UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

ESTUDO DAS PROPRIEDADES LOCAIS DE SISTEMAS DE SPINS CLÁSSICOS NA REDE DE BETHE

Pedro Luiz Christiano

OK

[redacted]

Tese apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, para obtenção do título de Doutor em Ciências (Física Básica)

Orientador : Prof. Dr. SYLVIO GOULART ROSA JR.

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - 1985

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE _____

Pedro Luiz Christiano

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 21 DE *junho* DE 1985.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. *Sylvio Goulart Rosa Junior* - Orientador

Dr. *Roberto Nicolau Onody*

Dr. *Valério Kurak*

Dr. *Francisco Castilho Alcaraz*

Dr. *Silvio Roberto Azevedo Salinas*

À minha esposa Beth e aos nossos filhos Daniel e Lucas. Deles recebi o carinho, a compreensão e a dedicação que tornaram possíveis a realização desta tese.

Agradeço ,

a meus pais, pelo sacrifício que fizeram para que eu pudesse completar meus estudos e pelo amor e carinho com que me educaram;

ao Sylvio, pela dedicação e entusiasmo com que me orientou e, sobretudo, pela competência e capacidade demonstradas durante a realização deste trabalho;

ao Lidério, pelas proveitosas discussões e pela amizade;

ao Prof. Ulisses e ao Luiz Nunes pela qualidade excepcional de suas aulas;

a todos meus amigos, pelo apoio, estímulo e amizade;

ao Geraldo Catarino e ao José A. Lopes da Rocha pela rapidez com que confeccionaram as figuras deste trabalho;

ao Valdecir e ao Valdir, profissionais competentes e dedicados, que muito me ajudaram;

à Marli, pela eficiência com que datilografou esta tese;

à CAPES pelo suporte financeiro, ao IFQSC pela acolhida e ao Departamento de Física da UFPB que viabilizou minha vinda à São Carlos.

RESUMO

Neste trabalho um novo formalismo é desenvolvido para o estudo de sistemas de spins clássicos com interações regulares ou aleatórias na rede de Bethe. Esse novo formalismo consiste essencialmente na introdução de um spin fantasma cujas interações com os spins da superfície da rede simulam um campo magnético externo. Com a introdução do spin fantasma e das ligações que representam sua interação com os spins da superfície, a árvore de Cayley é transformada na árvore de Cayley fechada assimétrica. A estrutura hierárquica dessa última permite então a aplicação das técnicas do grupo de renormalização no espaço real na determinação das propriedades locais de sistemas de spins. Neste trabalho são estudados os modelos de Ising, Potts e Ashkin-Teller com interações regulares e aleatórias com ênfase na determinação de seus diagramas de fases.

Os diagramas de fases dos sistemas regulares são determinados do estudo das propriedades dos atratores de um mapeamento que relaciona a magnetização no topo de uma rede com s+1 camadas com a mesma quantidade em uma rede com uma camada a menos.

No caso de sistemas aleatórios esse mapeamento é escrito em termos da média e da variância das distribuições de probabilidades dos campos externos efetivos que atuam nos topos dessas redes. Para o vidro de spin de Ising, esse mapeamento reproduz as equações de Sherrington e Kirkpatrick. Nos demais modelos os mapeamentos obtidos correspondem a generalizações dessas equações. A simplicidade técnica e conceitual do formalismo desenvolvido, possibilita a derivação de equações de Thouless, Anderson e Palmer generalizadas para os vidros de spin de Potts e Ashkin-Teller.

Finalmente, é apresentado um procedimento direto e algébricamente fácil para a obtenção da energia interna de todos esses sistemas.

ABSTRACT

In this thesis the Ising, the Potts and the Ashkin-Teller models, with random or regular interactions, on a Bethe lattice, are studied using a new formalism. The formalism is essentially based in the introduction of a ghost spin whose interactions with the spins in the surface mimick an external magnetic field. The presence of the bonds associated with these interactions transforms the Cayley tree into the asymetric closed Cayley tree. The hierarchical structure of this latter tree enables one to use the real space renormalization group techniques in the determination of the properties of the systems.

The phases diagrams for regular systems are determined studing the properties of the attractors of the mapping which relates the magnetization in the tops of two trees with s+1 and s shells.

For random systems the mapping relates the means and variances of the probability distributions of the effective external magnetic fields acting in the tops of these two trees. In the particular case of the Ising spin glass this mapping gives the Sherrington-Kirkpatrick equations. In the other cases it corresponds to generalizations of these equations. The technical and conceptual simplicity of the formalism also enables one to derive the generalized Thouless, Anderson and Palmer equations for Potts and Ashkin-Teller spin glasses.

Finally a straightforward and algebrically simple procedure to derive the internal energy of all those systems is also shown.

ÍNDICE

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO 1

1.1. Teorias de Campo Médio para o Vidro de spin de Ising 2

1.1.1. A solução de TAP 7

1.2. Teorias de campo médio para os vidros de spin de Potts e Ashkin-Teller 10

1.3. Sistemas regulares 11

CAPÍTULO II - O MODELO DE ISING NA REDE DE BETHE - DESENVOLVIMENTO DO FORMALISMO 19

2.1. A Rede de Bethe 21

2.2. Aplicação das técnicas do grupo de renormalização no espaço real à rede de Bethe ... 31

2.2.1. A relação de recorrência 37

2.2.2. Outras propriedades termodinâmicas .. 48

2.3. O vidro de spin de Ising na rede de Bethe .. 53

2.3.1. Distribuição de Probabilidades Gaussiana 58

2.3.2. A equação de TAP 65

2.3.3. A energia interna 69

2.3.4. A Distribuição ±J 71

CAPÍTULO III - O MODELO DE POTTS NA ÁRVORE DE CAYLEY FECHADA .. 75

3.1. A árvore de Cayley fechada 77

3.2. O modelo de Potts regular na árvore de Cayley fechada 85

3.3. O modelo de Potts com interações aleatórias na árvore de Cayley fechada 97

3.3.1. Generalização da equação de TAP 118

3.3.2. A energia interna 121

CAPÍTULO IV - O MODELO DE ASHKIN-TELLER NA REDE DE BETHE 125

4.1. O modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular na rede de Bethe 127

4.1.1. Energia interna do modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular 143

4.2. O vidro de spin de Ashkin-Teller 149

4.2.1. Generalização das equações de TAP para o vidro de spin de Ashkin-Teller 173

4.2.2. A energia interna do vidro de spin de Ashkin-Teller 180

CAPÍTULO V - CONCLUSÃO 185

APÊNDICE A - CRITÉRIOS DE ESTABILIDADE E O EXPOENTE DE LIAPUNOV 191

APÊNDICE B - INTEGRAÇÃO NUMÉRICA 197

APÊNDICE C - O MODELO DE ASHKIN-TELLER DE ALCANCE INFINITO 205

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 225

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Diagrama de fases para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico 14

Figura 2 - Processo de construção da árvore de Cayley com razão de ramificação z=2 22

Figura 3 - A árvore de Cayley e a cadeia linear 24

Figura 4 - Transformação da árvore de Cayley aberta na árvore de Cayley fechada assimétrica 28

Figura 5 - Leis de composição para as transmissividades 32

Figura 6 - Obtenção da relação de recorrência para o modelo de Ising regular 36

Figura 7 - Relação de recorrência para o caso ferromagnético 38

Figura 8 - Relação de recorrência para a caso antiferromagnético 42

Figura 9 - Determinação da correlação entre o spin do topo e um spin da superfície 46

Figura 10 - Derivação da energia interna 52

Figura 11 - Relação de recorrência para o vidro de spin de Ising 54

Figura 12 - Diagrama de fases do vidro de spin de Ising 62

Figura 13 - Processo utilizado para a derivação da equação de TAP 64

Figura 14 - Obtenção da energia interna do vidro de spin de Ising 68

Figura 15 - Diagrama de fases do vidro de spin de Ising com distribuição ±J 72

Figura 16 - Árvore de Cayley fechada com razão de ramificação z=2 e N=4 camadas 78

Figura 17 - Leis de Composição para as transmissividades no modelo de Potts 80

Figura 18 - Aglomerados que dão origem a um mesmo mapeamento 82

Figura 19 - Equivalência entre as árvores de Cayley fechada e assimétrica decorada 84

Figura 20 - Obtenção da relação de recorrência para o modelo de Potts regular na árvore de Cayley fechada 86

Figura 21 - Relação de recorrência para o caso ferromagnético ($t=t_1t_2>0$) 88

Figura 22 - Transmissividade crítica $T_c^{(1)}$ e descontinuidade de Δ_1 em função do número de estados de Potts 90

Figura 23 - Cálculo da correlação entre o spin do topo e um spin da camada central superior 94

Figura 24 - Diagrama de fases para o modelo de Potts ferromagnético 96

Figura 25 - Relação de recorrência para o modelo de Potts antiferromagnético 98

Figura 26 - Obtenção da relação de recorrência para o modelo de Potts com interações aleatórias na árvore de Cayley fechada 100

Figura 27 - Diagrama de fases do vidro de spin de Potts com p=3 108

Figura 28 - Diagrama de fase do vidro de spin de Potts com p=6 111

Figura 29 - Evolução do atrator característico da fase aleatória 113

Figura 30 - Expoente de Liapunov como função do número de iterações 115

Figura 31 - Atrator característico da região indicada por M na figura 28 117

Figura 32 - Generalização da equação de TAP e obtenção da energia interna do vidro de spin de Potts 119

Figura 33 - Leis de composição para as transmissividades no modelo de Ashkin-Teller 130

Figura 34 - Relação de recorrência para o modelo de Ashkin-Teller regular 132

Figura 35 - Diagrama de fases do modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular 136

Figura 36 - Diagrama de fluxos nas regiões BDC (a) e CDE (b) 142

Figura 37 - Descontinuidades nos parâmetros de ordem 145

Figura 38 - Obtenção da energia interna do modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular 146

Figura 39 - Relação de recorrência para o vidro de spin de Ashkin-Teller 150

Figura 40 - Diagrama de fases de vidro de spin de Ashkin-Teller: caso particular $\tilde{K}_1=K_3^o=0$ 161

Figura 41 - Diagrama de fases do vidro de spin de Ashkin-Teller: caso particular $K_1^o=\tilde{K}_3=0$ 167

Figura 42 - Diagrama de fases do vidro de spin de Ashkin-Teller: caso particular $K_1^o=K_3^o=0$ 172

Figura 43 - Generalização da equação de TAP para o vidro de spin de Ashkin-Teller e obtenção de sua energia interna 174

Figura 44 - Gráfico da função (B.7) para A e B muito grandes 200

Figura 45 - Comparação entre os métodos de integração numérica de Gauss-Hermite e Gauss-Legendre 202

Figura 46 - Energia livre para o modelo de Ashkin-Teller de alcance infinito 209

Figura 47 - Magnetização do modelo de Ashkin-Teller em função de temperatura 211

Figura 48 - Diagrama de fases para o modelo de Ashkin-Teller de alcance infinito 213

Figura 49 - Entropia em função da temperatura 220

Figura 50 - Calor específico em função da temperatura 221

Figura 51 - Susceptibilidade magnética em função da temperatura 222

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Neste trabalho desenvolvemos um novo formalismo para o estudo de sistemas de spins na rede de Bethe[1] e o aplicamos para os modelos de Potts e Ashkin-Teller com ênfase na determinação de seus diagramas de fase.

A rede de Bethe, apesar de apresentar uma topologia bastante peculiar sendo por muitos considerada como uma pseudo-rede, tem sido largamente utilizada no estudo de problemas envolvendo sistemas de muitas partículas[2-10]. O interesse despertado por essa rede se deve principalmente às seguintes razões: em primeiro lugar, é possível obter-se soluções exatas o que, por si só, é razão mais do que suficiente para justificar sua utilização. Em segundo lugar, como foi primeiramente observado por Kurata, Kikuchi e Watari[11], a aproximação de Bethe-Peierls para o magnestismo[12-15] é exata na rede de Bethe. Essa última observação permite concluir-se então, que a solução exata de modelos de spins nessa rede corresponde à aproximação de campo efetivo de Bethe-Peierls para redes de Bravais. A idéia básica dessa aproximação, introduzida nos anos de 1935-36, é tratar exatamente as interações de um spin com seus primeiros vizinhos, substituindo os efeitos dos demais spins do sistema por um campo efetivo.

Foi exatamente esta propriedade da rede de Bethe que nos motivou a utilizá-la em nossos estudos. Dessa forma, podemos afirmar que o objetivo desse trabalho é desenvolver e aplicar a alguns exemplos um novo formalismo para a construção de teorias de campo médio para sistemas de spins.

Nessa introdução faremos uma breve recapitulação dos resultados conhecidos, o que permite uma apreciação da motivação do

nosso trabalho. Os resultados originais estão expostos nos capítulos seguintes.

1.1. Teorias de Campo Médio para o Vidro de Spin de Ising

Dentre os problemas solucionados nesse trabalho destacam-se, por sua importância, os referentes a sistemas aleatórios também chamados de vidros de spin.

O termo vidro de spin foi originalmente introduzido por Coles[16] para denotar um conjunto enorme de ligas metálicas com impurezas magnéticas substitucionais, das quais a liga AuFe é o exemplo mais clássico. Essas ligas apresentam uma fase a temperaturas muito baixas, conhecida como fase vidro de spin, na qual os momentos magnéticos se encontram aleatóriamente congelados de modo que, a magnetização líquida é nula. Nessas ligas a interação predominante entre as impurezas magnéticas é a interação de troca de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY)[17-19]. O caráter oscilatório dessa interação é considerado o responsável pela existência da fase vidro de spin[20].

Posteriormente foram descobertos inúmeros outros sistemas que apresentavam essa fase[21,22], fazendo com que o conceito de vidro de spin se tornasse muito mais abrangente. Atualmente é bastante aceita a definição de Binder[23] que classifica os vidros de spin como sistemas magnéticos nos quais as interações entre os spins estão em conflito umas com as outras devido a algum tipo de desordem temperada presente no sistema.

Do ponto de vista teórico, a exigência de que a desordem seja temperada, introduz uma dificuldade adicional no problema. Como foi demonstrado por Brout[24], a média sobre a desordem temperada deve ser efetuada na energia livre ou nos observá-

veis e não na função de partição. Para resolver esse problema Edwards e Anderson (EA)[25] numa das primeiras teorias de campo médio para os vidros de spin, utilizaram a técnica conhecida como truque das réplicas. Esse truque foi primeiramente utilizado por Kac[26] e consiste em fazer uso da identidade:

$$\ell n Z = \lim_{n \to 0} \frac{1}{n} (Z^n - 1) \tag{1.1}$$

que possibilita transformar a média sobre o logarítmo da função de partição, na média sobre a função de partição de um sistema constituído por n réplicas do sistema original não interagentes. Nesse modelo os spins são clássicos e a desordem é simulada considerando que as interações entre eles são variáveis aleatórias que obedecem a uma distribuição de probabilidades Gaussiana. Com essas suposições EA mostraram a existência de uma temperatura crítica T_g abaixo da qual os spins se encontram congelados em posições aleatórias. Além disso, foram capazes de mostrar também que a susceptibilidade magnética apresenta uma cúspide em T_g, o que é uma das características experimentais mais importantes dos vidros de spin. Esse modelo entretanto, apresenta também aspectos negativos. Dentre eles o mais importante é a previsão de uma cúspide no calor específico em T_g, o que nunca foi observado experimentalmente. Em 1975 Sherrington e Kirkpatrick (SK)[27,28] lançaram as bases da que seria, pelo menos até o momento, a mais bem sucedida teoria de campo médio para os vidros de spin. A idéia básica desses autores consiste na aplicação da teoria de EA a um sistema de spins de Ising, com a suposição adicional de que as interações entre eles têm alcance infinito.

Seguindo o exemplo de EA, no modelo de SK, as interações são aleatórias e obedecem a uma distribuição de probabilidades Gaussiana definida por:

$$P[J_{ij}] = [N/2\pi\tilde{J}^2]^{1/2} \exp[-N(J_{ij}-\tilde{J}_o/N)^2/2\tilde{J}^2] \qquad (1.2)$$

A divisão da média e da variância dessa distribuição é feita no sentido de se obter um limite termodinâmico razoável[27]. Observe que como as interações têm alcance infinito um spin qualquer é primeiro vizinho de todos os demais de modo que a Hamiltoniana para esse sistema pode ser escrita como:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \qquad (1.3)$$

onde a soma deve ser tomada sobre todos os pares de spin no sistema.

Através da utilização do truque das réplicas SK, foram capazes de efetuar a média sobre a desordem logo nos passos iniciais. Seguindo um procedimento muito semelhante ao introduzido por Kac[29] que faz uso da identidade de Hubbard-Stratonovich[30], SK obtém a seguinte expressão para a energia livre:

$$[F]_{av} = - T \lim_{N\to\infty} \lim_{n\to 0} \frac{1}{n} [\exp(\frac{Nn\,\tilde{J}^2}{4k_B T^2}) \int \{\prod_{\alpha=1}^{n} (\frac{N}{2\pi})^{1/2} dx_\alpha\} \times$$

$$\times \{\prod_{(\alpha\beta)} (N/2\pi)^{1/2} dy_{\alpha\beta}\} \{\exp(NG)-1\}] \qquad (1.4a)$$

onde:

$$G = \frac{1}{2} \sum_{(\alpha\beta)} y_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{n} x_\alpha^2 +$$

$$+ \ln \mathrm{Tr}_{\{S^\alpha\}} \exp[\beta\tilde{J} \sum_{(\alpha\beta)} y_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + (\beta\tilde{J}_o)^{1/2} \sum_{\alpha=1}^{n} x_\alpha S^\alpha]$$

$$(1.4b)$$

Nas equações (1.4), α é um índice de réplicas e

$(\alpha\beta)$ indica pares distintos de réplicas. $Tr_{\{S^\alpha\}}$ denota o traço sobre as n réplicas em um único sítio; $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann) e $[\ ]_{av}$ indica média sobre a desordem.

Para efetuar as integrais usando o método de ponto de sela, a ordem dos limites $N\to\infty$ e $n\to 0$ foi trocada.

Fazendo a hipótese que no máximo todos os x_α e todos $y_{\alpha\beta}$ são iguais ($x_\alpha = x$; $y_{\alpha\beta} = y$) obtém-se para a energia livre:

$$[F]_{av} = k_B T \{1/2\ \beta\tilde{J}_o\ m^2 - [1/2\ \beta\tilde{J}(1-q)]^2 -$$

$$- (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \exp(-x^2/2)\ \ell n\ 2\cosh(\beta\tilde{J}_o m +$$

$$+ \beta\tilde{J}q^{1/2}x)\} \qquad (1.5)$$

onde foram feitas as substituições:

$$q = y/\beta\tilde{J} \qquad (1.6a)$$

$$m = x(\beta J_o)^{-1/2} \qquad (1.6b)$$

Essa hipótese é conhecida atualmente como "ansatz" de réplicas simétricas.

Das condições de éxtremo:

$$\frac{\partial[F]_{av}}{\partial q} = 0 \quad e \quad \frac{\partial[F]_{av}}{\partial m} = 0 \qquad (1.7)$$

obtém-se as seguintes equações para m e q:

$$m = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \ e^{-x^2/2} \tanh[\beta\tilde{J}_o m + \beta\tilde{J}q^{1/2}x] \qquad (1.8a)$$

$$q = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2/2} \tanh^2[\beta\tilde{J}_o m + \beta\tilde{J}q^{1/2}x] \tag{1.8b}$$

As soluções (1.8) são conhecidas como equações de SK. O siginificado físico de m e q é determinado pelas seguintes igualdades:

$$m = [\langle Si\rangle]_{av} \tag{1.9a}$$

$$q = [\langle Si\rangle^2]_{av}. \tag{1.9b}$$

m e q são designados respectivamente parâmetros de ordem ferromagnético e de vidro de spin. Observe que um valor não nulo para q indica ordem magnética enquanto que um valor não nulo de m indica que a ordem é ferromagnética. A fase em que $m=0$ e $q\neq 0$ é então identificada como sendo a fase vidro de spin. É importante observar que as equações de SK, como pode ser facilmente verificado, não admitem uma solução do tipo antiferromagnética.

A solução de SK também sofre de um sério defeito uma vez que a baixas temperaturas obtém-se entropia negativa. SK especularam que esse comportamento não físico tinha sua origem na troca dos limites $N\to\infty$ e $n\to 0$. Posteriormente van Hemmen e Palmer[31] verificaram ser incorreta essa suposição.

Na verdade, como demonstrado por de Almeida e Thouless (AT)[32] por meio do estudo da estabilidade da solução de SK, a entropia negativa era devida à caracterização da fase vidro de spin por meio de um único parâmetro de ordem, q. Em outras palavras, AT verificaram que a solução de SK obtida a partir do "ansatz" de réplicas simétricas era instável na fase vidro de spin e mesmo na fase ferromagnética a baixas temperaturas. Dessa forma, o fato da en

tropia ser negativa quando $T \to 0$ pode ser entendido como uma consequência direta da suposta simetria entre as réplicas. Para se obter uma entropia fisicamente aceitável é necessário então a elaboração de um esquema para quebrar a simetria entre réplicas. Em termos matemáticos isso significa fazer com que o parâmetro de ordem q não seja único mas sim uma grandeza dependente das réplicas envolvidas. Como não se tinha idéia de como deveria ser essa dependência foram sugeridos muitos esquemas de quebra de simetria entre réplicas[33-43]. Dentre estes o mais bem sucedido foi proposto por Parisi em 1980 e transforma o parâmetro de ordem q em uma função q(x) com x contido no intervalo [0,1]. Resultado semelhante foi obtido por Sompolinsky[44] que estudou as propriedades estáticas do modelo de SK utilizando uma aproximação dinâmica. Nessa aproximação supôs-se que existe uma distribuição de tempos de relaxação que se tornam infinitos no limite termodinâmico. De modo a relacionar seus resultados com os obtidos por Parisi, Sompolinsky parametrizou esses tempos de relaxação em ordem decrescente por meio de um parâmetro arbitrário x contido no intervalo [0,1]. Nessa aproximação q (x) mede a autocorrelação retida no tempo t_x definida por:

$$q(x) = \left[\langle Si(0)Si(t_x)\rangle\right]_{av} \tag{1.10}$$

1.1.1. A solução de TAP

Com o intuito de obter uma entropia não negativa Thouless, Anderson e Palmer (TAP)[45] propuseram em 1978 uma nova solução, que evitava o truque das réplicas, para o modelo de SK. Utilizando expansões diagramáticas nas quais eram desprezados os diagramas que se anulavam no limite em que o número de coordenação tende ao infinito obtiveram a seguinte expressão para a ener-

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

gia livre:

$$F\{m_i\} = -N^{-1} \sum_{i<j} J_{ij}\, m_i m_j -$$

$$- \frac{1}{2} \beta N^{-1} \sum_{i<j} J_{ij}^2 (1-m_i^2)(1-m_j^2) +$$

$$+ \frac{1}{2} (\beta N)^{-1} \sum_i \{(1+m_i)\ln[1/2(1+m_i)] +$$

$$+ (1-m_i)\ln[1/2(1-m_i)]\} \qquad (1.11)$$

onde $m_i = \langle Si \rangle$ é a magnetização no sítio i. Da condição de extremo para a energia livre ($\partial F/\partial m_i = 0$) obtiveram que:

$$m_i = \tan h \left[\beta \sum_j J_{ij} m_j - \beta^2 \sum_j J_{ij}^2 (1-m_j^2) m_i\right] \qquad (1.12)$$

Essa equação é conhecida como equação de TAP e substitui a equação de campo médio usual. A interpretação física da equação de TAP é a seguinte: o argumento da tangente hiperbólica nada mais é do que o campo efetivo que atua sobre o spin localizado no sítio i. Esse campo é constituído pelo campo da cavidade ($\sum_j J_{ij}\, m_j$) - que é o campo que atua no sítio i na ausência do spin nele localizado - e pelo campo de reação de Onsager ($\beta \sum_j J_{ij}^2 (1-m_j^2) m_i$). Esse último campo é devido à polarização dos spins vizinhos ao i-ésimo sítio induzida pelo spin nele localizado. Essa polarização por sua vez altera o campo visto por esse mesmo spin. Em suma, o campo de reação de Onsager é o campo produzido sobre um sítio pela polarização do spin nele próprio localizado. Como observado por Cyrot[46], o campo de reação de Onsager desempenha um papel crucial nos vidros de spin porque nos sistemas aleatórios esse campo e o campo da cavidade são comparáveis. As seguintes propriedades de baixa temperatura do modelo foram derivadas por TAP em seu trabalho original:

i) A energia do estado fundamental calculada por TAP é ligeiramente maior do que as obtidas por EA e SK

ii) A entropia é zero em T=0

iii) O calor específico varia como T^2 e a susceptibilidade como T quando $T \to 0$

vi) A distribuição de campo efetivo $P(\xi)$ é linear nas proximidades da origem ($P(\xi) = a[\xi]$) e não constante como na distribuição Gaussiana de SK.

Como foi observado por De Dominicis et al. porém, a média com relação à desordem da equação (1.12) possui um número de soluções <Ns> que cresce exponencialmente com o número de spins no sistema:

$$\langle Ns \rangle \doteq \exp\left[NA(T)\right] \qquad (1.13)$$

onde A(T) é da ordem de 0.2 para T=0 e $A(T_g)=0$.

Essas soluções representam mínimos locais no espaço de configurações que são separados por barreiras de energia que, no limite termodinâmico, são infinitamente altas.

Esses resultados mudaram a representação conceitual dos vidros de spin. A partir deles tornou-se largamente aceita a idéia de que a superfície de energia livre de um vidro de spin apresenta muito vales, cada um deles representando um estado metaestável.

1.2. TEORIAS DE CAMPO MÉDIO PARA OS VIDROS DE SPIN DE POTTS E ASHKIN-TELLER

Pelo que foi apresentado nas secções anteriores fica claro que a elaboração de uma teoria de campo médio para o vidro de spin de Ising fez-se segundo dois dois caminhos distintos: utilizando-se ou não do truque de réplicas.

No estudo do vidro de spin de Potts tem-se tentado reproduzir esse procedimento. É claro que devido à maior complexidade desse modelo, dificuldades adicionais eram esperadas. Os primeiros trabalhos nessa área porém têm demonstrado que as dificuldades surgidas e os fatos novos encontrados têm superado em muito as expectativas, impossibilitando um entendimento claro desse sistema. De uma forma abreviada, são os seguintes os principais resultados obtidos até agora:

i) A baixas temperaturas e para $p>2$, onde p é o número de estados de Potts, o modelo de alcance infinito é sempre ferromagnético[48].

ii) Supondo-se que exista uma fase de vidro de spin a utilização do "ansatz" de réplicas simétricas indica que a transição dessa fase para a fase paramagnética deve ser de la. ordem para $p>6$ e de segunda ordem para $p<6$[48,49]. Por outro lado, a análise da estabilidade da solução paramagnética determina que a transição deve ser de la. ordem para $p>2$[49].

iii) Elderfield e Sherrington[50] demonstraram ainda que para $p\neq 2$ os efeitos de quebra de simetria entre réplicas são muito mais fortes do que para $p=2$ fazendo com que os "ansatz" de Parisi[39-43] e Sompolinsky[44] deixem de ser equivalentes para $p>4$. Nessa situação o mais adequado seria o "ansatz" de Sompolinsky.

iv) O uso do "ansatz" de réplicas simétricas juntamente com uma quebra da simetria entre os p estados de Potts dão origem a uma nova fase, denominada de fase mista. Essa é uma fase do tipo ferromagnética mas que apresenta parâmetros de ordem de vidro de spin longitudinal e transversal diferentes[51,52].

v) A generalização da abordagem de TAP para esse modelo, novamente na suposição da existência de uma fase vidro de spin, indica que a energia livre tem instabilidades nas mesmas temperaturas obtidas pela utilização do "ansatz" de réplicas simétricas. Também nesse caso prevê-se que as transições entre as fases paramagnética e vidro de spin seja de la.ordem para $p>2$[53].

Os fatos inexplicados e as contradições aqui apresentadas constituem a motivação principal para o nosso estudo desse sistema utilizando uma abordagem diferente.

No caso do vidro de spin de Ashkin-Teller não temos conhecimento de nenhum trabalho até o presente momento. Os nossos estudos apresentam os primeiros resultados sobre esse sistema.

É importante salientar também que, além das razões citadas na primeira secção dessa introdução, a utilização da rede de Bethe nestes estudos foi motivada pelo fato de que os resultados de SK e TAP para o modelo de Ising podem ser reproduzidos nessa rede como foi mostrado por Thompson[54].

1.3. SISTEMAS REGULARES

Além do estudo de sistemas aleatórios apresentamos neste trabalho uma discussão sobre os modelos de Potts e Ashkin-Teller regulares.

O modelo de Potts regular, que apresenta uma teoria

de campo médio já razoavelmente desenvolvida[55], é resolvido na árvore de Cayley fechada introduzida por Jellito. Esse modelo é utilizado também para se mostrar a correspondência entre essa árvore e a árvore de Cayley decorada.

No caso do modelo de Ashkin-Teller porém apesar de sua introdução ter se dado a mais de 40 anos sua aproximação de campo médio não foi ainda suficientemente estudada. Conhecemos apenas um artigo que trata desse problema. Nele Ditizian et al[56] consideram o modelo de Ashkin-Teller como uma superposição de dois sistemas de Ising acoplados de forma que sua Hamiltoniana é escrita como:

$$H = - \sum_{<ij>} \left[J_2(\sigma_i\sigma_j + S_i\, S_j) + J_3\sigma_i\sigma_j S_i S_j\right] \qquad (1.14)$$

onde a soma envolve todos os pares de vizinhos mais próximos na rede. σ_i e S_i são variáveis de spin de Ising e J_2 e J_3 são constantes de interação.

A partir da identificação dos campos efetivos que atuam sobre os spins σ, s e σs no sítio i, dados por:

$$h_\sigma^i = \sum_j <\sigma_j> K_2 \qquad (1.15a)$$

$$h_s^i = \sum_j <S_j> K_2 \qquad (1.15b)$$

$$h_{\sigma s}^i = \sum_j <\sigma_j s_j> K_3 \qquad (1.15c)$$

onde $K_i = \beta\, J_i$ (i= 2,3) e a soma extende-se apenas sobre os vizinhos ao sítio i, são obtidas as equações de campo médio:

$$<\sigma_i> = (\tan h\, h_\sigma^i + \tan h\, h_s^i \tan h\, h_{\sigma s}^i)/D \qquad (1.16a)$$

$$<S_i> = (\tan h\, h_s^i + \tan h\, h_\sigma^i \tan h\, h_{\sigma s}^i)/D \qquad (1.16b)$$

$$<\sigma_i S_i> = (\tan h\, h_{\sigma s}^i + \tan h\, h_\sigma^i \tan h\, h_s^i)/D \qquad (1.16c)$$

$$D = 1 + \tan h\, h_\sigma^i \tan h\, h_s^i \tan h\, h_{\sigma s}^i \qquad (1.16d)$$

Como é usual nesse tipo de aproximação pode-se construir facilmente a energia livre:

$$F = - \sum_i \ell n\, Z^i + K_2 \sum_{<ij>} (<\sigma_i><\sigma_j> + <S_i><S_j>) +$$

$$+ K_s \sum_{<ij>} <\sigma_i S_i> <\sigma_j S_j> \qquad (1.17)$$

onde

$$Z^i = 4(\cos h\, h_\sigma^i \cos h\, h_s^i \cos h\, h_{\sigma s}^i +$$

$$+ \operatorname{sen} h\, h_\sigma^i \operatorname{sen} h\, h_s^i \operatorname{sen} h_{\sigma s}^i) \qquad (1.18)$$

é a função de partição de uma única partícula sob a ação dos campos magnéticos h_σ^i, h_s^i e $h_{\sigma s}^i$.

O diagrama de fases para esse modelo, apresentado na figura 1, é então determinado pelo estudo numérico das soluções das equações de campo médio (1-16). Sempre que é encontrada mais de uma solução é escolhida aquela que minimiza (1-17).

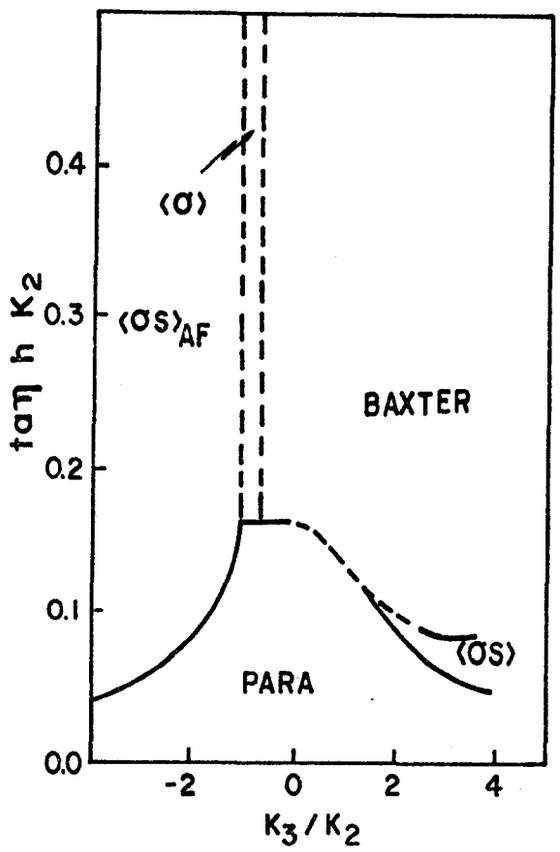


Figura 1 - Diagrama de fases para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico[56].

Por meio desse estudo foram encontradas, além da fase paramagnética na qual $\langle\sigma\rangle = \langle S\rangle = \langle\sigma S\rangle = 0$, as seguintes fases;

i) Fase de Baxter (Baxter) na qual todos os parâmetros de ordem são não nulos.

ii) Fase de Ising Ferromagnética ($\langle\sigma S\rangle$) para a qual apenas a magnetização $\langle\sigma s\rangle$ é não nula.

iii) Fase de Ising Antiferromagnética ($\langle\sigma S\rangle_{AF}$). Essa fase é a análoga à fase $\langle\sigma S\rangle$ para valores negativos de K_3 e é obtida dividindo-se a rede em duas sub-redes distintas. Nela apenas a magnetização $\langle\sigma s\rangle$ de cada sub-rede é não nula com as sub-redes a-

presentando magnetizações de sentidos contrários.

Esse diagrama apresenta ainda a fase indicada por $\langle\sigma\rangle$ na qual apenas essa magnetização é não nula ($\langle s\rangle = \langle\sigma s\rangle = 0$) e, na mesma região do diagrama, a sua equivalente com $\langle s\rangle \neq 0$ e $\langle\sigma\rangle = \langle\sigma s\rangle = 0$. É interessante observar que devido à simetria da Hamiltoniana (1.14), o aparecimento dessa fase por ser considerado como bastante surpreendente.

Em virtude do desenvolvimento incipiente da teoria de campo médio para esse modelo nós apresentamos neste trabalho duas versões dessa aproximação: a primeira delas consiste na sua solução na rede de Bethe e é apresentada no capítulo IV. Na segunda é considerada a versão de alcance infinito desse modelo e é apresentada no apêndice C.

Essa tese é dividida da seguinte forma: no Capítulo II o modelo de Ising é utilizado tanto para ilustrar algumas propriedades da rede de Bethe bem como para introduzir o formalismo por nós desenvolvido e utilizado no restante deste trabalho. Esse formalismo se baseia essencialmente na introdução de um spin fantasma cuja interação com os demais spins no sistema simula os efeitos de um campo magnético externo. Como veremos logo no início desse capítulo a presença de um campo magnético externo, atuando pelo menos nos sítios da superfície da rede, é fundamental porque sem ele os resultados obtidos nessa rede reproduzirão os da cadeia linear.Com a introdução do spin fantasma porém a árvore de Cayley é transformada na árvore de Cayley fechada assimétrica o que põe em evidência seu caráter hierárquico. Mediante a aplicação das técnicas do grupo de renormalização no espaço real - que é a ferramenta mais adequada para o tratamento desses sistemas - pode-se então determinar de uma forma matematicamente muito simples e conceitualmente bastante clara as propriedades locais de spins localizados profundamente em seu interior.

Para o modelo de Ising regular o problema torna-se quase que trivial e os principais resultados como temperatura crítica, ordem da transição, energia interna, etc... são facilmente reobtidos. Demonstra-se também, com igual simplicidade, que na situação em que o número de coordenação da rede z tende ao infinito são reproduzidos os resultados de teoria de campo médio usual.

No caso particular em que supõe-se que as interações são aleatórias o problema é um pouco mais complexo só podendo ser resolvido no limite em que $z \to \infty$. É importante salientar porém que é exatamente esse limite que mais nos interessa. Além disso, esse formalismo nos permite reobter as equações de SK e de TAP de uma maneira muito mais simples e direta do que a utilizada por Thompson[54].

No Capítulo III é utilizada uma nova rede conhecida como árvore de Cayley fechada. Essa rede foi introduzida por Jellito[57] com o intuito de obter uma conectividade menos trivial do que a da árvore de Cayley usual e utilizada por ele e posteriormente por Glasser et al[58,59] na solução do modelo de Ising. Com a utilização das técnicas do grupo de renormalização no espaço real entretanto nós mostramos logo no início desse capítulo que os resultados obtidos com ela reproduzem os que seriam obtidos com a utilização de uma árvore de Cayley decorada e mostramos ainda como, a partir desses últimos, construir os resultados para a rede de Bethe. Resolvemos então os modelos de Potts regular e aleatório generalizando para esse modelo os resultados obtidos no capítulo anterior. É interessante observar que os resultados obtidos para o vidro de spin de Potts diferem em muito dos obtidos para Ising. Em primeiro lugar, destaca-se o fato de inexistir uma fase vidro de spin no seu sentido usual para qualquer $p \neq 2$. Também, para $p \geq 6$ há o aparecimento de uma fase aleatória incrustada entre as fases ferromagnética e paramagnética.

O modelo de Ashkin-Teller regular na rede de Bethe é estudado na primeira secção do Capítulo IV. Apesar desse modelo ser muito mais complexo do que o modelo de Ising o formalismo por nós desenvolvido se mostra nesse caso igualmente poderoso. Através de sua aplicação obtém-se de forma bastante simples o diagrama de fases para esse modelo. Esse formalismo nos permite também demonstrar que, pelo menos na rede de Bethe, inexiste a fase designada por $\langle\sigma\rangle$ na referência 56. No restante, verifica-se que há uma concordância qualitativa bastante boa entre essas soluções e entre elas e a apresentada no apêndice C.

As secções restantes desse capítulo são dedicadas ao estudo do vidro de spin de Ashkin-Teller. Novamente nesse caso nos concentramos na obtenção de equações de TAP e SK generalizadas para esse modelo e a partir destas últimas na determinação de seu diagrama de fases. Devido ao número excessivo de parâmetros presentes no mapeamento porém nos limitamos neste trabalho ao estudo dos três casos particulares mais representativos.

Finalmente, no Capítulo V fazemos um resumo de nossos resultados e conclusões.

Antes de encerrarmos essa introdução queremos salientar que ao redigirmos esta tese procuramos fazê-lo de forma a proporcionar aos leitores três níveis de entendimento: o primeiro deles é proporcionado pela leitura da introdução e da conclusão deste trabalho e apresenta de forma concisa a motivação para a sua elaboração e os principais resultados obtidos. O segundo, que fornece uma visão também global mas um pouco mais profunda do trabalho, pode ser obtido da leitura da introdução de cada capítulo e das legendas das figuras neles contidas. Finalmente o último deles como é usual, requer a leitura de toda a tese e através dele pode ser obtido um entendimento mais detalhado e técnico deste trabalho.

CAPÍTULO II

O MODELO DE ISING NA REDE DE BETHE - - DESENVOLVIMENTO DO FORMALISMO

O objetivo deste capítulo é discutir os aspectos principais da rede de Bethe e desenvolver o formalismo a ser empregado no restante do trabalho. Para isso utilizaremos como exemplo o modelo de Ising uma vez que este sistema já foi bem estudado na rede de Bethe podendo ser encontrados na literatura[54,60,61] todos os resultados que aqui serão reobtidos. Na secção 2.1 apresentaremos uma maneira alternativa de se construir a árvore de Cayley que, apesar de não ser a usualmente encontrada, se mostra a mais conveniente para nosso estudo (veja figura 2). Nesta mesma secção nós mostramos também que os resultados obtidos não são reduzidos aos obtidos para a cadeia linear somente se existir um campo magnético externo atuando pelo menos sobre os spins da superfície da árvore. A introdução desse campo magnético, pode ser simulada pela interação dos spins nos sítios superficiais com um spin fantasma situado em um sítio extra não pertencente à rede original. Isso nos permite transformar a árvore de Cayley usual na árvore de Cayley fechada assimétrica da figura 4. Essa rede apresenta sobre a árvore de Cayley aberta usual a vantagem de revelar claramente a sua estrutura hierárquica tornando possível a utilização de técnicas do grupo de renormalização no espaço real no estudo de modelos de spins clássicos na árvore de Cayley.

Na secção 2.2 nós introduzimos as variáveis transmissividade térmica e sua dual[62] e apresentamos também suas regras de composição (veja figura 5). Essas regras nos permitem substituir cada aglomerado contendo spins da superfície da árvore de Cayley fechada assimétrica por uma única ligação. Esse processo de substi

tuição de ligações, conhecido como renormalização, reproduz entretanto a mesma rede mas com uma camada a menos (veja figura 6). A aplicação sucessiva desse procedimento reduz o estudo de modelos de spins nessa rede ao estudo das propriedades de um mapeamento, que no caso do modelo de Ising regular é dado pela equação (2.14). Podemos obter dessa forma a magnetização no topo da rede, a temperatura crítica e a ordem da transição. Como último tópico dessa secção apresentamos uma maneira bastante simples de se calcular a energia interna dos spins infinitamente afastados da superfície (figura 9).

Finalmente na secção 2.3 nos dedicamos ao estudo do modelo de Ising com interações aleatórias distribuídas segundo uma Gaussiana dada pela equação (2.45) ou segundo a distribuição ±J apresentada em (2.46). Utilizando as regras de composição para as transmissividades bem como o teorema do limite central mostramos que a distribuição de probabilidades para o campo externo efetivo que atua sobre os spins de uma dada camada da rede é uma distribuição Gaussiana. Das relações entre as médias e variâncias para as distribuições dos campos efetivos que atuam em duas camadas consecutivas obtemos então o mapeamento. Para sistemas com constantes de acoplamento com distribuição de probabilidades Gaussianas esse mapeamento reproduz no ponto fixo as equações de Sherrington e Kirkpatrick para o vidro de spin de Ising. A seguir calculamos, de maneira análoga à da secção 2.2, a energia interna do vidro de spin de Ising (figura 14) e derivamos a equação de TAP para esse sistema. Finalizando esse capítulo estudamos o caso da distribuição ±J cujo mapeamento (2.83) reproduz o obtido em teoria de campo médio usual para sistemas regulares de modo que não é possível obter-se uma fase do tipo vidro de spin.

