) \sim |x - x_c|^{2-\alpha}, \quad (12)$$

where x_c is given by the fixed point of the recursion relation (3),

$$x_c = \left(\frac{x_c^2 + q - 1}{2x_c + q - 2} \right)^2, \quad (13)$$

which may also be written as

$$q = q(x_c) = (\sqrt{x_c} - 1)(x_c - 1). \quad (14)$$

Inserting the asymptotic expression for the free energy into Eq. (11), we have the critical exponent

$$\alpha = 2 - \frac{\ln 4}{\ln(d\mathcal{R}_u(x)/dx)_{x=x_c}}, \quad (15)$$

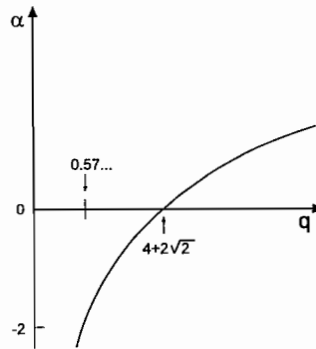


Fig. 3. Critical exponent α versus number of states q for a uniform ferromagnetic Potts model on the diamond lattice.

where

$$\left(\frac{d\mathcal{R}_u(x)}{dx}\right)_{x=x_c} = \frac{4x_c}{(\sqrt{x_c} + 1)^2}. \tag{16}$$

If $\alpha = 0$, we have $x_c = x_c(q_a) = 3 + 2\sqrt{2} \simeq 5.82842\dots$, and $q = q_a = 4 + 2\sqrt{2} = 6.82842\dots$. Therefore, α is positive for a ferromagnetic Potts model on a diamond lattice with $q > q_a = 4 + 2\sqrt{2}$ states. In Fig. 3, we show a graph of the critical exponent α of the uniform ferromagnetic Potts model on the diamond lattice in terms of the number of states q .

3. The Random Layered Model

The fully disordered ferromagnetic Potts model is given by the spin Hamiltonian

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \tag{17}$$

where $\{J_{ij} > 0\}$ is a set of independent and identically distributed random variables on the bonds of the hierarchical diamond lattice. In the random layered model under consideration, as illustrated in Fig. 4, disorder is restricted to the “layers” of the diamond lattice. In this layered model, there are just two independent random variables associated with each unit cell.

The recursion relations for the random layered model are given by the stochastic equation

$$x_n = \mathcal{R}(x_{n-1}^{(1)}, x_{n-1}^{(2)}; q) = \left(\frac{x_{n-1}^{(1)} x_{n-1}^{(2)} + q - 1}{x_{n-1}^{(1)} + x_{n-1}^{(2)} + q - 2} \right)^2, \tag{18}$$

where the interaction parameter x_n depends on $x_{n-1}^{(1)}$ and $x_{n-1}^{(2)}$ (in the fully disordered case, x_n depends on four interaction parameters, $x_{n-1}^{(i)}$ for $i = 1, \dots, 4$).

402 P. T. Muzy & S. R. Salinas

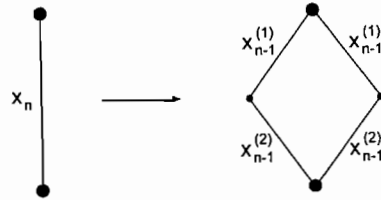


Fig. 4. Graphical illustration of the recursion relations for the layered disordered Potts ferromagnet on the diamond lattice.

Now we perform a (quenched) average over disorder,

$$\langle x_n \rangle = \left\langle \left(\frac{x_{n-1}^{(1)} x_{n-1}^{(2)} + q - 1}{x_{n-1}^{(1)} + x_{n-1}^{(2)} + q - 2} \right)^2 \right\rangle. \quad (19)$$

As in the fully disordered case, the first moment, $\langle x_n \rangle$, depends on $\langle x_{n-1} \rangle$ and on the higher-order moments, $\langle x_{n-1}^2 \rangle, \langle x_{n-1}^3 \rangle, \dots$. Therefore, we have to deal with a set of coupled equations for all moments of the distribution. The weak disorder approximation of Derrida and Gardner⁵ is designed to provide a controlled way of decoupling this hierarchy of equations.