2.1. A rede de Bethe

Consideremos o gráfico construído da seguinte forma (veja figura 2): z pontos são colocados lado a lado em uma linha e ligados por meio de barras a um único ponto colocado imediatamente acima gerando dessa forma uma árvore de Cayley com 2 camadas. Para se gerar uma árvore com 3 camadas são colocadas, ao lado dessa figura, z-1 figuras idênticas ligando seus pontos superiores de maneira análoga ao processo usado para unir os pontos iniciais. A repetição iterativa desse segundo passo por mais N - 3 vezes produzirá um gráfico que designaremos por árvore de Cayley desgalhada com N camadas e razão de ramificação z. Observe que seu ponto mais superior se encontra ligado a apenas z vizinhos ao passo que os demais sítios no seu interior se encontram ligados a b=z+1 pontos vizinhos onde b é o número de coordenação. O gráfico que é conhecido como árvore de Cayley é gerado unindo-se a seguir, pelo mesmo processo acima descrito, z+1 árvores de Cayley desgalhadas. Vale a pena ressaltar que a maneira como aqui construimos a árvore de Cayleu difere bastante da que é normalmente utilizada. Entretanto, como veremos a seguir, essa construção alternativa é a mais conveniente para a abordagem aqui utilizada. A árvore de Cayley não apresenta circuito fechado visto que há um e apenas um caminho unindo quaisquer dois de seus pontos. Seu ponto mais superior será chamado de topo, sua camada mais inferior será denominada superfície e a camada constituída pelos topos das árvores desgalhadas de camada central. As camadas serão numeradas em ordem crescente a partir da superfície (s=0) até o topo (s=N-1). Em uma camada qualquer, s, teremos $\eta_s = z^{N-(s+1)}$ pontos enquanto que no gráfico todo teremos um total de pontos dados por:

$$\eta_T = (z^N - 1)/(z - 1)$$

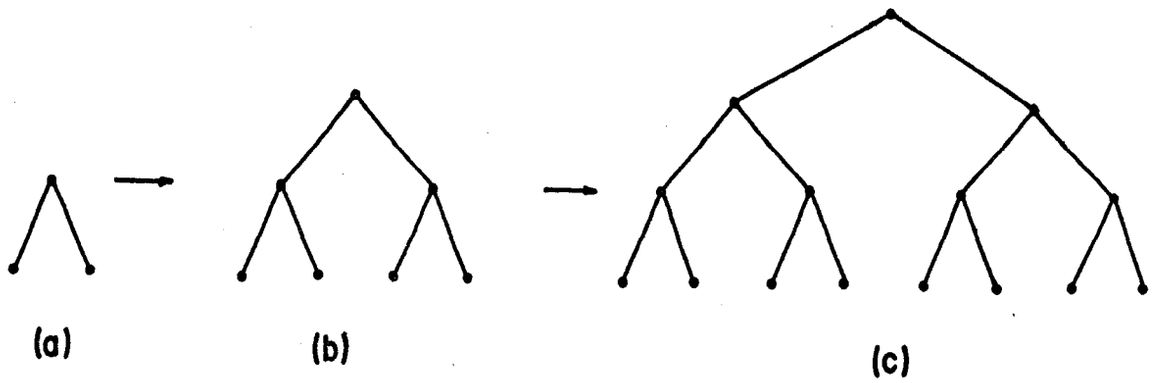


Figura 2 - Processo de Construção da Árvore de Cayley com razão de ramificação z=2.

Inicialmente dois pontos são colocados lado a lado em uma linha, formando uma camada. Em seguida esses pontos são unidos por barras a um único ponto pertencente a uma camada imediatamente acima (a). Na segunda etapa do processo coloca-se lado a lado duas figuras assim formadas ligando seus pontos superiores de maneira descrita acima (b). A repetição dessa última etapa por mais N-3 vezes da origem à árvore de Cayley aberta desgalhada com razão de ramificação z=2 e N camadas. A árvore de Cayley usual pode ser facilmente obtida unindo-se por barras z+1=3 árvores de Cayley desgalhadas a um único ponto chamado de topo. A camada mais inferior é chamada de superfície e a camada vizinha ao topo de camada central. A árvore de Cayley com z qualquer é construída de forma idêntica.

Como em todas outras redes os pontos pertencentes à superfície da árvore são pontos especiais uma vez que estão ligados a apenas um ponto vizinho. De uma maneira geral a árvore de Cayley pode ser considerada uma rede regular desde que por algum processo os efeitos dos spins de sua superfície possam ser excluídos ou ignorados. O procedimento usual utilizado no estudo de sistemas definidos em redes de Bravais para se eliminar os efeitos de spins superficiais consiste em se tomar o limite termodinâmico, ou seja, considerar o limite em que o número total de pontos da rede tende ao infinito. Com isso a razão entre o número de pontos na superfície e o número de pontos em seu interior tende a zero. Portanto, nesse limite os efeitos de spins superficiais nas propriedades do sistema podem ser ignorados. Para um sistema definido na árvore de Cayley o limite termodinâmico pode ser efetuado de uma maneira simples fazendo-se com que o número de camadas tenda ao infinito. Esse procedimento entretanto não elimina os efeitos dos spins superficiais. Isso porque tanto o número de pontos no interior quanto o número de pontos na superfície da árvore de Cayley crescem exponencialmente como z^N fazendo com que a razão entre eles tenda a um número finito diferente de zero. Isso significa que para qualquer modelo colocado nessa rede sua função de partição conterá contribuições tanto de spins em seu interior quanto de spins em sua superfície. Neste caso, sabe-se que o estudo de um modelo de spins nessa rede, segundo os cânones tradicionais da mecânica estatística, dará origem a resultados muito peculiares, tais como uma transição de fase com uma energia livre singular mas sem ordem de longo alcance[63,64]. Por outro lado, o estudo de propriedades locais, tais como a magnetização, em regiões afastadas da superfície da rede, indicam a existência de uma transição de fase numa temperatura crítica bem definida e sem as anamalias que ocorrem no outro caso[60,61].

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
FÍSICA

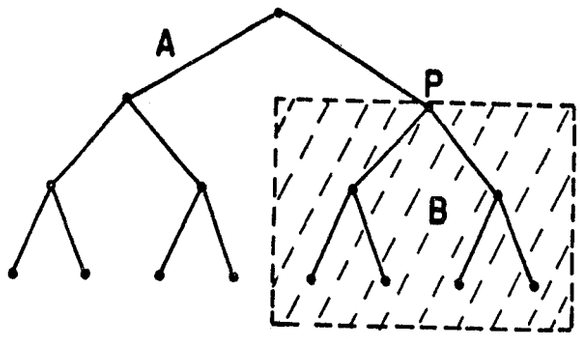


Figura 3 - A árvore de Cayley e a Cadeia Linear

Devido à inexistência de circuitos fechados na árvore de Cayley essa figura pode ser sempre separada em duas partes (designadas por A e B) cortando-a em um ponto P qualquer. Para o modelo de Ising a função de partição do sistema original é dada por $Z = \frac{1}{2} Z_A Z_B$ onde $Z_A(Z_B)$ é a função de partição do sub-sistema A(B) como se o ponto P só a ele pertencesse. Esse procedimento de corte pode ser repetido para cada um dos sub-sistemas A e B até que a árvore fique reduzida à N_1 sistemas constituídos por dois spins interagindo entre si, onde N_1 é o número de ligações na rede original. Dessa maneira, a função de partição será proporcional ao produto das N_1 funções de partição de um par de spins, como ocorre para a cadeia linear.

Neste trabalho consideraremos somente as propriedades locais de sítios infinitamente afastados da superfície no limite termodinâmico. Mais tarde, neste mesmo capítulo, nós definiremos o que consideraremos como sendo sítios infinitamente afastados da superfície. Esses sítios, que por ora consideraremos como sendo o topo e os spins nas camadas vizinhas, são todos equivalentes tendo cada um b vizinhos e constituem o que é chamado de rede de Bethe. Essa designação, como observado por Baxter[1] tem sua origem no fato bem conhecido de que as propriedades locais nesses sítios reproduzem as obtidas quando se faz a aproximação de Bethe-Peierls[12-15] em redes de Bravais[11,61].

Sistemas de spins com interações de primeiros vizinhos colocados na árvore de Cayley e na ausência de campo magnético externo apresentam ainda a interessante propriedade de reproduzir os resultados obtidos para a cadeia linear[65]. Esse fato, que é uma consequência direta da inexistência de circuitos fechados na rede pode ser demonstrado com facilidade. Por uma questão de simplicidade vamos considerar o modelo de Ising regular cuja Hamiltoniana é definida por:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j - 1) \tag{2.1}$$

onde os σ_i são variáveis que podem tomar os valores ±1 e a soma se estende sobre todos os pares de primeiros vizinhos na rede. A demonstração a seguir pode ser facilmente generalizada para outros modelos de spins tais como os modelos de Potts e Ashkin-Teller. Devido à inexistência de circuitos fechados a rede pode ser dividida em duas partes - indicadas na figura 3 por A e B - cortando-a em um único ponto. Designemos as variáveis de spin de Ising colocadas nos sítios das sub-redes A e B respectivamente por $\{\sigma\}$ e $\{S\}$. A variável colocada no ponto de junção das sub-redes P é designada

por τ. A função de partição para o sistema todo é escrita como:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{S\}} \sum_{\tau=-1}^{1} \exp\Big[\beta J \sum_{<ij>} (\sigma_i\sigma_j - 1) +$$

$$+ \beta J \sum_{<K\ell>} (S_K S_\ell - 1) + \beta J \sum_i (\sigma_i \tau - 1) +$$

$$+ \beta J \sum_K (S_K \tau - 1)\Big] \qquad (2.2)$$

As somas em i e K serão tomadas apenas sobre os pontos vizinhos a τ nas sub-redes A e B respectivamente enquanto que as somas em <ij> e <Kℓ> sobre todos os pares distintos de vizinhos em cada sub-rede. Efetuando a soma em τ temos que:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{S\}} \exp\Big[\beta J \sum_{<K\ell>} (S_K S_\ell - 1) + \beta J \sum_{<ij>} (\sigma_i\sigma_j - 1)\Big] \,.$$

$$.\ \Big\{\exp\Big[\beta J \sum_K (S_K - 1) + \beta J \sum_i (\sigma_i - 1)\Big] +$$

$$+ \exp\Big[\beta J \sum_K (-S_K - 1) + \beta J \sum_i (-\sigma_i - 1)\Big]\Big\} \qquad (2.3)$$

Fazendo-se, na última exponencial do lado direito dessa equação, as transformações de inversão dos spins em todos os sítios:

$$\sigma_i \to -\sigma_i \qquad (2.4a)$$

$$\forall i$$

$$S_i \to -S_i \qquad (2.4b)$$

obtém-se que:

$$Z = 2 \sum_{\{\sigma\}} \exp\Big[\beta J \sum_{<ij>} (\sigma_i\sigma_j - 1) + \beta J \sum_i (\sigma_i - 1)\Big] \times$$

$$\times \sum_{\{S\}} \exp\left[\beta J \sum_{\langle K\ell\rangle} (S_K S_\ell - 1) + \beta J \sum_K (S_K - 1)\right] \qquad (2.5)$$

A função de partição do sistema fica expressa então como o produto das funções de partição $Z_A[\{\sigma\},J]$ e $Z_B[\{S\},J]$ dos sub-sistemas A e B submetidos à ação de um campo magnético J que atua apenas sobre os sítios vizinhos ao sítio P. A função de partição $Z_A[\{\sigma\},J]$ pode também ser reescrita como:

$$Z_A[\{\sigma\},J] = \frac{1}{2} \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\beta J \sum_{\langle ij\rangle} (\sigma_i\sigma_j - 1) + \right.$$

$$\left. + \beta J \sum_i (\sigma_i - 1)\right] + \frac{1}{2} \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\beta J \sum_{\langle ij\rangle} (\sigma_i\sigma_j - 1) - \right.$$

$$\left. - \beta J \sum_i (\sigma_i + 1)\right] \qquad (2.6)$$

onde, no segundo termo do lado direito dessa equação fizemos uso da transformação (2.4a). Finalmente, introduzindo um spin "fantasma" σ_g em P teremos:

$$Z_A[\{\sigma\},J] = \frac{1}{2} Z_A \qquad (2.7)$$

onde $Z_A = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\beta J \sum_{\langle ij\rangle} (\sigma_i\sigma_j - 1) + \beta J \sum_i (\sigma_i\sigma_g - 1)\right]$ é a função de partição do sub-sistema A considerando-se que o spin no sítio P pertença apenas a ele e não ao subsistema B. Repetindo o procedimento de (2.6) a (2.7) para o subsistema B chegaremos às mesmas conclusões de tal forma que teremos:

$$Z = \frac{1}{2} Z_A Z_B \qquad (2.8)$$

Pode-se ver facilmente que esse procedimento pode ser repetido para os subsistemas A e B e depois para os subsistemas ge

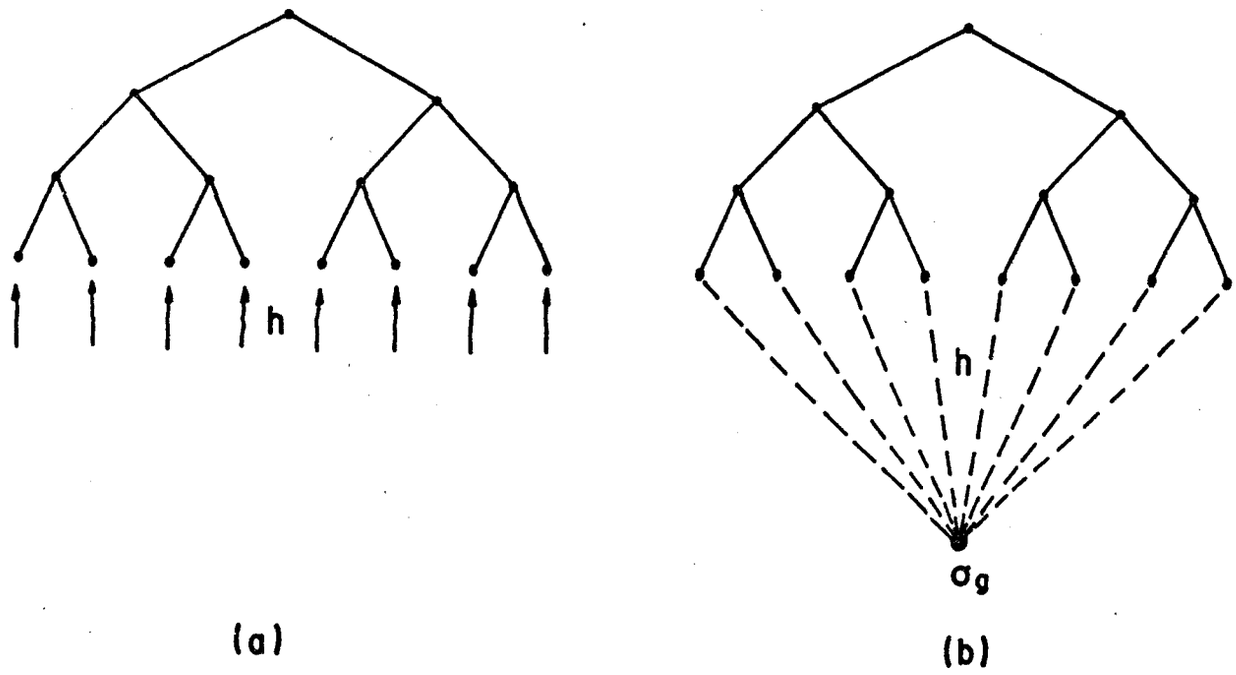


Figura 4 - Transformação da árvore de Cayley aberta na árvore de Cayley fechada assimétrica.

Para que os resultados obtidos para um sistema de spins na árvore de Cayley não reproduzam os obtidos na cadeia linear devemos submeter, à ação de um campo magnético externo, pelo menos os spins na superfície da árvore. As interações desses spins com o campo externo podem ser simuladas por interações com um spin fantasma σ_g colocado em um sítio adicional. A introdução desse sítio extra e das ligações associadas às interações que simulam o campo externo transforma a árvore de Cayley aberta (a) na árvore de Cayley fechada assimétrica (b).

rados pela subdivisão destes e assim por diante até que finalmente tenhamos somente N-1 sistemas de dois spins interagindo entre si, onde N é o número de partículas no sistema original. A função de partição do sistema original será então o produto de N-1 funções de partição de dois spins, 4 cos h βJ, dividido por dois elevado ao número de divisões efetuadas no sistema, N-2:

$$Z = 2^N \cos h^{N-1} \beta J \tag{2.9}$$

que nada mais é do que a função de partição da cadeia linear, o que completa a demonstração. Queremos ressaltar que esse resultado é uma consequência direta da simetria Z(2) da Hamiltoniana implicando na invariância da função de partição para a transformação $\sigma_i \to -\sigma_i$. Raciocínio análogo pode ser utilizado para os modelos de Potts e Ashkin-Teller fazendo-se as transformações apropriadas.

Para que os resultados obtidos utilizando a árvore de Cayley não se reduzam aos resultados triviais do mesmo modelo na cadeia linear devemos introduzir um campo magnético externo para quebrar a simetria da Hamiltoniana. A razão porque a introdução desse campo magnético externo altera tão profundamente as propriedades do sistema pode ser entendida da seguinte maneira. Comparando as equações (2.6) e (2.7) pode-se ver que a interação do campo magnético externo com os spins da rede pode ser simulada pela interação destes últimos com um spin introduzido artificialmente. Esse spin designado de spin fantasma σ_g é colocado em um sítio extra não pertencente originalmente à rede. Para nossos propósitos é suficiente que o campo magnético externo atue apenas sobre os spins da superfície da rede. A generalização para campo magnético externo atuando em todos os spins é trivial. Com a introdução desse spin fantasma, a árvore de Cayley original com seus sítios superficiais sob a ação de um campo magnético externo (figura 4a) é transformada na

rede que denominaremos árvore de Cayley fechada assimétrica ou simplesmente árvore fechada assimétrica (figura 4b). Para melhor diferenciá-las a árvore da figura 4a. será designada daqui por diante de árvore de Cayley aberta.

A introdução do spin fantasma para simular o campo magnético externo apresenta duas grandes vantagens:

i) Em primeiro lugar, torna evidente que as alterações produzidas nos resultados pela presença do campo magnético externo se devem a uma profunda modificação na conectividade da rede. Essa modificação se traduz, no limite termodinâmico, pelo aparecimento de um número infinito de circuitos fechados. Torna-se claro portanto porque que, com a introdução do campo magnético externo, não só os sistemas regulares passem a apresentar resultados não triviais mas também porque sistemas aleatórios possam apresentar uma fase do tipo vidro de spin (secção 2.3) uma vez que o sistema pode ter circuitos (plaquetas) frustadas.

ii) Em segundo lugar, e talvez mais importante, a introdução do spin fantasma nos revela, com toda clareza, a natureza hierárquica dessa rede. Essa propriedade nos leva à aplicação de técnicas do grupo de renormalização no espaço real no estudo de sistemas de spin nessa rede.

Finalmente, observamos que a Hamiltoniana que descreve o modelo de Ising na árvore de Cayley aberta com um campo externo atuando em seus spins superficiais pode ser obtida trivialmente da que descreve esse mesmo modelo na árvore assimétrica simplesmente atribuindo-se ao spin fantasma o valor +1, como pode ser visto na equação (2.7). Essa relação implica em correspondências simples entre as propriedades dos dois sistemas. As correlações entre spins em dois sítios quaisquer na árvore de Cayley aberta são idênticas às obtidas para os mesmos spins na árvore fechada assimétrica

como pode ser facilmente demonstrado. Em particular, a correlação entre o spin fantasma e o spin do topo na árvore fechada assimétrica pode ser identificada com o valor esperado do spin do topo da árvore de Cayley aberta simplesmente atribuindo-se ao spin fantasma o valor +1. Outra relação importante é que a função de participação do sistema na árvore fechada é proporcional à função de partição do sistema na árvore aberta.

2.2. Aplicação das técnicas do grupo de renormalização no espaço real à rede de Bethe

A simplicidade algébrica do grupo de renormalização no espaço real a ser empregado neste trabalho é decorrente da natureza hierárquica da árvore de Cayley fechada e da simplicidade das leis de composição das variáveis naturais desse formalismo. Para um sistema consistindo de apenas dois spins interagindo entre si, essas variáveis, designadas de transmissividade térmica e sua dual [62], nada mais são do que a correlação entre esses dois spins e o peso de Boltzmann associado à ligação entre eles. Essa identificação segue diretamente da definição dessas grandezas. Portanto, neste trabalho nós usaremos como sinônimos as designações: transmissividade-correlação e transmissividade dual - peso ou fator de Boltzmann. No caso do modelo de Ising a transmissividade entre dois spins, σ_i e σ_j, situados em sítios vizinhos e interagindo através de uma constante de troca J é definida como:

$$t = [1 - \exp(-2\beta J)] / [1+\exp(-2\beta J)] = \langle\sigma_i\sigma_j\rangle =$$

$$= \tan h(\beta J) \qquad (2.10a)$$

e sua dual como:

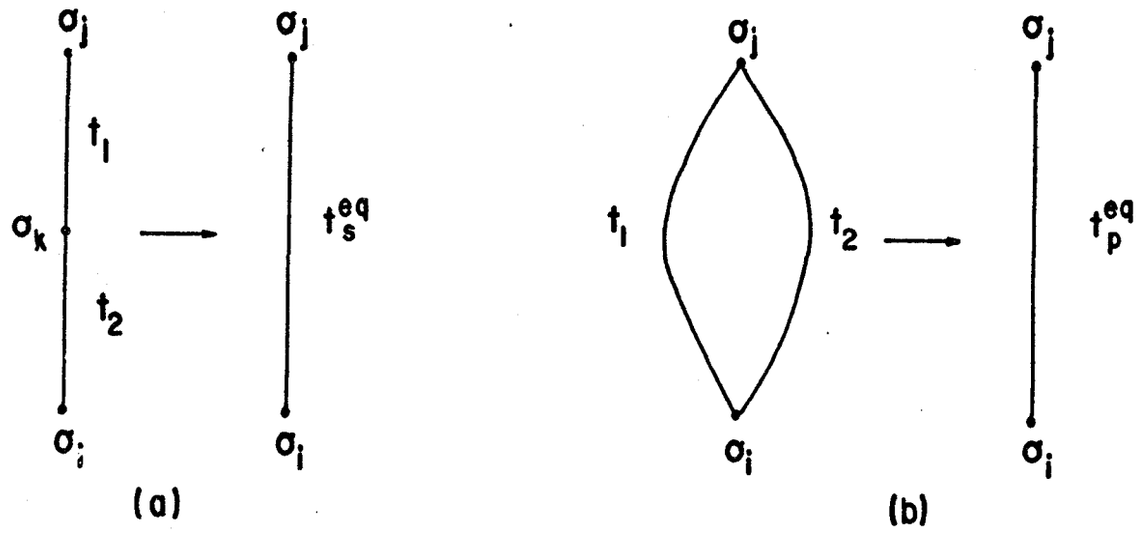


Figura 5 - Leis de composição para as transmissividades.

A transmissividade associada a uma ligação $K_1=\beta J_1$ entre dois spins s_i e s_j é definida por: $t= [1 - \exp(-2K_1)]/[1+\exp(-2K_1)]$ e sua dual por $t^D = [1-t]/[1+t]$. Essas grandezas correspondem, respectivamente, à correlação $\langle s_i s_j \rangle$ e ao peso de Boltzmann associado à ligação. A partir dessa correspondência obtém-se as seguintes leis de composição para pares de ligações com transmissividade t_1 e t_2: i) Para duas ligações em série (a) a transmissividade equivalente t_s^{eq} é o produto das transmissividades, $t_s^{eq} = t_1 . t_2$. ii) Para duas ligações em paralelo (b) a dual da transmissividade equivalente $(t_p^{eq})^D$ é igual ao produto das duais das transmissividades associadas a cada ligação, $(t_p^{eq})^D = t_1^D . t_2^D$.

$$t^D = [1 - t]/[1 + t] \equiv \exp(-2\beta J). \qquad (2.10b)$$

As regras de composição dessas variáveis são as seguintes: Considere o arranjo de três spins interagindo através das constantes de troca J_1 e J_2 com transmissividade associada, respectivamente, t_1 e t_2 como mostra a figura 5a. A transmissividade equivalente correspondendo a uma ligação direta entre os dois spins extremos, é obtida como sendo o produto das transmissividades associadas a cada ligação:

$$t_s^{eq} = t_1 . t_2 \qquad (2.11a)$$

Isso pode ser entendido lembrando-se que para a cadeia linear a correlação entre dois spins quaisquer é obtida como sendo o produto das correlações entre todos os pares de primeiros vizinhos intermediários aos dois sítios considerados. Para o arranjo de dois spins ligados por duas ligações em paralelo, como mostra a figura 5b, a transmissividade dual equivalente é obtida como sendo o produto das transmissividades duais associadas a cada ligação:

$$(t_p^{eq})^D = t_1^D . t_2^D . \qquad (2.11b)$$

Em termos de pesos de Boltzmann, a demonstração dessa segunda lei de composição é absolutamente trivial.

De posse dessas leis de composição a idéia básica para a obtenção das propriedades locais de spins em sítios infinitamente afastados da superfície da árvore consiste em se substituir aglomerados de ligações localizados na superfície da rede por uma única ligação. Note que após a implementação desse procedimento a camada seguinte da rede (s=1) passará a constituir uma nova super-

fície onde novamente encontramos aglomerados iguais aos anteriores. É importante lembrar que as ligações entre os spins da superfície darede e o spin fantasma representam o campo magnético externo. Dessa forma, essas ligações renormalizadas representarão o campo externo efetivo que atua sobre os spins da 1ª camada.

A repetição desse procedimento fará com que uma vez efetuadas todas as renormalizações necessárias restem apenas o spin do topo e o spin fantasma ligados por uma única interação renormalizada. Essa interação corresponderá no caso da árvore aberta ao campo efetivo que atua sobre o spin do topo.

Na prática, esse procedimento se reduz à obtenção de uma relação de recorrência ou mapeamento que nos permitirá, a partir do campo efetivo que atua sobre os spins de uma dada camada, determinar o campo efetivo que atua sobre os spins da camada seguinte. Para os casos regulares esse mapeamento será escrito em termos das transmissividades associadas aos campos efetivos. A obtenção de seus atratores nada mais é do que a determinação da correlação existente o spin do topo e o spin fantasma. Como já observamos, atribuindo-se ao spin fantasma o valor +1 essa mesma correlação pode ser identificada com as magnetizações nos topos das árvores de Cayley desgalhadas. Como mostraremos mais adiante, a magnetização no topo da árvore de Cayley aberta, ou seja, a magnetização na rede de Bethe, pode ser obtida a partir das magnetizações nos topos das árvores de Cayley desgalhadas. Para tanto faz-se mais uma renormalização onde serão dizimados, entretanto, z+1 spins. Dessa forma, os atratores estáveis do mapeamento determinarão os parâmetros de ordem que caracterizarão as diferentes fases do modelo. Por exemplo, no sistema com interações ferromagnéticas, o ponto fixo trivial caracteriza a fase paramagnética e o ponto fixo não trivial a fase ferromagnética.

Antes de prosseguir vamos fazer um parenteses para

definir o que consideraremos como sítios infinitamente afastados da superfície da rede. Esses sítios devem ser todos equivalentes e como foi observado nossos problemas se reduzirão ao estudo de relações de recorrência. Torna-se claro portanto que devem ser considerados como sítios infinitamente afastados da superfície da rede àqueles pertencentes a camadas para as quais a relação de recorrência já tenha convergido. Para se evitar mal-entendidos, duas observações se fazem necessárias:

i) Em primeiro lugar, há que se destacar que os atratores característicos dessas relações de recorrência, exceto nos casos muito simples, serão obtidos numéricamente. Torna-se então necessário o estabelecimento de um critério que permita caracterizar a ocorrência da convergência. Por razões puramente computacionais neste trabalho diremos que a convergência já foi alcançada quando os resultados obtidos após duas iterações consecutivas não diferirem entre si por mais do que uma parte em 10^7. Em termos da transmissividade θ_s associada a uma ligação direta entre os sítios da camada s e o spin fantasma, essa camada será considerada como infinitamente afastada da superfície da árvore se:

$$|\theta_{s+1} - \theta_s| < 10^{-7}$$

ii) Em segundo lugar, o fato da última renormalização ser diferente das demais pode fazer parecer que o topo e seus vizinhos não são equivalentes. Apesar da magnetização na rede de Bethe só poder ser identificada com a magnetização no topo da árvore a equivalência entre esse sítio e seus vizinhos pode ser facilmente demonstrada. Observe que, uma vez tendo sido obtida a convergência em uma dada camada, qualquer sítio de uma camada posterior pode ser considerado como topo simplesmente redesenhando-se a árvore.

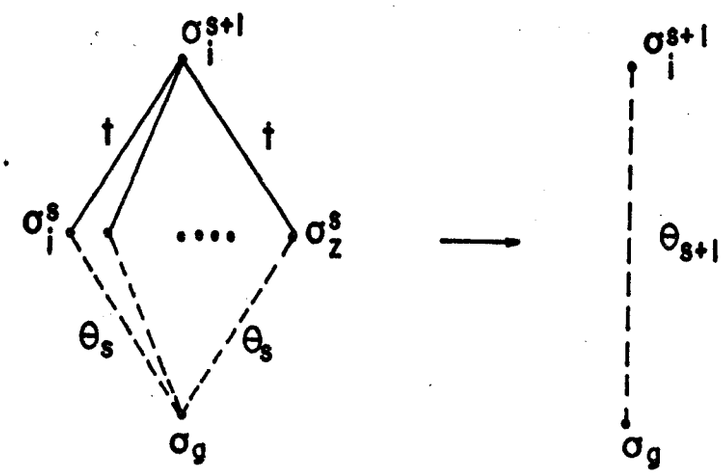


Figura 6 - Obtenção da relação de recorrência para o modelo de Ising regular

Utilizando as leis de composição da figura 5 cada aglomerado de ligações contendo os spins da superfície da árvore de Cayley fechada assimétrica (figura 4b) pode ser transformado em uma única ligação. A transmissividade equivalente é dada pela equação (2.15) onde t é a transmissividade associada às ligações não renormalizadas e θ_s a transmissividade associada a uma ligação direta entre o spin fantasma e um spin da s-ésima camada. Observe que a substituição de cada aglomerado da figura 4b por uma única ligação reproduz a mesma figura com uma camada a menos. Dessa forma, esse procedimento pode ser aplicado recursivamente até que o sistema fique reduzido a uma única ligação renormalizada entre o spin do topo o spin fantasma. θ_s pode ser interpretada como sendo a transmissividade associada ao campo efetivo que atua nos spins da s-ésima camada.

2.2.1. A relação de recorrência

Consideremos o aglomerado de spins e ligações mostrado na figura 6. $\theta_i = \tan h\ (\beta X_i)$ é a transmissividade associada ao campo efetivo X_i que atua sobre os spins da i-ésima camada e $t = \tan h\ (\beta J)$ é a transmissividade associada às interações não renormalizadas, ou seja, às interações que ligam os sítios de camada s aos sítios da camada s+1. Todos os resultados que serão aqui (re)-obtidos são bem conhecidos e podem ser encontrados, por exemplo, na referência 60.

Usando inicialmente a lei de composição (2.11a) eliminemos os spins da camada s substituindo cada par de ligações em série por uma única ligação com transmissividade $t\theta_s$. A seguir, por meio de (2.11b) podemos substituir todas as z ligações em paralelo por uma única ligação, X_{s+1}, com transmissividade associada, θ_{s+1}, dada por:

$$[1-\theta_{s+1}]/[1+\theta_{s+1}] = [(1-t\theta_s)/(1+t\theta_s)]^z \tag{2.13}$$

Tomando o logarítmo de ambos os lados essa equação pode ser reescrita como:

$$\text{arc tan h}\ \theta_{s+1} = z\ \text{arc tan h}(t\theta_s) \tag{2.14}$$

ou ainda como:

$$\theta_{s+1} = \tan h\ [z\ \text{arc tan h}(t\theta_s)] \tag{2.15}$$

Antes de passarmos ao estudo do mapeamento (2.15) propriamente dito vamos mostrar que ele reproduz os resulta

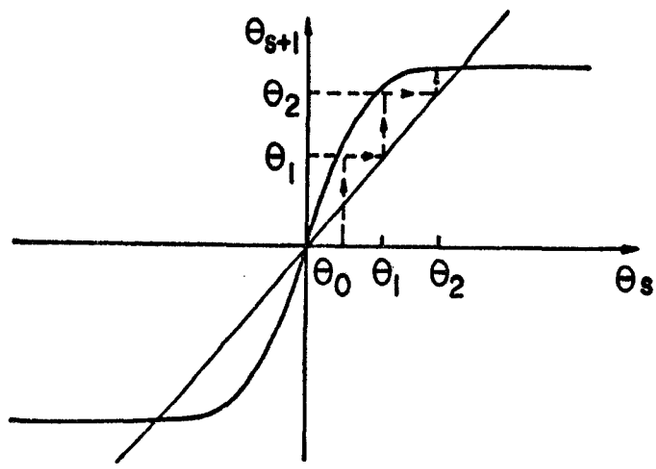


Figura 7 - Relação de recorrência para o caso ferromagnético (t>0).

A transmissividade θ_s entre o spin do topo e o spin fantasma é a magnetização no topo da árvore com s camadas. Dessa forma, no limite em que $s \to \infty$ a magnetização no topo é determinada pelos atratores do mapeamento (2.15) parametrizado pela transmissividade (temperatura) t. Esses atratores podem ser determinados graficamente da seguinte maneira: A partir de um valor não nulo θ_o determinamos θ_1 traçando uma linha vertical até a intersecção com a curva θ_{s+1}. θ_2 é determinado traçando-se desse ponto uma linha horizontal até a reta $\theta_{s+1}=\theta_s$ e a seguir novamente uma linha vertical até a curva θ_{s+1}. Repetindo esse processo "ad infinitum" obtém-se o atrator. Para $t < 1/z$ o único atrator é o ponto fixo trivial (origem) que identifica a fase paramagnética. Para $t > 1/z$ o ponto fixo trivial é instável e os iterados de qualquer θ_o não nulo convergem para um ponto fixo não trivial θ^* que identifica a fase ferromagnética.

dos de campo médio usual. Antes de mais nada, é importante observar-se que neste limite, para que possamos garantir a existência de resultados fisicamente aceitáveis, as interações devem ser proporcionais ao inverso da razão de ramificação[66]. Nessas condições podemos fazer a aproximação:

$$t = \tan h(\beta J/z) \cong \beta J/z. \qquad (2.16)$$

Substituindo (2.16) em (2.15) e expandindo-se o arco tangente hiperbólico obtemos a seguinte relação de recorrência para a transmissividade θ_s:

$$\theta_{s+1} = \tan h(\beta J \theta_s) \qquad (2.17)$$

Lembrando que no ponto fixo ($\theta_{s+1}=\theta_s=\theta^*$) e que a transmissividade θ^* pode ser interpretada como a magnetização m^* do spin do topo, podemos identificar a equação (2.17) como a equação de campo médio[66].

No que diz respeito ao mapeamento (2.15), exceto pelo fato de $\theta^*=0$ ser um ponto fixo para qualquer valor de t, todas as suas demais propriedades serão profundamente dependentes do sinal desse parâmetro e por esse motivo analisaremos os dois casos separadamente.

a) Caso Ferromagnético ($t= \tan h(\beta J)>0$)

Nesse caso a função $\theta_{s+1}= f(\theta_s)$ tem as seguintes propriedades (veja figura 7):

i) É monótoma crescente em todo o intervalo de definição de $\theta_s[-1,1]$.

ii) É côncava no intervalo $-1 < \theta_s < 0$ e convexa

no intervalo $0 < \theta_s < 1$.

Essas propriedades nos permitem tirar as seguintes conclusões a respeito dos pontos fixos desse mapeamento:

i) Em primeiro lugar, só teremos pontos fixos não triviais quando a derivada $f'(\theta_s)$ em $\theta_s=0$ satisfizer a condição $|f'(0)|>1$, ou seja, quando o ponto fixo $\theta^*=0$ se torna instável (veja Apêndice A). Note que a instabilidade do ponto fixo trivial significa na prática que teremos uma correlação não nula entre o spin do topo e o spin fantasma mesmo no limite em que o campo na superfície é aproximadamente - mas não exatamente - nulo. É importante observar-se também que este valor da correlação é independente da magnitude da condição inicial (campo externo) dependendo apenas de seu sinal. Como veremos mais adiante essa dependência não é importante.

ii) Os dois pontos fixos não triviais, dados por:

$$\theta^*_{\pm} = \tan h\,[z \text{ arc tan } h(t\theta^*_{\pm})] \qquad (2.18)$$

serão estáveis sempre que existirem. Esses pontos fixos, como se pode ver de (2.18), corresponderão à mesma solução, diferindo entre si apenas pelo sinal. Para qual desses pontos fixos a relação de recorrência convergirá dependerá de condição inicial.

No caso de z finito entretanto esses pontos fixos não podem ser imediatamente identificados como a magnetização no topo da rede, como fizemos no caso $z\to\infty$. Isso porque no último aglomerado a ser renormalizado teremos z+1 ligações em paralelo e não simplesmente z ligações como em todas as renormalizações anteriores. Levando em conta esse fato a magnetização no topo da rede será:

$$m^* = \tan h\left[(z+1)\ \text{arc}\tan h(t\theta^*)\right] \qquad (2.19)$$

que é precisamente a expressão para a magnetização na aproximação de Bethe-Peierls[60]. Os dois pontos fixos não triviais podem então ser entendidos como uma degenerescência do estado fundamental do modelo de Ising ferromagnético e correspondem ao alinhamento "para cima" e "para baixo" se o campo externo que atua na superfície (condição inicial) for positivo ou negativo.

iii) Da estabilidade do ponto fixo trivial obtém-se a temperatura crítica β_c:

$$t_c = \tan h(\beta_c J) = 1/z \qquad (2.20)$$

Para $t>t_c$ o ponto fixo trivial que caracteriza a fase paramagnética ($m^*=0$) torna-se instável e a solução não trivial estável ($m^*\neq 0$) que caracteriza a fase ferromagnética passa a existir.

iv) A ordem da transição pode ser determinada considerando-se os seguintes resultados: como foi observado os pontos fixos paramagnético e ferromagnético não são simultâneamente estáveis, significando que não há coexistência de soluções. Em segundo lugar, como uma consequência da convexidade (concavidade) do mapeamento para $\theta_s>0(<0)$ os pontos fixos ferromagnéticos coalescem de uma maneira contínua no ponto fixo trivial quando $t\to t_c$. Isso significa que não há discontinuidade no parâmetro de ordem (m^*) na temperatura crítica. Baseados nesses fatos podemos concluir que a transição é de 2ª ordem.

b) Caso Antiferromagnético ($t= \tan h(\beta J)<o$)

Para $t<0$ o mapeamento (2.15) pode ser escrito

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

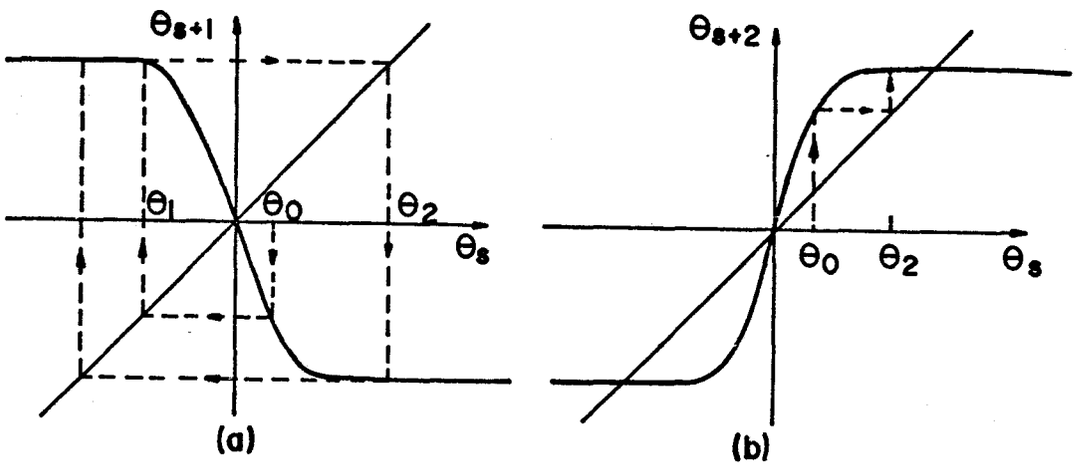


Figura 8 - Relação de recorrência para o caso antiferromagnético ($t<0$)

Seguindo o procedimento descrito na figura 6 verifica-se que para $|t|<1/z$ o único atrator é o ponto fixo paramagnético. Para $|t|>1/z$ surge um novo atrator, denominado de duplo ciclo, no qual os iterados de θ_o no limte $s\to\infty$ ficam saltando entre dois valores (a) de forma que são necessárias duas iterações para que o mesmo valor seja reproduzido. Em termos da segunda iterada (b) esse duplo ciclo se transforma em dois pontos fixos.

como:

$$\theta_{s+1} = -\tan h\,[z \text{ arc tan } h(|t|\theta_s)] \qquad (2.21)$$

de tal forma que θ_{s+1} e θ_s terão sempre sinais opostos, o que equivale a dizer que o único ponto fixo possível é o ponto paramagnético (veja figura 8a.). O estudo da estabilidade desse ponto fixo usando (A.5) nos mostra que, a exemplo do que ocorre no caso ferromagnético, ele é instável abaixo da temperatura crítica definida por (2.20). Consequentemente, para $t>t_c$, um novo atrator, mais complexo que um simples ponto fixo, deve se tornar estável. A forma desse atrator pode ser determinada a partir dos pontos fixos não triviais obtidos no caso ferromagnético da seguinte forma: suponhamos que $\theta_s=\theta_+^*$. De (2.18) e de (2.21) teremos então que $\theta_{s+1} = -\theta_+^*$, ou seja, $\theta_{s+1} = \theta_-^*$. Repetindo esse procedimento com $\theta_s = \theta_-^*$ obtemos que $\theta_{s+1}=\theta_+^*$. Dessa forma, esse atrator chamado duplo ciclo, é constituido pelos dois pontos fixos não triviais do caso ferromagnético, de forma que pela relação de recorrência volta-se ao mesmo ponto após duas iterações. Esse resultado pode ser interpretado como uma consequência da divisão da rede em duas sub-redes magnetizadas em sentidos opostos. Portanto esse duplo ciclo é o atrator que caracteriza a fase antiferromagnética. No que diz respeito à magnetização no topo tem-se dois resultados possíveis, um para cada sub-rede:

$$m_\pm = \tan h[(z+1) \text{ arc tan } h(|t|\theta_\pm^*)] \qquad (2.22)$$

Quanto as demais propriedades do modelo, elas podem ser mais facilmente determinadas estudando-se a relação de recorrência para a segunda iterada, ou seja, a relação de recorrência para θ_{s+2} em função de θ_s:

$$\theta_{s+2} = \tan h\{z \arctan h[|t| \tan h[z \arctan h (|t|\theta_s)]]\} \tag{2.23}$$

Nesse caso pode-se ver facilmente que o duplo ciclo de (2.21) se reduz a um ponto fixo não trivial. Em outras palavras, esse mapeamento tem as mesmas propriedades já discutidas no caso ferromagnético. Portanto todas as conclusões obtidas no que diz respeito à temperatura crítica, estabilidade dos pontos fixos e ordem da transição se aplicam para o caso $t<0$ (veja figura 86).

A seguir analisamos o caso particular $z=2$. Para esse valor da razão de ramificação a relação de recorrência pode ser escrita de maneira muito mais simples. Da equação (2.13) obtemos que:

$$\theta_{s+1} = 2t\theta_s/[1 + t^2\ \theta_s^2] \tag{2.24}$$

Fazendo-se $\theta_{s+1}=\theta_s=\theta^*$ podemos obter os seguintes pontos fixos:

$$\theta^* = 0 \tag{2.25a}$$

$$\theta^*_{\pm} = [2t - 1]^{1/2}/t \tag{2.25b}$$

É interessante destacar que:

i) Os pontos fixos não triviais só são reais para $t > t_c^F = 1/2$ que é a mesma temperatura em que o ponto fixo paramagnético fica instável. Aplicando-se (A.5) é fácil mostrar que os pontos fixos (2.25b) são estáveis sempre que reais.

ii) Os pontos fixos não triviais (2.25b) tendem de uma maneira contínua ao ponto fixo trivial quando $t \to t_c^F$. Es-

sas duas propriedades caracterizam uma transição de fase de 2ª ordem na temperatura $t_c^F = \tan h(\beta_c J) = 1/2$.

iii) Para $t<0$ o único ponto fixo real é o ponto fixo paramagnético. Isso nos leva a estudar a segunda iterada de (2.24).

$$\theta_{s+2} = [4t^2\theta_s + 4t^4\theta_s^3]/[1+2t^2\theta_s^2 + t^4\theta_s^4 + 4t^4\theta^2] \qquad (2.26)$$

Além do ponto fixo trivial esse mapeamento apresenta os seguintes pontos fixos:

$$\text{i)} \quad (\theta_\pm^*)_F = \pm \frac{1}{t}(-1+2t)^{1/2} \qquad (2.27a)$$

que só serão reais se $t>0$ e nesse caso correspondem aos pontos fixos (2.25b) já obtidos no caso ferromagnético.

$$\text{ii)} \quad (\theta_\pm^*)_{AF} = \pm \frac{1}{t}[-1-2t]^{1/2} \qquad (2.27b)$$

que só serão reais para $t < t_c^{AF} = -1/2$. Aplicando-se o critério de estabilidade (A.5) à equação (2.26) verifica-se que essa é a temperatura em que o ponto fixo trivial se torna instável. Como no caso ferromagnético os pontos fixos não triviais (2.27b) serão estáveis sempre que forem reais e tendem de uma maneira contínua ao ponto fixo trivial quando $t \to t_c^{AF}$ caracterizando a transição entre as fases paramagnética e antiferromagnética também como de 2ª ordem. O duplo ciclo que caracteriza a fase antiferromagnética pode ser identificado simplesmente fazendo-se $\theta_s = (\theta_+^*)_{AF}$ em (2.24) para se obter $\theta_{s+1} = (\theta_-^*)_{AF}$ e vice-versa.

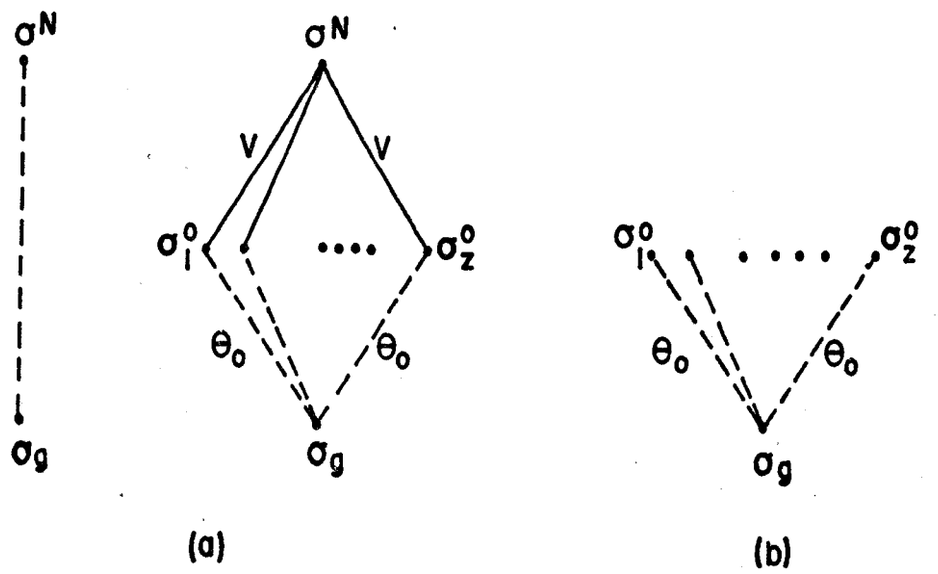


Figura 9 - Determinação da correlação entre o spin do topo e um spin da superfície.

Conhecendo a transmissividade renormalizada entre o spin do topo e o spin fantasma podemos construir um aglomerado reintroduzindo os spins da superfície. Isso nos permite obter a transmissividade (2.30) associada a uma ligação direta entre o spin do topo e os spins da superfície (a). No limite termodinâmico o número de camadas tende ao infinito fazendo com que essa transmissividade tenda a zero. Nesse limite os spins da superfície se comportam como um sistema de partículas não interagentes submetidos à ação de um campo magnético externo (b).

Para finalizar essa secção vamos considerar mais uma vez a árvore de Cayley para mostrar que a correlação entre um spin na superfície e o spin do topo é nula. Com isso, mostraremos que a superfície dessa árvore pode ser entendida como um conjunto de spins não interagentes submetidos à ação de um campo magnético externo. Nessa demonstração utilizaremos um procedimento inverso ao adotado até agora. Em todos os cálculos que efetuamos até o presente momento a idéia básica era ir dizimando os spins da rede até ficarmos com uma única ligação renormalizada unindo o spin fantasma ao spin no topo da rede. A idéia agora é reintroduzir os z^{N-1} sítios da superfície, transformando uma única interação renormalizada em um aglomerado como mostrado na figura 9a. Esse aglomerado é constituído por z^{N-1} conjuntos de ligações em paralelo. Cada um desses conjuntos por sua vez, é constituído por 2 ligações em série: a primeira delas representando o campo magnético externo, X_o, com transmissividade associada θ_o e a outra representando a ligação direta entre um spin da superfície da árvore e o spin no topo, com transmissividade associada V. Aplicando as leis de composição (2.10) a esse aglomerado teremos:

$$[1-\theta^*]/[1+\theta^*] = [(1-V\theta_o)/(1+V\theta_o)]^{z^{N-1}} \tag{2.28}$$

onde θ^* é a transmissividade associada à ligação renormalizada entre os spin do topo e fantasma. Tomando o logarítmo de ambos os lados dessa equação teremos:

$$\text{arc tan h}\ \theta^* = z^{N-1}\ \text{arc tan h}(V\theta_o) \tag{2.29}$$

de tal forma que a transmissividade associada à ligação direta entre um sítio da superfície e o spin do topo será:

$$V = \frac{1}{\theta_o} \tan h \left[\frac{1}{z^{N-1}} \text{arc tan h } \theta^*\right]. \qquad (2.30)$$

No limite termodinâmico, ou seja, no limite em que o número de camadas N tende ao infinito, V se anulará.Nesse limite então será nula a correlação entre um spin da superfície e o spin do topo e o aglomerado da figura 9a pode ser reduzido ao da figura 9b que representa z^{N-1} spin não interagentes sob a ação de um campo magnético. É trivial mostrar-se então que a correlação entre dois desses spins, V_s, será dada por:

$$V_s = \theta_o^2 = \tan h^2(\beta X_o) \qquad (2.31)$$

Também, fica óbvio que a correlação entre um desses spins e o spin fantasma nada mais é do que a magnetização produzida na superfície pelo campo magnético externo:

$$m_s = \tan h(\beta X_o) \qquad (2.32)$$

2.2.2. Outras propriedades termodinâmicas

Consideremos o modelo de Ising em uma rede qualquer, submetido à ação de um campo magnético H. Sua função de partição é definida como:

$$Z(\beta,h) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\beta J \sum_{<ij>} \sigma_i\sigma_j + \beta H \sum_i \sigma_i\right] \qquad (2.33)$$

onde a primeira soma é efetuada sobre todos os pares de sítios vizinhos e a segunda sobre todos os sítios. Da energia livre definida por:

$$\psi(\beta,h) = - KT \ln Z \tag{2.34}$$

todas as propriedades termodinâmicas podem ser calculadas. Por exemplo, a magnetização total M pode ser obtida de:

$$M(\beta,H) = - \frac{\partial\psi(\beta,H)}{\partial H} \tag{2.35}$$

e a energia interna de:

$$U(\beta,H) = - T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\psi(\beta,H)}{T}\right]. \tag{2.36}$$

Convém lembrar que a magnetização total é uma soma sobre todas as magnetizações locais, ou seja:

$$M(\beta,H) = \sum_i M_i(\beta,H). \tag{2.37}$$

Em uma rede regular onde todos os sítios são equivalentes a magnetização total pode ser escrita como Nm onde N é o número total de sítios e m a magnetização média por sítio.

Como já observamos esse procedimento no caso da árvore de Cayley dá origem a uma série de problemas inusitados porque ela não é uma rede de Bravais. Como nesse trabalho consideramos apenas propriedades locais de sítios pertencentes à rede de Bethe, é necessário desenvolver um método que nos permita construir as demais propriedades termodinâmicas.

Com relação à energia livre esse método já foi desenvolvido por Thompson[60]. Ele consiste essencialmente em se considerar na equação (2.37) apenas sítios pertencentes à rede de Bethe, todos com número de coordenação b, e para os quais $M_i(\beta, H) = m(\beta,H)$. Para a rede de Bethe a energia livre pode então ser obtida integrando-se (2.35) com relação ao campo magnético, desde

que se defina de forma apropriada os extremos de integração. Isso pode ser feito observando-se que no limite $H \to \infty$ a função de partição (2.33) é dominada pelo estado em que todos os spins assumem o valor +1, de tal forma que:

$$\psi(\beta,\infty) = - JN_L - HN \tag{2.38}$$

onde N_L é o número de ligações na rede e N o número de sítios. Observando-se ainda que $m(\beta,\infty)=1$ e que para uma rede regular, com número de coordenação $b=z+1$ teremos $N_L = \frac{1}{2}$ Nb ligações a energia livre por partícula poderá ser escrita como:

$$\frac{\psi(\beta,H)}{N} = - \frac{1}{2} bJ - H + \int_H^\infty [m(h)-1]dh. \tag{2.39}$$

Esse é o procedimento padrão para o cálculo da energia livre a partir da magnetização para rede de Bethe. Mesmo no caso do modelo de Ising regular a avaliação da integral do lado direito de (2.39) exige algum esforço de modo que a determinação da energia livre em sistemas mais complicados não é uma tarefa fácil.

Nesta secção nós mostraremos entretanto que a energia <u>interna</u> pode ser calculada de uma maneira muito simples. Esse cálculo se baseia no fato de no limite termodinâmico tanto o topo da árvore quanto os sítios da camada central poderem ser considerados como pertencentes à rede de Bethe, ou seja, são todos sítios equivalentes. A média térmica da energia de interação entre um spin da camada central da rede, σ_i, e o spin do topo, σ_t, é dada por:

$$U_L = -J\langle\sigma_i\sigma_t\rangle. \tag{2.40}$$

Como esses sítios são todos equivalentes U_L pode ser considerada a energia média por ligação em uma rede de Bravais na aproximação de Bethe. Da equação (2.36) a energia interna para o modelo pode ser escrita como:

$$U = - J \sum_{<ij>} <\sigma_i \sigma_j> \qquad (2.41)$$

Lembrando-se que $<\sigma_i \sigma_j>$ deve ser o mesmo para quaisquer pares de sítios, teremos para a energia interna por partícula:

$$U = - \frac{Jb}{2} <\sigma_i \sigma_j> \qquad (2.42)$$

Comparando (2.40) e (2.42) nós podemos ver que o problema da obtenção da energia interna na aproximação de Bethe se reduz ao cálculo da correlação entre um spin da camada central e o spin do topo, ou seja, ao cálculo da transmissividade efetiva entre esses dois spins. Essa transmissividade pode ser obtida da seguinte forma: inicialmente procedemos a todas as renormalizações necessárias para se reduzir a árvore apenas ao conjunto formado pelo spin do topo, seus primeiros vizinhos que formam a camada central e o spin fantasma (veja figura 10a). No limite termodinâmico podemos dizer que a transmissividade efetiva θ_+^* entre os spins da camada central e o spin fantasma será dada por (2.18). Lembrando que na camada central temos z+1 sítios o aglomerado da figura 10b é obtido simplesmente dizimando-se quaisquer z spins da camada central. Considerando que a relação de recorrência já convergiu note que a transmissividade obtida dessa decimação será $\theta_+^*(\theta_-^*)$ se estamos supondo ferromagnetismo (antiferromagnetismo). Vale a pena destacar que o aglomerado da figura 10b representa um sistema de dois spins interagindo entre si com cada um deles submetido à ação de um campo magnético efetivo que nada mais é do que a idéia básica

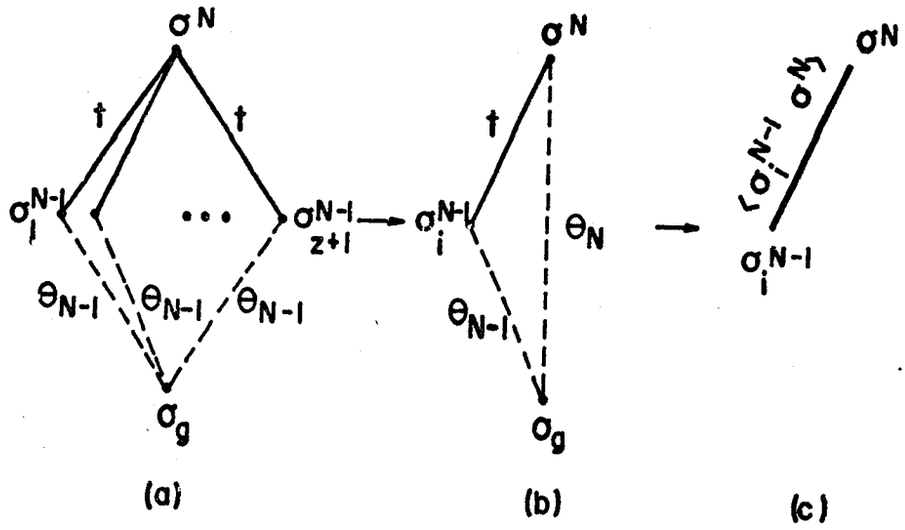


Figura 10 - Derivação da energia interna

A correlação $\langle\sigma^N\sigma_i^{N-1}\rangle$ entre o spin do topo σ^N e um spin qualquer σ_i^{N-1} da camada central (2.43) é obtida efetuando-se as renormalizações indicadas na figura. Na rede de Bethe, $\langle\sigma^N\sigma_i^{N-1}\rangle$ é a correlação entre quaisquer dois spins primeiros vizinhos. Portanto, na aproximação de Bethe - Peierls a energia interna (2.44) é obtida substituindo-se essa equação na equação (2.42).

de aproximação de acoplamento constante[67].

Vamos calcular a transmissividade definida em (2.40) apenas para o caso antiferromagnético uma vez que o caso ferromagnético pode ser obtido deste simplesmente fazendo-se $\theta_-^* \to \theta_+^*$.

Aplicando as leis de composição (2.11) ao aglomerado da figura 10b teremos finalmente:

$$\langle \sigma_i \sigma_t \rangle = [t + \theta_+^* \theta_-^*]/[1 + t\theta_+^* \theta_-^*] \qquad (2.43)$$

A substituição de (2.43) em (2.42) nos permite escrever a energia interna por partícula como sendo dada por:

$$U = -\frac{1}{2} b J [t+\theta_+^*\theta_-^*]/[1+t\theta_+^*\theta_-^*] \qquad (2.44)$$

concordando com a expressão da energia interna obtida na aproximação de Bethe[60].

2.3. O vidro de spin de Ising na Rede de Bethe

Nesta secção e nas seguintes nós resolvemos exatamente o modelo de Ising com interações aleatórias entre primeiros vizinhos na rede de Bethe no limite $z \to \infty$. Abrimos um parenteses para salientar que a desordem introduzida no sistema pelas interações aleatórias será considerada temperada. Segundo a prescrição de Brout [24] isso significa que a média sobre esta desordem deve ser efetuada sobre a energia livre e as grandezas dela derivadas e não sobre a função de partição, como seria o caso se considerássemos a desordem recozida.

O modelo de Ising aleatório na árvore de Cayley foi anteriormente considerado por Thompson[54], supondo que a distri-

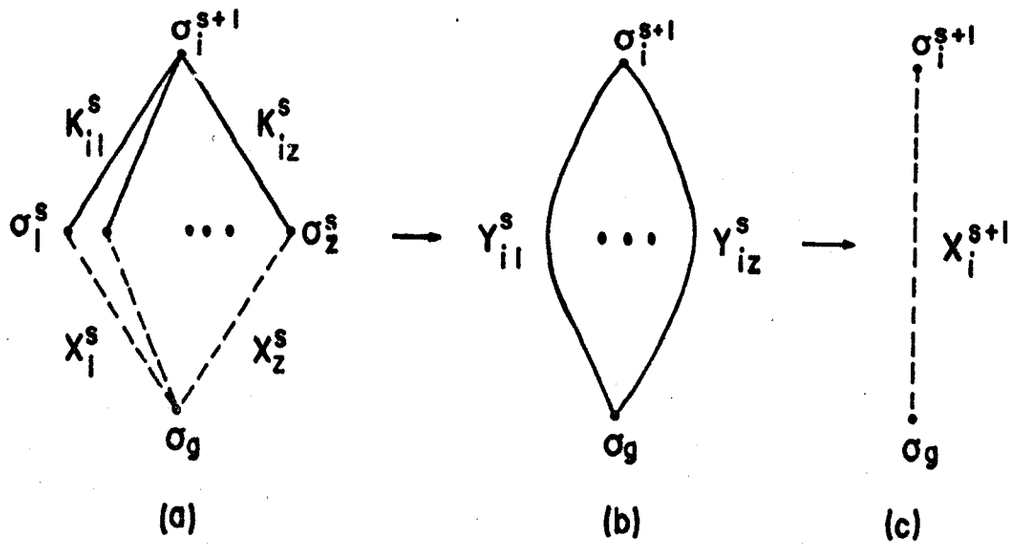


Figura 11 - Relação de recorrência para o vidro de spin de Ising.

Usando as leis de composição da figura 5 o campo efetivo $X_i^{s+1}(c)$, que atua sobre um spin da camada s+1, pode ser escrito em termos das interações não renormalizadas K_{ij}^s, entre esse spin e os da camada s, e do campo efetivo X_j^s, que atua nesses últimos, como nas equações (2.50) e (2.49). No limite em que $z \to \infty$ o teorema do limite central nos assegura que a distribuição de probabilidades para o campo efetivo X_i^{s+1} será Gaussiana. A sua média e variância podem ser obtidas da média e variância da distribuição de probabilidades das interações Y_{ij}^s (b).

buição de probabilidades para as interações é Gaussiana, de modo que a maior parte dos resultados aqui obtidos pode ser encontrada, para comparação, nessa referência. Essa comparação se presta também para se apreciar melhor a simplicidade de nosso formalismo.

A idéia básica para solução desse problema consiste, como fizemos no caso regular, na substituição de aglomerados com z+2 spins e 2z ligações pelos dois spins nos extremos interagindo através de uma constante de troca renormalizada. Essa constante de troca renormalizada pode ser interpretada, fixando-se o spin fantasma, como o campo magnético externo efetivo que atua sobre os spins de camada a que pertence o spin no topo do aglomerado. Procedendo dessa maneira, podemos calcular a distribuição de probabilidades para o campo externo efetivo, que atua na camada s + 1 da rede, a partir das distribuições de probabilidades para os campos externos efetivos que atuam na camada s.

Consideremos o aglomerado da figura 11a. A Hamiltoniama para esse sistema pode ser escrita como:

$$-\beta H = \sum_{j=1}^{z} K_{ij}^{s}(\sigma_i^{s+1}\ \sigma_j^{s} - 1) + \sum_{j=1}^{z} X_j^{s}(\sigma_j^{s}\sigma_g - 1) \qquad (2.45$$

onde σ_g representa o spin fantasma, σ_j^s os z spins da camada s ligados ao i-ésimo spin da camada s+1 por meio das interações não renormalizadas K_{ij}^s. Os campos externos efetivos que atuam sobre os spins da camada s são designados por X_j^s.

Por enquanto não seria necessário que especificássemos qual é a distribuição de probabilidades para as interações. Entretanto, podemos adiantar que resolveremos esse problema usando a distribuição de probabilidades mais comum no estudo de vidros de spin:

$$P[K_{ij}^s] = [z/2\pi\tilde{K}^2]^{1/2} \exp[-z(K_{ij}^s - K_o/z)^2/2\tilde{K}^2] \qquad (2.46)$$

bem como uma distribuição discreta do tipo:

$$P[K_{ij}^s] = \omega\ \delta\ [K_{ij}^s - K/z] + (1-\omega)\delta[K_{ij}^s + K/z] \qquad (2.47)$$

Em ambos os casos, os parâmetros das distribuições devem ser divididos pela razão de ramificação para que, como no caso regular, possamos garantir resultados fisicamente aceitáveis no limite $z \to \infty$. Observe que esta divisão faz com que as interações K_{ij}^s possam ser consideradas como quantidades muito pequenas, o que será bastante utilizado no que segue. É importante salientar que os resultados obtidos dessa aproximação só se tornarão realmente corretos no momento em que efetuarmos a média sobre a desordem.

Utilizando a lei de composição (2-11a) cada conjunto de duas ligações em série no aglomerado da figura 11a pode ser substituido por uma única ligação Y_{ij}^s (veja figura 11b). Fazendo uso da definição de transmissividade (2.10a) as interações Y_{ij}^s podem ser escritas como:

$$Y_{ij}^s = \frac{1}{2}\ \ell n\ \{[1 + t_{ij}^s\ \theta_j^s\ ]/[1 - t_{ij}^s\ \theta_j^s]\} \qquad (2.48)$$

onde t_{ij}^s e θ_j^s são as transmissividades associadas, respectivamente, com as interações não renormalizadas K_{ij}^s e os campos efetivos X_j^s. Lembrando que as interações K_{ij}^s são muito pequenas obtemos a seguinte aproximação para a equação (2.48):

$$Y_{ij}^s \cong K_{ij}^s\ \theta_j^s \qquad (2.49)$$

O passo seguinte consiste na substituição de todas as z ligações em paralelo pelo campo externo efetivo X_i^{s+1}:

$$X_i^{s+1} = \sum_{j=1}^{z} Y_{ij}^s \tag{2.50}$$

O teorema do limite central[69] nos garante que no limite $z \to \infty$, qualquer que seja a distribuição de probabilidades dos Y_{ij}^s, a distribuição de probabilidades para o campo externo efetivo X_i^{s+1} será Gaussiana. Com excessão da superfície onde suporemos que o campo externo não é aleatório, podemos afirmar então que em todas as demais camadas da rede o campo externo efetivo terá uma distribuição de probabilidades Gaussiana. O teorema do limite central nos garante também que a média X_o^s dessa distribuição e sua variância $\tilde{X}_s^2$ são obtidas da média Y_o^s e da variância $\tilde{Y}_s^2$ da distribuição de probabilidades dos Y_{ij}^s por:

$$X_o^s = z\, Y_o^s \tag{2.51a}$$

$$\tilde{X}_s^2 = z\, \tilde{Y}_s^2 \tag{2.51b}$$

Portanto o problema da obtenção da distribuição de probabilidades para o campo externo efetivo X_i^{s+1} se reduz ao cálculo de Y_o^s e $\tilde{Y}_s^2$ que são obtidas, usando a equação (2.49), de:

$$Y_o^s = \int\int P(X_j^s) P[K_{ij}^s] K_{ij}^s\, \theta_j^s\, dK_{ij}^s\, dX_j^s \tag{2.52a}$$

e de:

$$\tilde{Y}_s^2 = \int\int P[X_j^s] P[K_{ij}^s] [K_{ij}^s \theta_j^s - Y_o^s]^2\, dK_{ij}^s\, dX_j^s. \tag{2.52b}$$

Para prosseguir além desse ponto é necessário especificar a distribuição de probabilidades dos K_{ij}^s. Os dois casos particulares já mencionados serão analisados separadamente pois apresentam resultados bastante distintos.

2.3.1. Distribuição de probabilidades Gaussiana

Neste caso os K^s_{ij} são independentemente distribuídos de acordo com (2.46). Fazendo-se a substituição de variáveis.

$$U^s_{ij} = -z^{1/2} \; (K^s_{ij} - K_o/z)/\tilde{K} \tag{2.53}$$

nas equações (2.52) temos que:

$$Y^s_o = (2\pi)^{-1/2} \int\int P[X^s_j] e^{-(U^s_{ij})^2/2} (K_o \, z^{-1} +$$

$$+ \tilde{K} \, z^{-1/2} \, U^s_{ij}) \; \theta^s_j \;\; dU^s_{ij} \; dX^s_j \tag{2.54a}$$

e

$$\tilde{Y}^2_s = (2\pi)^{-1/2} \int\int P[X^s_j] e^{-(U_{ij}{}^s)^2/2} [(K_o z^{-1} +$$

$$+ \tilde{K} \, z^{-1/2} \, U_{ij}{}^s) \; \theta^s_j - Y^s_o]^2 \; dU_{ij}{}^s \; dX^s_j. \tag{2.54b}$$

Efetuando as integrais em U^s_{ij} nas equações acima e definindo:

$$m_s = \int P[X^s_j] \; \theta^s_j \; dX^s_j \tag{2.55a}$$

$$q_s = \int P[X^s_j] \; [\theta^s_j]^2 \; dX^s_j \tag{2.55b}$$

obtemos finalmente:

$$Y_o^s = K_o \; z^{-1} \; m_s \tag{2.56a}$$

$$\tilde{Y}_s^2 = \tilde{K}^2 \; z^{-1} \; q_s . \tag{2.56b}$$

Usando agora as relações (2.51) a distribuição de probabilidades para o campo externo efetivo que atua na camada s+1 pode ser explicitamente escrita como:

$$P[X_j^{s+1}] = [2\pi\tilde{K}^2 \; q_s]^{-1/2} \exp[-(X_j^{s+1} - K_o m_s)^2/2 \; \tilde{K}^2 \; q_s] \tag{2.57}$$

Note que m_s e q_s estão ligados respectivamente à média e à variância da distribuição de probabilidades do campo externo efetivo que atua na camada s+1. Usando agora (2.57),(2.55) e lembrando que $\theta_j^s \mp \tan h \; |X_j^s|$ nós podemos encontrar o mapeamento que relaciona a média e a variância da distribuição de probabilidades do campo externo efetivo que atua na camada s+2 como função dessas mesmas grandezas para o campo externo efetivo que atua na camada s+1:

$$m_{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \tan h \; [K_o m_s + \tilde{K} \; q_s^{1/2} \; x] dx \tag{2.58a}$$

$$q_{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \tan h^2 \; [K_o m_s + \tilde{K} \; q_s^{1/2} \; x \;] \; dx \tag{2.58b}$$

onde, para escrever as equações acima fizemos uma substituição de variáveis idêntica a (2.53). Supondo a existência de pontos fixos

do tipo $m_{s+1}=m_s=m$ e $q_{s+1}=q_s=q$ as equações (2.58) se reduzem às equações de SK para o vidro de spin de Ising[27]. Na verdade, essas equações são um pouco mais gerais que as equações de SK uma vez que admitem solução também para $K_o<0$. Para valores negativos de K_o é fácil de ver que (2.58) possui um duplo ciclo do tipo $m_s = - m_{s+1}$; $q_s=q_{s+1}$ característico de uma fase antiferromagnética. Basta que se faça nas equações (2.58) a transformação $x \to - x$ para obter, para $K_o<0$:

$$m_{s+1} = - (2\pi)^{-1/2} \int_{+\infty}^{-\infty} e^{-x^2/2} \tan h \left[-|K_o|m_s - \tilde{K}\, q_s^{1/2}\, x\right] dx \qquad (2.59a)$$

$$q_{s+1} = - (2\pi)^{-1/2} \int_{+\infty}^{-\infty} e^{-x^2/2} \tan h^2 \left[-|K_o|m_s - \tilde{K}\, q_s^{1/2}\, x\right] dx \qquad (2.59b)$$

Invertendo os limites de integração nessas equações e lembrando que a tangente hiperbólica é uma função ímpar de seu argumento teremos:

$$m_{s+1} = - (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \tan h \left[|K_o|m_s + \tilde{K}\, q_s^{1/2}\, x\right] dx \qquad (2.60a)$$

$$q_{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \tan h^2 \left[|K_o|m_s + \tilde{K}\, q_s^{1/2}\, x\right] dx \qquad (2.60b)$$

Para se estudar a estabilidade dos pontos fi-

xos (veja Apêndice A) é necessário obter-se os elementos do Jacobiano das transformações (2.58):

$$A = \frac{\partial m_{s+1}}{\partial m_s} = (2\pi)^{-1/2} K_o \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \sec h^2 [K_o m_s + \tilde{K} q_s^{1/2} x] dx \qquad (2.61a)$$

$$B = \frac{\partial m_{s+1}}{\partial q_s} = \frac{(2\pi)^{-1/2} \tilde{K}}{2 q_s^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \cdot x \sec h^2 [K_o m_s + \tilde{K} q_s^{1/2} x] dx \qquad (2.61b)$$

$$C = \frac{\partial q_{s+1}}{\partial m_s} = (2\pi)^{-1/2} 2K_o \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \tan h [K_o m_s + \tilde{K} q_s^{1/2} x] \sec h^2 [K_o m_s + \tilde{K} q_s^{1/2}] dx \qquad (2.61c)$$

$$D = \frac{\partial q_{s+1}}{\partial q_s} = \frac{(2\pi)^{-1/2} \tilde{K}}{q_s^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \cdot x \tan h [K_o m_s + \tilde{K} q_s^{1/2} x] \sec h^2 [K_o m_s + \tilde{K} q_s^{1/2} x] dx \qquad (2.61d)$$

Devido à complexidade do mapeamento (2.58) e das equações (2.61) o único estudo analítico que pode ser feito é o da estabilidade do ponto fixo trivial:

$$m^* = q^* = 0 \qquad (2.62)$$

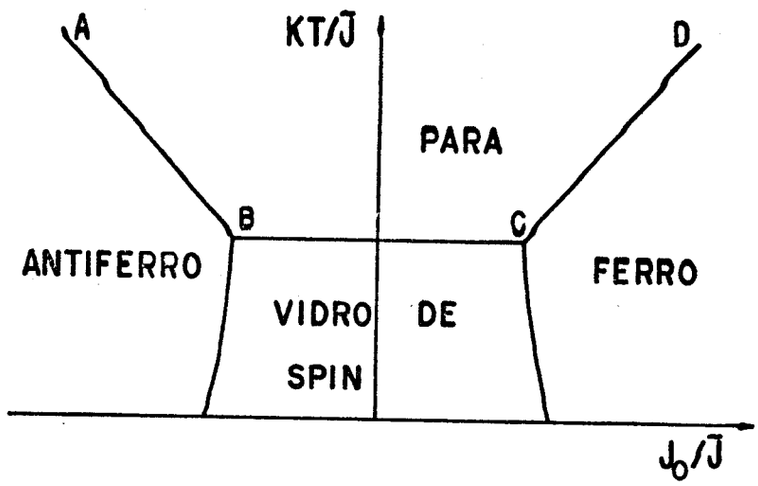


Figura 12 - Diagrama de fases de vidro de spin de Ising.

Como no caso regular, o diagrama de fases do vidro de spin pode ser obtido dos atratores do mapeamento correspondente (2.58). São os seguintes os atratores encontrados e as fases por eles caracterizadas: i) ponto fixo $m^* = q^* = 0$ - fase paramagnética. ii) ponto fixo $m^* = 0$; $q^* \neq 0$ - fase vidro de spin. iii) ponto fixo $m^* \neq 0$; $q^* \neq 0$ - fase ferromagnética. iv) duplo ciclo $m_{i+1} = - m_i = m^*$; $q_{i+1} = q_i = q^*$ - fase antiferromagnética.

A linha ABCD fornecida por (2.64) pode ser obtida analiticamente estudando-se a estabilidade do ponto fixo paramagnético.

Substituindo (2.62) em (2.61) é fácil de ver que B=C=0 de tal forma que os autovalores do Jacobiano serão:

$$\lambda_1 = A = K_o \equiv \beta J_o \tag{2.63a}$$

$$\lambda_2 = D = \tilde{K} \equiv \beta \tilde{J} \tag{2.63b}$$

Aplicando-se o critério de estabilidade (A-10) temos que o ponto fixo trivial, que caracteriza a fase paramagnética é estável na região definida por:

$$KT/\tilde{J} > |J_o/\tilde{J}| \tag{2.64a}$$

$$KT/\tilde{J} > 1 \tag{2.64b}$$

Para se estudar outros aspectos do mapeamento (2.58) tais como a identificação dos demais atratores e a determinação de suas estabilidades é necessário recorrer-se a uma análise numérica (veja Apêndice B). Essa análise nos permite reproduzir entre outras coisas o diagrama de fases do vidro de spin de Ising obtido por SK (figura 12). Nesse diagrama, além da fase paramagnética temos uma fase ferromagnética representada por um ponto fixo não trivial, $m^* \neq 0$; $q^* \neq 0$, uma fase vidro de spin caracterizada por um ponto fixo do tipo $m^*=0$; $q^* \neq 0$ bem como uma fase antiferromagnética representada por um duplo ciclo do tipo $m_{s+1} = - m_s = - m^*$; $q_{s+1} = q_s = q^*$. Todas as transições de fase são de segunda ordem no sentido discutido na secção (2.2.1).

Como último passo mostraremos que m_s e q_s podem ser identificados respectivamente como os parâmetros de ordem ferromagnético e vidro de spin em uma árvore com s+1 camadas. Observe inicialmente que as equações (2.58) representam as médias da

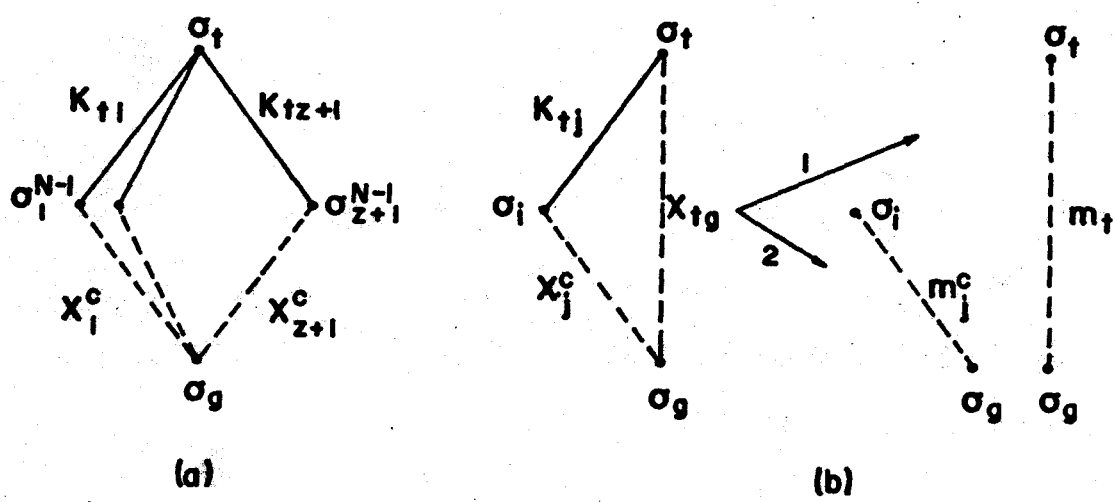


Figura 13 - Processo utilizado para a derivação da equação de TAP.

A partir do aglomerado (a) constituído pelo spin do topo, o spin fantasma e os spins da camada central podemos obter a magnetização no topo (2.66). Por outro lado, essa mesma quantidade e a magnetização na camada central podem ser obtidas a partir do aglomerado (b) seguindo-se, respectivamente, os caminhos indicados pelas setas 1 e 2 (respectivamente equações (2.68) e (2.67)). Combinando essas três equações obtêm-se as equações de TAP (2.74).

transmissividade, entre o spin fantasma e o spin do topo de uma rede com s+1 camadas, e de seu quadrado, segundo a distribuição de campo externo efetivo que atua neste último spin. Como já vimos na secçao (2.2) essa transmissividade pode ser diretamente identificada com a magnetização $\langle\sigma_t^{s+1}\rangle$ no topo de uma árvore de Cayley aberta com s+1 camadas. Desse modo, as equações (2.58) podem ser reescritas como:

$$m_s = [\langle\sigma_t^{s+1}\rangle]_{av} \tag{2.65a}$$

$$q_s = [\langle\sigma_t^{s+1}\rangle^2]_{av} \tag{2.65b}$$

onde $[\ ]_{av}$ indica a média sobre a desordem introduzida pelo campo externo efetivo.

2.3.2. A equação de TAP

Os primeiros autores a reconhecerem a importância do campo de reação no estudo dos vidros de spin foram Thouless, Anderson e Palmer (TAP)[45]. Utilizando a rede de Bethe esses autores desenvolveram uma equação fundamental para o valor esperado de σ, agora conhecida como equação de TAP. Essa equação substitui a equação de campo médio usual (2.17) por levar em conta a contribuição do campo de reação. Nesta secção mostraremos como a equação de TAP pode ser derivada usando o formalismo aqui desenvolvido.

Para isso, inicialmente devemos proceder a todas as renormalizações necessárias para reduzir a árvore (completa) ao aglomerado da figura 13. Esse aglomerado é constituído pelo spin do topo, σ_t, seus z+1 primeiros vizinhos σ_j e o spin fantasma σ_q.

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

Em outras palavras, devemos determinar primeiramente o campo externo efetivo X_j^c que atua nos spins da camada central. O campo efetivo que atua no topo da rede será então dado por:

$$X_t = \sum_{j=1}^{z+1} K_{tj}\ \theta_j^c$$

onde K_{tj} é a constante de interação entre o spin do topo e o j-ésimo spin da camada central e θ_j^c a transmissividade associada ao campo externo efetivo X_j^c. Tomando a tangente hiperbólica de ambos os lados dessa equação e lembrando que a transmissividade entre o spin do topo e o spin fantasma nada mais é do que a magnetização no topo teremos:

$$m_t = \tan h\ [\ \sum_{j=1}^{z+1} K_{tj}\ \theta_j^c\ ] \qquad (2.66)$$

Efetuando-se agora mais uma renormalização de forma a eliminar z spins da camada central pode-se facilmente chegar ao aglomerado da figura 13b. Nessa figura θ_{tg} representa a transmissividade associada à interação X_{tg} entre o spin do topo e o spin fantasma quando um um dos spin da camada central permanece sem ter sido eliminado. Para essa interação estamos usando a mesma notação dos campos externos efetivos porque, como na camada central temos z+1 spins, ela é obtida usando-se a mesma equação (2.50) usada na determinação desses campos. A partir desse aglomerado temos duas opções: primeiramente nós podemos renormalizá-lo de forma a encontrar a transmissividade entre o spin fantasma e o spin remanescente na camada central. Lembrando que, a exemplo do que fizemos com relação ao spin do topo, também essa transmissividade pode ser identificada como a magnetização nesse sítio, teremos:

$$m_j = [\theta_j^c + K_{tj}\theta_{tg}]/[1 + K_{tj}\theta_j^c\theta_{tg}]. \qquad (2.67)$$

Por outro lado, podemos dizimar o spin remanescente para encontrar a magnetização no topo da rede:

$$m_t = [\theta_{tg} + K_{tj}\theta_j^c]/[1 + K_{tj}\theta_j^c\theta_{tg}]. \qquad (2.68)$$

Dessa última equação podemos obter a seguinte relação:

$$\theta_{tg} = [m_t - K_{tj}\theta_j^c] / [1-K_{tj}m_t\theta_j^c]. \qquad (2.69)$$

Substituindo (2.69) em (2.67) e desprezando os termos $0(K_{tj}^2)$ temos:

$$m_j = \theta_j^c + K_{tj}\, m_t\, [1 - (\theta_j^c)^2] \qquad (2.70)$$

de modo que:

$$\theta_j^c = m_j - K_{tj}m_t[1 - (\theta_j^c)^2] \; . \qquad (2.71)$$

Elevando essa equação ao quadrado:

$$(\theta_j^c)^2 = m_j^2 - 2K_{tj}\, m_j m_t[1 - (\theta_j^c)^2] +$$

$$+ K_{tj}^2\, m_t^2\, [1 - (\theta_j^c)^2]^2 \qquad (2.72)$$

e substituindo (2.72) de volta em (2.71) podemos escrever:

$$\theta_j^c = m_j - K_{tj}\, m_t\, (1 - m_j^2) \qquad (2.73)$$

onde novamente desprezamos os termos $0(K_{tj}^2)$. Finalmente, (2.73) pode ser substituída em (2.66) e teremos:

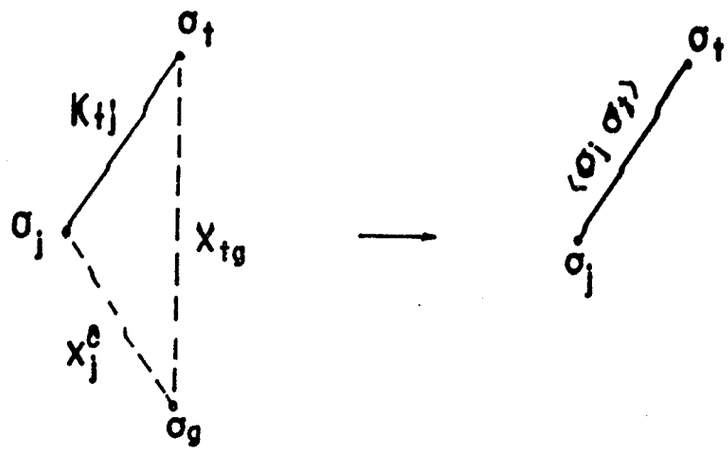


Figura 14 - Obtenção da energia interna do vidro de spin de Ising.

A partir do aglomerado constituído pelo spin do topo, o spin fantasma e um spin da camada central a correlação entre esse último e o spin do topo (2.76) pode ser obtida como indicado na figura. Dessa relação, conforme indicado em (2.75), a energia interna para o vidro de spin de Ising (2.79) pode ser obtida efetuando-se a média sobre a desordem.

$$m_t = \tan h \left[\sum_{j=1}^{z+1} K_{tj}\, m_j - m_t \sum_{j=1}^{z+1} K_{tj}^2 (1-m_j^2) \right] \tag{2.74}$$

que é exatamente a equação de TAP. Vale a pena reafirmar que as aproximações feitas para se obter (2.74) só podem ser consideradas corretas se agora efetuarmos a média com relação à desordem. Essa tarefa, como é sabido na literatura, tem resistido a todos os esforços e apenas observamos aqui que ela deve ser o último passo no procedimento adotado.