To perform the weak disorder expansion, we introduce the notation

$$x_n = x_c + \epsilon_n, \quad (20)$$

and

$$x_{n-1}^{(i)} = x_c + \epsilon_{n-1}^{(i)}, \quad (21)$$

for $i = 1, 2$, where x_c is the critical point of the uniform model, given by Eq. (13). We thus have

$$\epsilon_n = -x_n + \frac{A^2}{B^2} \left[\frac{(1 + C_1)}{(1 + C_2)} \right]^2 \quad (22)$$

with

$$A = x_c^2 + q - 1 = \frac{\sqrt{x_c}(1 - x_c)^2}{\sqrt{x_c} - 1}, \quad (23)$$

$$B = 2x_c + q - 2 = \frac{(1 - x_c)^2}{\sqrt{x_c} - 1}, \quad (24)$$

$$C_1 = \frac{x_c}{A} (\epsilon_{n-1}^{(1)} + \epsilon_{n-1}^{(2)}) + \frac{1}{A} \epsilon_{n-1}^{(1)} \epsilon_{n-1}^{(2)}, \quad (25)$$

and

$$C_2 = \frac{1}{B} (\epsilon_{n-1}^{(1)} + \epsilon_{n-1}^{(2)}), \quad (26)$$

where $x_c = A^2/B^2$.

Now we perform an expansion of the deviations ϵ_n up to terms of fourth order in $\epsilon_{n-1}^{(1)}$ and $\epsilon_{n-1}^{(2)}$,

$$\begin{aligned} \epsilon_n = & a[(\epsilon_{n-1}^{(1)})^4 + (\epsilon_{n-1}^{(2)})^4] + b[(\epsilon_{n-1}^{(1)})^3\epsilon_{n-1}^{(2)} + (\epsilon_{n-1}^{(2)})^3\epsilon_{n-1}^{(1)}] \\ & + c[(\epsilon_{n-1}^{(1)})^2(\epsilon_{n-1}^{(2)})^2] + k[(\epsilon_{n-1}^{(1)})^3 + (\epsilon_{n-1}^{(2)})^3] \\ & + f[\epsilon_{n-1}^{(2)}(\epsilon_{n-1}^{(1)})^2 + \epsilon_{n-1}^{(1)}(\epsilon_{n-1}^{(2)})^2] + m[(\epsilon_{n-1}^{(1)})^2 + (\epsilon_{n-1}^{(2)})^2] \\ & + e[\epsilon_{n-1}^{(1)}\epsilon_{n-1}^{(2)}] + r[\epsilon_{n-1}^{(1)} + \epsilon_{n-1}^{(2)}] + \dots, \end{aligned} \quad (27)$$

where

$$a = x_c \left(\frac{5}{B^4} - \frac{8}{AB^3} + \frac{3x_c^2}{A^2B^2} \right), \quad (28)$$

$$b = x_c \left(\frac{32x_c}{AB^3} + \frac{12}{A^2B^2} + \frac{6}{AB^2} + \frac{20}{B^4} - \frac{4x_c}{A^2B} \right), \quad (29)$$

$$c = x_c \left(\frac{30}{B^4} - \frac{48x_c}{AB^3} + \frac{18x_c^2}{A^2B^2} + \frac{12}{AB^2} + \frac{1}{A^2} - \frac{8x_c}{A^2B} \right), \quad (30)$$

$$k = x_c \left(\frac{6x_c}{AB^2} - \frac{4}{B^3} - \frac{2x_c^2}{A^2B} \right), \quad (31)$$

$$f = x_c \left(\frac{12}{B^3} - \frac{4}{AB} + \frac{18x_c}{AB^2} + \frac{2x_c}{A^2} - \frac{6x_c^2}{A^2B} \right), \quad (32)$$

$$m = x_c \left(\frac{3}{B^2} - \frac{4x_c}{AB} + \frac{x_c^2}{A^2} \right), \quad (33)$$

$$e = x_c \left(\frac{6}{B^2} + \frac{2}{A} - \frac{8x_c}{AB} + \frac{2x_c^2}{A^2} \right), \quad (34)$$

$$r = x_c \left(\frac{2x_c}{A} - \frac{2}{B} \right). \quad (35)$$

4. The Weak Disorder Expansion

According to Derrida and Gardner,⁵ consider a class of distributions such that

$$\langle \epsilon^{2p-1} \rangle \sim \langle \epsilon^{2p} \rangle \sim \lambda^p, \quad (36)$$

for $p = 1, 2, \dots$, where λ is a small parameter (to be determined by the properties of the model). Therefore, up to second order in λ , the hierarchical set of coupled equations for the moments is reduced to a (much simpler) set of just four equations (involving the moments up to the fourth power, $\langle \epsilon_n \rangle, \langle \epsilon_n^2 \rangle, \langle \epsilon_n^3 \rangle$ and $\langle \epsilon_n^4 \rangle$).