2.3.3. A energia interna

A energia interna para o modelo com interações aleatórias pode ser obtida utilizando-se um procedimento muito semelhante ao desenvolvido na secção 2.2.2. Como vimos neste secção, para sistemas regulares tudo se resume ao cálculo da correlação entre o spin do topo e um spin da camada central. Nesse caso, entretanto, como estamos tratando a desordem como temperada, para obtermos a energia interna devemos fazer a média dessa correlação com relação às distribuições de probabilidade. Dessa maneira a equação (2.42) no caso de sistemas aleatórios deve ser escrita como:

$$U = -\frac{b}{2} \left[\beta^{-1} K_{ij} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle\right]_{av}. \tag{2.75}$$

Consideremos o aglomerado da figura 14. Utilizando-se as leis de composição (2-10) a correlação $\langle \sigma_t \sigma_j \rangle$, entre o spin do topo e um spin da camada central, pode ser obtida como:

$$\langle \sigma_t \sigma_j \rangle = \left[K_{tj} + \theta_{tg} \theta_j^c\right] / \left[1 + K_{tj}\, \theta_{tg} \theta_j^c\right] \tag{2.76}$$

ou, lembrando que K_{tj} é $O(z^{-1/2})$, como:

$$\langle\sigma_t\sigma_j\rangle = K_{tj} + \theta_{tg}\theta_j^c - K_{tj}\,\theta_{tg}^2\,(\theta_j^c)^2 \qquad (2.77)$$

De tal forma que a energia interna por partícula, no limite em que $z\to\infty$, será dada por:

$$U = \frac{\beta^{-1}}{2}\, z \int\!\!\int\!\!\int P\,[K_{tj}]P[X_{tg}]P[X_j^c]\,[-K_{tj}\theta_{tg}\theta_j^c -$$

$$- K_{tj}^2 + K_{tj}^2\,\theta_{tg}^2(\theta_j^c)^2]\; dK_{tj}dX_{tg}\; dX_j^c \qquad (2.78)$$

Como fizemos no caso regular a energia interna será calculada para a situação mais geral que é aquela em que o atrator para as relações de recorrência (2.58) é um duplo ciclo antiferromagnético ($[\theta_{tg}]_{av} = m_+^*$, $[\theta_j^c]_{av} = m_-^*$ com $m_+^* = -\,m_-^*$). Usando as definições (2.55) e efetuando a média sobre a distribuição dos K_{tj} temos a seguinte expressão para a energia interna:

$$U = -\frac{1}{2}\; J_o\; m_+^*\; m_-^* - \frac{\tilde{J}^2}{2}\,(1 - q^2) \qquad (2.79)$$

Observe que na situação em que o atrator é um ponto fixo a energia interna é obtida da equação acima fazendo $m_+^* = m_-^* = m$ como:

$$U = -\frac{1}{2}\, J_o\, m^2 - \frac{\tilde{J}^2}{2}\,(1 - q^2). \qquad (2.80)$$

Essa é a expressão da energia interna do vidro de spin de Ising obtida primeiramente por SK[27].

2.3.4. A distribuição ±J

Suponhamos agora que os K_{ij}^{s} sejam independentemente distribuidos de acordo com (2.47). Substituindo-se essa distribuição em (2.52) e usando as definições (2.55) temos que:

$$Y_o^s = 2\omega\ K\ z^{-1}\ m_s \tag{2.81a}$$

$$\tilde{Y}_s^2 = \beta^2 J^2\ z^{-2}\ q_s - 4\ \omega^2 \beta J^2\ z^{-2}\ m_s^2 \tag{2.81b}$$

Usando as relações (2.51) a distribuição de probabilidades para o campo efetivo que atua na camada s+1 pode ser escrita como:

$$P|X_j^{s+1}| = \lim_{z\to\infty} [2\pi\varepsilon^2]^{-1/2} \exp[-(X_j^{s+1} - (2\omega-1)\beta J m_s)^2/2\varepsilon^2] \tag{2.82a}$$

onde

$$\varepsilon^2 = \beta^2 J^2\ z^{-1}\ q_s - 4\ \omega^2\ \beta^2\ J^2\ z^{-1}\ m_s^2\ . \tag{2.82b}$$

Efetuando-se o limite $z\to\infty$ obtemos que:

$$P[X_j^{s+1}] = \delta\ [X_j^{s+1} - 2\omega\beta J m_s] \tag{2.83}$$

Usando essa distribuição de probabilidades nas definições (2.55) obtemos a relação de recorrência:

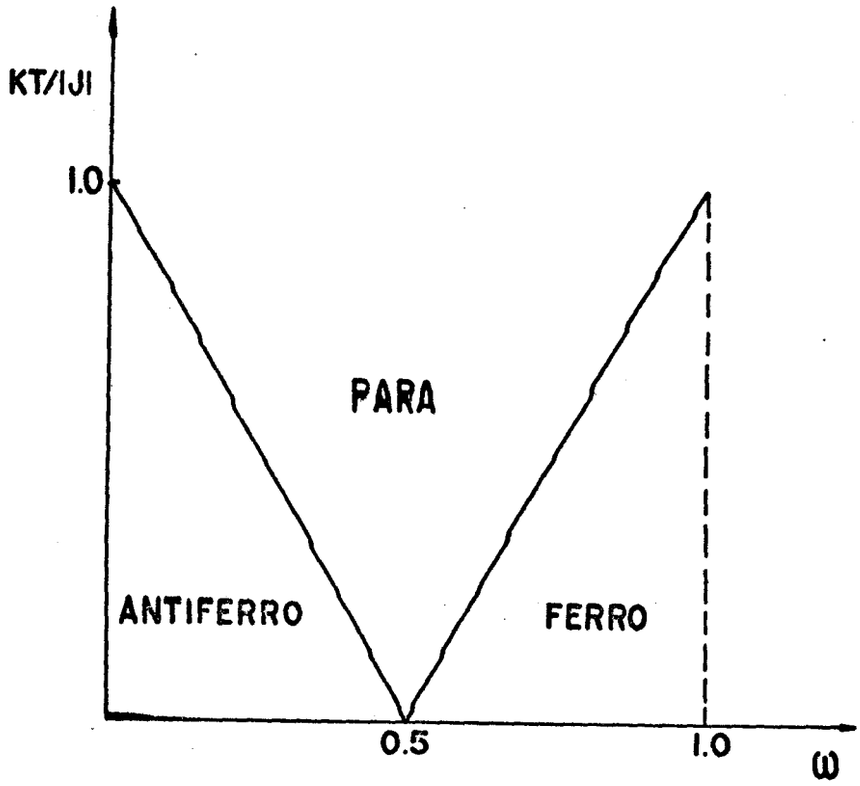


Figura 15 - Diagrama de fases para o vidro de Spin de Ising com distribuição $\pm$ J.

O diagrama de fases pode ser obtido determinando-se os atratores do mapeamento (2.84) de forma análoga ao que foi feito para o caso de desordem gaussianamente distribuída. No caso $\pm$ J, não há nenhum atrator correspondente à fase vidro de spin, porque a distribuição de probabilidades para o campo externo efetivo que atua no topo da rede é uma função Delta. Nesse caso obtém-se apenas as fases paramagnética , ferromagnética e antiferromagnética.

$$m_{s+1} = \tan h\ [(2\omega-1)\beta J m_s] \tag{2.84a}$$

$$q_{s+1} = m^2_{s+1}. \tag{2.84b}$$

Fazendo-se a substituição $\beta J' = \beta J(2\omega-1)$ a equação (2.84a) reproduz a equação de campo médio para o modelo de Ising ferromagnético (antiferromagnético). Nesse caso então não teremos uma fase vidro de spin e o diagrama de fases para esse sistema (figura 15) pode ser trivialmente obtido. Observe que a inexistência da fase vidro de spin é uma consequência direta da anulação da variância da distribuição de campo efetivo no limite $z\to\infty$. Isto, por sua vez, decorre do fato de a distribuição de probabilidades (2.47) apresentar um único parâmetro passível de ser dividido por z. Consequentemente, a inexistência da fase vidro de spin independe do modelo que está sendo estudado, advindo diretamente de (2.47). Em vista disso, nos estudos dos modelos de Potts e Ashkin-Teller aleatórios nos restringimos apenas à distribuição Gaussiana.

CAPÍTULO III

O MODELO DE POTTS NA ÁRVORE DE CAYLEY FECHADA

O modelo de Potts, formulado em 1952 por R.B.Potts[70] seguindo uma sugestão de C.Domb, é uma generalização do modelo de Ising para um sistema de mais de duas componentes. Esse modelo pode ser formulado em qualquer rede associando-se a cada sítio i uma variável λ_i que pode assumir p valores e será designada por spin. Para uma revisão recente sobre o modelo de Potts veja Ref.71.

A energia de interação entre dois spins λ_i e λ_j localizados em sítios adjacentes é definida como sendo:

$$H_{ij} = pJ_{ij}\delta_{\lambda_i\lambda_j} \tag{3.1}$$

onde

$$\delta_{\lambda_i\lambda_j} = 1 \text{ se } \lambda_i = \lambda_j$$

$$= 0 \quad \text{se } \lambda_i \neq \lambda_j \text{ é o delta de Kronecker.}$$

Usando a representação[72]

$$\lambda_i = \omega^{k_i} \quad ; \quad \omega = \exp(2\pi i/p) \ , \ k_i = 1, \ldots p \tag{3.2}$$

podemos escrever:

$$\delta_{\lambda_i\lambda_j} = p^{-1} \sum_{r=1}^{p} \lambda_i^r \lambda_j^{p-r} \tag{3.3}$$

A Hamiltoniana para o modelo de Potts em uma rede qual-

quer, com interações apenas entre primeiros vizinhos, pode ser escrita como:

$$- \beta H = \sum_{<ij>} H_{ij} = \sum_{<ij>} K_{ij} \sum_{r=1}^{p} \lambda_i^r \lambda_j^{p-r} \tag{3.4}$$

onde $K_{ij} = \beta J_{ij}$. Observe que na situação em que p=2, devido às definições (3.2) as variáveis λ só podem assumir os valor ± 1 de modo que teremos:

$$- \beta H = \sum_{<ij>} K_{ij} (\lambda_i \lambda_j + 1) \tag{3.5}$$

que corresponde à Hamiltoniana para o modelo de Ising.

Neste capítulo, será estudado o modelo de Potts com p-estados na árvore de Cayley fechada definida na secção 3.1. Ainda nesta secção serão introduzidas as variáveis transmissividade térmica e sua dual para o modelo de Potts e suas leis de composição. Com a introdução dessas variáveis mostra-se que o modelo de Potts na árvore de Cayley fechada é mapeado no mesmo modelo na árvore de Cayley fechada assimétrica decorada da figura 19b, bem como na árvore fechada assimétrica da figura 4b.

Na secção 3.2 resolvemos o modelo de Potts regular na árvore de Cayley fechada e mostramos que quando as interações são ferromagnéticas os resultados obtidos dependem profundamente do sinal das ligações que unem as superfícies das árvores abertas. Verificamos, por exemplo, que quando essas ligações são ferromagnéticas (antiferromagnéticas) a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética é de primeira (segunda) ordem. No caso de as ligações entre as árvores serem antiferromagnéticas mostra-se também que o alinhamento dentro de cada árvore é ferromagnético e que spins em árvores abertas diferentes se alinham antiferromagnéticamente.

Como um último resultado dessa secção mostramos que se as interações em uma árvore aberta são ferromagnéticas e na outra antiferromagnéticas a única fase possível é a fase paramagnética.

Na secção 3.3 é analisado o modelo de Potts na árvore de Cayley fechada com interações aleatórias independentemente distribuídas segundo uma Gaussiana. Utilizando um procedimento semelhante ao usado para se estudar o vidro de spin de Ising derivamos as relações de recorrência para os parâmetros de ordem ferromagnético e vidro de spin. É importante salientar que nesse ponto fazemos a transformação que nos leva à arvore de Cayley fechada assimétrica da figura 4b. Essa transformação permite que os resultados obtidos sejam considerados como uma aproximação de campo médio para o vidro de spin de Potts. Como resultados interessantes dessa secção vale a pena destacar a inexistência de uma fase vidro de spin no sentido usual e o aparecimento, para $p>6$, de uma fase aleatória. Nesta secção é feito também um estudo sucinto do atrator que caracteriza essa fase.

Finalmente, na secção 3.3.1 generalizamos a equação de TAP para o modelo de Potts e na última secção deste capítulo derivamos a energia interna desse sistema.

3.1. A árvore de Cayley fechada

A árvore de Cayley fechada é um gráfico derivado do que convencionamos chamar de árvore de Cayley aberta. Essa árvore foi proposta em 1979 por Jellito com o intuito de construir uma rede com uma conectividade menos trivial. Na versão original, a árvore de Jellito é construída unindo-se a partir da superfície duas árvores de Cayley abertas idênticas, como mostrado na figura 16a. Nesse trabalho usaremos uma construção ligeiramente diferen-

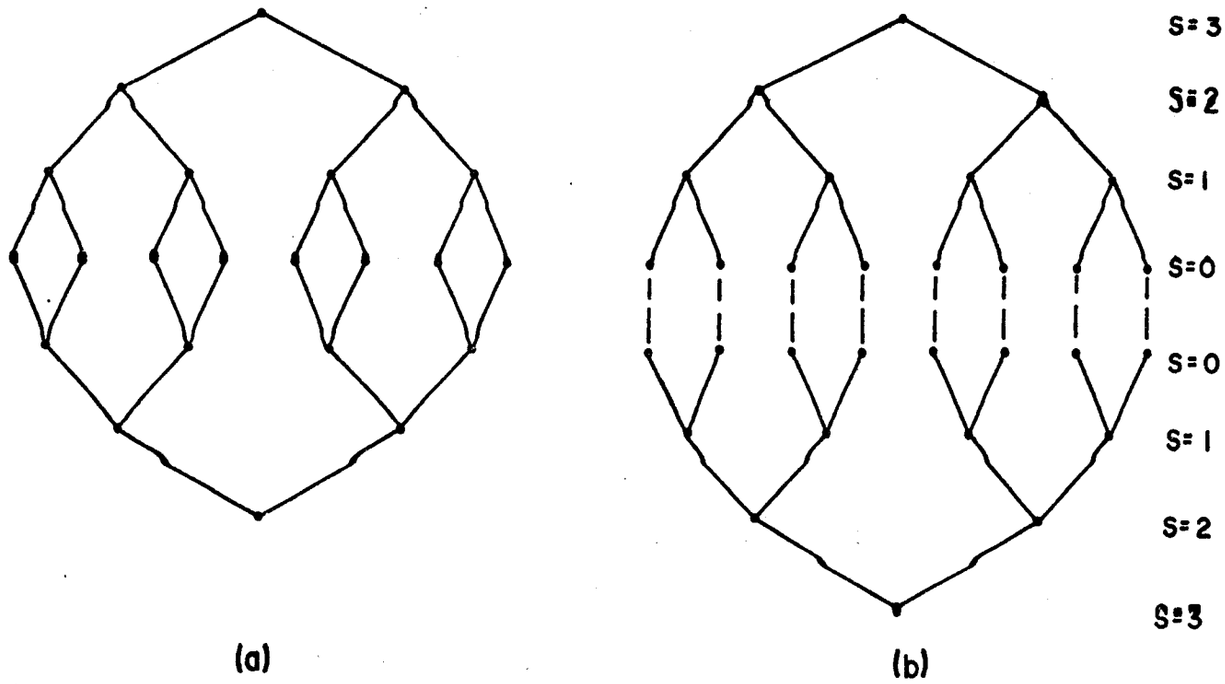


Figura 16 - Árvore de Cayley fechada com razão de Ramificação z=2 e n=4 camadas.

A árvore de Cayley fechada proposta por Jellito em 1979 é constituída por uma árvore aberta e sua imagem especular(a). Na versão modificada da árvore de Jellito utilizada neste trabalho (b) os sítios superficiais de duas árvores abertas são unidas por ligações, designadas por junções, que podem assumir valores diferentes das demais ligações. As camadas das árvores abertas superior e inferior são numeradas a partir de suas superfícies (s=0) até os topos. O topo da árvore aberta inferior é designada por fundo.

te, proposta em 1984[73], na qual as superfícies das duas árvores abertas serão unidas através de novas ligações, como mostrado na figura 16b. A introdução dessas novas ligações, que podem ser diferentes das ligações nos interiores das árvores é feita no sentido de facilitar a aplicação das técnicas do grupo de renormalização no espaço real. A árvore de Jellito é um caso particular que pode ser recuperado no limite em que as interações associadas às novas ligações tendem ao infinito. Será mantida para a árvore de Cayley fechada a mesma notação utilizada no Capítulo II para a árvore de Cayley aberta. As camadas das árvores abertas superior e inferior que a compõe serão numeradas independentemente a partir das superfícies (s=0) até os topos (s=N-1). O topo da árvore aberta inferior será designada por fundo e as ligações que unem as duas árvores serão chamadas junções.

A árvore de Cayley fechada assimétrica pode ser reobtida desta árvore fazendo-se com que todos os pontos que constituem a árvore aberta inferior coalesçam em um único ponto. Esse ponto desempenhará o papel do sítio extra no qual é colocado o spin fantasma. Em termos de interações entre spins isso corresponde a se fazer com que as interações na árvore aberta inferior sejam infinitamente grandes. Nessas condições, as junções podem ser identificadas com um campo magnético externo.

O procedimento que adotaremos nesse capítulo é análogo ao adotado no capítulo anterior. Ele consiste na aplicação de técnicas do grupo de renormalização no espaço real, para substituir as aglomerados existente na união das árvores abertas superior e inferior por uma única ligação. Essa ligação será chamada de junção renormalizada. A repetição iterativa desse procedimento nos permitirá então reduzir toda a árvore de Cayley fechada a uma única ligação entre os spins do topo e do fundo. A exemplo do que fizemos no capítulo anterior, esse procedimento pode ser bastante

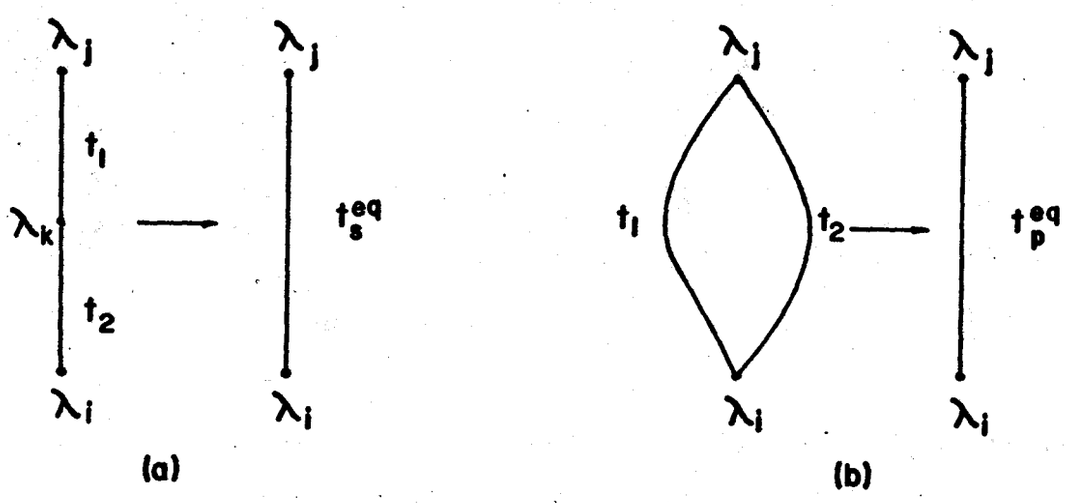


Figura 17 - Leis de composição para as transmissividades no modelo de Potts.

No modelo de Potts com p-estados a transmissividade associada a uma ligação K_1 entre 2 spins é definida por $t = [1 - \exp(-p K_1)] / [1 + (p-1) \exp(-pK_1)]$ e sua dual por $t^D = [1 - t] / [1 + (p - 1)t]$. Suas leis de composição são idênticas às derivadas para o modelo de Ising. Para ligações em série $t_s^{eq} = t_1 . t_2$. Para ligações em paralelo $(t_p^{eq})^D = t_1^D . t_2^D$.

simplificado com a introdução das variáveis transmissividade e sua dual. Como no caso de Ising, para um sistema de dois spin interagindo entre si essas variáveis nada mais são do que a correlação $<\lambda_1^r \lambda_2^{p-r}>$ e o fator de Boltzmann associado à interação entre eles. Utilizando a Hamiltoniana (3.4) verifica-se facilmente que:

$$t \equiv <\lambda_1^r \lambda_2^{p-r}> = [1 - \exp(-pK_{ij})]/[1+(p-1) \exp(-pK_{ij})] \tag{3.6a}$$

$$t^D \equiv \exp(-pK_{ij}) = [1 - t]/[1 + (p-1)t] \tag{3.6b}$$

Observe que para p=2 as definições para a transmissidade e sua dual para o modelo de Ising são reproduzidas. A partir dessas definições, pode-se facilmente encontrar as mesmas leis de composição obtidas no capítulo anterior para essa variáveis, a saber:

i) Para duas ligações em série, (figura 17a), com transmissividades associadas t_1 e t_2 a transmissividade equivalente, correspondendo à substituição desse sistema por uma única ligação é dada pelo produto:

$$t_s^{eq} = t_1 \cdot t_2 = t_2 \cdot t_1 \tag{3.7a}$$

ii) Para duas ligações em paralelo com transmissividades t_1 e t_2 (figura 17b) a dual da transmissividade equivalente, correspondendo à substituição desse aglomerado por uma única ligação, é dada pelo produto das duais

Figura 18 - Aglomerados que dão origem a um mesmo mapeamento.

Devido à comutatividade do produto de transmissividades o mesmo mapeamento é gerado pela aplicação das leis de composição da figura 17 aos aglomerados (a) e (b). Dessa forma as redes construídas a partir desses aglomerados são equivalentes pois sistemas de spins nelas definidos apresentarão as mesmas propriedades locais.

$$(t_p^{eq})^D = t_1^D \cdot t_2^D \tag{3.7b}$$

Na equação (3.7a) nós fizemos questão de explicitar a comutatividade da lei de composição para associações de ligações em série porque essa propriedade traz uma consequência importante. Como no capítulo anterior, pode-se intuir que a transmissividade entre o spin do topo e o spin do fundo da árvore de Cayley fechada dependerá unicamente do mapeamento. Por sua vez esse mapeamento fica completamente defindo pelo aglomerado a ser substituído por uma única ligação. Devido à propriedade de comutatividade da lei de composição (3.7a), pode-se mudar a ordem das ligações em série do aglomerado a ser renormalizado, conforme indicado na figura 18. Para a determinação da transmissividade entre os spins do topo e do fundo da árvore de Cayley fechada, essa mudança é irrelevante. Note que para os dois aglomerados da figura 18 obtém-se o mesmo mapeamento. Podemos concluir então que as mesmas propriedades locais são obtidas para o modelo definido em qualquer das árvores da figura 19. Entretanto a árvore da figura 19a que dá origem ao aglomerado da figura 18a é topológicamente distinta da árvore da figura 19b que dá origem ao aglomerado da figura 18b. No caso do modelo de Potts a demonstração de que a árvore de Cayley aberta, com um campo magnético externo atuando em seus sítios superfíciais, pode ser transformada na árvore de Cayley fechada assimétrica é uma extensão direta da já apresentada para o modelo de Ising. Como uma consequência dessa equivalência pode-se então fazer as seguintes identificações entre quantidades na árvore de Cayley fechada e na árvore de Cayley fechada assimétrica decorada: o spin do fundo de uma pode ser identificado com o spin fantasma da outra e as junções renormalizadas como o campo magnético externo. Mais importante ainda, a correlação entre os spins do topo e do fundo na árvore de Cayley fechada pode ser interpretada como a magnetização no topo da árvo-

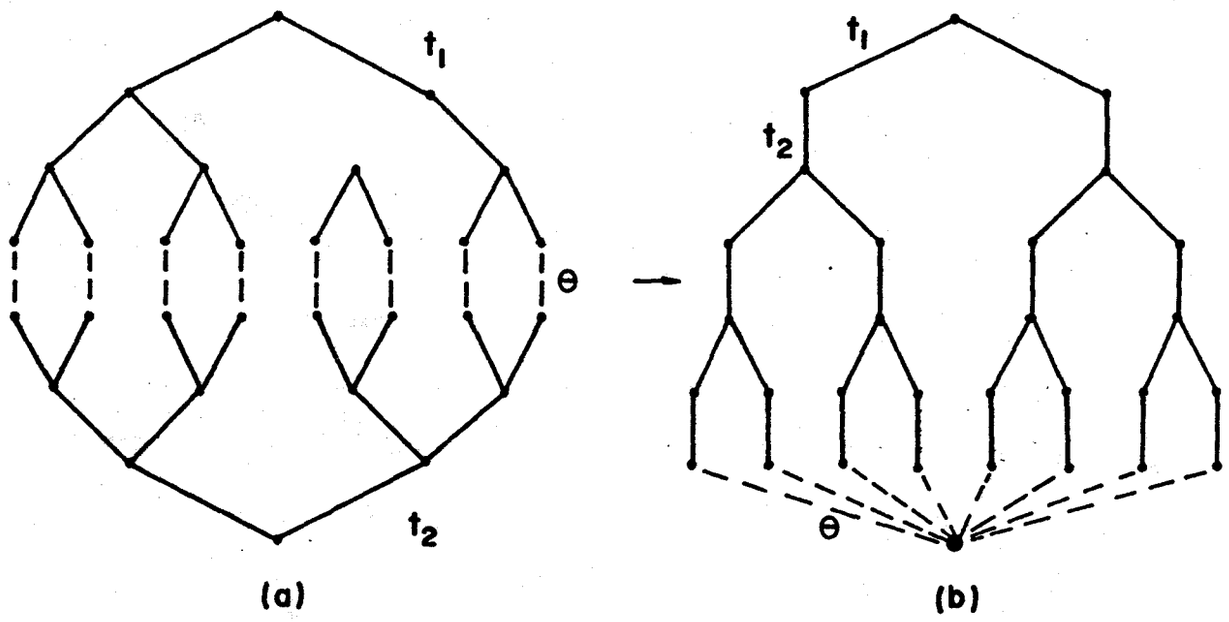


Figura 19 - Equivalência entre as árvores de Cayley fechada e fechada assimétrica decorada.

Os aglomerados que devem ser utilizados no processo de renormalização para as redes (a) e (b) são apresentados na figura 18 e como visto nessa figura, dão origem ao mesmo mapeamento. Dessa forma, as junções e o spin do fundo da rede (a) são identificados, respectivamente, com o campo externo e o spin fantasma na rede (b). Modelos de spin na rede (b) podem ainda ser mapeados em modelos na árvore de Cayley fechada assimétrica (Figura 4b) pela substituição $t_1 t_2 \rightarrow t$. Portanto, modelos de spins em qualquer dessas três árvores apresentam as mesmas propriedades locais.

re de Cayley fechada assimétrica decorada.

As propriedades locais do modelo na árvore fechada assimétrica podem ser obtidas das propriedades na árvore fechada decorada pela substituição das duas ligações em série por uma única ligação com transmissividade $t = t_1 t_2$. Dessa forma, a relação de recorrência para o modelo de Ising regular na árvore de Cayley fechada pode ser obtida de (2.13) simplesmente substituindo-se t por $t_1 t_2$. Finalmente, devemos salientar que para o cálculo das propriedades termodinâmicas globais do modelo essa equivalência não tem absolutamente nenhum sentido.

3.2. O modelo de Potts regular na árvore de Cayley fechada

No estudo do modelo de Potts regular na árvore de Cayley fechada todas as interações K_{ij} serão consideradas iguais a K na árvore aberta superior e iguais a L na árvore inferior. Aplicando as leis de composição (3.7) ao aglomerado da figura 20a, onde θ_s é a transmissividade associada à junção entre as s-ésimas camadas das árvores abertas superior e inferior e t_1 e t_2 são as transmissividades associadas respectivamente às interações K e L temos que:

$$[1-\theta_{s+1}]/[1+(p-1)\theta_{s+1}] = [1-t_1 t_2 \theta_s]^z/[1+(p-1)t_1 t_2 \theta_s]^z. \tag{3.8}$$

Por uma questão de simplicidade vamos nos restringir ao caso particular em que a razão de ramificação, z, é igual a 2. Nesse caso (3.8) pode ser reescrita como:

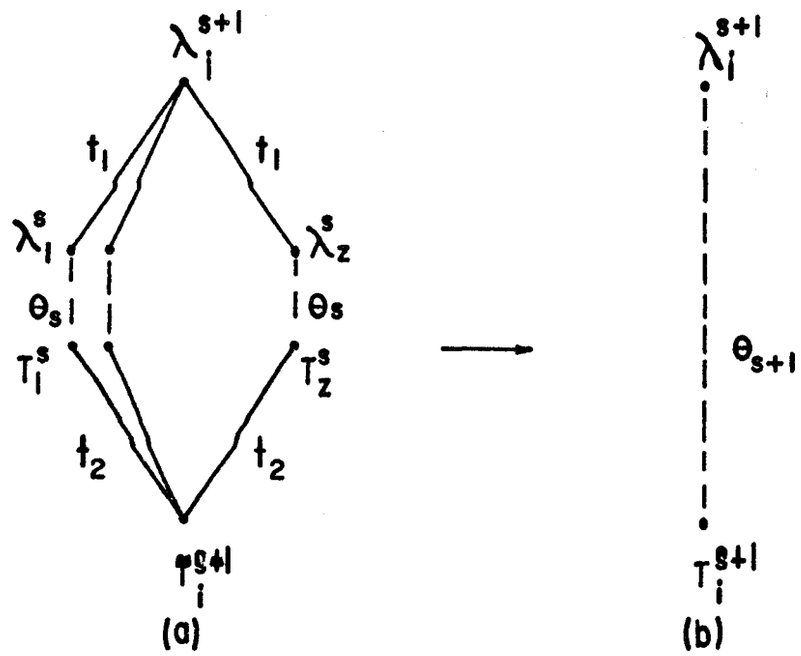


Figura 20 - Obtenção da relação de recorrência para o modelo de Potts regular na árvore de Cayley fechada.

A aplicação das leis de composição da figura 17 ao aglomerado (a) gera o mapeamento: $[1 - \theta_{s+1}] / [1 + (p-1)\theta_{s+1}] = [1 - t_1 t_2 \theta_s]^z / [1 + (p-1) t_1 t_2 \theta_s]^z$ onde θ_i é a transmissividade associada à junção entre as i-ésimas camadas das árvores abertas superior e inferior. Para razão de ramificação z=2 esse mapeamento se reduz a: $\theta_{s+1} = [2t_1 t_2 \theta_s + t_1^2 t_2^2 \theta_s^2 (p-2)] / [1 + (p-1) t_1^2 t_2^2 \theta_s^2]$. Fazendo a substituição $t = t_1 t_2$ obtém-se o mapeamento gerado pela árvore de Cayley fechada assimétrica da figura 4b.

$$\theta_{s+1} = [2t_1t_2\theta_s + t_1^2t_2^2\theta_s^2\ (p-2)]/[1+(p-1)\,t_1^2t_2^2\theta_s^2] \tag{3.9}$$

Exceto pelo fato de $\theta^*=0$ ser ponto fixo para quaisquer valores de t_1 e t_2, as propriedades desse mapeamento serão profundamente dependentes do sinal do produto dessas variáveis. Dessa forma, como fizemos no capítulo anterior, os dois casos serão analisados separadamente. Lembrando que a substituição $t_1t_2 \to t$ deve reproduzir o mapeamento para a árvore de Cayley fechada assimétrica diz-se que o modelo é ferromagnético se $t_1t_2>0$ e antiferromagnético se $t_1t_2<0$.

a) Caso ferromagnético ($t_1t_2>0$)

Além do ponto fixo $\theta^*=0$, característico da fase paramagnética pode-se ver da figura 21 que o mapeamento (3.9) apresenta dois pontos fixos não triviais:

$$\theta^*_{\pm} = \frac{(p-2)\,t^2 \pm [(p-2)^2t^4 - 4(p-1)\,t^2(1-2t)]^{1/2}}{2\ (p-1)\ t^2} \tag{3.10}$$

onde $t = t_1t_2$. Note que esses pontos fixos são os mesmos que seriam obtidos na árvore de Cayley fechada assimétrica.

Como a magnetização no topo da árvore é determinada pelo ponto fixo pode-se definir a transmissividade (temperatura) crítica $t_c^{(1)}$ como sendo o menor valor de t para o qual os pontos fixos (3.10) são reais. Assim, $t_c^{(1)}$ será determinado de:

$$(p-2)^2(t_c^{(1)})^2 - 4(p-1)\ [1-2t_c^{(1)}] = 0 \tag{3.11}$$

como:

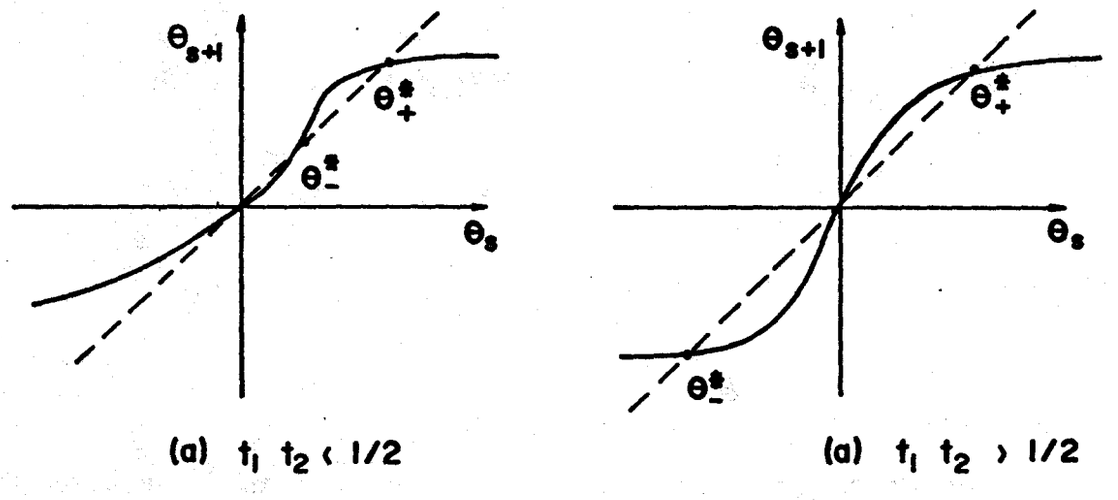


Figura 21 - Relação de Recorrência para o caso Ferromagnético ($t = t_1 t_2 > 0$).

Para $t>0$ o mapeamento da figura 20 tem as seguintes propriedades: i) $\theta^* = 0$ é ponto fixo para qualquer valor de t sendo estável (instável) para $t_c^{(2)} = 1/2 > t$ ($<t$).ii). O ponto fixo θ_+^* é estável para $t > t_c^{(1)} = [2p(p-1)^{1/2} - 4(p-1)] / [(p-2)^2]$.iii) O ponto fixo θ_-^* é instável para $t_c^{(1)} < t < t_c^2$ e estável para $t>t_c^{(2)}$.iv) Para $t = t_c^{(1)}$ têm-se $\theta_+^* = \theta_-^* > 0$.v) Para $t>t_c^{(1)}$ esses pontos fixos começam a se deslocar em sentidos contrários com o ponto fixo θ_-^* passando pela origem em $t=t_c^{(2)}$.vi). O mapeamento conserva o sinal da junção renormalização, ou seja, sinal (θ_{s+1}) = sinal (θ_s).

A escolha do sinal da condição inicial traz implicações que se acham discutidas nas figuras 22 e 23.

$$t_c^{(1)} = [2p(p-1)^{1/2} - 4(p-1)]/[(p-2)^2] \qquad (3.12)$$

onde só tomamos a raiz positiva porque, por hipótese $t=t_1t_2>0$.

Substituindo agora (3.11) em (3.10) nós veremos que na "temperatura" crítica $t_c^{(1)}$ o campo externo efetivo - e consequentemente a magnetização - terá uma discontinuidade dada por:

$$\Delta_1 = \theta_+^* [t_c^{(1)}] = \theta_-^* [t_c^{(1)}] = (p-2)/2(p-1) \qquad (3.13)$$

que é exatamente a metade da discontinuidade obtida em teoria de campo médio[71,74]. Na figura 22 apresentamos a temperatura crítica $t_c^{(1)}$ e a discontinuidade Δ_1 em função do número de estados de Potts, p.

É interessante observar-se também que com a diminuição (aumento) da temperatura (transmissividade) a partir de $t_c^{(1)}$ os pontos fixos θ_+^* e θ_-^* começam a se afastar, deslocando-se em direções contrárias. Enquanto o ponto fixo θ_+^* se dirige em direção ao valor máximo 1 atingindo-o em t=1, o ponto fixo θ_-^* se dirige em direção à origem. Uma segunda "temperatura crítica" $t_c^{(2)}$ - as razões para essa denominação ficarão claras logo mais - é definida quando $\theta_-^* = 0$ obtendo-se $t_c^{(2)}=1/2$. Nessa segunda temperatura crítica a discontinuidade será:

$$\Delta_2 = 2\Delta_1 = (p-2)/(p-1) \qquad (3.14)$$

Para temperaturas ainda menores esse ponto fixo assume valores negativos atingindo o valor mínimo $-1/(p-1)$ também em t=1.

No que diz respeito à estabilidade dos pontos fixos θ_-^* e θ_+^* (por inspeção da figura 21 e/ou aplicação do critério de estabilidade (A-5)) as seguintes informações são obtidas:

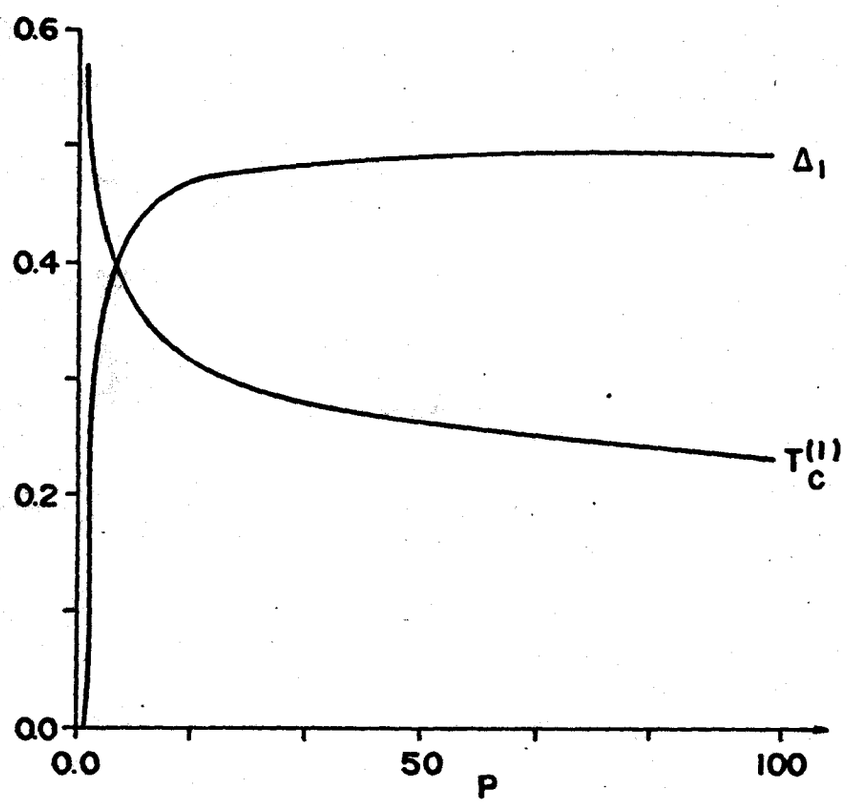


Figura 22 - Transmissividade crítica $t_c^{(1)}$ e descontinuidade Δ_1 em função do número de estados de Potts.

Para condições iniciais positivas o atrator do mapeamento da figura 20 correspondente à fase ferromagnética é o ponto fixo θ_+^*. Dessa forma, para $t_c^{(1)} < t < t_c^{(2)}$ (Figura 21a) há coexistência entre as soluções paramagnética e ferromagnética, caracterizando uma transição de fase de 1ª ordem. A descontinuidade Δ_1 no parâmetro de ordem em $t_c^{(1)}$ é dada por $\Delta_2=(p-2)\ /\ 2(p-1)$. Em $t_c^{(2)}$ a descontinuidade é o dobro desse valor reproduzindo a obtida em teoria de campo médio. Para $t_c^{(1)} < t < t_c^{(2)}$, o atrator em direção ao qual se dará a convergência é determinado pela condição inicial θ_0. Para $\theta_0 > \theta_-^*$ $(< \theta_-^*)$ a convergência se dará em direção a θ_+^* $(\theta^*=0)$.

i) O ponto fixo $\theta^*=0$ é estável até a temperatura crítica definida por $t_c^{(2)}$, ou seja, para $t<t_c^{(2)}$

ii) O ponto fixo θ_+^* é estável sempre que for real, ou seja, para $t > t_c^{(1)}$. Observe que, como $t_c^{(2)} \geq t_c^{(1)}$ (a igualdade vale para p=2) no intervalo $t_c^{(1)} < t < t_c^{(2)}$ as soluções paramagnéticas ($\theta^*=0$) e ferromagnética θ_+^* são simultâneamente estáveis.

iii) O ponto fixo θ_-^* é instável no intervalo $t_c^{(1)} < t < t_c^{(2)}$ e estável para $t>t_c^{(2)}$.

Observa-se também que, como as transmissividades t e θ_s só podem assumir valores no intervalo $(-1/(p-1), 1)$, o mapeamento (3.9), para $t>0$, fará com que θ_{s+1} e θ_s tenham sempre o mesmo sinal. Dessa forma, o problema apresenta soluções bastante diferentes dependendo de se a condição inicial (ou seja, as junções não renormalizadas que unem as árvores de Cayley abertas inferior e superior) for suposta positiva ou negativa. Como essa árvore é equivalente à árvore de Cayley fechada assimétrica, onde essas junções são interpretadas como sendo o campo magnético externo, tem-se (para $p>2$) soluções bastante diferentes se o campo magnético externo for positivo ou negativo. Observe que esse resultado se deve ao fato de que campos positivos atuando em uma direção significam que esta direção está sendo favorecida ao passo que campos negativos que ela está sendo desfavorecida. Para o modelo de Ising essa distinção é irrelevante pois nesse caso só temos dois estados acessíveis e favorecer um ou desfavorecer outro é a mesma coisa. Entretanto para o modelo de Potts com $p>2$ essa distinção se torna importante pois nesse caso desfavorecer um estado significa favorecer, simultâneamente os outros p-1 estados. Vamos então analisar também esses dois casos separadamente.

a.1) Junções Ferromagnéticas ($\theta_o>0$)

Nesse caso os dois pontos fixos acessíveis são $\theta^*=0$ e $\theta^* = \theta^*_+$ uma vez que θ^*_- quando for positivo será também instável. Isso significa que a fase de baixa temperatura é aquela em que a correlação entre os spins do topo e do fundo é positiva indicando que os spins nas duas árvores de Cayley abertas se alinham na mesma direção. No caso do modelo posto na árvore de Cayley fechada assimétrica, isso significa que os spins se alinham paralelamente ao spin fantasma, ou seja, na direção em que atua o campo magnético. No intervalo $t_c^{(1)} < t < t_c^{(2)}$ pode-se ver da figura 21 que a existência do ponto fixo instável θ^*_-, localizado entre os pontos fixos estáveis $\theta^* = 0$ e θ^*_+ faz com que a convergência do mapeamento (3.9) dependa fortemente da condição inicial θ_o. Dessa forma, tanto a temperatura crítica quanto a discontinuidade no parâmetro da ordem dependem da condição inicial. Para obter-se o ponto fixo θ^*_+ é preciso que $\theta_o > \theta^*_-$ de modo que uma vez fixada a condição inicial a temperatura crítica t_c é definida como sendo aquela para a qual $\theta^*_- = \theta_o$. A discontinuidade no parâmetro de ordem nessa temperatura crítica é dada por:

$$\Delta = \theta^*_+ (t_c) \tag{3.15}$$

Pode-se ver facilmente ainda que para $\theta_o > \theta^*_- (t_c^{(1)})$ a convergência se dará em direção ao ponto fixo θ^*_+ sempre que ele for real de modo que para esses valores da junção (campo externo) a temperatura crítica será sempre $t_c^{(1)}$. Por outro lado, na árvore de Cayley fechada assimétrica, o campo magnético é introduzido para evitar que os resultados sejam triviais de modo que no final do cálculo pode-se tomar o limite em que esse campo se anula. Nesse limite, tem-se então que a temperatura crítica é $t_c^{(2)}$ e a discontinuidade no

parâmetro de ordem Δ_2. É importante lembrar que Δ_2 é a discontinuidade obtida em teoria de campo médio[71,74].

Finalmente, no que diz respeito à ordem da transição diz-se que ela é de 1ª ordem porque o parâmetro de ordem apresenta sempre uma discontinuidade na temperatura crítica e também porque há coexistência de soluções.

a.2) Junções antiferromagnéticas ($\theta_o < 0$)

Na situação em que a condição inicial é negativa os dois únicos pontos fixos acessíveis são o ponto fixo trivial e o ponto fixo $\theta^* = \theta^*_-$ que quando negativo é estável. Dessa forma, na fase de baixa temperatura, a correlação entre os spins do topo e do fundo da árvore de Cayley fechada será negativa indicando que dois spins, um na árvore aberta superior e outro na inferior se encontram em estados diferentes. É importante observar-se que a situação ainda é de ferromagnetismo uma vez que a correlação entre dois spins na mesma árvore é positiva. Isso pode ser melhor visualizado calculando-se a correlação entre o spin do topo, e um de seus primeiros vizinhos. Para isso utiliza-se o aglomerado da figura 23 onde λ_j^s e λ_j^i são respectivamente, um spin da camada central superior e sua imagem na camada central inferior. λ_t e λ_f são respectivamente o spin de topo e o spin do fundo. Observe que a transmissividade associada à ligação direta entre esses dois últimos spins, também é θ^*_- porque, a exemplo do que ocorria no capítulo anterior, na camada central teremos z+1=3 sítios. Aplicando as leis de composição (3.7) a esse aglomerado, a correlação entre o spin do topo e o spin da camada central é obtida como:

$$\langle \lambda_t^r \, (\lambda_j^s)^{p-r} \rangle = \frac{[t_1 + t_2(\theta^*_-)^2 + (p-2)\, t_1 t_2 (\theta^*_-)^2]}{1+(p-1)\; t_1 t_2 (\theta^*_-)^2} \qquad (3.16)$$

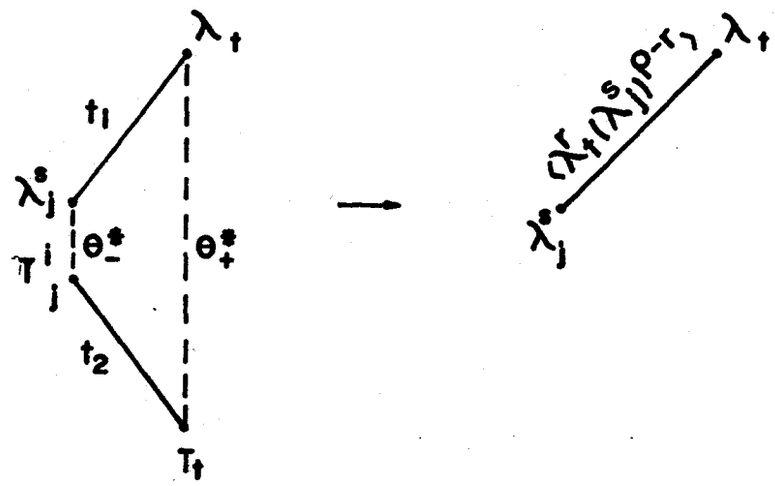


Figura 23 - Cálculo da correlação entre o spin do topo e um spin da camada central superior.

Para condições iniciais negativas (junção antiferromagnéticas) o único atrator estável será o ponto fixo trivial (θ_-^*) se $t<t_c^{(2)}$ ($t>t_c^{(2)}$) de forma que não há coexistência de soluções. Além disso, como o ponto fixo θ_-^* decresce continuamente não há descontinuidade no parâmetro de ordem na temperatura crítica $t_c^{(2)}$ caracterizando a transição como de 2ª ordem. Para junções antiferromagnéticas, a fase de baixa temperatura pode ainda ser caracterizada como ferromagnética apesar da correlação entre os spins do topo e do fundo da rede ser negativa. Isso é verificado aplicando as leis de composição da figura 17 ao aglomerado (a). A correlação entre o spin do topo e um spin de camada central da mesma árvore aberta (superior ou inferior) assim obtida é positiva.

Observe que essa correlação será sempre positiva porque a única quantidade negativa, θ_-^*, se encontra elevada ao quadrado. Isso porque as junções renormalizadas estão associadas em série, o que sempre ocorrerá quando calcularmos as correlações entre dois spins na mesma árvore de Cayley aberta.

Como já foi observado anteriormente, a transição é de 2^a (1^a) ordem quando as junções são antiferromagnéticas (ferromagnéticas). Isso é justificado observando-se que o ponto fixo θ_-^* se torna estável e negativo na mesma temperatura em que o ponto fixo trivial se torna instável de modo que não há coexistência de soluções e a temperatura crítica $t_c = 1/2$ é independente da condição inicial.

Em segundo lugar $\theta_-^*(t_c) = 0$ e com a diminuição da temperatura esse ponto fixo se afasta de forma contínua desse valor de modo que o parâmetro de ordem não é discontínuo na temperatura crítica. Essas observações nos permitem então concluir que a transição, nesse caso, é de segunda ordem.

Encerrando o estudo do modelo de Potts ferromagnético na árvore de Cayley fechada apresentamos na figura 24 o seu diagrama de fases no plano (t,θ_o). Nessa figura a fase ferromagnética obtida na situação em que as junções são ferromagnéticas (antiferromagnéticas) é indicada como Ferro 1 (Ferro 2).

b) Caso antiferromagnético ($t_1 t_2 < 0$)

Fazendo em (3.9) a substituição $t = -t_1 t_2$ obtém-se que:

$$\theta_{s+1} = [-2t\theta_s + t^2\theta_s^2(p-2)]/[\,1+(p-1)t^2\theta_s^2\,] \qquad (3.17)$$

É claro que isso em nada altera as propriedades do

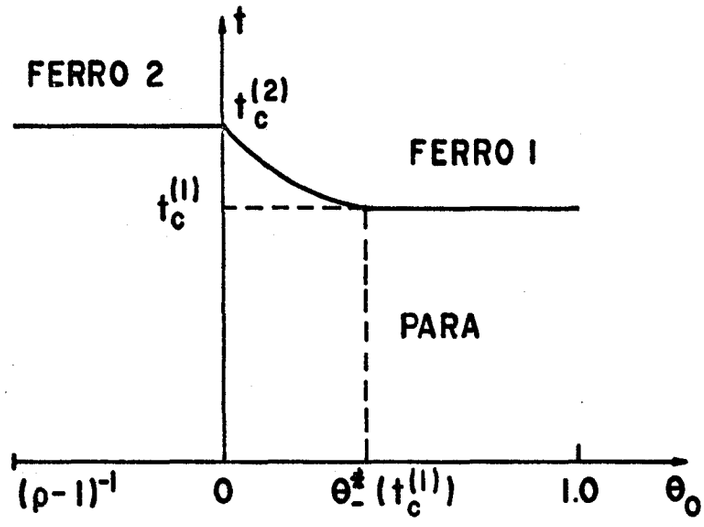


Figura 24 - Diagrama de fases para o modelo de Potts ferromagnético.

Além da fase paramagnética (indicada por PARA) esse modelo apresenta ainda duas fases ferromagnéticas. A fase FERRO 1 - na qual todos os spins do sistema se ordenam ferromagnéticamente e a fase FERRO 2 onde os spins estão ferromagnéticamente ordenados porém em estados distintos em cada árvore aberta.

ponto fixo trivial $\theta^*=0$ mantendo-se este estável até a temperatura crítica definida por $t_c=1/2$. No que diz respeito às demais propriedades do mapeamento, entretanto, as alterações são profundas (figura 25). Basta observar que se θ_s é negativa (positiva) então θ_{s+1} será positiva (negativa), ou seja, o atrator não trivial para esse mapeamento é um duplo ciclo antiferromagnético. No capítulo anterior, atratores desse tipo foram estudados utilizando-se a segunda iterada do mapeamento. Nesse caso entretanto essa segunda iterada é bastante complicada o que nos leva ao estudo numérico desse mapeamento. Lembrando que t se acha contido no intervalo $(0,+1/(p-1))$ pode-se facilmente verificar que o único atrator para a relação de recorrência (3.17) é o ponto fixo $\theta^*=0$. Podemos então concluir que o modelo de Potts antiferromagnético na árvore de Cayley fechada é paramagnético até T=0.

3.3. O Modelo de Potts com Interações Aleatórias na Árvore de Cayley Fechada

Nesta secção estuda-se o modelo de Potts com interações aleatórias na árvore de Cayley fechada no limite em que a razão de ramificação z tende ao infinito. A desordem no sistema é considerada novamente como temperada e nos limitaremos a estudar apenas a situação em que a distribuição de probabilidades é Gaussiana. É importante frisar que as propriedades locais de sistemas aleatórios na árvore de Cayley fechada também podem ser mapeadas nas de sistemas definidos na árvore de Cayley fechada decorada e estas, por sua vez, nas de sistemas na árvore de Cayley fechada assimétrica. Lembrando que a solução de modelos nessa última árvore é equivalente à sua solução na árvore de Cayley aberta com campo na superfície, o que faremos nesta secção corresponde a teoria de campo médio para o vidro de spin de Potts.

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

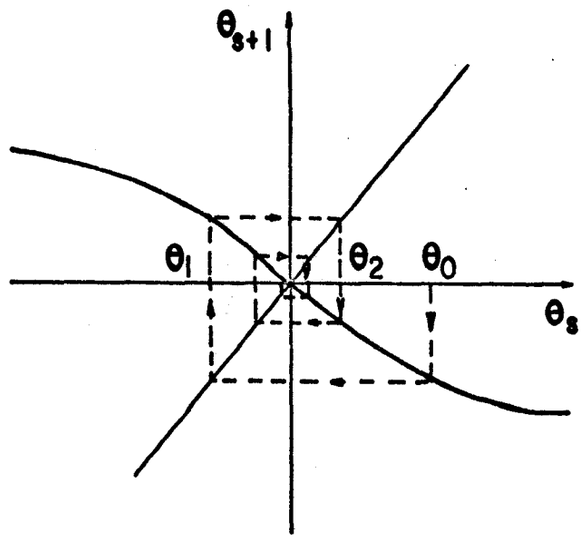


Figura 25 - Relação de recorrência para o modelo de Potts antiferromagnético.

Para $t<0$ o mapeamento da figura 20 apresenta como único atrator o ponto fixo trivial que se mantém estável em todo intervalo de definição de $t(t\varepsilon[0, -1/(q-1)])$. Portanto, a única fase possível para o modelo de Potts com interações antiferromagnéticas é a fase paramagnética.

Como já foi observado anteriormente para que se possa garantir a obtenção de resultados fisicamente aceitáveis, no limite em que a razão de ramificação é infinita, a média e a variância da distribuição de probabilidades para as interações devem ser inversamente proporcionais a z. Entretanto, quando consideramos sistemas na árvore de Cayley fechada apenas os parâmetros da distribuição de probabilidades das interações de uma das árvores abertas devem ser escalados com z. Se, por outro lado, esse procedimento for adotado para todas as distribuições, obtém-se resultados triviais. Isso fica mais evidente se consideramos a transformação dessa rede na árvore de Cayley fechada assimétrica decorada apresentada na figura 19b. Nesta árvore, os sítios que decoram as ligações possuem z=2. Sendo assim, apenas os parâmetros da distribuição de probabilidades para as interações na árvore aberta superior devem ser feitas proporcionais a 1/z.

De modo análogo ao procedimento utilizado no estudo do vidro de spin de Ising os aglomerados de ligações e spins na união das árvores abertas são substituídos por uma única ligação. Esse procedimento é repetido até que toda a árvore de Cayley fechada seja reduzida a uma única ligação unindo os spins do topo e do fundo. A cada passo desse processo a distribuição de probabilidades para a junção renormalizada que substitui o aglomerado é obtida das distribuições de probabilidades para as interações nele presentes. Como algumas dessas ligações são também junções renormalizadas esse procedimento permite, a exemplo do que foi feito na secção 2.3, construir uma relação de recorrência envolvendo as médias e variâncias dessas distribuições em dois passos consecutivos.

Como apenas a distribuição de probabilidade para as interações na árvore aberta superior tem seus parâmetros divididos por z vamos usar uma notação que permite distinguir variáveis das árvores abertas superior e inferior. Designaremos então as intera-

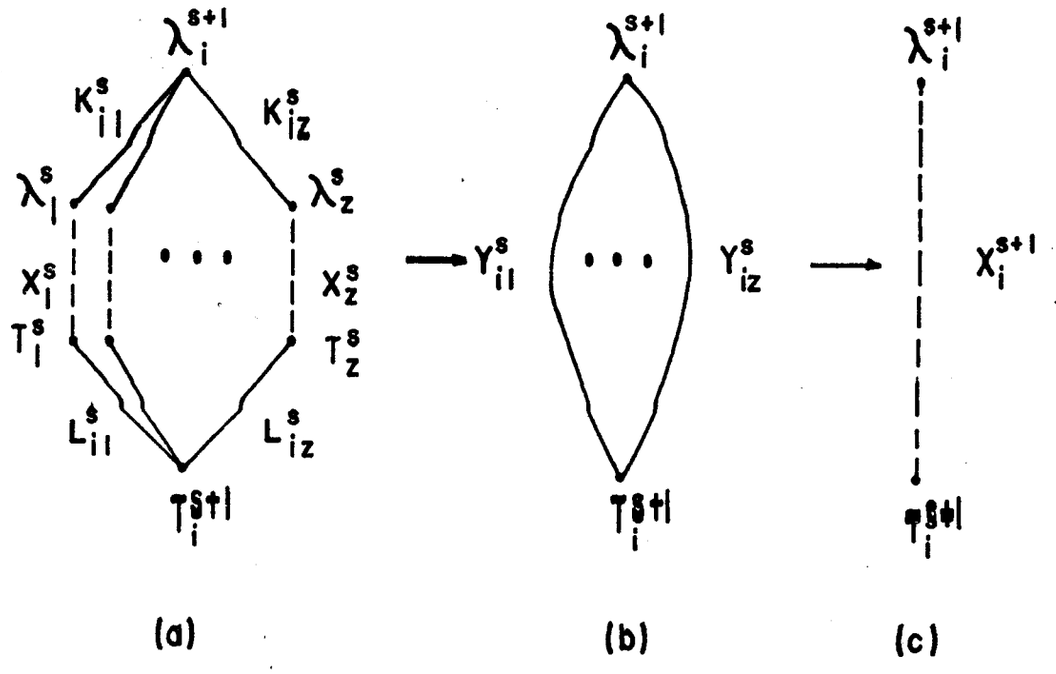


Figura 26 - Obtenção da relação de recorrência para o modelo de Potts com interações aleatórias na árvore de Cayley fechada.

Usando as leis de composição da figura 17 o campo efetivo $X_i^{s+1}(\varsigma)$, que atua sobre um spin da camada s+1, é escrito em termos das interações não renormalizadas K_{ij}^s e L_{ij}^s e das junções renormalizadas X_j^s, como nas equações (3-20) e (3-21). No limite em que $z\to\infty$, a exemplo do que foi feito para o modelo de Ising, o teorema do limite central nos assegura que a distribuição de probabilidades para o campo efetivo X_i^{s+1} será Gaussiana. A sua média e variância podem ser obtidas da média e variância da distribuição de probabilidades dos $Y_{ij}^s(b)$.

ções ligando os z spins λ_j^s da s-ésima camada da árvore aberta superios ao spin λ_i^{s+1} da camada s+1 dessa mesma árvore por K_{ij}^s. Na árvore aberta inferior as ligações correspondentes são designadas por L_{ij}^s e os spins por τ_j^s e τ_j^{s+1} respectivamente. Com essa notação a Hamiltoniana para o aglomerado da figura 26a será escrita como:

$$- \beta H = p \sum_{j=1}^{z} K_{ij}^s \, \delta_{\lambda_i^{s+1} \lambda_j^s} + p \sum_{j=1}^{z} L_{ij}^s \, \delta_{\tau_i^{s+1} \tau_j^s} + $$

$$+ p \sum_{j=1}^{z} X_j^s \, \delta_{\lambda_j^s \tau_j^s} \qquad (3.18)$$

onde X_j^s são as junções renormalizadas unindo as s-ésimas camadas das árvores abertas superior e inferior. As interações K_{ij}^s são independentemente distribuídas com probabilidade:

$$P[K_{ij}^s] = [z/2\pi\tilde{K}^2]^{1/2} \exp\left[-z(K_{ij}^s - K_o/z)^2/2\tilde{K}^2\right] \qquad (3.19a)$$

e as interações L_{ij}^s, também independentemente, com probabilidade:

$$P[L_{ij}^s] = [2\pi\tilde{L}^2]^{-1/2} \exp\left[-(L_{ij}^s - L_o)^2/2\tilde{L}^2\right] \qquad (3.19b)$$

Utilizando as leis de composição (3.7) esse aglomerado pode ser substituído por uma única ligação (figura 26b)

$$X_i^{s+1} = \sum_{j=1}^{z} Y_{ij}^s \qquad (3.20)$$

onde

$$Y_{ij}^s = \frac{1}{p} \ln \left\{ \left[1+(p-1)\, t_{ij}^s \, h_{ij}^s \, \theta_j^s\right] / \left[1-t_{ij}^s h_{ij}^s \theta_j^s\right] \right\} \qquad (3.21)$$

com t_{ij}^s, h_{ij}^s e θ_j^s representando respectivamente as transmissivida-

des associadas com as interações K^s_{ij} e L^s_{ij} e as junções renormalizadas X^s_j. Devido à distribuição de probabilidades (3.19a) as interações K^s_{ij} são da ordem do inverso da razão de ramificação. No limite em que esta quantidade tende ao infinito (3.21) pode ser expandida em série de potências para se obter, em primeira ordem:

$$Y^s_{ij} \cong K^s_{ij}\, h^s_{ij}\, \theta^s_j \tag{3.22}$$

O teorema do limite central garante que as junções renormalizadas X^{s+1}_j da equação (3.20) tem uma distribuição de probabilidades Gaussiana, independentemente de qual seja a distribuição de probabilidades para os Y^s_{ij}. O mesmo teorema garante também a existência das seguintes relações:

$$X^{s+1}_o = z\, Y^s_o \tag{3.23a}$$

$$\tilde{X}^2_{s+1} = z\, \tilde{Y}^2_s \tag{3.23b}$$

onde X^s_o e $\tilde{X}^2_s$ são respectivamente a média e a variância da distribuição de probabilidades da junção renormalizada X^{s+1}_i e Y^s_o e $\tilde{Y}^2_s$ respectivamente a média e a variância da distribuição de probabilidades dos Y^s_{ij}. Usando as equações (3.22) essas últimas grandezas são obtidas de:

$$Y^s_o = \iiint P[X^s_j]P[L^s_{ij}]P[K^s_{ij}]\; K^s_{ij}\, h^s_{ij}\, \theta^s_j\, dK^s_{ij}\, dL^s_{ij} dX^s_j \tag{3.24a}$$

$$\tilde{Y}^2_s = \iiint P[X^s_j]P[L^s_{ij}]P[K^s_{ij}]\; [K^s_{ij}\, h^s_{ij}\, \theta^s_j - Y^s_o]^2\, dK^s_{ij}\, dL^s_{ij}\, dX^s_j \tag{3.24b}$$

Note que essas equações só diferem das equações (2.54) pela introdução das variáveis relativas à árvore aberta inferior. A contribuição dessas variáveis, entretanto, se limita à introdução de duas constantes multiplicativas dadas por:

$$\alpha = \int P\,[L^s_{ij}]\; h^s_{ij}\; dL^s_{ij} \tag{3.25a}$$

$$\tilde{\alpha}^2 = \int P\,[L^s_{ij}]\; (h^s_{ij})^2\; dL^s_{ij} \tag{3.25b}$$

Como em (2.55) define-se:

$$m_s = \int P\,[X^s_j]\; \theta^s_j\; dX^s_j \tag{3.26a}$$

$$q_s = \int P\,[X^s_j]\; (\theta^s_j)^2\; dX^s_j\;. \tag{3.26b}$$

Combinando os três pares de equações acima tem-se que:

$$Y^s_o = \alpha\; K_o\; z^{-1}\; m_s \tag{3.27a}$$

$$\tilde{Y}^2_s = \tilde{\alpha}^2\;\; \tilde{K}^2\; z^{-1}\; q_s \tag{3.27b}$$

De forma que usando as relações (3.23) a distribuição de probabilidades para as junções renormalizadas que unem as (s+1)-ésimas camadas das árvores abertas superior e inferior pode ser explicitamente escrita como:

$$P[X^{s+1}_i] = [2\pi\; \tilde{\alpha}^2\, \tilde{K}^2\; q_s]^{-1/2}\; \exp[-(X^{s+1}_i - \alpha\; K_o\; m_s)^2/2\; \tilde{\alpha}^2\;\; \tilde{K}^2\; q_s] \tag{3.28}$$

Análogamente as que foi feito no capítulo anterior,o

mapeamento que relaciona as médias e variâncias das distribuições de probabilidades para as junções renormalizadas em dois passos consecutivos é obtido da substituição da equação (3.28) na equação (3.26) como:

$$m_{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2}\ \theta\left[\alpha\ K_o\ m_s + \tilde{\alpha}\ \tilde{K}\ q_s^{1/2}\ x\right] dx \tag{3.29a}$$

$$q_{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2}\ \theta^2\left[\alpha\ K_o\ m_s + \tilde{\alpha}\ \tilde{K}\ q_s^{1/2}\ x\right] dx \tag{3.29b}$$

onde:

$$\theta(y) = \left[1-\exp(-py)\right]/\left[1+(p-1)\exp(-py)\right]. \tag{3.29c}$$

A passagem para a árvore de Cayley fechada assimétrica pode ser feita simplesmente omitindo-se em todas essas equações a dependência nas variáveis associadas à árvore aberta inferior, o que em termos das constantes α e $\tilde{\alpha}^2$ corresponde a igualá-las à unidade. Portanto, as equações de campo médio para o vidro de spin de Potts são[83]:

$$m_{s+1}=(2\pi)^{-1/2} \int_{\infty}^{\infty} e^{-x^2/2}\ \frac{1-\exp\left[-pK_o m_s - p\tilde{K} q_s^{1/2}\ x\right]}{1+(p-1)\exp\left[-pK_o m_s - p\tilde{K} q_s^{1/2}\ x\right]}\ dx \tag{3.30a}$$

$$q_{s+1}=(2\ )^{-1/2} \int_{\infty}^{\infty} -e^{2/2}\left\{\frac{1-\exp\left[-pK_o m_s - p\tilde{K} q_s^{1/2}\ x\ \right]}{1+(p-1)\exp\left[-pK_o m_s - p\tilde{K} q_s^{1/2}\ x^2\right]}\right\}^2 dx \tag{3.30b}$$

Antes de passarmos a análise do mapeamento propriamento dito vamos mostrar que m_s e q_s podem ser identificados, respectivamente, com os parâmetros de ordem ferromagnético e vidro

de spin. Para isso procedemos da seguinte forma: inicialmente efetuamos todas as renormalizações necessárias para que a árvore de Cayley fechada assimétrica com (s+1) camadas fique reduzida a apenas uma ligação entre o spin do topo e o spin fantasma, ou seja, até que o sistema fique reduzido a apenas um spin sob a ação de um campo magnético efetivo X_t^{s+1}, cuja distribuição de probabilidades é dada por (3.28). Da Hamiltoniana para esse sistema:

$$H = - p\, X_t^{s+1}\, \delta_{\lambda_t^{s+1}\, \lambda_g} \tag{3.31}$$

onde λ_t^{s+1} é o spin do topo e λ_g o spin fantasma, obtém-se a função de partição:

$$Z = p\, [\exp(pX_t^{s+1}) + (p-1)]. \tag{3.32}$$

Dessa grandeza, a magnetização é obtida como:

$$M = [p \exp(pX_t^{s+1})]/[\exp(pX_t^{s+1}) + (p-1)] \tag{3.33}$$

Entretanto, no caso do modelo de Potts é importante observar-se que a magnetização não é o verdadeiro parâmetro de ordem - o qual toma valores de 0 a 1 - mas se encontra relacionada com ele por[71,75,76]

$$m = [M - 1]/[p-1] \tag{3.34}$$

Substituindo (3.33) nessa última equação obtém-se que:

$$m = [1 - \exp(-p\, X_t^{s+1})]/[1 + (p-1) \exp(p\, X_t^{s+1})] \tag{3.35}$$

Comparando as equações (3.35) e (3.30) verifica-se

que essas últimas podem ser interpretadas como as médias, segundo a distribuição de campo efetivo, do parâmetro de ordem e de seu quadrado, o que completa a identificação procurada.

Como era de se esperar, para p=2 o mapeamento (3.30) reproduz as equações de SK para o vidro de spin de Ising. Entretanto para $p \neq 2$ esse mapeamento apresenta resultados completamente diferentes dos obtidos para o modelo de Ising.

Destaca-se entre esses resultados a impossibilidade de existência de uma fase vidro de spin no sentido usual ($m^*=0, q^* \neq 0$). Isso pode ser facilmente visualizado através do seguinte raciocínio. Suponhamos que em um certo estágio do processo iterativo $m_s=0$ e $q_s \neq 0$. Como a função $\theta(p\tilde{K}q_s^{1/2}x)$, definida em (3.29c), tem o mesmo sinal de seu argumento e além disso, como $\theta(p\,\tilde{K}\,q_s^{1/2}\,x) > -\theta(-p\,\tilde{K}\,q_s^{1/2}\,x)$ a iterada seguinte será do tipo $m_{s+1}>0$, $q_{s+1}>0$, para $p>2$. Para $p<2$ as desigualdades são invertidas de modo que a iterada seguinte será do topo $m_{s+1}<0$, $q_{s+1}>0$. Com isso fica então demonstrado que $m^* = 0$, $q^* \neq 0$, que é o ponto fixo característico da fase vidro de spin, não é ponto fixo do mapeamento (3.30). Portanto o modelo de Potts com unterações aleatórias não apresenta a fase vidro de spin.

Outra informação relativa ao mapeamento (3.30) que pode ser obtida analiticamente diz respeito à estabilidade do ponto fixo trivial ($m^*=0$, $q^*=0$). A região onde esse ponto fixo é estável pode ser determinada estudando-se, como fizemos para o modelo de Ising, os autovalores do Jacobiano do mapeamento. Suas fronteiras são obtidas aplicando-se o critério de estabilidade (A.10)

$$K_B T/\tilde{J} = 1 \tag{3.36a}$$

$$K_B T/\tilde{J} = J_o/\tilde{J} \tag{3.36b}$$

onde $J_o = K_B T K_o$ e $\tilde{J} = K_B T \tilde{K}$.

Devido à complexidade do mapeamento (3.30) suas demais propriedades são obtidas numericamente (veja Apêndice B). As relações de recorrência serão estudadas para os valores de p= 3,4, 5,6 e 8. De uma maneira geral, os diagramas de fase obtidos podem ser grosseiramente divididos em 2 grupos - $p<6$ e $p\geq 6$. O diagrama de fase para p=3 (figura 27) é representativo dos do primeiro grupo e o diagrama de fase para p=6 dos do segundo (figura 28). Além da fase paramagnética, já discutida e indicada nesses diagramas por PARA, foram encontradas as seguintes fases:

a) Fase Ferromagnética (indicada por Ferro): Esta é uma das fases de baixa temperatura para $p\neq 2$ sendo caracterizada por um ponto fixo em que m* e q* são positivos. Ela ocorre mesmo para valores negativos de $J_o/\tilde{J}$ ocupando as regiões que para p=2 eram ocupadas pela fase vidro de spin. Outra diferença com relação ao diagrama de fase para o vidro de spin de Ising é o aparecimento de uma região - indicada pelas áreas tracejadas nas figuras 27 e 28- em que essa solução coexiste com a solução paramagnética. Essa região de coexistência de soluções cresce com p e como vimos anteriormente, indica que a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética é de primeira ordem.

b) Fase Antiferromagnética ($\langle 2\rangle_{AF}$): Essa fase, caracterizada por um atrator que é um duplo ciclo do tipo $m_1>0$, $m_2<0$ e $q_1\neq q_2\neq 0$, é uma outra fase de baixa temperatura do modelo. Com o aumento de p a região ocupada por essa fase é deslocada, pela fase ferromagnética para valores cada vez mais negativos do parâmetro $J_o/\tilde{J}$. Como não há nenhum indicativo de coexistência entre essa fase e suas vizinhas todas as transições envolvendo-a são classificadas como de 2ª ordem.

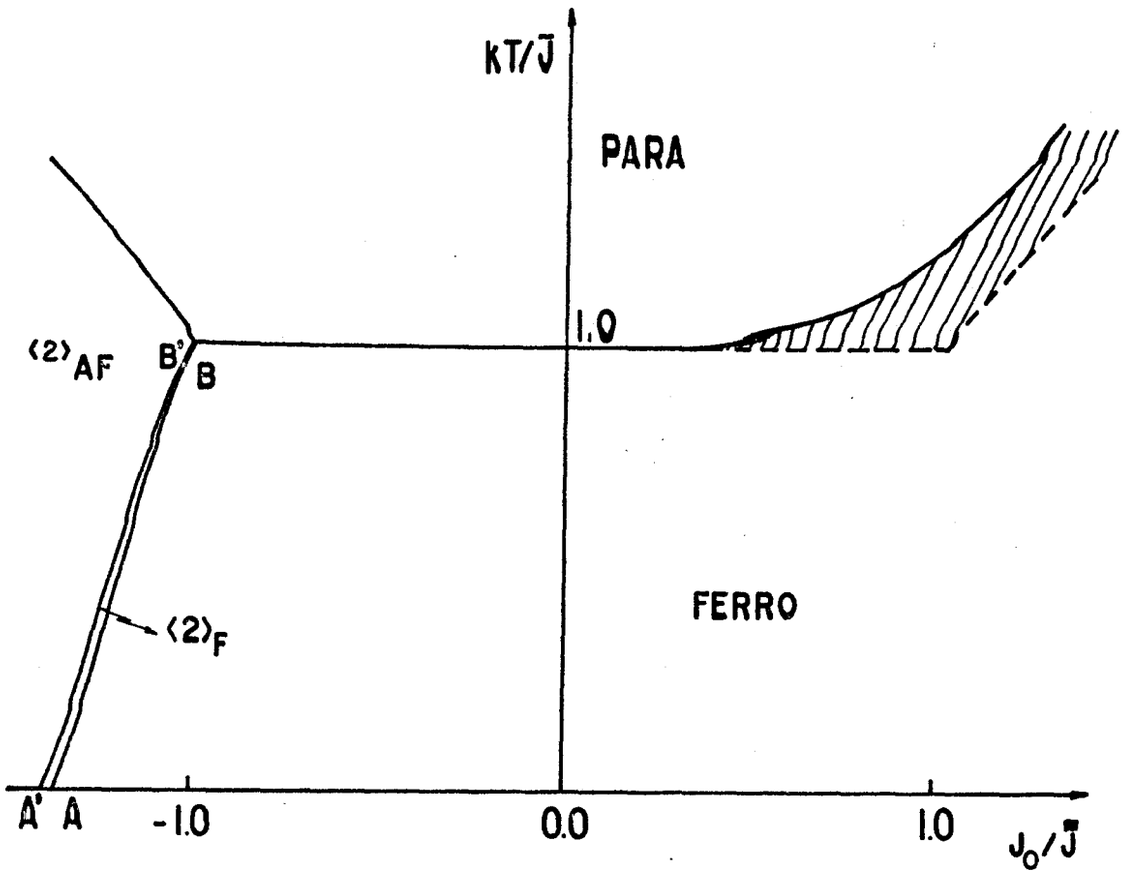


Figura 27 - Diagrama de fase do vidro de spin de Potts com P=3.

O diagrama de fases do vidro de spin de Potts pode ser determinado a partir da identificação dos atratores do mapeamento (3.30). Esse diagrama apresenta as seguintes fases: i) paramagnética indicada por PARA e caracterizada pelo ponto fixo trivial $m^* = q^* = 0$. ii) ferromagnética (FERRO) caracterizada por um ponto fixo não trivial $m^* \neq 0$, $q^* \neq 0$. Na região hachurada as soluções FERRO e PARA coexistêm caracterizando essa transição como de 1ª ordem. iii) Bi-ferromagnética ($\langle 2 \rangle_F$) caracterizada por um duplo ciclo com os dois valores de m positivos. iv) Antiferromagnética ($\langle 2 \rangle_{AF}$) caracterizada por um duplo ciclo onde os dois valores de m têm sinais contrários. À excessão da transição PARA-FERRO todas as demais são de 2ª ordem. Digno de nota também é a inexistência de uma fase vidro de spin.

c) Fase Bi-Ferromagnética ($<2>_F$): Essa fase ocupa uma pequena região no formato de uma tira localizada entre as fases ferromagnética e antiferromagnética e é caracterizada por um duplo ciclo no qual os dois valores de m são positivos. As duas transições ferro - <2>F e antiferro - <2>F parecem ser de 2ª ordem no sentido em que não há discontinuidade no parâmetro de ordem, para p<6. Mantendo-se a temperatura constante na passagem do sistema (p<6) da fase ferromagnética para a fase antiferromagnética é observada a seguinte evolução do atrator: com a diminuição em direção a valores cada vez mais negativos do parâmetro $J_o/\tilde{J}$ o ponto fixo ferromagnético fica instável e abre-se continuamente em um duplo ciclo do tipo $0<m_1<m_2$ característico da fase biferromagnética. Na fronteira entre essas fases (linha AB nas figuras 27 e 28) o atrator é um duplo ciclo (ponto fixo) dado por:

$$m_1 = m_2 \; ; \; q_1 = q_2$$

Com a posterior diminuição do parâmetro $J_o/\tilde{J}$ os valores de m_1 e m_2 se tornam cada vez mais distintos com m_1 se deslocando em direção à origem. m_1 torna-se negativa de maneira contínua de modo que a fronteira entre as fases bi-ferromagnética e antiferromagnética (linha A'B' nas figuras 27 e 28) é caracterizada por um duplo ciclo dado por:

$$m_1 = 0 \quad , \quad m_2 > 0 \quad e \quad q_1 \neq q_2 \neq 0$$

d) Fase Aleatória (A): Os diagramas de fase para $p \geq 6$ diferem dos demais pelo aparecimento de uma nova fase, designada aleatória, em uma pequena região incrustada entre as fases ferromagnética e antiferromagnética. Essa fase é caracterizada por um atrator que apresenta uma evolução extremamente interessante. Fixando-se parâmetro $J_o/\tilde{J}$ com o aumento da temperatura o ponto fi

Figura 28 - Diagrama de fase do vidro de spin de Potts com p=6.

Para p≥6 o diagrama de fases para o vidro de spin de Potts apresenta uma outra fase, indicada por A em (b), além das discutidas na figura 27. Essa fase foi designada de aleatória por ser caracterizada por um atrator que parece ser não periódico. Esse atrator é descrito em detalhes nas figuras 29 e 30. Ao lado da fase aleatória existe uma pequena região, indicada por M em (b), onde ocorre um fenômeno de metaestabilidade muito interessante (figura 31).

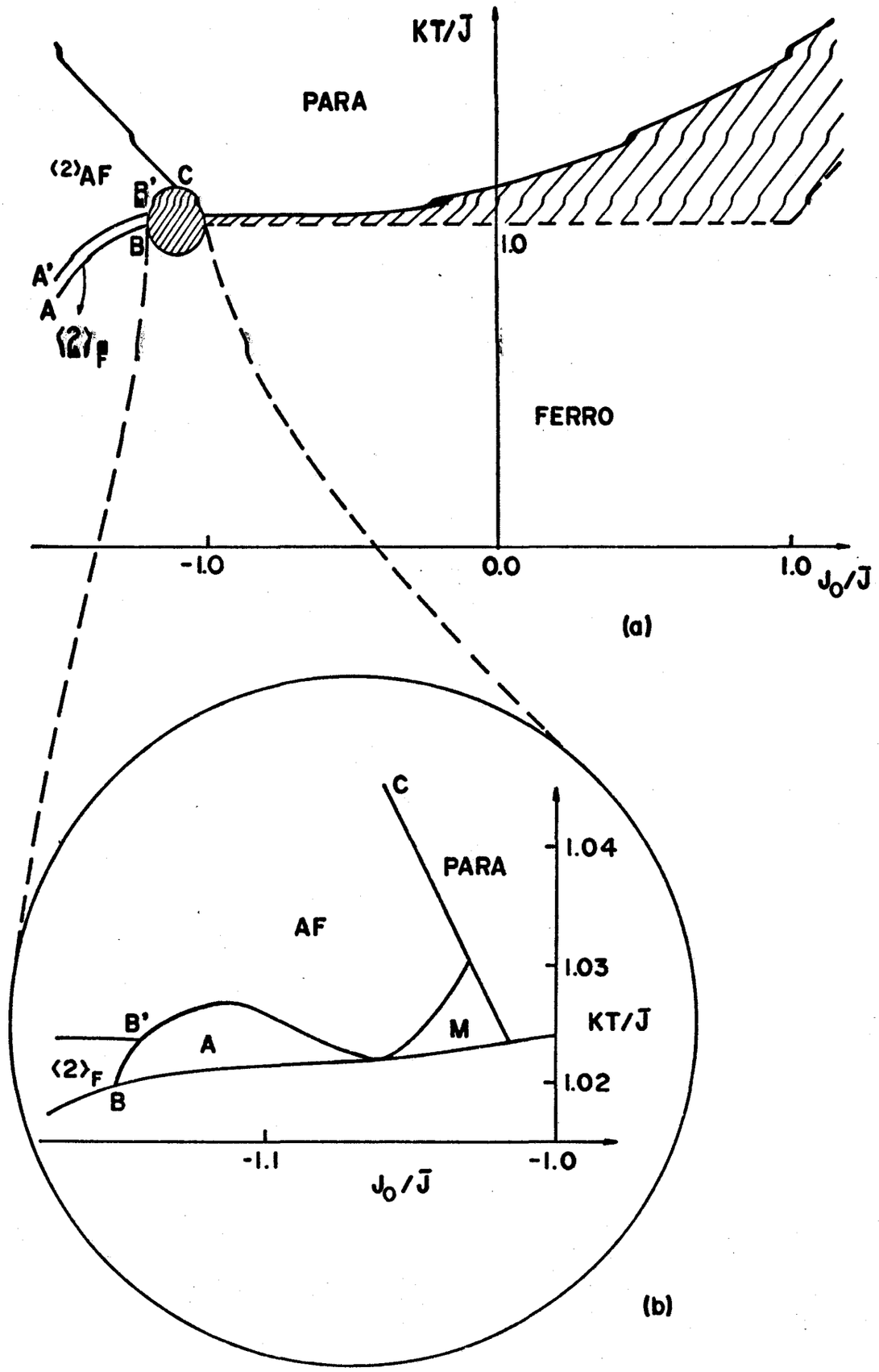
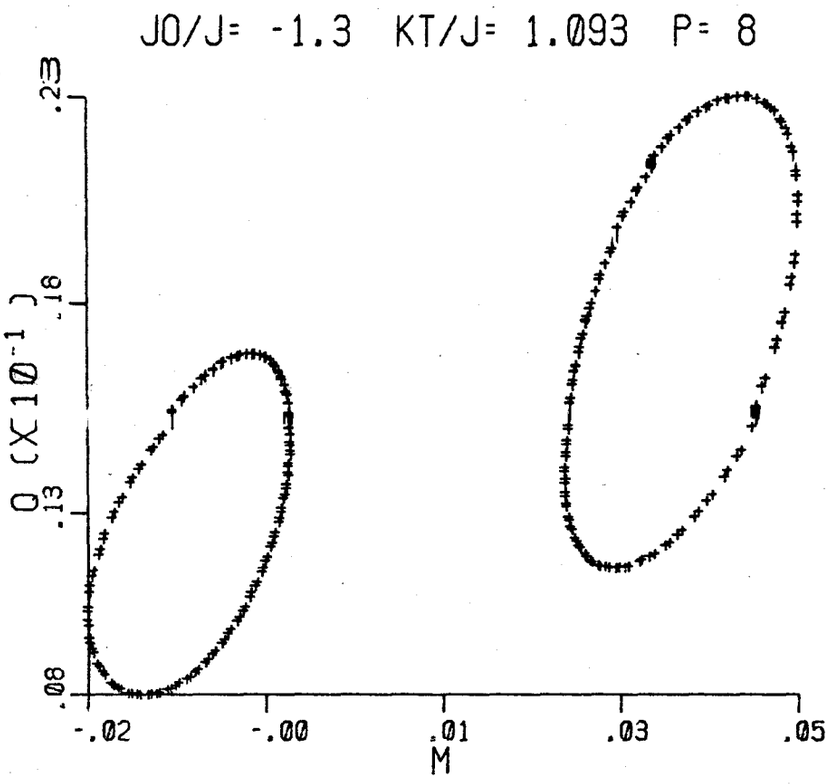

KT/J
PARA
⟨2⟩AF
C
B'
B
A'
A
⟨2⟩F
1.0
FERRO
-1.0
0.0
1.0
J0/J
(a)
C
PARA
1.04
AF
1.03
B'
A
M
KT/J
⟨2⟩F
1.02
B
-1.1
-1.0
J0/J
(b)

Figura 29 - Evolução do atrator característico da fase aleatória.