Taking into account that

$$\langle \epsilon_{n-1}^{(1)} \rangle = \langle \epsilon_{n-1}^{(2)} \rangle = \langle \epsilon_{n-1} \rangle \sim \lambda, \quad (37)$$

$$\langle \epsilon_{n-1}^{(1)} \epsilon_{n-1}^{(2)} \rangle = \langle \epsilon_{n-1}^{(1)} \rangle \langle \epsilon_{n-1}^{(2)} \rangle = \langle \epsilon_{n-1} \rangle^2 \sim \lambda^2, \quad (38)$$

404 *P. T. Muzy & S. R. Salinas*

and

$$\langle (\epsilon_{n-1}^{(i)})^2 \rangle = \langle (\epsilon_{n-1})^2 \rangle \sim \lambda, \quad (39)$$

it is easy to use Eq. (27) to write the recursion relations

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_n \rangle &= 2a \langle \epsilon_{n-1}^4 \rangle + 2k \langle \epsilon_{n-1}^3 \rangle + c \langle (\epsilon_{n-1}^2) \rangle^2 + 2m \langle \epsilon_{n-1}^2 \rangle \\ &\quad + 2f \langle \epsilon_{n-1}^2 \rangle \langle \epsilon_{n-1} \rangle + e \langle (\epsilon_{n-1}) \rangle^2 + 2r \langle \epsilon_{n-1} \rangle, \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_n^2 \rangle &= (4rk + 2m^2) \langle \epsilon_{n-1}^4 \rangle + 4rm \langle \epsilon_{n-1}^3 \rangle + (2m^2 + 4fr + e^2) \langle (\epsilon_{n-1}^2) \rangle^2 \\ &\quad + 2r^2 \langle \epsilon_{n-1}^2 \rangle + 4r(m + e) \langle \epsilon_{n-1}^2 \rangle \langle \epsilon_{n-1} \rangle + 2r^2 \langle (\epsilon_{n-1}) \rangle^2, \end{aligned} \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_n^3 \rangle &= 6r^2 m \langle \epsilon_{n-1}^4 \rangle + 2r^3 \langle \epsilon_{n-1}^3 \rangle + 6r^2(m + e) \langle (\epsilon_{n-1}^2) \rangle^2 \\ &\quad + 6r^3 \langle \epsilon_{n-1}^2 \rangle \langle \epsilon_{n-1} \rangle, \end{aligned} \quad (42)$$

and

$$\langle \epsilon_n^4 \rangle = 2r^4 \langle \epsilon_{n-1}^4 \rangle + 6r^4 \langle (\epsilon_{n-1}^2) \rangle^2, \quad (43)$$

up to second order in the small parameter λ . Eqs. (40)–(43) are the decoupled set of four equations produced by the weak disorder approximation (up to the second order in the small parameter λ).

It is easy to see that there is always a trivial fixed point,

$$\langle \epsilon \rangle = \langle \epsilon^2 \rangle = \langle \epsilon^3 \rangle = \langle \epsilon^4 \rangle = 0, \quad (44)$$

associated with the critical behavior of the uniform model (disorder is irrelevant in this case).

To search for the existence of a nontrivial fixed point, associated with disorder, we consider the diagonal form, to first order in λ , of Eq. (41) for the second moment,

$$\langle \epsilon_n^2 \rangle = 2r^2 \langle \epsilon_{n-1}^2 \rangle. \quad (45)$$

From this equation, we see that there may exist a nontrivial fixed point (that is, with $\langle \epsilon^2 \rangle \neq 0$) for

$$2r^2 = 2x_c^2 \left(\frac{2x_c}{A} - \frac{2}{B} \right)^2 = 1, \quad (46)$$

up to terms of order $\lambda^0 = 1$. Let us write $r = r_0 + O(\lambda)$ and $x_c = x_{c0} + O(\lambda)$. Then

$$x_{c0} = \left(\frac{1}{2^{3/4} - 1} \right)^2 = 2.15127\dots, \quad (47)$$

that leads to

$$q_0 = q(x_{c0}) = \frac{-2^{14/4} + 2^{11/4} + 2^{9/4}}{(2^{3/4} - 1)^3} = 0.53732\dots, \quad (48)$$

and

$$\alpha_0 = 2 - \frac{\ln 4}{\ln[4x_{c0}/(\sqrt{x_{c0}} + 1)^2]} = -2. \quad (49)$$