O atrator característico da fase aleatória evolui com o aumento da temperatura da seguinte forma: partindo da fase ferromagnética, com o aumento da temperatura, o ponto fixo característico dessa fase se torna instável sendo então substituído, de maneira contínua, por um atrator com o formato de uma borboleta (a) Para temperaturas ainda maiores as asas dessa borboleta se separam assumindo cada uma delas um formato elipsoidal (b). Aumentando-se ainda mais a temperatura cada uma dessas elipses coalesce em um único ponto característico da fase antiferromagnética. Finalmente aumentos posteriores da temperatura fazem com que esses pontos convirjam em direção à origem gerando assim o ponto fixo paramagnético.


JO/J= -1.3 KT/J= 1.093 P= 8
Q (X 10^-1)
.23
.18
.13
.08
-.02
-.00
.01
.03
.05
M

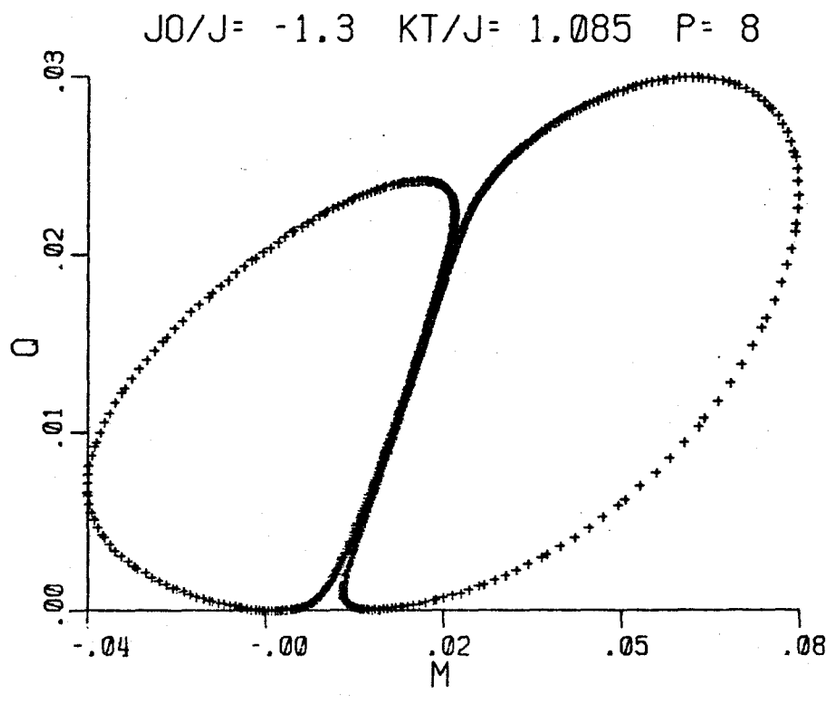
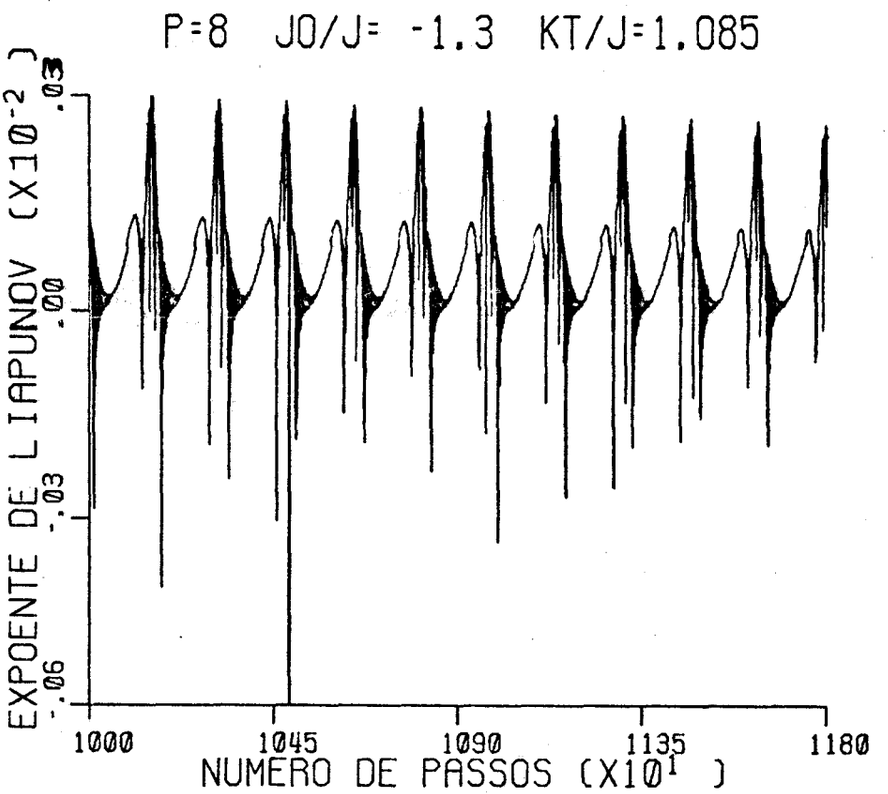
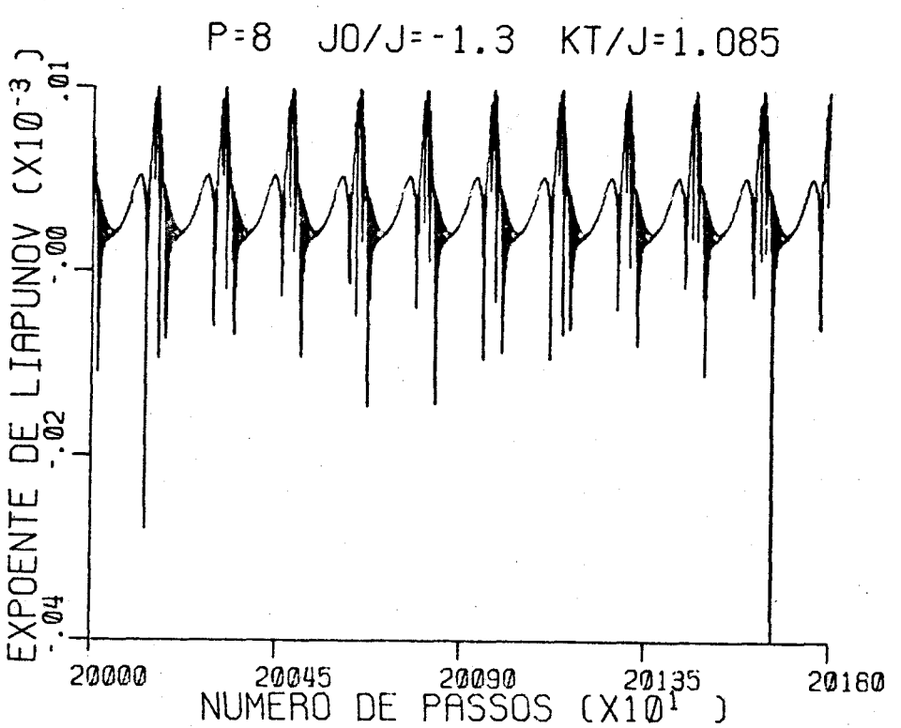

JO/J= -1.3 KT/J= 1.085 P= 8
Q
.03
.02
.01
.00
-.04
-.00
.02
.05
.08
M

Figura 30 - Expoente de Liapunov como função do número de iterações.

Nessa figura apresentamos o expoente de Liapunov como função do número de iterações utilizadas para calculá-lo. São graficados somente os valores obtidos em 1800 iterações após terem sido feitas 10^4 (a) e 2×10^5(b) iterações para o ponto $J_o/\tilde{J} = -1.3$ e $KT/\tilde{J} = 1.085$. O mesmo procedimento foi repetido para outros pontos tendo sido obtidos comportamentos semelhantes. Observe que a única diferença importante entre essas duas figuras é a mudança de escala no eixo das ordenadas. Isso indica que seria necessário um número maior de iterações para que se conseguisse obter a convergência. Devido à presença das integrais no mapeamento (3.30) o tempo de computação (CPU) necessário torna esse cálculo impraticável, dentro das facilidades de que dispomos. Essa mudança de escala pode ser interpretada também como um indicativo de que o expoente de Liapunov pode convergir para um valor nulo, o que caracterizaria uma fase quase periódica.


P=8 JO/J= -1.3 KT/J=1.085
EXPOENTE DE LIAPUNOV (X10^-2)
.03
.00
-.03
-.06
1000
1045
1090
1135
1180
NUMERO DE PASSOS (X10^1)


P=8 JO/J=-1.3 KT/J=1.085
EXPOENTE DE LIAPUNOV (X10^-3)
.01
-.00
-.02
-.04
20000
20045
20090
20135
20160
NUMERO DE PASSOS (X10^1)

xo característico da fase ferromagnética torna-se instável, sendo substituído, de forma aparentemente contínua, por um atrator com o formato de uma borboleta (figura 29a). Aumentando-se novamente a temperatura as asas dessas borboletas começam a se separar em duas figuras de formato elipsoidal (figura 29b). Para temperaturas ainda maiores essas "elipses" começam a diminuir, coalescendo no duplo ciclo antiferromagnético. É interessante observar-se que nesse atrator um ponto qualquer e seu primeiro iterado localizam-se em asas distintas, exceto na região central da figura onde torna-se difícil essa distinção.

Para atratores desse tipo é sempre importante a determinação do expoente de Liapunov pois esse número nos permite verificar se a órbita é periódica ou não (veja Apêndice A). Nesse caso entretanto, o cálculo do expoente de Liapunov é bastante dificultado pela lentidão com que essa grandeza parece convergir. Isso pode ser verificado comparando-se as figuras 30a e 30b onde graficamos 1.800 valores do expoente de Liapunov após, respectivamente 10.000 e 200.000 iterações. O procedimento adotado para a construção dessas figuras foi repetido também para outros pontos tendo sido obtidos resultados semelhantes. Observe que as figuras são aproximadamente as mesmas tendo mudado apenas a escala associada à ordenada. Dessas figuras, pode-se verificar que, para se obter o expoente de Liapunov com uma precisão razoável, seriam necessários milhões de iterações. Isso, contudo, se torna impraticável quando observamos que a presença das integrais no mapeamento (3.30) faz com que o tempo de computação (CPU) necessário para tanto seja da ordem de algumas dezenas de horas, para cada par de valores dos parâmetros $J_o/\tilde{J}$ e $KT/\tilde{J}$. Ficamos portanto limitados por dificuldades computacionais podendo observar apenas que as figuras 30 indicam uma pequena tendência no sentido de convergência para um expoente de Liapunov nulo, o que caracterizaria uma órbita quase-contínua.

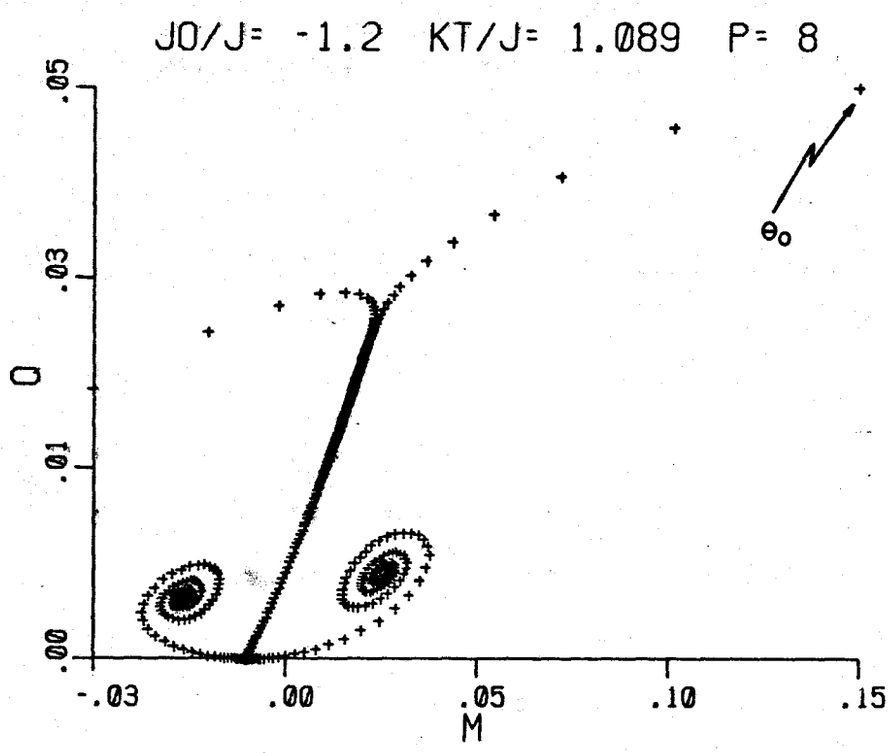


Figura 31 - Atrator característico da região indicada por M na figura 28.

Nessa região ocorre um fenômeno de metaestabilidade caracterizado pela forma como os iterados de uma determinada condição inicial convergem ao verdadeiro atrator do mapeamento. Partindo-se de um dado ponto, indicado na figura por θ_o, os iterados seguintes parecem convergir diretamente para o ponto fixo trivial, que é instável para esses valores dos parâmetros $J_o/\tilde{J}$ e $KT/\tilde{J}$. Após ficar por um número grande de iterações nas proximidades desse ponto seus iterados seguintes começam a se afastar da origem. Esse afastamento se dá de uma forma que chamamos de antiferromagnética uma vez que dois iterados seguintes apresentam sinais contrários. O processo se encerra com a convergência ao verdadeiro atrator nessa região do espaço de parâmetros que é um duplo ciclo antiferromagnético.

Para finzaliar esta secção destacamos que, vizinha à região ocupada pela fase aleatória, há uma região - indicada por M na figura 28 - em que ocorre um fenômeno de meta-estabilidade muito interessante (figura 31). Para determinados valores das condições iniciais (campo externo) o mapeamento (3.30) inicialmente parece convergir para o ponto fixo paramagnético, que é instável para esses valores dos parâmetros. Após ficar algum tempo nas proximidades desse ponto, porém, começa a haver um distanciamento da origem, através de uma sequência antiferromagnética, com dois iterados consecutivos apresentando sinais contrários. O processo se encerra com a convergência para o verdadeiro atrator que no caso, é um duplo ciclo antiferromagnético.

3.3.1. Generalização da Equação de T.A.P.

Nesta secção mostramos que seguindo o mesmo procedimento adotado no caso de Ising obtém-se a equação de TAP generalizada para o modelo de Potts. Para isso, considere-se o modelo de Potts na árvore de Cayley fechada assimétrica fazendo todas as renormalizações necessárias para reduzir essa árvore ao aglomerado da figura 32a. Esse aglomerado é constituído pelo spin do topo, λ_t, os spins da camada central, λ_j $(j = 1, .. z+1)$ e o spin fantasma λ_g. Usando as leis de composição (3.7) e o fato de K_{ij} ser $0(z^{-1})$ podemos obter a magnetização no topo como sendo dada por:

$$m_o = [1 - \exp[-p \sum_{j=1}^{z+1} K_{ij}\ \theta_j^c]/[1 + (p-1)\exp(-p \sum_{j=1}^{z+1} K_{tj}\theta_j^c)] \qquad (3.37)$$

Efetuando agora mais uma renormalização obtém

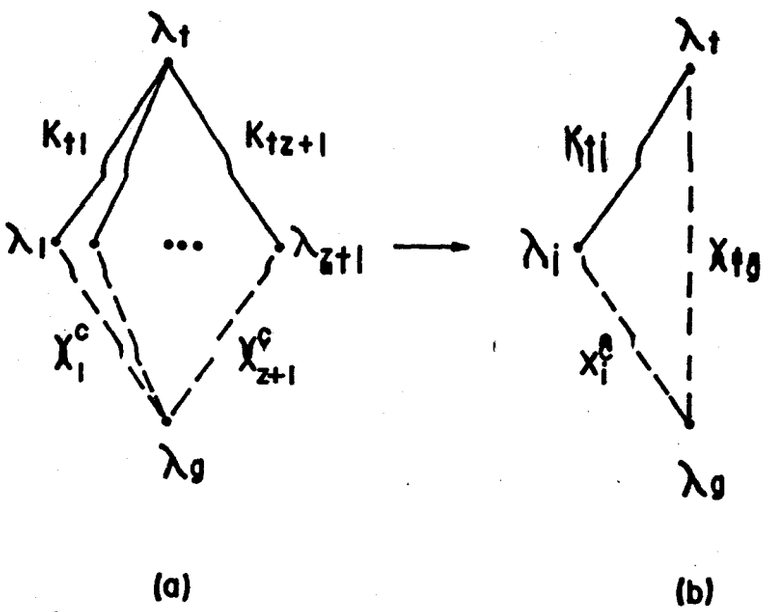


Figura 32 - Generalização da equação de TAP e obtenção da energia interna do "vidro de spin" de Potts.

Utilizando as mesmas sequências de renormalizações apresentadas na figura 13 podemos obter, a partir dos aglomerados (a) e (b) a generalização da equação de TAP para o vidro de spin de Potts [eq.(3.43)].

Por outro lado, seguindo a sequência de renormalizações da figura 14 o aglomerado (b) pode ser utilizado também para obter a energia interna desse sistema [eq.(3.47)]. Ressalvamos que essa equação não é válida na fase aleatória onde não se conhece a distribuição de probabilidades do campo efetivo.

se o aglomerado da figura 32b onde θ_{tg} representa a transmissividade associada à interação entre o spin do topo e o spin fantasma, X_{tg}, com um dos spins da camada central remanescente. A partir desse aglomerado pode-se obter tanto a magnetização nesse sítio da camada central:

$$m_j^c = \frac{\theta_j^c + K_{tj}\ \theta_j^c + (p-2)K_{tj}\ \theta_j^c\theta_{tg}}{1 + (p-1)\ K_{tj}\ \theta_j^c\ \theta_{tg}} \tag{3.38}$$

quanto a magnetização no topo da rede:

$$m_t = \frac{\theta_{tg} + K_{tj}\theta_{tg} + (p-2)K_{tj}\ \theta_j^c\ \theta_{tg}}{1 + (p-1)K_{tj}\ \theta_j^c\ \theta_{tg}} \tag{3.39}$$

Dessa última equação obtém-se:

$$\theta_{tg} = \frac{m_t - K_{tj}\ \theta_j^c}{1 + (p-2)K_{tj}\ \theta_j^c - (p-1)\ m_t\ K_{tj}\ \theta_j^c} \tag{3.40}$$

Substituindo (3.40) em (3.38) e desprezando os termos $0(K_{tj}^2)$ tem-se que:

$$m_j^c = \theta_j^c + K_{tj}\ m_t\ [1-(p-1)(\theta_j^c)^2 + \\ + (p-2)\ \theta_j^c] \tag{3.41}$$

A transmissividade θ_j^c pode ser obtida dessa equação pelo mesmo procedimento utilizado no Capítulo II nas passagens da equação (2.71) à equação (2.73) como:

$$\theta_j^C = m_j^C - K_{tj}\, m_t \left[1-(p-1)(m_j^C)^2 + \right.$$

$$\left. + (p-2)\, m_j^C \right] \qquad (3.42)$$

Finalmente, substituindo-se (3.42) em (3.37) obtém-se

$$m_t = \frac{1 - \exp\{-p \sum_{j=1}^{z+1} K_{tj} m_j^c + p \sum_{j=1}^{z+1} m_t K_{tj}^2 [1-(p-1)(m_j^c)^2+(p-2)m_j^c]\}}{1 + (p-1)\exp\{-p \sum_{j=1}^{z+1} K_{tj} m_j^c + p \sum_{j=1}^{z+1} m_t K_{tj}^2 [1+(p-1)(m_j^c)^2+(p-2)m_j^c]\}} \qquad (3.43)$$

que é a generalização da equação de TAP para o modelo de Potts. Observe que a solução para o modelo de Ising pode ser reobtida simplesmente fazendo-se p=2. Convém ainda destacar novamente que as aproximações feitas para se obter (3.43) só têm validade se, como um último passo, efetuarmos a média sobre a desordem.

3.3.2. A Energia Interna

A energia interna do "vidro de spin de Potts" pode ser obtida para quase todos os valores dos parâmetros $J_o/\tilde{J}$ e $KT/\tilde{J}$ adaptando-se para esse modelo o cálculo efetuado para o modelo de Ising. Essa adaptação entretanto não nos permite obter a energia interna do modelo na fase aleatória uma vez que nessa região não temos uma distribuição de probabilidades bem definida para efetuar a média sobre a desordem. Essa indeterminação pode então ser considerada como uma limitação do método aqui proposto para o cálculo da energia interna. Há que se considerar em seu favor, contudo, que nessas condições não se conhece nenhum outro método que nos permita calcular essa grandeza de modo que esse ponto em nada reduz as vantagens apresentadas por essa metodologia quando comparada com as já previamente existentes.

Do aglomerado da figura 32b obtém-se facilmente a correlação entre o spin do topo e o spin da camada central:

$$<\lambda_t^r \lambda_j^{p-r}> = \frac{K_{tj} + \theta_j^c \theta_{tg} + (p-2) K_{tj} \theta_j^c \theta_{tg}}{1 + (p-1) K_{tj} \theta_j^c \theta_{tg}} \tag{3.44}$$

Expandindo essa expressão obtém-se que:

$$<\lambda_t^r \lambda_j^{p-r}> = K_{tj} + \theta_j^c \theta_{tg} + (p-2) K_{tj} \theta_j^c \theta_{tg} -$$

$$- (p-1) K_{tj} (\theta_j^c)^2 (\theta_{tg})^2 \tag{3.45}$$

de modo que a energia interna será dada por:

$$U = - \frac{z}{2\beta} \int P [K_{tj}] P [X_{tg}] P [X_j] K_{tj} <\lambda_t^r \lambda_j^{p-r}>$$

$$d K_{tj} \, d X_{tg} \, d X_j \tag{3.46}$$

A fim de tornar essa solução a mais geral possível vamos supor que as distribuições de probabilidades para as variáveis X_{tg} e X_j sejam ambas Gaussianas com média $m_1 (m_2)$ e variância $q_1 (q_2)$ para a distribuição dos $X_{tg} (X_j^s)$. Na fase em que o atrator característico é um ponto fixo a energia interna pode ser obtida simplemente fazendo $m_1 = m_2$ e $q_1 = q_2$. Usando as definições (3.26) essas integrais podem ser facilmente calculadas obtendo-se para a anergia interna a seguinte expressão:

$$U = - \frac{1}{2\beta} K_o m_1 m_2 - \frac{\tilde{K}^2}{2\beta} [1 + (p-2) m_1 m_2 +$$

$$+ (p-1) q_1 q_2] \tag{3.47}$$

Vale a pena reafirmar que essa forma de energia interna é válida para todas as fases do modelo com excessão da fase aleatória.

CAPÍTULO IV

O MODELO DE ASHKIN-TELLER NA REDE DE BETHE

O modelo de Ashkin-Teller foi introduzido em 1943[77] como uma generalização do modelo de Ising para sistemas de quatro componentes. Em sua versão de gás de rede cada sítio pode ser ocupado por um dentre quatro tipos de átomos designados por: A, B, C e D. Dois átomos do mesmo tipo interagem com energia ε_o; para os pares de AB e CD a energia de interação é ε_1; ε_2 para os pares AD e BC e ε_3 para os pares AC e BD.

Em 1972 Fan[78] mostrou que a Hamiltoniana para esse modelo pode ser escrita em termos de variáveis de spin de Ising associando-se duas dessas variáveis - σ_i e s_i - a cada sítio. O par (σ_i, s_i) é feito igual a:

(+,+) se o átomo em i for do tipo A

(+,-) se for do tipo B

(-,+) se for do tipo C e

(-,-) se for do tipo D.

No restante deste trabalho o par (σ_i, s_i) será chamado de spin de Ashkin-Teller e representado por $\vec{\eta}$.

Nesse esquema, a energia de interação para um sistema de duas partículas localizadas nos sítios i e j pode ser escrita como:

$$H_{ij} = - J_o - J_1 s_i s_j - J_2 \sigma_i \sigma_j - J_3 s_i \sigma_i s_j \sigma_j \qquad (4.1)$$

onde

$$- J_o = (\varepsilon_o + \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)/4 \qquad (4.2a)$$

$$- J_i = (\varepsilon_o + \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3)/4 \qquad (4.2b)$$

$$- J_2 = (\varepsilon_o + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_1)/4 \qquad (4.2c)$$

$$- J_3 = (\varepsilon_o + \varepsilon_3 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2)/4 \qquad (4.2d)$$

Adicionando à energia de interação a constante $J_o+J_1+J_2+J_3$, essa Hamiltoniana pode ainda ser escrita da forma mais conveniente:

$$- \beta H_{ij} = K_1(s_i s_j - 1) + K_2(\sigma_i \sigma_j - 1) + K_3(s_i \sigma_i s_j \sigma_j - 1) \qquad (4.3)$$

onde $K_\alpha = \beta J_\alpha$ ($\alpha = 1,2,3$)

No caso particular em que $K_i = K_2$ o modelo de Ashkin-Teller é chamado de isotrópico. Um outro caso particular interessante desse modelo é obtido quando $K_1=K_2=K_3$. Nesse caso o modelo de Ashkin-Teller reproduz o modelo de Potts com $p=4$. Isso pode ser verificado observando que ambas as Hamiltonianas (4.3) e (3.4) descrevem sistemas de dois estados, com degenerescência 12 para o estado de mais baixa energia e 4 para o de energia mais alta. A equivalência se completa verificando que em ambos os casos a diferença de energia entre os dois estados é a mesma.

Inicialmente, neste cappitulo o conceito de transmissividade e sua dual é extendido para o modelo de Ashkin-Teller[84] e as leis de composição para essas variáveis são apresentadas. Utilizando essas leis o modelo de Ashkin-Teller regular isotrópico na rede de Bethe é analisado obtendo-se seu diagrama de fases. Na secção 4.1.1 mostramos que o formalismo desenvolvido no Capítulo II pode ser facilmente extendido para a obtenção da energia interna desse sistema.

A secção 4.2 é dedicada ao estudo do vidro de spin de Ashkin-Teller. Devido à complexidade do mapeamento obtido - veja equações (4.38) - nos limitaremos a estudar alguns casos particulares obtidos fazendo-se com que dois dos parâmetros se anulem simultâneamente. Esses casos particulares, que apresentam uma riqueza bastante grande, têm seus diagramas de fase apresentados nas figuras 40, 41 e 42.

Finalmente, as secções 4.2.1 e 4.2.2 são dedicadas, respectivamente, à obtenção de uma generalização da equação de TAP para o vidro de spin de Ashkin-Teller e à derivação de sua energia interna.

4.1. O modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular na rede de Bethe

Nesta secção estudamos o modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular na árvore de Cayley fechada assimétrica. Os resultados desta secção podem ser comparados com os obtidos utilizando interações de alcance infinito[79] (veja Apêndice C) ou mesmo com os obtidos na aproximação de campo médio. A demonstração de que essa solução é equivalente à obtida na árvore de Cayley com campo magnético externo atuando nos spins superficiais é uma generaliza

ção direta da apresentada no Capítulo II, para o modelo de Ising. É importante observar porém que no caso de spins de Ashkin-Teller existem 3 campos magnéticos externos: H_1 atuando nas variáveis s_i, H_2 nas variáveis σ_i e H_3 atuando no par $\sigma_i s_i$. Assim sendo, define-se 3 "magnetizações" $\langle\sigma_i\rangle$, $\langle s_i\rangle$ e $\langle\sigma_i s_i\rangle$. Por um raciocínio análogo ao do Capítulo II mostra-se facilmente que essas magnetizações podem ser obtidas das correlações $\langle\sigma_i\sigma_g\rangle$, $\langle s_i s_g\rangle$ e $\langle\sigma_i s_i \sigma_g s_g\rangle$ fixando-se o spin fantasma (σ_g, s_g) na posição (+,+).

Vamos considerar um sistema constituído por um par de spins de Ashkin-Teller e descrito pela Hamiltoniana (4.3). Da identificação transmissividade - correlação mostra-se facilmente que a uma ligação existem 3 transmissividades associadas dadas por:

$$t_1 \equiv \langle s_i s_j\rangle = [1+x_1-x_2-x_3]/[1+x_1+x_2+x_3] \tag{4.4a}$$

$$t_2 \equiv \langle\sigma_i\sigma_j\rangle = [1-x_1+x_2-x_3]/[1+x_1+x_2+x_3] \tag{4.4b}$$

$$t_3 \equiv \langle\sigma_i s_i \sigma_j s_j\rangle = [1-x_1-x_2+x_3]/[1+x_1+x_2+x_3] \tag{4.4c}$$

onde os x_i's são os fatores de Boltzmann:

$$x_1 = \exp\,[-2\,K_2 - 2\,K_3] \tag{4.5a}$$

$$x_2 = \exp\,[-2\,K_1 - 2\,K_3] \tag{4.5b}$$

$$x_3 = \exp\,[-2\,K_1 - 2\,K_2] \tag{4.5c}$$

No restante deste capítulo a seguinte convenção é adotada para o uso dos índices α, β e γ: sempre que um deles apare-

cer isoladamente em uma equação ela representará 3 equações nas quais esse índice assume consecutivamente os valores 1, 2 e 3. Quando os três índices aparecerem em uma mesma equação, eles tomam os valores $\alpha=1$, $\beta=2$ e $\gamma=3$. Também nesse caso essa equação representará um conjunto de 3 equações sendo que as duas restantes são obtidas da primeira por permutações cíclicas desse índices.

Nessa notação, as equações (4.4) e (4.5) podem ser reescritas como:

$$t_\alpha = \frac{1 + x_\alpha - x_\beta - x_\gamma}{1 + x_\alpha + x_\beta + x_\gamma} \tag{4.4d}$$

e

$$x_\alpha = \exp\left[-2\,K_\beta - 2\,K_\gamma\right] \tag{4.5d}$$

As duais das transmissividades (fatores de Boltzmann) são obtidas invertendo-se as equações (4.4):

$$t^D_\alpha \equiv x_\alpha = \left[1 + t_\alpha - t_\beta - t_\gamma\right] / \left[1 + t_\alpha + t_\beta + t_\gamma\right] \tag{4.6}$$

Por uma questão de brevidade nesta tese representamos o conjunto das três transmissividades t_1, t_2 e t_3 associadas a uma única ligação por $\vec{t}$ e ao conjunto de suas duais, t^D_1, t^D_2 e t^D_3 por $\vec{t}^D$.

Utilizando as relações (definições) (4.4)-(4.6) as leis de composição para as transmissividades podem ser obtidas como generalizações diretas das apresentadas para os modelos de Ising e Potts (figura 33).

i) Para duas ligações em série com transmissividades

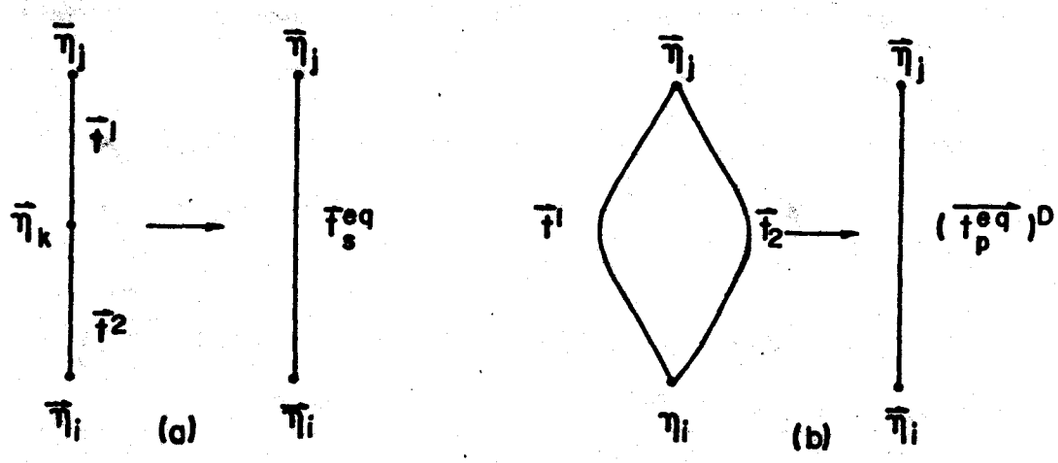


Figura 33 - Leis de composição para as transmissividades no modelo de Ashkin-Teller.

Devido à forma da Hamiltoniana (4.3) três transmissividades são associadas a uma única ligação. Essas transmissividades e suas duais são definidas, respectivamente, pelas equações (4.4) e (4.6). A partir dessas definições é fácil mostrar-se que cada uma dessas transmissividades obedece às mesmas leis de composição já obtidas para os modelos de Ising e Potts. Para ligações em série essas leis se encontram explicitadas na equação (4.7a) e para ligações em paralelo nas equações (4.7b) e (4.7c). Por conveniência é introduzida a seguinte notação: os índices α, β e γ tomam os valores 1, 2 e 3. Quando os 3 índices aparecem na mesma equação são-lhes atribuídos os valores fixos $\alpha=1$, $\beta=2$ e $\gamma=3$. Duas outras equações são obtidas por permutações cíclicas desses índices.

associadas $\vec{t}^1$ e $\vec{t}^2$ a α-ésima componente da transmissividade equivalente é obtida como sendo igual ao produto das α-ésimas componentes dessas transmissividades, ou seja:

$$(t_\alpha^{eq})^s = t_\alpha^1 \cdot t_\alpha^2 \tag{4.7a}$$

ii) Para duas ligações em paralelo, com transmissividades associadas $\vec{t}^1$ e $\vec{t}^2$ a α-ésima componente da dual da transmissividade equivalente é obtida como sendo dada pelo produto das α-ésimas componentes das duais:

$$(t_\alpha^{eq})^D = (t_\alpha^1)^D \cdot (t_\alpha^2)^D \tag{4.7b}$$

Usando as relações (4.6) a lei de composição (4.7b) pode também ser reescrita em termos das componentes das transmissividades $\vec{t}^1$ e $\vec{t}^2$ como

$$(t_\alpha^{eq})^P = \frac{t_\alpha^1+t_\alpha^2+t_\beta^1 t_\gamma^2+ t_\gamma^1 t_\beta^2}{1 + t_\alpha^1 t_\alpha^2+ t_\beta^2 t_\beta^1+ t_\gamma^1 t_\gamma^2} \tag{4.7c}$$

Mediante a aplicação dessas leis de composição ao aglomerado da figura 34 obtém-se o seguinte mapeamento para o modelo de Ashkin-Teller regular:

$$\theta_\alpha^{s+1} = [2(t_\alpha \theta_\alpha^s + t_\beta t_\gamma \theta_\beta^s \theta_\gamma^s)]/[1+(t_\alpha \theta_\alpha^s)^2 + $$

$$+ (t_\beta \theta_\beta^s)^2 + (t_\gamma \theta_\gamma^s)^2] \tag{4.8}$$

onde $\vec{t}$ é a transmissividade associada às ligações não iteradas e $\vec{\theta}^s = (\theta_1^s, \theta_2^s, \theta_3^s)$ a transmissividade associada ao campo efetivo que atua na s-ésima camada da árvore.

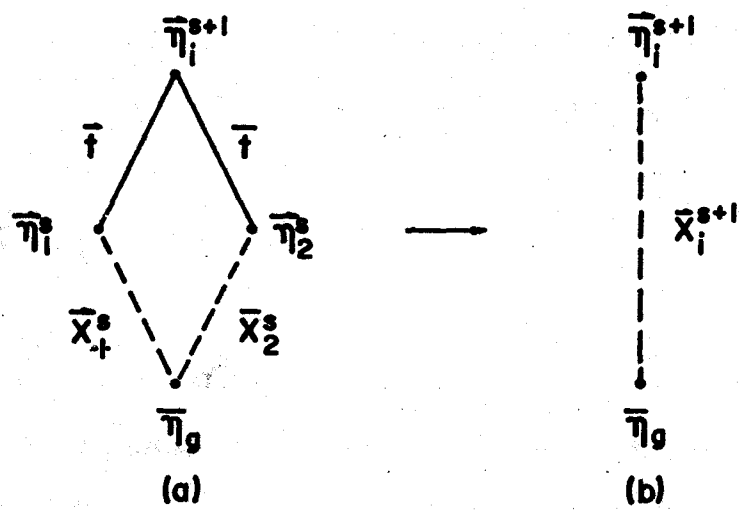


Figura 34 - Relação de recorrência para o modelo de Ashkin-Teller regular.

A aplicação das leis de composição da figura 33 ao aglomerado (a) gera o mapeamento: $\theta_\alpha^{s+1} = [2(t_\alpha\theta_\alpha^s + t_\beta t_\gamma \theta_\beta^s\ \theta_\gamma^s)] / [1 + (t_\alpha\theta_\alpha^s)^2 + (t_\beta\theta_\beta^s)^2 + (t_\gamma\theta_\gamma^s)^2]$. Para o modelo de Ashkim-Teller isotrópico ($K_1=K_2$), fazendo-se $\theta_1^o = \theta_2^o$, esse mapeamento pode ser reescrito como:

$$V_1^{s+1} = [2t_1V_1^s\ (1+V_3^s)] / [1+2(V_1^s)^2 + (V_3^s)^2]$$

$$V_2^{s+1} = V_1^{s+1}$$

$$V_3^{s+1} = 2t_3\ [V_3^s + (V_1^s)^2] / [1 + 2\ (V_1^s)^2 + (V_3^s)^2]$$

onde fizemos $V_\alpha^s = t_\alpha\theta_\alpha^s$.

No caso particular do modelo de Ashkin-Teller isotrópico ($K_1=K_2$) verifica-se facilmente que $x_1 = x_2$ de modo que $t_1=t_2$. Nesse caso as equações (4.4) podem ser reescritas como:

$$t_1 = [1 - x_3]/[1 + 2x_1 + x_3] \tag{4.9a}$$

$$t_3 = [1 - 2x_1 + x_3]/[1+ 2x_1 + x_3] \tag{4.9b}$$

Observando-se que os pesos de Boltzmann (4.5) são necessariamente positivos verifica-se facilmente também que as variáveis t_1 e t_3 se encontram definidas nos intervalos:

$$-1 < t_3 < 1 \tag{4.10a}$$

$$-\frac{1}{2}(1 + t_3) < t_1 < \frac{1}{2}(1 + t_3) \tag{4.10b}$$

Adotando-se para os campos magnéticos externos (condições iniciais) $\vec{\theta}_o$ a mesma simetria do modelo, ou seja, fixando-se $\theta_1^o = \theta_2^o$ o mapeamento para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular é obtido como:

$$\theta_1^{s+1} = [2t_1\theta_1^s(1 + t_3\,\theta_3^s)]/[1+2(t_1\theta_1^s)^2 + (t_3\theta_3^s)^2] \tag{4.9a}$$

$$\theta_2^{s+1} = \theta_1^{s+1} \tag{4.9b}$$

$$\theta_3^{s+1} = 2[t_3\theta_3^s + (t_1\theta_1^s)^2]/[1 + 2(t_1\theta_1^s)^2 + (t_3\theta_3^s)^2] \tag{4.9c}$$

Fazendo-se a transformação

$$V_\alpha^s = t_\alpha^s \, \theta_\alpha^s$$

as relações (4.9) podem ser reescritas na forma mais simplificada:

$$V_1^{s+1} = [2t_1 V_1^s (1+V_3^s)] \,/\, [1+2(V_1^s)^2 + (V_3^s)^2] \qquad (4.10a)$$

$$V_2^{s+1} = V_1^{s+1} \qquad (4.10b)$$

$$V_3^{s+1} = 2\, t_3\, [V_3^s + (V_1^s)^2] \,/\, [1+2(V_1^s)^2+(V_3^s)^2] \qquad (4.10c)$$

No que segue, por conveniência, somente condições iniciais θ_α^o positivas são consideradas. Nesse caso, os atratores do mapeamento (4.10) nos permitem identificar, para esse modelo, as seguintes fases (veja a figura 35):

a) Fase Paramagnética (PARA): Como foi observado inúmeras vezes nesse trabalho essa fase é caracterizada pelo ponto fixo trivial $\theta_1^* = \theta_3^* = 0$. O critério de estabilidade (A.10) determina a seguinte região de estabilidade para essa fase:

$$-1/2 < t_1 < 1/2 \qquad (4.11a)$$

$$-1/2 < t_3 < 1/2 \qquad (4.11b)$$

É importante frisar que não há nenhum indício da existência da fase indicada por <σ> na referência 56. A região que seria ocupada por essa fase se encontra dentro da região dominada pelo ponto fixo paramagnético (figura 35b).

b) Fase de Baxter Ferromagnética (BAXTER F): Nessa fase todas as correlações entre o spin fantasma e o spin no topo são positivas. Como já vimos, isso significa que as três magnetizações no topo $\langle\sigma_t\rangle$, $\langle s_t\rangle$ e $\langle\sigma_t s_t\rangle$ são positivas indicando um alinhamento ferromagnético dos spins. Essa fase ocorre para valores de K_1 positivos e suficientemente grandes (ou temperatura baixa) mesmo que K_3 seja nulo ou negativo mas de módulo pequeno. Ela é devida a um alinhamento ferromagnético entre o spins de Ising σ e s o que por si só faz com que $\langle\sigma s\rangle$ seja positivo. É claro que o aumento de K_3 nessas condições favorece ainda mais esse alinhamento. Essa fase, que só existe para valores positivos de t_1 e t_3, é caracterizada por um ponto fixo não trivial de coordenadas dadas por:

$$V_3^* = \frac{\{(t_3+t_1t_3-t_1)+[(t_3+t_1t_3-t_1)^2-(2t_1+t_3)(t_3+2t_1t_3)]^{1/2}\}}{(2t_1+t_3)} \tag{4.12a}$$

$$V_1^* = \{[2t_1\ (1 + V_3^*) - 1 - (V_3^*)^2]\ /2\}^2 \tag{4.12b}$$

Essa última coordenada pode também ser obtida de:

$$V_1^* = \{V_3^*[2t_3 - 1 - (V_3^*)^2]/2[V_3^* - t_3]\}^{1/2} \tag{4.12c}$$

Devido à complexidade das equações (4.12) não nos foi possível determinar analiticamente a região onde este ponto fixo é estável.

c) Fase de Baxter Antiferromagnética (BAXTER A.F.) : Essa fase pode ser considerada como a análoga antiferromagnética da fase anterior. Ela ocorre a baixas temperaturas para valores negativos de K_1. Nessa fase $\langle\sigma\rangle$ e $\langle s\rangle$ invertem seus sinais um duas ca-

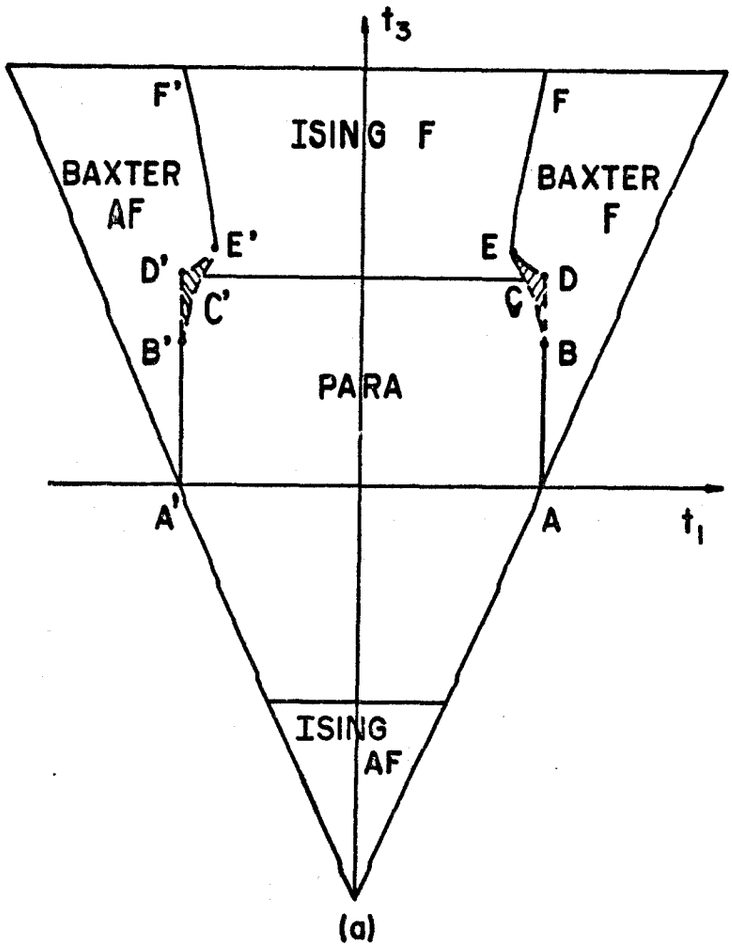
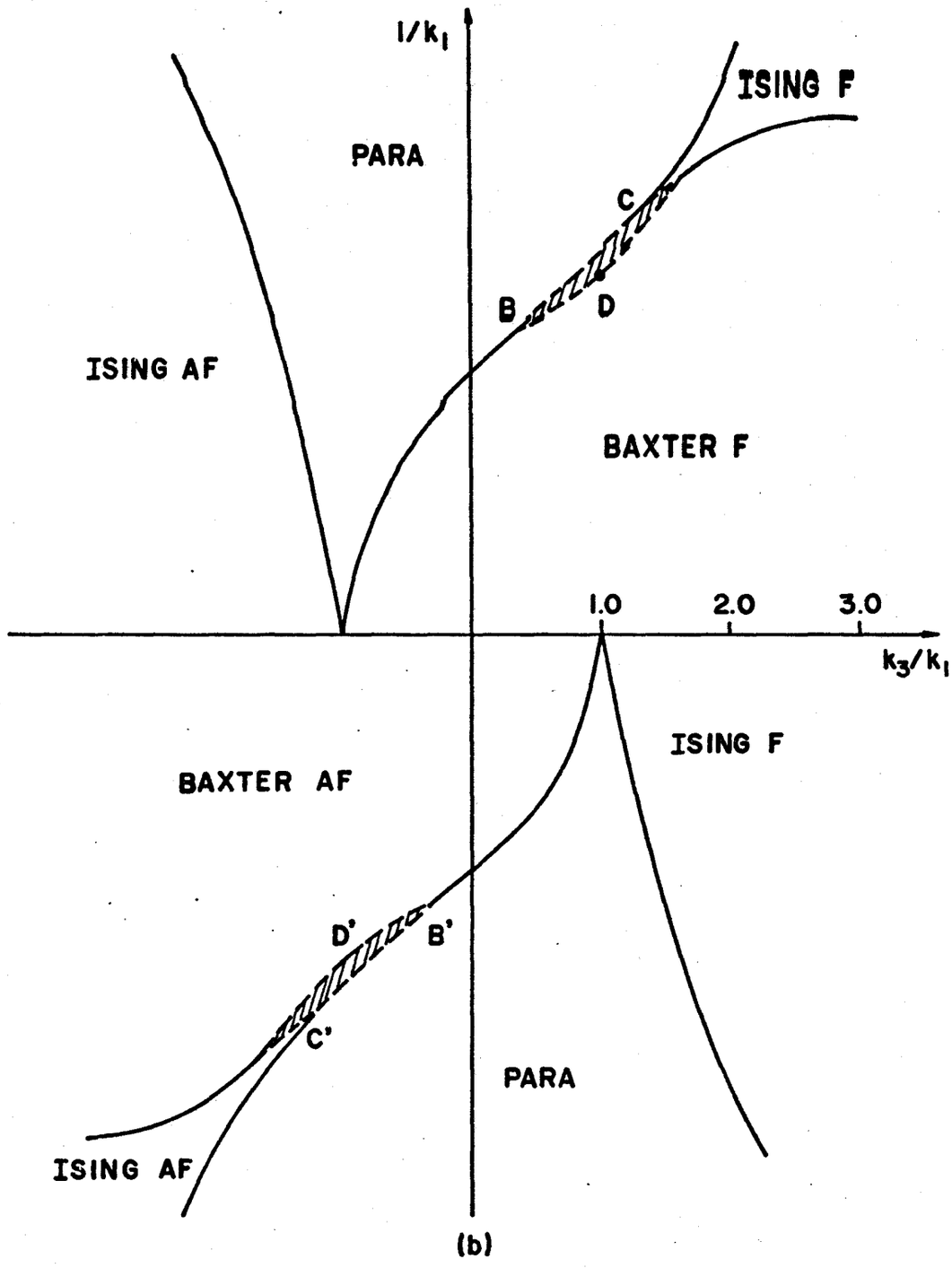


Figura 35 - Diagramas de fases do modelo de Ashkim-Teller isotrópico regular.

O diagrama de fases do modelo de Ashkin-Teller isotrópico na rede de Bethe, obtido a partir da determinação dos atratores do mapeamento da figura 34, apresenta as seguintes fases: i) Paramagnética caracterizada pelo ponto fixo $V_1^* = V_3^* = 0$. ii) Fase de Baxter ferromagnética (Baxter F) caracterizada pelo ponto fixo não trivial definido pelas equações (4.12). iii) Fase de Baxter antiferromagnética (Baxter AF) definida por um duplo ciclo do tipo $V_1^{s+1} = -V_1^s = V^*$ e $V_3^{s+1} = V_3^s = V_3^*$. iv) Fase de Ising ferromagnética (Ising F) caracterizada pelo ponto fixo $V_1^* = 0$, $V_3^* > 0$ definido nas equações (4.14). v) Fase de Ising antiferromagnética (Ising AF) caracterizada por um duplo ciclo do tipo $V_1^{s+1} = V_1^s = 0$ e $V_3^{s+1} = -V_3^s = V_3^*$ [equação (4.16)].

Nesse diagrama a região hachurada indica coexistência de



soluções (veja figura 36) de modo que as transições de fase que ocorrem no interior das regiões BDEC e B'D'E'C' são de 1ª ordem. As linhas cheias indicam transições de fase de 2ª ordem.

madas consecutivas caracterizando um alinhamento antiferromagnético. Numa mesma camada porém os spins de Ising σ e s se alinham paralelamente de modo a fazer com que $\langle\sigma s\rangle$ seja positivo. Ou seja, do ponto de vista do parâmetro de ordem $\langle\sigma\rangle$ ($\langle s\rangle$) o alinhamento é antiferromagnético enquanto que do ponto de vista do parâmetro de ordem $\langle\sigma s\rangle$ essa é uma fase ferromagnética. O atrator característico dessa fase, que só aparece quando $t_1 < 0$ e $t_3 > 0$, é um duplo ciclo do tipo:

$$V_1^{s+1} = - V_1^s = V_1^* \tag{4.13a}$$

$$V_3^{s+1} = V_3^s = V_3^* \tag{4.13b}$$

onde V_1^* e V_3^* podem ser obtidos das equações (4.12) simplesmente fazendo a substituição $t_1 \to - t_1$. Isso pode ser visto observando que as relações (410a) e (4.10b) são, respectivamente antissimétrica e simétrica com relação à inversão do sinal do parâmetro t_1. É claro que também nesse caso não é possível um estudo analítico da estabilidade desse atrator.

d) Fase de Ising Ferromagnética (Ising F): Para valores suficientemente grandes de K_3, dependendo do valor de K_1, é possível encontrar-se uma fase na qual apesar de $\langle\sigma\rangle$ e $\langle s\rangle$ serem nulos a magnetização $\langle\sigma s\rangle$ não é nula. Nessa fase o modelo de Ashkin-Teller se comporta como o modelo de Ising ferromagnético. Seu atrator característico é um ponto fixo cujas coordenadas são dadas por:

$$V_1^* = 0 \tag{4.14a}$$

$$V_3^* = [2t_3-1]^{1/2} \tag{4.14b}$$

Como se pode ver da equação (2.24b) esse é o ponto fixo ferromagnético do modelo de Ising.

A região onde esse ponto fixo é estável pode ser determinada analiticamente sendo definida por:

$$t_1 < t_3/[1 + (2t_3 - 1)^{1/2}] \tag{4.15a}$$

$$t_3 > 1/2 \tag{4.15b}$$

e) Fase de Ising Antiferromagnética (ISING AF): A exemplo do que ocorre com as fases de Baxter ferromagnética e antiferromagnética essa fase é a análoga à anterior para $K_3 < 0$. Também nesse caso apesar de $\langle\sigma\rangle$ e $\langle s\rangle$ serem nulos a magnetização $\langle\sigma s\rangle$ não é nula, porém alternada indicando que o alinhamento é antiferromagnético. O atrator característico dessa fase é um duplo ciclo do tipo:

$$V_1^{s+1} = V_1^s = 0 \tag{4.16a}$$

$$V_3^{s+1} = V_3^s = [-2t_3 - 1]^{1/2} \tag{4.16b}$$

Observe que (4.10c) é antissimétrica com relação à t_3 quando $V_1^s = 0$ e que (4.16b) pode ser obtida de (4.14b) invertendo-se o sinal desse parâmetro.

A região de estabilidade desse duplo ciclo é definida por:

$$t_3 < -1/2 \tag{4.17}$$

Nesse caso não há nenhuma equação correspondente a (4.15a) porque o afunilamento da região física para valores negativos de t_3 faz com que só existam as fases Ising AF e paramagnética.

No que diz respeito à ordem das transições entre as diferentes fases elas podem ser deduzidas do estudo das propriedades dos vários atratores descritos. Devido às simetrias apresentadas pelo mapeamento (4.10) e pelas inter-relações entre os pontos fixos e duplos ciclos esse estudo pode ser limitado apenas aos pontos fixos uma vez que as transições envolvendo duplos ciclos terão as mesmas características das envolvendo pontos fixos. Vamos estudar essas transições uma a uma.

a) Transição Para-Ising F: Essa transição pode ser identificada como sendo de segunda ordem simplesmente observando-se que em virtude de (4.11b) e de (4.15b) os pontos fixos que caracterizam essas fases não são simultâneamente estáveis. Além disso, como pode ser visto de (4.14b) o ponto fixo não trivial característico da fase Ising F cresce continuamente a partir do zero de modo que não há discontinuidade no parâmetro de ordem na temperatura crítica. Note que os mesmos argumentos se aplicam à transição para - Ising AF.

b) Transição Para-Baxter F: A determinação da ordem das transições envolvendo a fase Baxter F (Baxter AF) requer um estudo mais elaborado do ponto fixo (duplo ciclo) definido em (4.12). Note em primeiro lugar que V_3^* só será real se o radicando for positivo semi-defindo, i.e., se:

$$t_1 > 4t_3\,(1-t_3)/(1+t_3)^2 \,. \qquad (4.18)$$

A igualdade define a linha BCE. Sobre essa linha tem-se que:

$$V_3^* = (t_3 + t_1 t_3 - t_1)/(2t_1 + t_3) \tag{4.19}$$

Como V_3^* é positivo para:

$$t_3 > t_1(1 + t_1) \tag{4.20}$$

esse parâmetro de ordem apresenta uma discontinuidade na temperatura crítica (figura 37). Além disso, da condição (4.11a) ($t_1 < 1/2$) que define a linha ABD e do estudo numérico da estabilidade do ponto fixo de Baxter (4.12) verifica-se que na região BDC as soluções PARA e BAXTER F coexistem, como se pode ver do diagrama de fluxos da figura 36a. Dessa forma, na região em que (4.20) é satisfeita a transição entre essas fases pode ser classificada como sendo de 1ª ordem.

Na região, em que (4.20) não é satisfeita V_3^* somente é positiva se $t_1 > 1/2$ que coincide com (4.11a). Note que de (5.10c), verifica-se facilmente que para condições iniciais positivas e t_3 positivo todo V_3^s será necessariamente positivo. Da mesma forma verifica-se também que nessa região não há coexistência de soluções e que os parâmetros de ordem V_1^* e V_3^*, ou seja, $\langle\sigma\rangle$, $\langle s\rangle$ e $\langle\sigma s\rangle$ crescem continuamente a partir do zero. Desse modo, a transição sobre a linha AB é de segunda ordem. As coordenadas do ponto B onde a transição entre as fases PARA e BAXTER F passa de 2ª para 1ª ordem são:

$$t_{1B} = 1/2 \tag{4.21a}$$

$$t_{3B} = 1/3 \tag{4.21b}$$

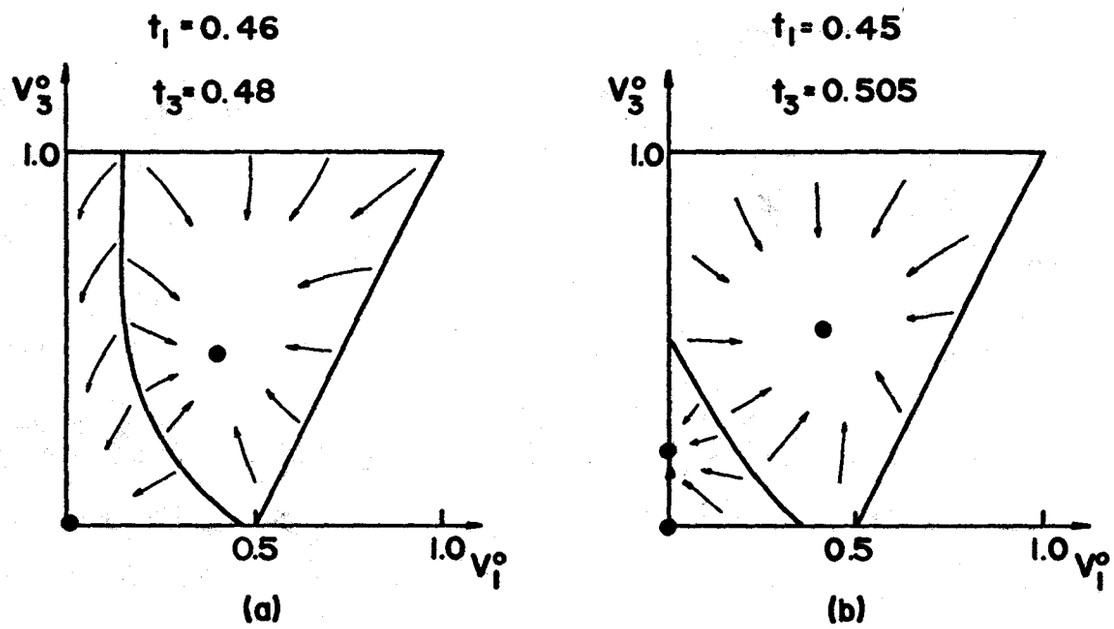


Figura 36 - Diagrama de fluxos nas regiões BDC(a) e CDE(b).

Nas regiões de coexistência de soluções o verdadeiro atrator para o qual o mapeamento da figura 34 converge é determinado pelas condições iniciais. É importante frisar que na região BDC (B'D'C') a coexistência se dá entre as soluções paramagnéticas e Baxter F (Baxter AF) ao passo que na região CDE (C'D'E') coexistem as soluções Ising F e Baxter F (Baxter AF). Nesse último caso, como se pode ver em (b), o ponto fixo paramagnético é instável.

Vale a pena reafirmar que essa argumentação pode ser extendida de forma direta para a transição PARA - BAXTER AF. bastando que se faça nos resultados acima a substituição: $t_1 \to -t_1$.

c) Transição Ising F - Baxter F: A ordem dessa transição é determinada do estudo numérico do mapeamento (4.10) nas proximidades da curva obtida tomando-se a igualdade em (4.15a). Vale a pena lembrar que essa curva define o limite de estabilidade da solução Ising F. Através desse estudo foi possível mostrar que essa transição é de segunda ordem na linha EF e de primeira ordem na linha ED. O ponto E onde a transição passa de 1ª ordem para 2ª ordem tem coordenadas:

$$t_{1E} = 0.42705 \tag{4.22a}$$

$$t_{3E} = 0.52786 \tag{4.22b}$$

Na região CDE as soluções de Baxter F e Ising F coexistem, como pode ser visto do diagrama de fluxos da figura 36b. Apenas como ilustração apresentamos ainda na figura 4.7 as descontinuidades nos parâmetros de ordem ao longo das fronteiras BCE e BDE.

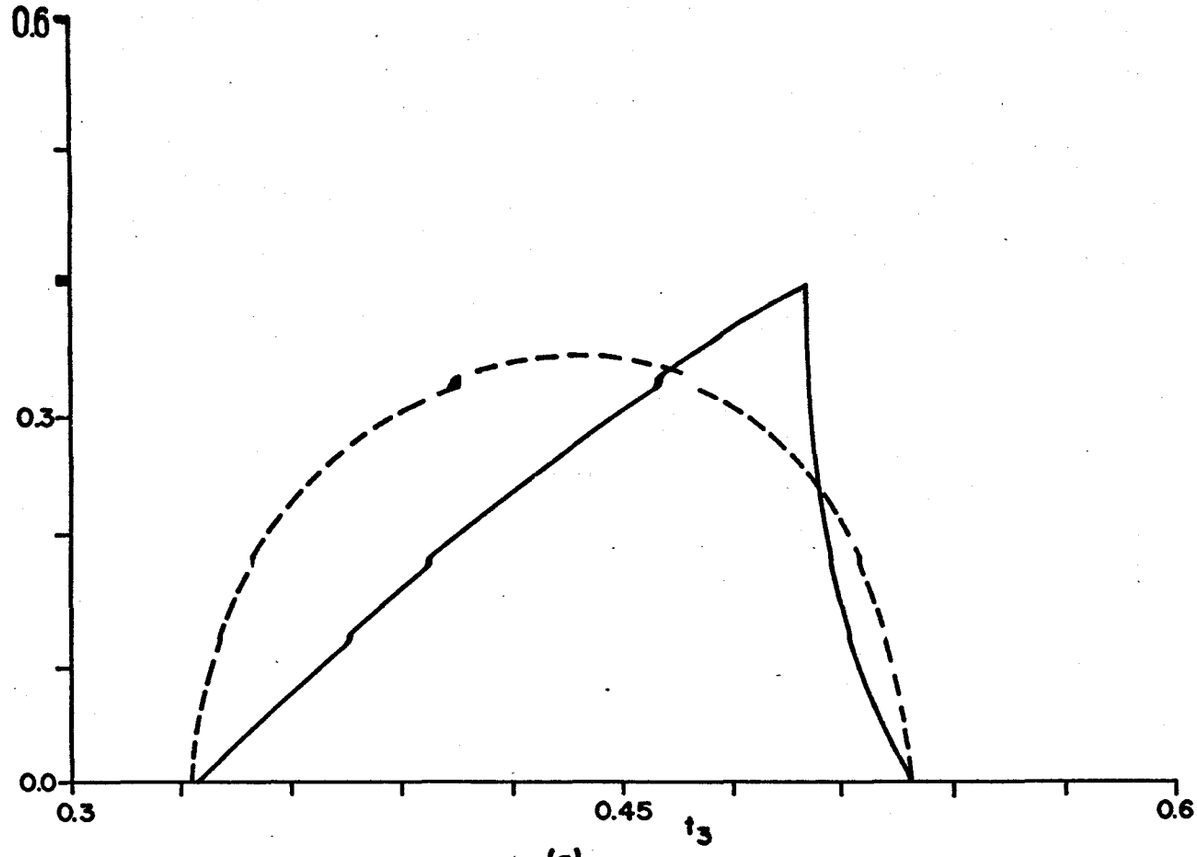
Finalmente vale a pena observar que os resultados para os modelos de Ising e Potts com 4 estados são reobtidos como casos particulares do modelo de Ashkin-Teller isotrópico.

4.1.1. Energia Interna do Modelo de Ashkin-Teller Isótropico Regular

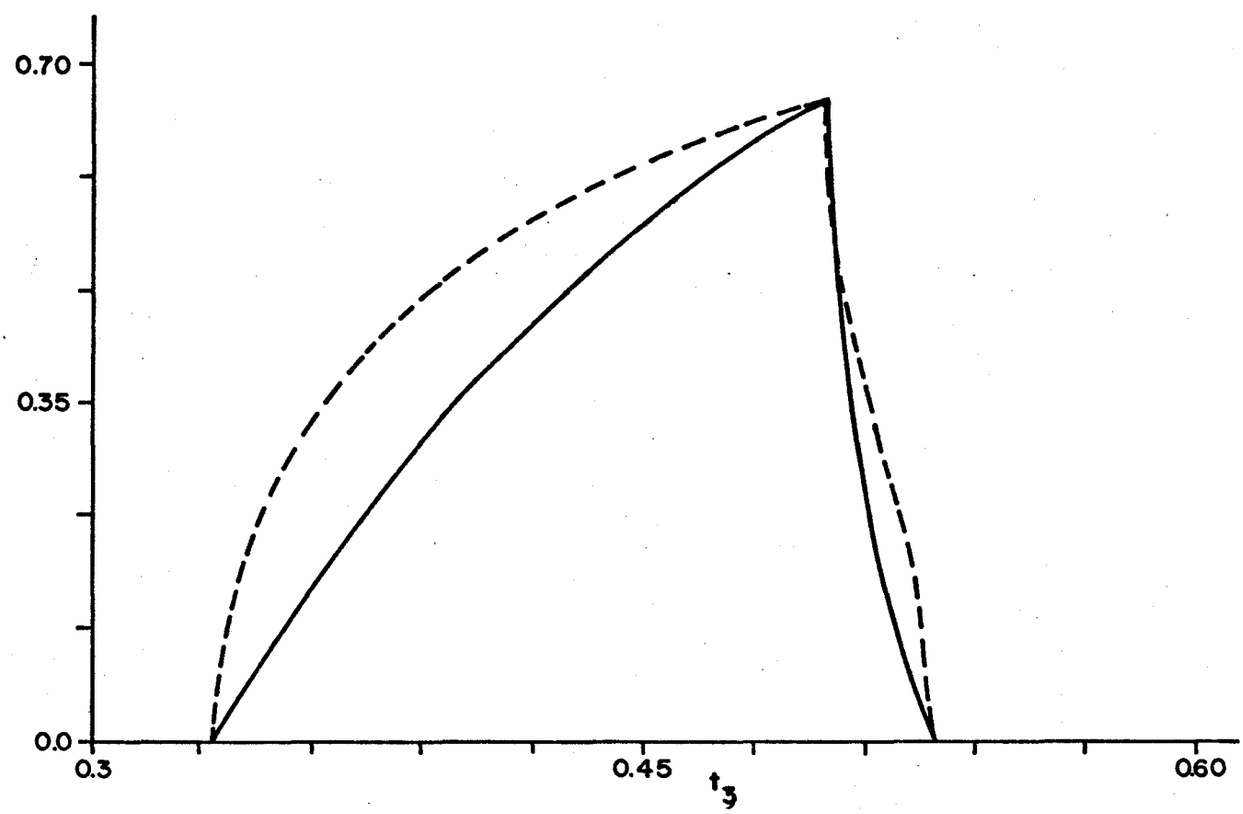
A energia interna do modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular pode ser calculada usando uma generalização do

Figura 37 - Descontinuidades nos parâmetros de ordem.

Nessa figura apresentamos as descontinuidades nos parâmetros de ordem V_1 e V_3 ao longo das fronteiras BCE(a) e BDE(b). Em ambos os casos a linha cheia representa a descontinuidade em V_1 e a linha tracejada a descontinuidade em V_3.



(a)



(b)

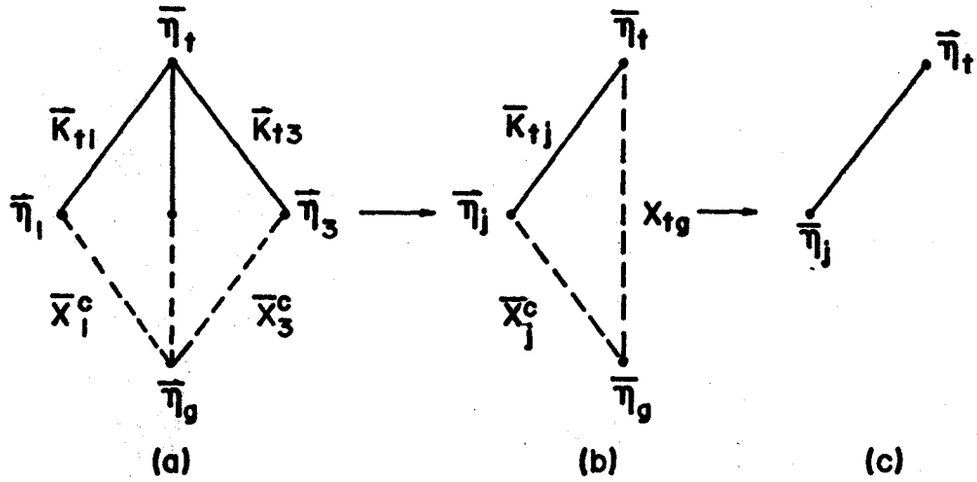


Figura 38 - Obtenção da energia interna do modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular.

A energia interna do modelo de Ashkin-Teller regular pode ser obtida a partir da determinação das correlações entre o spin do topo (σ_t, s_t) e um spin da camada central (σ_j, s_j) por meio da relação: $U = -\frac{k_1 b}{2\beta}(\langle\sigma_t\sigma_j\rangle + \langle s_t s_j\rangle) - \frac{k_3 b}{2\beta}\langle\sigma_t s_t \sigma_j s_j\rangle$. Essas correlações, por sua vez, são determinadas procedendo-se à mesma sequência de renormalizações discutida para os modelos de Ising e Potts. Nas fases caracterizadas por duplos ciclos a energia interna é dada pela equação (4.25).

procedimento desenvolvido no Capítulo II para o modelo de Ising regular. Para isso basta observar que, devido à forma da Hamiltoniana (4.3) a energia interna por partícula desse modelo será dada por:

$$U = -\frac{K_1 b}{2\beta}\left(\langle\sigma_i\sigma_j\rangle + \langle s_i s_j\rangle\right) - \frac{K_3 b}{2\beta}\langle\sigma_i s_i \sigma_j s_j\rangle \,. \tag{4.23}$$

Dessa forma, é necessário calcular todas as correlações (transmissividades efetivas) entre o spin do topo da rede e um spin da camada central, o que pode ser facilmente realizado utilizando-se o aglomerado da figura 38. Para uma rede com N camadas ($N\to\infty$) na situação mais geral em que o atrator é um duplo ciclo a transmissividade entre o spin fantasma e um spin da camada central $\vec{\theta}^c$ é difrente da transmissividade $\vec{\theta}^t$ entre o spin do topo e o spin fantasma. Designando as componentes dessas transmissividades por: (θ_1^c, θ_3^c) e (θ_1^t, θ_3^t) as componentes da transmissividade efetiva $\vec{\theta}^{tc}$ entre o spin do topo e um spin da camada central, obtidas utilizando as leis de composição (4.7), são dadas por:

$$\theta_1^{tc} = \frac{[t_1 + \theta_1^t\,\theta_1^c + t_1\theta_3^t\,\theta_3^c + t_3\theta_1^t\,\theta_1^c]}{1 + 2t_1\,\theta_1^t\theta_1^c + t_3\,\theta_3^t\,\theta_3^c} \tag{4.24a}$$

$$\theta_3^{tc} = \frac{[t_3 + \theta_3^t\,\theta_3^c + 2t_1\,\theta_1^t\,\theta_1^c]}{1 + 2t_1\,\theta_1^t\,\theta_1^c + t_3\,\theta_3^t\,\theta_3^c} \tag{4.24b}$$

Substituindo as equações (4.24) em (4.23) e com as identificações:

$$\langle\sigma_i\sigma_j\rangle \equiv \langle s_i s_j\rangle \equiv \theta_1^{tc}$$

$$\langle\sigma_i s_i \theta_j s_j\rangle \equiv \theta_3^{tc}$$

tem-se que:

$$U = -\frac{K_1 z}{\beta}\left[\frac{t_1+\theta_1^t\theta_1^c+t_1\theta_3^t\theta_3^c+t_3\theta_1^t\theta_1^c}{1+2t_1\theta_1^t\theta_1^c+t_3\theta_3^t\theta_3^c}\right] - \frac{K_3 z}{2\beta}\left[\frac{t_3+\theta_3^t\theta_3^c+2t_1\theta_1^t\theta_1^c}{1+2t_1\theta_1^t\theta_1^c+t_3\theta_3^t\theta_3^c}\right] \qquad (4.25)$$

As expressões para U nas diferentes fases são obtidas, no caso particular z=2, fazendo as seguintes substituições:

i) Na fase paramagnética teremos $\theta_1^t = \theta_1^c = 0$ e $\theta_3^t = \theta_3^c = 0$

ii) Na fase Baxter F teremos $\theta_1^t = \theta_1^c = \frac{1}{t_1} V_1^*$ e $\theta_3^t = \theta_3^c = \frac{1}{t_3} V_3^*$ com V_1^* e V_3^* a serem obtidos das equações (4.12).

iii) Na fase Baxter AF teremos $\theta_1^t = -\theta_1^c = \frac{1}{t_1} V_1^*$ e $\theta_3^t = \theta_3^c = \frac{1}{t_3} V_3^*$ onde V_1^* e V_3^* também são obtidos das equações (4.12) fazendo-se a substituição $t_1 \to -t_1$.

iv) Na fase Ising F teremos $\theta_1^t = \theta_1^c = 0$ e $\theta_c^t = \theta_3^c = \frac{1}{t_3} V_3^*$ com V_3 dado por (4.14b).

v) Finalmente na fase Ising AF teremos $\theta_1^t = \theta_1^c = 0$ e $\theta_3^t = -\theta_3^c = \frac{1}{t_3} V_3^*$ onde V_3^* é obtido de (4.14b) fazendo-se a

substituição $t_3 \to -t_3$.

4.2. O Vidro de Spin de Ashkin-Teller

Nessa secção o formalismo desenvolvido anteriormente é utilizado para a solução do modelo de Ashkin-Teller isotrópico com interações aleatórias na rede de Bethe no limite em que a razão de ramificação se torna infinita.

Consideremos o aglomerado da figura 39 onde $\vec{K}^s_{ij} \equiv [(K_1)^s_{ij}, (K_2)^s_{ij}, (K_3)^s_{ij}]$ representa as três interações entre os spins de Ashkin-Teller localizados nos sítios j da s-ésima e i da (s+1)-ésima camadas da rede. Nesse aglomerado $\vec{X}^s_j \equiv [(X_1)^s_j, (X_2)^s_j, (X_s)^s_j]$ representa os três campos externos que atuam no spin de Ashkin-Teller localizado no sítio j da s-ésima camada. As transmissividades associadas às interações $\vec{K}^s_{ij}$ serão designadas por $\vec{t}^s_{ij} \equiv [(t_1)^s_{ij}, (t_2)^s_{ij}, (t_3)^s_{ij}]$ e as transmissividades associadas aos campos externos $\vec{X}^s_j$ por $\vec{\theta}^s_j = [(\theta_1)^s_j, (\theta_2)^s_j, (\theta_3)^s_j]$.

Nessa secção, por razões já discutidas no Capítulo II, nos limitaremos ao estudo do caso particular em que as distribuições de probabilidades para as interações (K^s_{ij}) são Gaussianas. Mais explicitamente, essas interações se encontram independentemente distribuídas de acordo com as leis de probabilidades:

$$P[(K_\alpha)^s_{ij}] = [z/2\pi\tilde{K}^2_\alpha]^{1/2} \exp\{-z[(K_\alpha)^s_{ij} - K^o_\alpha/z]^2/2\tilde{K}^2_\alpha\} \tag{4.26}$$

Como já observamos nos capítulos precendentes a idéia básica para a solução desse problema consiste na substituição do

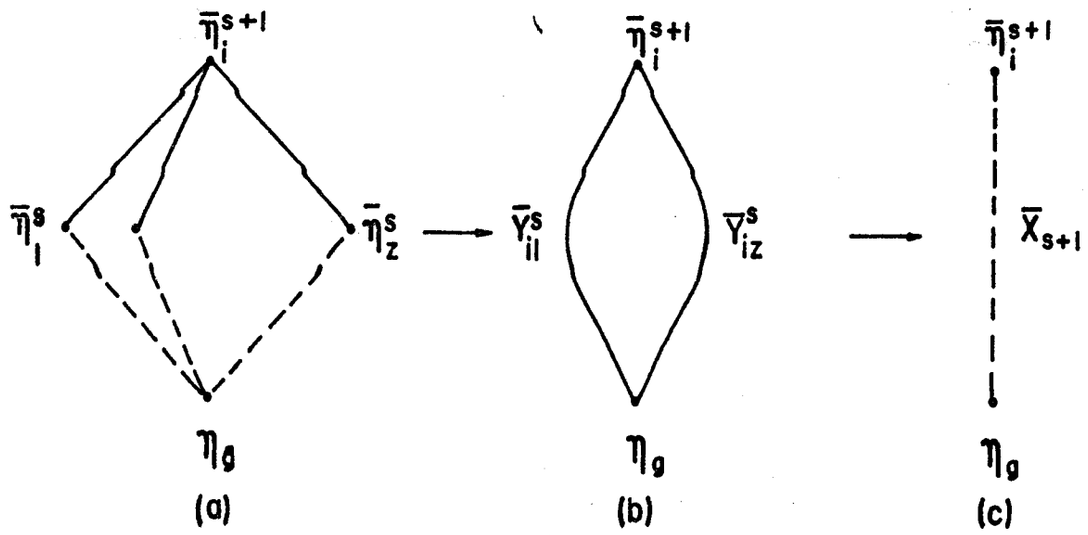


Figura 39 - Relação de recorrência para o vidro de spin de Ashkin-Teller.

O mapeamento (4-38) que determina os parâmetros de ordem do vidro de spin de Ashkin-Teller é obtido seguindo o formalismo desenvolvido no capítulo II. Mesmo no caso do modelo de Ashkin-Teller isotrópico, os mapeamentos (4.39) e (4.40) tem uma dimensionalidade excessivamente alta e envolvem um número muito grande de parâmetros. Nas figuras 40, 41 e 42 apresentamos os diagramas de fases para os casos particulares mais importantes.

aglomerado da figura 39 por uma única ligação efetiva de modo a se determinar os campos externos efetivos que atuam nos spins da camada s+1. As distribuições de probabilidades para esses campos podem então ser calculadas a partir das distribuições de probabilidades para os campos que atuam sobre os spins da camada anterior e das distribuições de probabilidades para as interações, não renormalizadas, definidas em (4.26).

Utilizando as leis de composição (4.7) obtém-se que os campos efetivos que atuam sobre os spins da camada s+1 são dados por:

$$(X_\alpha)_i^{s+1} = \sum_{j=1}^{z} (Y_\alpha)_{ij}^s \tag{4.27}$$

onde as interações $(Y_\alpha)_{ij}^s$ podem ser escritas em termos dos fatores de Boltzmann $(h_\alpha)_{ij}^s$ a elas associadas como:

$$(Y_\alpha)_{ij}^s = \frac{1}{4}\left[\ell n(h_\alpha)_{ij}^s - \ell n(h_\beta)_{ij}^s - \ell n\,(h_\gamma)_{ij}^s\right] \tag{4.28}$$

Esses pesos de Boltzmann por sua vez são dados por:

$$(h_\alpha)_{ij}^s = \frac{1 + (t_\alpha)_{ij}^s(\theta_\alpha)_j^s - (t_\beta)_{ij}^s\,(\theta_\beta)_j^s - (t_\gamma)_{ij}^s(\theta_\gamma)_j^s}{1 + (t_\alpha)_{ij}^s(\theta_\alpha)_j^s + (t_\beta)_{ij}^s\,(\theta_\beta)_j^s + (t_\gamma)_{ij}^s(\theta_\gamma)_j^s} \tag{4.29}$$

Lembrando agora que as interações $\vec{K}_{ij}^s$ são todas elas $0(z^{-1})$ as transmissividades $\vec{t}_{ij}^s$ podem ser aproximadas por:

$$(t_\alpha)_{ij}^s \simeq (K_\alpha)_{ij}^s \tag{4.30}$$

de modo que as equações (4.29) podem ser aproximadas por:

$$(h_\alpha)^s_{ij} = \frac{1 + (K_\alpha)^s_{ij}(\theta_\alpha)^s_j - (K_\beta)^s_{ij}\ (\theta_\beta)^s_j - (K_\gamma)^s_{ij}(\theta_\gamma)^s_j}{1 + (K_\alpha)^s_{ij}(\theta_\alpha)^s_j + (K_\beta)^s_{ij}\ (\theta_\beta)^s_j + (K_\gamma)^s_{ij}(\theta_\gamma)^s_j} \tag{4.31}$$

Substituindo a expressão acima nas equações (4.28) e expandindo os logarítmos obtém-se que:

$$(Y_\alpha)^s_{ij} = (K_\alpha)^s_{ij}\ (\theta_\alpha)^s_j\ . \tag{4.32}$$

A aplicação do teorema do limite central às equações (4.27) nos permite afirmar que as distribuições de probabilidades para os campos externos efetivos $\vec{X}^{s+1}_i$ serão todas Gaussianas. As médias $(X^o_\alpha)^{s+1}$ e as variâncias $(\tilde{X}^2_\alpha)^{s+1}$ dessas distribuições são obtidas das médias $(Y^o_\alpha)^s$ e das variâncias $(\tilde{Y}^2_\alpha)^s$ das distribuições de probabilidades para as interações $\vec{Y}^s_{ij}$ através das relações:

$$(X^o_\alpha)^{s+1} = z\ (Y^o_\alpha)^s \tag{4.33a}$$

$$(\tilde{X}^2_\alpha)^{s+1} = z\ (\tilde{Y}^2_\alpha)^s. \tag{4.33b}$$

Usando as equações (4.32) e fazendo as definições:

$$m^s_\alpha = \int P[(X_1)^s_j]\ P[(X_2)^s_j]\ P[(X_3)^s_j](\theta_\alpha)^s_j\ d(X_1)^s_j\ d(X_2)^s_j\ d(X_3)^s_j \tag{4.34a}$$

e

$$q^s_\alpha = \int P[(X_1)^s_j]P[(X_2)^s_j]P[(X_3)^s_j]\ [(\theta_\alpha)^s_j]^2\ d(X_1)^s_j\ d(X_2)^s_j\ d(X_3)^s_j \tag{4.34b}$$

as grandezas $(Y_\alpha^o)^s$ e $(\tilde{Y}_\alpha^2)^s$ são obtidas como sendo dadas por:

$$(Y_\alpha^o)^s = K_\alpha^o \, m_\alpha^s/z \tag{4.35a}$$

$$(\tilde{Y}_\alpha^2)^s = \tilde{K}_\alpha^2 \, q_\alpha^s/z. \tag{4.35b}$$

Substituindo as equações (4.35) nas equações (4.33) tem-se que:

$$(X_\alpha^o)^{s+1} = K_\alpha^o \, m_\alpha^s \tag{4.36a}$$

$$(\tilde{X}_\alpha^2)^{s+1} = \tilde{K}_\alpha^2 \, q_\alpha^s \, . \tag{4.36b}$$

de modo que as distribuições de probabilidades para os campos extermos efetivos podem ser explicitamente escritas como:

$$P\left[(X_\alpha)_i^{s+1}\right] = \left[2\pi\tilde{K}_\alpha^2 \, q_\alpha^s\right]^{-1/2} \exp\{-[(X_\alpha)_i^{s+1} - K_\alpha^o \, m_\alpha^s]^2/2\tilde{K}_\alpha^2 \, q_\alpha^s\}. \tag{4.37}$$

Finalmente, substituindo as distribuições de probabilidades (4.37) nas definições (4.34) obtém-se as seguintes relações de recorrência para o vidro de spin de Ashkin-Teller:

$$m_\alpha^{s+1} = (2\pi)^{-3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-(x^2 + y^2 + z^2)/2\right] f_\alpha(x, y, z; m_1, q_1, m_2, q_2, m_3, q_3) \, dx \, dy \, dz \tag{4.38a}$$

$$q_\alpha^{s+1} = (2\pi)^{-3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-(x^2 + y^2 + x^2)/2\right]\left[f_\alpha(x, y, z; m_1, q_1, m_2, q_2, m_3, q_3)\right]^2 dx \, dy \, dz \tag{4.38b}$$

onde as funções f_α $(x,y,z; m_1,q_1,m_2,q_2,m_3,q_3)$ são dadas por:

$$f_\alpha(x,y,z;\ m_1,q_1,m_2,q_2,m_3,q_3) = \{1 + \exp\ [-2\tilde{K}_\beta (q_\beta^s)^{1/2}\ y -$$

$$- 2K_\beta^o\ m_\beta^s - 2\tilde{K}_\gamma (q_\gamma^s)^{1/2}\ z -$$

$$- 2K_\gamma^o\ m_\gamma^s] - \exp[- 2\tilde{K}_\alpha (q_\alpha^s)^{1/2}\ x -$$

$$- 2K_\alpha\ m_\alpha^s - 2\tilde{K}_\beta (q_\beta^s)^{1/2}\ y -$$

$$- 2K_\beta^o\ m_\beta^s] - \exp\ [-2\tilde{K}_\alpha (q_\alpha^s)^{1/2}\ x -$$

$$- 2K_\alpha^o\ m_\alpha^s - 2\tilde{K}_\gamma (q_\gamma^s)^{1/2}\ z -$$

$$- 2K_\gamma^o\ m_\gamma^s]\}/\ \{1 + \exp\ [-2\tilde{K}_\beta (q_\beta^s)^{1/2}\ y -$$

$$- 2K_\beta^o\ m_\beta^s - 2\tilde{K}_\gamma\ (q_\gamma^s)^{1/2}\ z -$$

$$- 2K_\gamma^o\ m_\gamma^s] + \exp\ [-2\tilde{K}_\alpha (q_\alpha^s)^{1/2}\ x -$$

$$- 2K_\alpha\ m_\alpha^s - 2\tilde{K}_\beta (q_\beta^s)^{1/2}\ y -$$

$$- 2K_\beta^o\ m_\beta^s] - \exp\ [-2\tilde{K}_\alpha (q_\alpha^s)^{1/2}\ x -$$

$$- 2K_\alpha^o\ m_\alpha^s - 2\tilde{K}_\gamma (q_\gamma^s)^{1/2}\ z -$$

$$- 2K_\gamma^o\ m_\gamma^s]\} \qquad (4.38c)$$

A identificação de m_α^s e q_α^s como sendo, respectivamente, os parâmetros de ordem ferromagnético e vidro de spin pode ser efetuada observando-se que as equações (4.38) nada mais são do que as médias com relação as distribuições de campos externos efetivos das transmissividades entre os spins do topo e fantasma e de seus

quadrados. A identificação é completada lembrando que essas transmissividades nada mais são do que as magnetizações no topo da rede.