The standard form of Harris criterion for a Bravais lattice, in which $\alpha = 0$ defines the borderline for relevance of disorder, still works for the fully disordered model of Derrida and Gardner, but does not work in the present case. In fact, for $\alpha = 0$ we have $x_c(q_a) = 3 + \sqrt{2}$, with $q_a = 4 + 2\sqrt{2}$ and $2r^2 \neq 1$, which precludes the existence of a nontrivial fixed point.

Consider the behavior of a q -state Potts model in the neighborhood of $q = q_0$ (that is, such that x_c is in the neighborhood of x_{c0}). To work with an expansion around q_0 , it is natural to choose a small parameter λ given by

$$\lambda = \Delta x_c = x_c(q) - x_{c0} = x_c(q) - \left(\frac{1}{2^{3/4} - 1}\right)^2. \tag{50}$$

As we are keeping terms up to order λ^2 , coefficients m and r in Eqs. (40) and (41) have to be written up to terms of order Δx_c ,

$$m = -0.19088 \dots + (0.19865 \dots)\Delta x_c, \tag{51}$$

$$r = \frac{\sqrt{2}}{2} + (0.13325 \dots)\Delta x_c. \tag{52}$$

The remaining coefficients are written to order zero, $a = -0.00925 \dots + O(\Delta x_c)$, $b = O(\Delta x_c)$, $c = 0.08548 \dots + O(\Delta x_c)$, $f = -0.05370 \dots + O(\Delta x_c)$, $k = 0.04675 + O(\Delta x_c)$ and $e = 0.65111 \dots + O(\Delta x_c)$.

Now it is straightforward to show that, to lowest order in Δx_c , there is indeed a nontrivial fixed point given by

$$\langle \epsilon \rangle = -12.80510 \dots \Delta x_c, \tag{53}$$

$$\langle \epsilon^2 \rangle = -13.89309 \dots \Delta x_c, \tag{54}$$

$$\langle \epsilon^3 \rangle = 1066.31430 \dots (\Delta x_c)^2, \tag{55}$$

and

$$\langle \epsilon^4 \rangle = 579.05395 \dots (\Delta x_c)^2. \tag{56}$$

5. Analysis of the Critical Behavior

The linear form of the recursion relations around the fixed points is written in terms of the matrix

$$\mathbf{M}_{rs} = \frac{\partial \langle \epsilon_n^r \rangle}{\partial \langle \epsilon_{n-1}^s \rangle}. \tag{57}$$

In the neighborhood of the trivial fixed point, to lowest order in $\lambda = \Delta x_c$, we have

$$\mathbf{M}^{(u)} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} + c_1 \Delta x_c & c_2 + c'_2 \Delta x_c & c_4 & c_5 \\ 0 & 1 + c_3 \Delta x_c & c_6 & c_7 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}/2 & c_8 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{58}$$

406 *P. T. Muzy & S. R. Salinas*

where the superscript u refers to the critical behavior of the uniform model, and $c_1 = 0.26650\dots$, $c_2 = -0.38177\dots$, $c'_2 = 0.39278\dots$, $c_3 = 0.37688\dots$, $c_4 = -0.09351\dots$, $c_5 = -0.01851\dots$, $c_6 = -0.53991\dots$, $c_7 = 0.20512\dots$ and $c_8 = -0.57266\dots$. The eigenvalues of this matrix are given by

$$\lambda_1^{(u)} = \sqrt{2} + (0.26650\dots)\Delta x_c, \quad (59)$$

$$\lambda_2^{(u)} = 1 + (0.37688\dots)\Delta x_c, \quad (60)$$

$$\lambda_3^{(u)} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad \lambda_4^{(u)} = \frac{1}{2}.$$

Therefore, $\lambda_1^{(u)} > 1$, where $\lambda_1^{(u)}$ corresponds to the usual relevant thermal operator of the uniform model; as $0 < \lambda_3^{(u)}, \lambda_4^{(u)} < 1$, the eigenvalues $\lambda_3^{(u)}$ and $\lambda_4^{(u)}$ are associated with irrelevant terms. For $\Delta x_c < 0$, as $0 < \lambda_2^{(u)} < 1$, the trivial fixed point is unstable along a single direction (and the critical behavior is the same as in the uniform case). For $\Delta x_c > 0$ (which corresponds to $q > q_0$ and $\alpha > -2$), the second eigenvalue is larger than unit ($\lambda_2^{(u)} > 1$); the trivial fixed point is unstable along two directions and has to be ruled out.

In the neighborhood of the nontrivial fixed point, we have

$$\mathbf{M}^{(r)} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} + m_1\Delta x_c & 2b + m_2\Delta x_c & 2d & s \\ m_3\Delta x_c & 1 + m_4\Delta x_c & 2\sqrt{2}b & 2(b^2 + \sqrt{2}d) \\ m_5\Delta x_c & m_6\Delta x_c & \sqrt{2}/2 & 3b \\ 0 & m_7\Delta x_c & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad (61)$$

where $m_1 = -14.91809\dots$, $m_2 = -0.60275\dots$, $m_3 = -43.69748\dots$, $m_4 = -25.88066\dots$, $m_5 = -29.47169\dots$, $m_6 = -65.53263\dots$, $m_7 = -41.67927\dots$, $d = 0.04675\dots$, $b = -0.19088\dots$ and $s = -0.01851\dots$. The eigenvalues of this matrix are given by

$$\lambda_1^{(r)} = \sqrt{2} + (0.71885\dots)\Delta x_c, \quad (62)$$

$$\lambda_2^{(r)} = 1 - (0.37689\dots)\Delta x_c, \quad (63)$$

$$\lambda_3^{(r)} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \quad \lambda_4^{(r)} = \frac{1}{2}. \quad (64)$$

The second eigenvalue gives qualitatively different results with respect to the uniform case. For $\Delta x_c < 0$, this fixed point is unstable along two directions (therefore, the uniform fixed point is physically acceptable). For $\Delta x_c > 0$ (that is, $\alpha > -2$), the instability along a single direction indicates that it should be the only physically acceptable fixed point. However, from Eq. (54), we see that the second moment turns out to be negative for $\Delta x_c > 0$, which may preclude reaching this nontrivial fixed point from physically acceptable initial conditions in parameter space.

From this analysis, we see that the parameter Δx_c controls the relevance of disorder. For $\Delta x_c < 0$ (which corresponds to $\alpha < -2$), the random layered model displays the same critical behavior of its uniform counterpart. For $\Delta x_c > 0$ (which corresponds to $\alpha > -2$), there is a new characteristic critical behavior of the random layered model.

In the neighborhood of the critical point, the singular part of the free energy may be written in the scaling form

$$f_{sg} = \frac{1}{4} f_{sg}(\lambda_1 \mu_1, \lambda_2 \mu_2), \tag{65}$$

from which we have

$$f_{sg} = \mu_1^{1/y_1} f_{sg} \left(1, \frac{\mu_2}{\mu_1^{y_2/y_1}} \right) = \mu_1^{2-\alpha} F \left(\frac{\mu_2}{\mu_1^\phi} \right), \tag{66}$$

with $y_j = (\ln \lambda_j)/(\ln 4)$, where λ_j , for $j = 1, 2$ are the two largest eigenvalue of the linearization matrix M . Thus, we have the critical exponent associated with the specific heat,

$$\alpha = 2 - \frac{\ln 4}{\ln \lambda_1}, \tag{67}$$

and the crossover exponent,

$$\phi = \frac{\ln \lambda_2}{\ln \lambda_1}. \tag{68}$$

To lowest order in Δx_c , it is straightforward to show that

$$\alpha_u = -2 + (2.17493 \dots) \Delta x_c, \tag{69}$$

$$\phi_u = (1.08747 \dots) \Delta x_c, \tag{70}$$

for the uniform fixed point and

$$\alpha_r = -2 + (5.8661 \dots) \Delta x_c, \tag{71}$$

$$\phi_r = -(1.08747 \dots) \Delta x_c, \tag{72}$$

for the random fixed point, which confirms the relevance of disorder for $\Delta x_c > 0$.

6. Conclusions

According to the Harris criterion,³ disorder changes the critical behavior of spin systems if the specific heat exponent of the associated uniform model is positive (otherwise, the critical behavior remains unchanged). Derrida and Gardner⁵ confirmed this criterion for the fully disordered ferromagnetic Potts model on a hierarchical diamond lattice. In a subsequent paper, Derrida, Dickinson and Yeomans⁶ claim that the Harris criterion works for all hierarchical lattices in which the bonds of an elementary cluster play symmetric roles in the recursion relation (that is, in the presence of symmetric recursion relations). The random layered model in this

paper does display symmetric recursion relations, but does not obey the standard form of the Harris criterion.

Within the scheme of the weak disorder approximation, the symmetric recursion relations for the layered q -state Potts model under consideration were expanded about the small parameter $\lambda \propto q - q_0$, where $q_0 = (-2^{14/4} + 2^{11/4} + 2^{9/4})(2^{3/4} - 1)^{-3} = 0.53732 \dots$ (that corresponds to a uniform model with specific heat exponent $\alpha = -2$). To lowest order in λ , there is a trivial fixed point associated with the critical behavior of the uniform model (and physically acceptable for $\alpha < -2$). There is also a novel fixed point associated with disorder (and with adequate stability requirements for $\alpha > -2$). Therefore, the previous identification between the results of MST, for the aperiodic period-doubling sequence and DG, for the fully disordered model, is just a coincidence related to similar forms of the recursion relations in the neighborhood of the fixed point.

To make contact with the arguments of Derrida, Dickinson and Yeomans,⁶ let us write

$$[\mathcal{R}'(x)]_{x_c} = \left(\frac{d\mathcal{R}(x)}{dx} \right)_{x=x_c} = \sum_{i=1}^{n'} a_i, \quad (73)$$

where n' is the number of independent exchange variables (that is, the number of independent random bonds of the unit cell), and

$$a_i = \left[\frac{\partial \mathcal{R} x^{(i)}}{\partial x^{(i)}} \right]_{x_c} = a, \quad (74)$$

for all models with symmetric recursion relations.

For the random layered model on the diamond lattice, we have

$$[\mathcal{R}'(x)]_{x_c} = \sum_{i=1}^2 a_i = 2a. \quad (75)$$

From the diagonal term of Eq. (40), we make the identification $2a = 2r$. According to Eq. (46), which is required to produce a nontrivial fixed point, we have $2r^2 = 1$, which yields $a = \sqrt{2}/2$. Inserting into the expression for the exponent associated with specific heat, given by Eq. (15), we have $\alpha = -2$. In this case, disorder will be relevant for $\alpha > -2$.

For the fully disordered model on the diamond lattice, we write

$$[\mathcal{R}'(x)]_{x_c} = \sum_{i=1}^4 a_i = 4a. \quad (76)$$

Again, we can make the identification $a = r$. Now, the condition to produce a nontrivial fixed point is written as $4r^2 = 1$. Therefore $a = 1/2$ and $\alpha = 0$. In the case of this fully disordered model, disorder will be relevant for $\alpha > 0$, in accordance with the usual form the Harris criterion for a Bravais lattice.

Besides the symmetric form of the recursion relations with respect to the random exchange variables, an equal number of bonds and of random independent

variables in each unit cell of the hierarchical structure is also required to assure the validity of the standard form of the Harris criterion. The relevance of disorder can be established from an inspection of the diagonal forms of the recursion relations for the moments of the distribution of exchange variables.

References

1. A. C. N. de Magalhães, S. R. Salinas and C. Tsallis, *J. Phys. Math. Gen.* **A31**, L567 (1998).
2. S. T. R. Pinho, T. A. S. Haddad and S. R. Salinas, *Braz. J. Phys.* **27**, 567 (1997); *Physica* **A257**, 515 (1998).
3. A. B. Harris, *J. Phys. Solid State Phys.* **C7**, 1671 (1974).
4. J. M. Luck, *Europhys. Lett.* **24**, 359 (1993).
5. B. Derrida and E. Gardner, *J. Phys. Math. Gen.* **A17**, 3223 (1984).
6. B. Derrida, H. Dickinson and J. Yeomans, *J. Phys. Math. Gen.* **A18**, L53 (1985).
7. B. M. McCoy and T. T. Wu, *Phys. Rev.* **176**, 631 (1968).
8. A. N. Berker and S. Ostlund, *J. Phys. Solid State Phys.* **C12**, 4961 (1979).
9. M. Kaufman and R. B. Griffiths, *Phys. Rev.* **B24**, 496 (1981); R. B. Griffiths and M. Kaufman, *Phys. Rev.* **B26**, 5022 (1982).