As relações de recorrência para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico podem ser obtidas seguindo-se um procedimento absolutamente análogo ao aqui apresentado. Elas podem também ser diretamente obtidas a partir das definições (4.34) utilizando-se as distribuições (4.37) e observando que nesse caso tem-se apenas duas transmissividades associadas a cada ligação definidas nas equações (4.9). O mapeamento para este caso particular é escrito como:

$$m_\alpha^{s+1} = (2\pi)^{-1} \iint_{-\infty}^{\infty} \exp[-(x^2 + y^2)/2] \; f_\alpha \; (x,y;m_1,q_1,m_3,q_3) \; dx \, dy \tag{4.39a}$$

$$q_\alpha^{s+1} = (2\pi)^{-1} \iint_{-\infty}^{\infty} \exp[-(x^2 + y^2)/2] \; [f_\alpha(x,y;m_1,q_1,m_3,q_3)]^2 dx \, dy \tag{4.39a}$$

com as funções f_α $(x, y; m_1, q_1, m_3, q_3)$ dadas por:

$$\begin{aligned} f_1(x,y;m_1,q_1,m_3,q_3) = \{ 1 - \exp[-4\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2} x - 4K_1^o m_1^s]\} / \{1 + \\ + 2 \exp[-2\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2} x - 2 K_1^o m_1^s - \\ - 2 \tilde{K}_3 (q_3^s)^{1/2} y - 2 K_3^o m_3^s] + \\ + \exp [-4 \tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2} x - 4 K_1^o m_1^s]\} \end{aligned} \tag{4.40a}$$

$$f_2(x,y;m_1,q_1,m_3,q_3) = f_1 \; (x, y; m_1, q_1, m_3, q_3) \tag{4.40b}$$

$$f_3(x,y;m_1,q_1,m_3,q_3) = \{1 - 2\exp[-2\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}x - 2K_1^o m_1^s -$$

$$- 2\tilde{K}_3(q_3^s)^{1/2}y - 2K_3^o m_3^s] +$$

$$+ \exp[-4\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}x - 4K_1^o m_1^s]\} /$$

$$\{1 + 2\exp[-2\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}x - 2K_1^o m_1^s -$$

$$- 2\tilde{K}_3(q_3^s)^{1/2}y - 2K_3^o m_3^s] +$$

$$+ \exp[-4\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}x - 4K_1^o m_1^s]\} \quad (4.40c)$$

Nos parece evidente que devido à dimensionalidade excessivamente alta desse mapeamento bem como ao grande número de parâmetros envolvidos a análise das equações (4.39) torna-se impraticável. Entretanto, seis casos particulares importantes podem ser obtidos anulando-se simultâneamente dois dos parâmetros envolvidos. Dentre estes alguns se reduzem a situações já estudadas nesse trabalho como são os casos em que fazemos $K_1^o = \tilde{K}_1 = 0$ ou $K_3^o = \tilde{K}_3 = 0$, reproduzindo o mapeamento obtido para o modelo de Ising ou ainda $\tilde{K}_1 = \tilde{K}_3 = 0$ que reproduz o mapeamento para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular. Dessa forma, no que segue são analisados apenas os três casos particulares restantes. Antes de começarmos a estudá-los separadamente vale a pena observar que em todos eles o mapeamento será bi-dimensional uma vez que as funções $f_\alpha(x,y;m_1,q_1,m_3,q_3)$ só dependem de dois parâmetros. Além disso, em todos esse casos, a região em que o ponto fixo trivial é estável é determinada por equações semelhantes às já obtidas para os vidros de spin de Ising e Potts.

a) Primeiro Caso: $\tilde{K}_1 = K_3^o = 0$

Nesse caso particular as funções $f_\alpha(x, y; m_1, q_1, m_3, q_3)$ se reduzem a:

$$f_1(y;m_1,q_3) = \{1 - \exp[-4 K_1^o m_1^s]\} / \{1 + 2 \exp[-2 K_1^o m_1^s - 2 \tilde{K}_3 (q_3^s)^{1/2} y] + \exp[-4 K_1^o m_1^s]\} \quad (4.41a)$$

$$f_3(y;m_1,q_3) = \{1 - 2 \exp[-2 K_1^o m_1^s - 2 \tilde{K}_3 (q_3^s)^{1/2} y] + \exp[-4 K_1^o m_1^s]\} / \{1 + 2 \exp[-2 K_1^o m_1^s - 2 \tilde{K}_3 (q_3^s)^{1/2} y] + \exp[-4 K_1^o m_1^s]\} \quad (4.41b)$$

de modo que o mapeamento (4.39) fica reduzido a:

$$m_1^{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2} f_1(y; m_1, q_3)\, dy \quad (4.42a)$$

$$q_3^{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2/2} f_3^2 (y; m_1, q_3)\, dy \quad (4.42b)$$

Uma vez obtidos os valores de m_1 e q_3 correspondentes aos diferentes atratores desse mapeamento os demais parâmetros de ordem podem ser calculados.

A região no interior da qual o ponto fixo paramagnético $m_1^* = q_1^* = 0$ (fazendo também com que m_3^* e q_1^* sejam nulos) é estável é definida por:

$$1/\tilde{K}_3 > 1 \tag{4.43a}$$

$$1/\tilde{K}_3 > |K_1^o/\tilde{K}_3| \tag{4.43b}$$

O mapeamento (A.42) apresenta também alguns limites interessantes que podem ser estudados analiticamente e que permitem um bom entendimento das propriedades do modelo. Por conveniência, são feitas as seguintes substituições:

$$R_3 = 1/\tilde{K}_3 \tag{4.44a}$$

$$R_1^o = K_1^o/\tilde{K}_3 \tag{4.44b}$$

$$a = \exp\left[-2\, R_1^o\, m_1^s / R_3\right] \tag{4.44c}$$

$$\alpha = 2 \exp\left[-2(q_3^s)^{1/2}\, y/R_3\right] \tag{4.44d}$$

de modo que as equações (4.41) são reescritas como:

$$f_1(y;m_1,q_3) = [1 - a^2]/[1 + 2\, a\alpha + a^2] \tag{4.45a}$$

$$f_3(y;m_1,q_3) = [1 - 2a\alpha + a^2]/[1 + 2a\alpha + a^2] \tag{4.45b}$$

Nesse caso e nos seguintes usaremos letras gregas para indicar a exponencial da variável de integração.

i) $R_1^o \to \infty$ com R_4 finito. Nesse limite as intera-

ções entre os spins de Ising σ (s) em camadas consecutivas da rede são muito grandes fazendo com que esses spins se alinhem ferromagneticamente. Esse alinhamento, por sua vez, faz com que o mesmo ocorra com as variáveis σs. Observe que nessas condições $a \to 0$ de modo que f_1 e f_3 são iguais à unidade. Dessa forma m_1^s e m_3^s serão sempre iguais à unidade, qualquer que seja s, e de forma que teremos um alinhamento ferromagnético tanto em termos de σ(s) quanto em termos de σs. Essa fase é indicada por (1-FERRO; 3-FERRO) (figura 40).

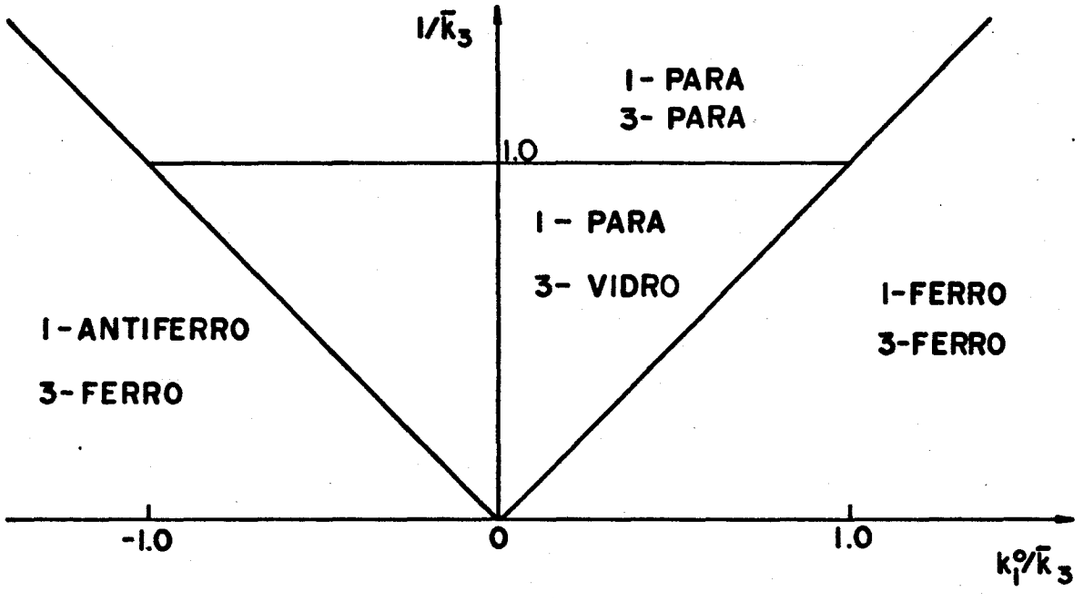
ii) $R_1^o \to \infty$; $R_3 \to \infty$ com $R_3 >> R_1^o$. Nesse caso apesar de haver uma forte tendência no sentido de que os spins σ(s) se alinhem ferromagneticamente ha uma tendência maior que os spins σs permaneçam desordenados uma vez que $R_3 \to \infty$ pode ser entendido como temperatura muito alta. Como σs não pode manter-se desordenado sem que o mesmo ocorra com relação a σ(s) devemos esperar que nesse caso tenhamos paramagnetismo com $m_1^* = m_3^* = 0$ e $q_1^* = q_3^* = 0$. De fato, nesse limite $a \to 1$ de modo que $f_1 = 0$ e $f_3 = \tan h\ [(q_3^s)^{1/2}\ y/R_3]$. Observe que em termos das variáveis m_3 e q_3 a relação de recorrência reproduz as equações de SK (2.58) com $J_o = 0$. Nessas equações o fato de J_o ser nulo faz com que m também o seja. O ponto fixo da relação de recorrência restante será $q^* = 0$ ($q^* \neq 0$) se $KT/\tilde{J} > 1 (<1)$. Como $R_3 = KT/\tilde{J}_3 >> 1$ a convergência então se dará em direção ao ponto fixo trivial. Essa fase é indicada na figura 40 por (1 - PARA; 3 - PARA).

iii) $R_1^o = 0$ com R_3 finito. Nesse limite o modelo de Ashkin-Teller isotrópico aleatório se reduz ao vidro de spin de Ising na variável σs. Além disso, como supomos nulo o valor médio K_3^o teremos em termos dessa variável uma fase paramagnética (1-PARA; 3-PARA) quando $R_3 > 1$ e uma fase vidro de spin (1-PARA; 3-VIDRO) quan $R_3 < 1$. Isso pode ser facilmente verificado observando-se que também

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

Figura 40 - Diagrama de fases do vidro de spin de Ashkin -Teller: caso particular $\tilde{K}_1 = K_3^o = 0$.

O diagrama de fases apresentado foi obtido do estudo numérico do mapeamento (4.39) com $\tilde{K}_1 = K_3^o = 0$. Nesse e nos diagramas seguintes o número 1 se refere às variáveis $\sigma(s)$ ao passo que o número 3 se refere à variável σs. São as seguintes as fases encontradas: i) (1-PARA; 3-PARA). Essa é a fase paramagnética do sistema, obtida para temperaturas suficientemente altas e caracterizada pelo ponto fixo $m_1^* = q_1^* = 0$ e $m_3^* = q_3^* = 0$. ii) (1-FERRO; 3-FERRO) obtida para valores suficientemente grandes do parâmetro K_1^o e caracterizada por um ponto fixo no qual todos os parâmetros de ordem são positivos. iii) (1-PARA; 3-VIDRO). Nessa fase σs apresenta uma ordem do tipo vidro de spin ($m_3^* = 0$; $q_3^* \neq 0$) enquanto que σs se mantêm desordenados. Ela é encontrada para valores suficientemente pequenos da temperatura e de K_1^o, iv) (1-ANTIFERRO; 3-FERRO): Essa fase é a análoga à fase discutida em ii) para valores negativos de K_1^o. Seu atrator característico é um duplo ciclo do tipo $m_1^{s+1} = - m_1^{s+1}$ com $m_3^{s+1} = m_3^s$. No que diz respeito à ordem das transições aparentemente são todas de 2ª ordem não havendo indícios de descontinuidade nos parâmetros de ordem ou de coexistência de soluções.


1/k̄3
1- PARA
3- PARA
1.0
1 - PARA
3- VIDRO
1-FERRO
3-FERRO
1-ANTIFERRO
3-FERRO
-1.0
0
1.0
k1°/k̄3

nesse caso a=1 de modo que $f_1=0$ e $f_3 = \tan h\ [(q_3^s)^{1/2} y/R_3]$.

iv) $R_1 \to -\infty$ com R_3 finito. O fato de $R_1^o \to -\infty$ faz com que $\sigma(s)$ apresente um alinhamento antiferromagnético e, como já vimos, esse alinhamento induz o alinhamento do spin σs. É interessante observar que o alinhamento induzido é ferromaghético indicando que os spins σ e s em um mesmo sítio se alinham ferromagneticamente. Em outras palavras, $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ e $\langle s_i s_j\rangle$ sendo negativos fazem com que $\langle\sigma_i s_i \sigma_j s_j\rangle$ seja positivo. Observe que se tomamos m_1^s positivo a $\to \infty$, de modo que $f_1 = -1$ - fazendo com que m_1^{s+1} seja negativo - e $f_3=1$. Se, por outro lado, tomamos m_1^s negativo a $\to 0$ e teremos $f_1=1$ - fazendo com que m_1^{s+1} seja positivo - e novamente $f_3=1$. Essa fase é indicada na figura 40 por (1-ANTIFERRO; 3-FERRO).

v) $R_1^o \to -\infty$ com R_3 finito e $R_3 >> R_1^o$. Esse limite pode ser analisado de forma muito semelhante ao que fizemos em ii) e valem as mesmas conclusões ali obtidas.

Guiados por esses resultados, o mapeamento (4.42) foi estudado numéricamente. O diagrama de fases obtido é apresentado na figura 40. Como pode ser visto dessa figura o modelo apresenta apenas as fases obtidas dos casos limites estudados analiticamente.

b) Segundo Caso: $K_1^o = \tilde{K}_3 = 0$

Nessas condições as funções $f_\alpha(x, y; m_1, q_1, m_2, q_2, m_3, q_3)$ se reduzem a:

$$f_1(x;q_1,m_3) = \{1 - \exp\ [- 4\ \tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\ x]\}\ /$$

$$\{\ 1 + 2 \exp\ [- 2\ \tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\ -$$

$$- 2\, K_3^o\, m_3^s\,] + \exp\,[-\,4\,\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\, x]\}$$

(4.46a)

$$f_3(x;q_1,m_3) = \{1 - 2\exp\,[-2\,\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\, x -$$

$$- 2\, K_3^o\, m_3^s] + \exp\,[-4\,\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\, x]\}/$$

$$\{1+2\exp[-2\,\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\, x - 2\,\tilde{K}_3^o\, m_3^s] +$$

$$+ \exp\,[-4\,\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\, x]\} \qquad (4.46b)$$

de modo que o mapeamento (4.39) fica reduzido a:

$$q_1^{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2}\; f_1^2\,(x;\, q_1, m_3)\; dx \qquad (4.47a)$$

$$m_3^{s+1} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2}\; f_3\,(x;q_1,m_3)\; dx \qquad (4.47b)$$

Agora, são os parâmetros de ordem m_1 e q_3 que não participam do mapeamento devendo ser calculados a partir dos valores de q_1 e m_3.

A região no interior da qual o ponto fixo paramagnético é estável é dada por:

$$1/\tilde{K}_1 > 1 \qquad (4.48a)$$

$$1/\tilde{K}_1 > |K_3^o/\tilde{K}_1| \qquad (4.48b)$$

Seguindo o mesmo esquema utilizando no primeiro caso ($\tilde{K}_1 = K_3^o = 0$) vamos estudar alguns limites analiticamente. Fazendo as substituições:

$$R_1 = 1/\tilde{K}_1 \tag{4.49a}$$

$$R_3^o = K_3^o/\tilde{K}_1 \tag{4.49b}$$

$$b = \exp\left[-2\, R_3^o\, m_3^s/R_1\right] \tag{4.49c}$$

$$\beta = \exp\left[-2(q_1^s)^{1/2}\, x\, /R_1\right] \tag{4.49d}$$

podemos reescrever as equações (4.46) como:

$$f_1(x;q_1,m_3) = [1 - \beta^2]/[1 + 2b\beta + \beta^2] \tag{4.50a}$$

$$f_3(x;q_1,m_3) = [1 - 2b\beta + \beta^2]\,/\,[1 + 2b\beta + \beta^2] \tag{4.50b}$$

i) $R_3^o \doteq 0$ com R_1 finito: O modelo de Ashkin-Teller se reduz a dois Isings superpostos nas variáveis σ e s. Nessas circunstâncias b=1, $f_1 = \tan h\,[(q_1^s)^{1/2}\, x/R_1]$e $f_3 = \tan h^2[\,(q_1^s)^{1/2}\, x/R_1]$ de modo que para $R_1 < 1$ temos que $m_1^*=0$ com $q_1^* > 0$ caracterizando uma ordem vidro de spin na variável $\sigma(s)$ e $m_3^* > 0$ com $q_3^* > 0$ caracterizando ordenamento ferromagnético na variável σs. Portanto essa fase é indicada por (1-VIDRO; 3-FERRO) na figura 41. Para $R_1 > 1$ $m_1^*=q_1^*=m_3^*=q_3^*=0$ caracterizando a fase paramagnética (1-PARA; 3-PARA).

ii) $R_3^o \to \infty$ com R_1 finito. Nesse caso há uma forte tendência a um alinhamento ferromagnético na variável σs. Observe que nessas condições b=0 e $f_3=1$ implicando que $m_3=1$, o que demonstra o ferromagnetismo em σs. Outra consequência de b=0 é que $f_1 = \tan h\,[2(q_1^s)^{1/2} x/R_1]$. Para a variável $\sigma(s)$ tem-se então reproduzida equação de SK para $J_o=0$. Observe que o fator 2 multiplicando o

argumento da tangente hiperbólica faz com que a transição entre as fases vidro de spin e paramagnética ocorra em $R_1=2$. No diagrama da figura 41 essas fases são indicadas por (1-PARA, 3-FERRO) quando $R_1>2$ e (1-VIDRO; 3-FERRO) quando $R_1<2$.

iii) $R_3^o \to \infty$ mas $R_3^o >> R_1$. Nesse caso mantém-se a tendência de ordenamento ferromagnético para a variável σs.

Com relação à variável $\sigma(s)$ novamente o fato de b tender a zero faz com que $f_1 = \tan h \left[2(q_1^s)^{1/2} x/R_1\right]$. Entretanto como $R_1>>2$ essas variáveis não se ordenam e temos novamente caracterizada a fase (1-PARA; 3-FERRO).

iv) $R_3^o \to \infty$ com $R_1 \to \infty$ mas $R_3^o << R_1$. Nesse caso, a forte tendência ao ferromagnestismo na variável σs expressa em $R_3^o \to \infty$ é anulada por uma temperatura excessivamente alta evidenciada pelo fato de $R_1 \to \infty$ com $R_1>>R_3^o$. Sendo assim, não há ordenamento em nenhuma das variáveis (1-PARA; 3-PARA). Note que como b=1 recupera-se o limite analisado em i mas com $R_1>1$.

v) $R_3^o \to -\infty$ com R_1 finito: De maneira inversa ao que obtivemos em ii há neste caso forte tendência no sentido de um alinhamento antiferromagnético da variável σs. A demonstração de que isso realmente acontece pode ser feita através do seguinte raciocínio: em primeiro lugar observemos que, para $m_3^s>0, b\to\infty$. É fácil de se ver também que f_3 tem dois zeros localizados em $\beta_1=0$ e $\beta_2=2b$. Em termos da variável de integração x estes zeros se localizam em:

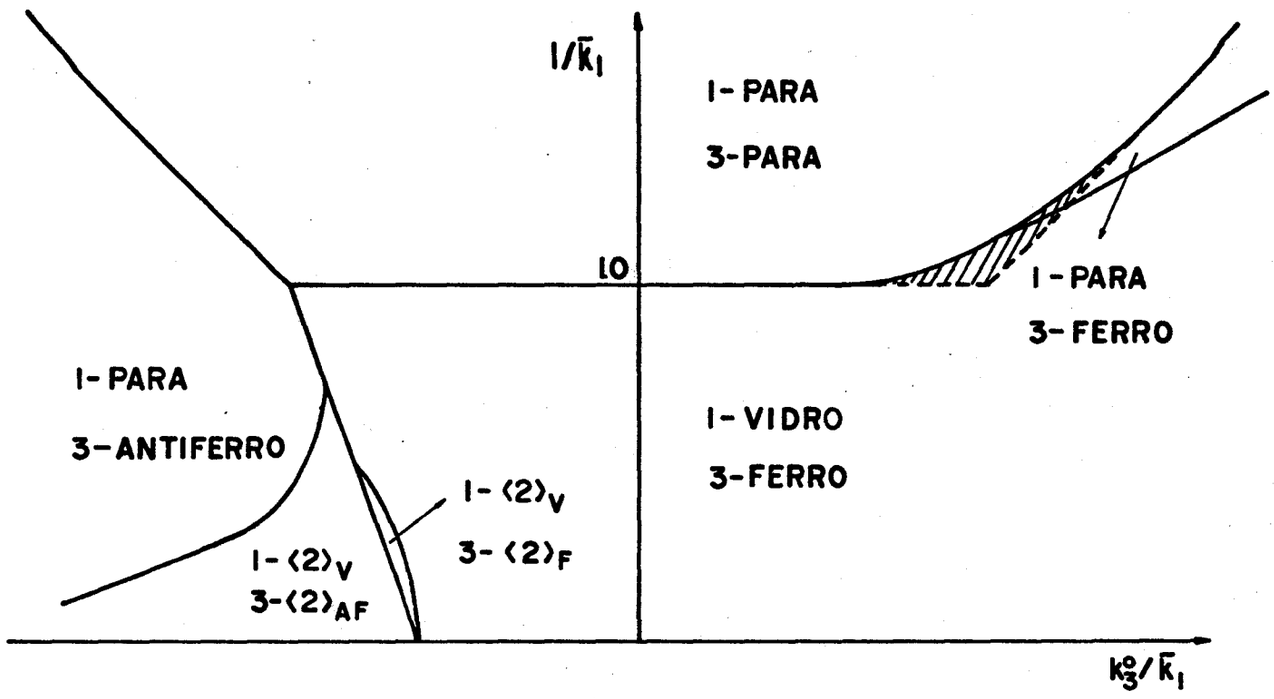
$$x_i = R_1 \ln \beta_i \,/\, \left[2(q_1^s)^{1/2}\right] \quad (i=1,2) \qquad (4.51)$$

de modo que substituindo os valores de β_1 e β_2 e lembrando que $b\to\infty$ teremos:

Figura 41 - Diagrama de fases para o vidro de spin de Ashkin-Teller: caso particular $K_1^o = \tilde{K}_3 = 0$.

Quando $K_1^0 = \tilde{K}_3 = 0$ o mapeamento (4.39) se reduz ao mapeamento (4.47). Além da fase paramagnética encontrada em todos os diagramas são derivadas as seguintes fases: i) (1-VIDRO; 3-FERRO) caracterizada por um ponto fixo no qual $m_1^*=0$ mas m_3^*, q_1^* e q_3^* são positivos. ii) (1-PARA; 3-FERRO) caracterizada por um ponto fixo no qual $m_1^* = q_1^* =0$ mas com m_3^* e q_3^* positivos. iii) (1-PARA; 3- ANTIFERRO). Essa fase é a análoga da fase anterior para $K_3^0 < 0$. Seu atrator é um duplo ciclo do tipo $m_1^* = q_1^* = 0$ com $m_3^{s+1} = - m_3^s$. iv) $(1-\langle 2\rangle_V;\ 3-\langle 2\rangle_F)$. O atrator característico dessa fase é um duplo ciclo no qual, exceto m_1^*, que é nulo, todos os demais parâmetros de ordem são positivos mas assumem valores diferentes em duas camadas consecutivas. vi) $(1-\langle 2\rangle_V\ ;\ 3-\langle 2\rangle_{AF})$. Essa fase é análoga à anterior com a única diferença de que nela o parâmetro de ordem m_3 alterna seu sinal em duas camadas consecutivas.

Com relação à ordem das transições todas parecem ser de 2ª ordem com excessão da que ocorre na região hachurada da figura onde há coexistência de soluções.


1/k̄1
1- PARA
3-PARA
1.0
1 - PARA
3- FERRO
1- PARA
3-ANTIFERRO
1- VIDRO
3-FERRO
1- ⟨2⟩V
3- ⟨2⟩F
1- ⟨2⟩V
3-⟨2⟩AF
k°3/k̄1

$$x_1 = -\infty \qquad x_2 = +\infty \tag{4.52}$$

Como a função é negativa entre os zeros é facil de ver que m_3^{s+1} será negativa. Por outro lado, para $m_3^s < 0$ a função f_3 não tem zeros sendo positiva em todo eixo real implicando que $m_3^{s+1} > 0$. A alternância do sinal de m_3 caracteriza o ordenamento ferromagnético da variável σs.

Com relação a f_1 é fácil de ver que esta função só terá valores significativamente diferentes de zero quando $x \to \infty$ ocasião em que a gaussiana se encarrega de anular a integral fazendo $q_1=0$. Temos então a fase (1-PARA; 3-ANTIFERRO).

vi) $R_3^o \to -\infty$ com $R_1 \to \infty$ e $R_1 >> R_3^o$ (1-PARA; 3-PARA).

Novamente uma temperatura excessivamente alta impede que exista qualquer ordenamento nas variáveis $\sigma(s)$ e σs. Isso pode ser facilmente verificado observando-se que $b \to 1$ e $f_3 = f_1^2 = \tan h^2[(q_1^s)^{1/2} x / R_1] \to 0$.

O diagrama de fases obtido a partir do estudo numérico do mapeamento (4.47) é apresentado na figura 41. Como pode ser visto dessa figura além das fases já previstas aparecem mais duas fases indicadas por $(1-\langle 2\rangle_V ; 3-\langle 2\rangle_F)$ e $(1-\langle 2\rangle_V ; 3-\langle 2\rangle_{AF})$. Essas fases se encontram localizadas entre as fases (1-PARA; 3-ANTIFERRO) e (1-VIDRO; 3-FERRO) e seus atratores característicos são duplos ciclos do tipo:

$$m_1^s = m_1^{s+1} = 0 \quad ; \quad q_1^s \neq q_1^{s+1}$$

$$0 < m_3^s \neq m_3^{s+1} > 0 \quad ; \quad q_3^s \neq q_3^{s+1}$$

para a fase $(1-\langle 2\rangle_V ; 3 - \langle 2\rangle_F$ e

$$m_1^s = m_1^{s+1} = 0 \quad ; \quad q_1^s \neq q_1^{s+1}$$

$$m_3^s < 0 < m_3^{s+1} \quad ; \quad q_3^s \neq q_3^{s+1}$$

para a fase (1 - $\langle 2 \rangle_V$; 3 - $\langle 2 \rangle_{AF}$).

Na região hachurada as soluções (1-PARA; 3-PARA)e (1-VIDRO; 3-FERRO) coexistem indicando transição de 1ª ordem.

c) Terceiro caso: $K_1^o = K_3^o = 0$

Quando ambos os valores médios das distribuições (4.26) são nulos as equações (4.40) podem ser reescritas como:

$$f_1(x,y;q_1,q_3) = \{1 - \exp\,[-4\,\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}\,x]\} \,/$$

$$\{1+2\,\exp\,[-2\,\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}\,x -$$

$$-2\,\tilde{K}_3(q_3^s)^{1/2}\,y] + \exp\,[-$$

$$-4\,\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}\,x]\} \qquad (4.53a)$$

$$f_3(x,y;q_1,q_3) = \{1-2\,\exp\,[-2\,\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}\,x -$$

$$-\,2\,\tilde{K}_3(q_3^s)^{1/2}\,y] + \exp\,[-$$

$$-\,4\,\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}\,x\,]\}\,/\,\{1\,+$$

$$+\,2\,\exp\,[-\,2\,\tilde{K}_1(q_1^s)^{1/2}\,x\,-$$

$$-\,2\,\tilde{K}_3(q_3^s)^{1/2}\,y] \,+$$

$$+ \exp\left[- 4\,\tilde{K}_1 (q_1^s)^{1/2}\, x\right]\} \tag{4.53b}$$

ficando o mapeamento (4.39) reduzido a:

$$q_1^{s+1} = (2\pi)^{-1} \iint_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-(x^2+y^2)/2\right] f_1^2\,(x,\, y;\, q_1,\, q_3)\, dx\, dy \tag{4.54a}$$

$$q_3^{s+1} = (2\pi)^{-1} \iint_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-(x^2+y^2)/2\right] f_3^2\,(x,\, y;\, q_1,\, q_3)\, dx\, dy \tag{4.54b}$$

Como nos casos anteriores os demais parâmetros de ordem m_1 e m_3 são determinados de q_1 e q_3.

Para esse caso particular, a região de estabilidade para o ponto fixo paramagnético é dada por:

$$1/\tilde{K}_3 > 1 \tag{4.55a}$$

$$1/\tilde{K}_3 > \tilde{K}_1/\tilde{K}_3 \tag{4.55b}$$

O diagrama de fases obtido da análise numérica do mapeamento (4.54) é apresentado na figura 42. A exemplo do que ocorreu no caso particular a ($\tilde{K}_1 = K_3^o = 0$) todas as fases do modelo podem ser identificadas estudando-se alguns limites especiais. Os comportamentos das funções f_1 e f_3 são obtidos mais facilmente fazendo as seguintes

substituições:

$$R_3 = 1/\tilde{K}_3 \tag{4.56a}$$

$$R_1^3 = \tilde{K}_1/\tilde{K}_3 \tag{4.56b}$$

$$\alpha = \exp\left[-2\, R_1^3\, (q_1^s)^{1/2}\, x / R_3\right] \tag{4.56c}$$

$$\beta = \exp\left[-2\, (q_3^s)^{1/2}\, y / R_3\right]. \tag{4.56d}$$

De modo que as equações (4.53) são reescritas como:

$$f_1(x, y; q_1, q_3) = [1 - \alpha^2] / [1 + 2\alpha\beta + \alpha^2] \tag{4.57a}$$

$$f_3\,(x, y; q_1, q_3) = [1 - 2\alpha\beta + \alpha^2] / [1 + 2\alpha\beta + \alpha^2] \tag{4.57b}$$

i) $R_1^3 = 0$ (1-PARA; 3-VIDRO) e (1-PARA; 3-PARA)

Com $R_1^3=0$ o modelo de Ashkin-Teller isotrópico novamente se reduz ao modelo de Ising na variável σs. Observe que nesse caso $\alpha=1$ de modo que $f_1=0$ e $f_3=\tan h\,[(q_3^s)^{1/2}\, y / R_3]$. Dessa forma, não há ordenamento das variáveis σ e s. No caso da variável σs entretanto podemos dizer que temos um ordenamento vidro de spin para $R_3 < 1$ e nenhum ordenamento para $R_3 > 1$. As fases assim obtidas são designadas, respectivamente, por (1-PARA; 3-VIDRO) e (1-PARA; 3-PARA).

ii) $R_3 \to \infty$ (1-PARA; 3-PARA) e (1-VIDRO; 3-FERRO)

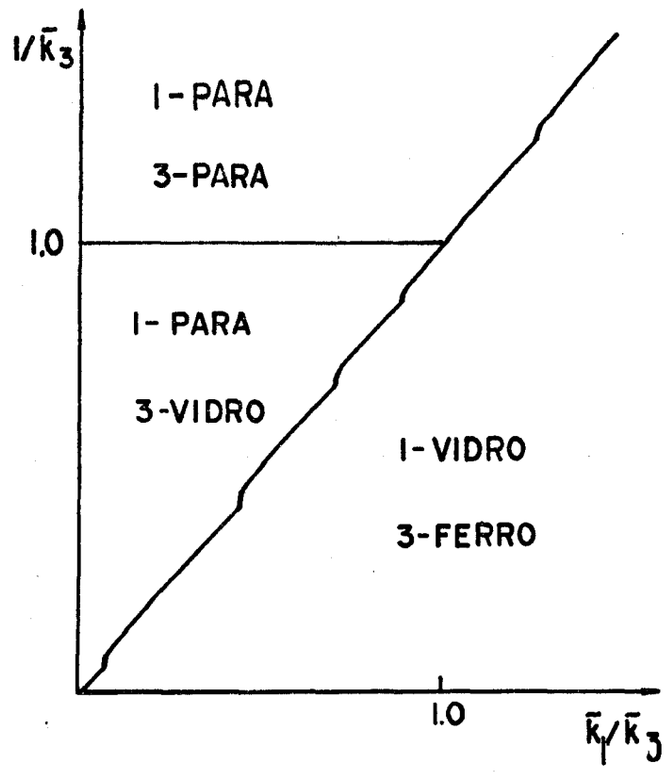


Figura 42 - Diagrama de fases do vidro de spin de Ashkin Teller: caso particular $K_1^o = K_3^o = 0$

Quando ambas as médias são nulas o mapeamento para o vidro de spin de Ashkin-Teller se reduz às equações (4.54). O estudo numérico desse mapeamento indica, além da fase desordenada, a existência das seguintes fases: i) (1 - PARA; 3 - VIDRO). Essa fase é encontrada para valores suficientemente pequenos da temperatura e de $\tilde{K}_1$ sendo caracterizada pelo ponto fixo $m_1 = q_1 = m_3 = 0$; $q_3 \neq 0$ ii) (1 - VIDRO; 3 - FERRO). Essa fase é obtida para valores suficientementes grandes de $\tilde{K}_1$ e é caracterizada por um ponto fixo no qual todos os parâmetros de ordem são positivos, exceto m_1^* que é nulo.

Novamente as transições parecem ser todas de 2ª ordem não sendo verificadas descontinuidades nos parâmetros de ordem nem mesmo coexistência de soluções.

Na situação em que $R_3 \to \infty$ que corresponde a temperaturas muito altas somente para valores muito grandes de y teremos $\beta \neq 1$. Para esses valores contudo a gaussiana se encarrega de anular o integrando de modo que podemos fazer $\beta = 1$. Com isso podemos escrever que:

$$f_1 = \tan h \left[(q_1^s)^{1/2} x \,/\, (R_3/R_1^3) \right] \qquad (4.58a)$$

$$f_3 = \tan h^2 \left[(q_1^s)^{1/2} x \,/\, (R_3/R_1^3) \right] \qquad (4.58b)$$

Substituindo essas equações nas equações (4.54) verifica-se facilmente a partir do resultado obtido para o modelo de Ising que para $R_3/R_1^3 < 1$ obtém-se um ordenamento vidro de spin das variáveis σ e s e um ordenamento ferromagnético da variável σs (1-VIDRO; 3-FERRO). Por outro lado, quando $R_3 < R_1^3$ os spins estão completamente desordenados (1-PARA; 3-PARA).

Finalmente, com relação à ordem das transições de fase todas elas parecem ser de segunda ordem pois não há indícios de coexistência de soluções nem de descontinuidades nos parâmetros de ordem.

4.2.1. Generalização das equações de TAP para o vidro de spin de Ashkin-Teller

A exemplo do que fizemos para o modelo de Potts o formalismo desenvolvido no Capítulo II é extendido, permitindo a construção das equações de TAP generalizadas para o modelo de Ashkin-Teller. Como já foi visto anteriormente o primeiro passo desse procedimento consiste em fazer todas as renormalizações necessárias para que a rede fique reduzida ao aglomerado da figura 43a. Nesse aglomerado $\vec{\theta}_j^c$ são as transmissividades associadas aos

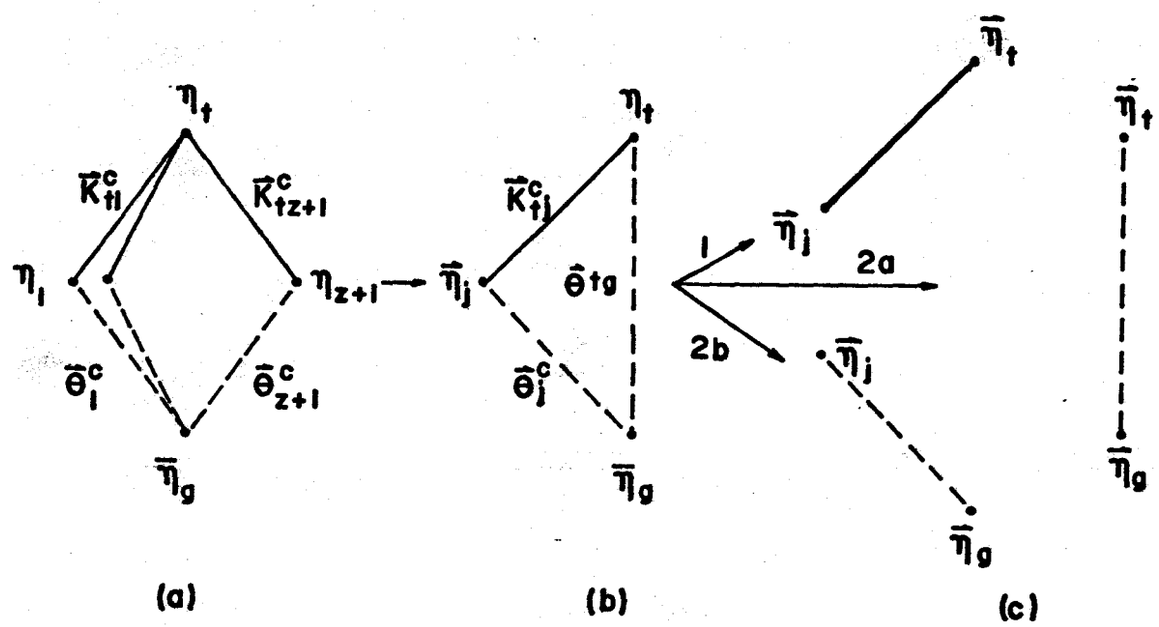


Figura 43 - Generalização da equação de TAP para o vidro de spin de Ashkin-Teller e obtenção de sua energia interna.

Seguindo a mesma sequência de renormalizações descrita no Capítulo II e indicada pelas setas 2a e 2b, obtém-se a generalização da equação de TAP (4.67) para o vidro de spin de Ashkin-Teller. Essa equação reduz-se aos resultados obtidos para Ising e Potts quando se escolhe apropriadamente as interações $(K_\alpha)_{tj}$ entre o spin do topo e os spins da camada central.

Efetuando a renormalização indicada na seta 1 esse aglomerado pode ainda ser utilizado para obtenção da energia interna desse sistema. O resultado obtido [eq(4.71)] reduz-se, nos casos particulares analisados, aos apresentados nas equações (4.72).

campos externos efetivos $\vec{X}_j^c$ que atuam na camada central, e $\vec{K}_{t_j}$ as interações entre o j-ésimo spin dessa camada e o spin do topo.

A partir desse aglomerado e por um procedimento semelhante ao utilizado na passagem da equação (4.27) para a equação (4.32) o campo externo efetivo que atua no topo da rede $\vec{X}_\alpha^t$ fica dada por:

$$X_\alpha^t = \sum_{j=1}^{z+1} (K_\alpha)_{tj} \, (\theta_\alpha)_j^c \, . \tag{4.59}$$

Combinando a equação acima com as definições dos pesos de Boltzmann:

$$\omega_\alpha^t = \exp\left[-2\, X_\beta^t - X_\gamma^t\right] \tag{4.60}$$

e das transmissividades (4.4) obtém-se a seguinte expressão para a magnetização no topo da rede:

$$\begin{aligned} m_\alpha^t = \{1+\exp\Big[-2 \sum_{j=1}^{z+1} \big[(K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c + (K_\gamma)_{tj}(\theta_\gamma)_j^c\big]\Big] - \\ - \exp\Big[-2 \sum_{j=1}^{z+1} \big[(K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c + (K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c\big]\Big] - \\ - \exp\Big[-2 \sum_{j=1}^{z+1} \big[(K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c + (K_\gamma)_{tj}(\theta_\gamma)_j^c\big]\Big]\}/\{1+ \\ + \exp\Big[-2 \sum_{j=1}^{z+1} \big[(K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c + (K_\gamma)_{tj}(\theta_\gamma)_j^c\big]\Big] + \\ + \exp\Big[-2 \sum_{j=1}^{z+1} \big[(K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c + (K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c\big]\Big] + \\ + \exp\Big[-2 \sum_{j=1}^{z+1} \big[(K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c + (K_\gamma)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c\big]\Big]\} \end{aligned} \tag{4.61}$$

Partindo desse aglomerado, e por meio das leis de composição (4.7), pode-se chegar facilmente ao aglomerado da figura 43b onde $\vec{\theta}^{tg}$ são as transmissividades associadas às interações $\vec{X}_{tg}$ entre o spin do topo e o spin fantasma. Fazendo agora uso da lei de composição (4.7c) o novo aglomerado por ser utilizado tanto para se reobter as magnetizações no topo (figura 43c, seta 2a)

$$m_\alpha^t = \frac{\theta_\alpha^{tg} + (K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c + \theta_\beta^{tg}(K_\gamma)_{tj}(\theta_\gamma)_j^c + \theta_\gamma^{tg}(K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c}{1 + \theta_\alpha^{tg}(K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c + \theta_\beta^{tg}(K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c + \theta_\gamma^{tg}(K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c} \tag{4.62}$$

bem como para se calcular a magnetização no j-ésimo sítio da camada central (figura 43c, seta 2b)

$$\begin{aligned}(m_\alpha)_j^c = [&(\theta_\alpha)_j^c + (K_\alpha)_{tj}\,\theta_\alpha^{tg} + (\theta_\beta)_j^c\,(K_\gamma)_{tj}\,\theta_\gamma^{tg} + \\ &+ (\theta_\gamma)_j^c\,(K_\beta)_{tj}\,\theta_\beta^{tg}]/[1 + (\theta_\alpha)_j^c\,(K_\alpha)_{tj}\,\theta_\alpha^{tg} + \\ &+ (\theta_\beta)_j^c\,(K_\beta)_{tj}\,\theta_\beta^{tg} + (\theta_\gamma)_j^c\,(K_\gamma)_{tj}\,\theta_\gamma^{tg}]\end{aligned} \tag{4.63}$$

As equações (4.62) podem ser agora utilizadas para se determinar as transmissividades $\vec{\theta}^{tg}$ como:

$$\begin{aligned}\theta_\alpha^{tg} = \{&m_\alpha^t - (K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c - (K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c\,m_\gamma^t - \\ &- (K_\gamma)_{tj}(\theta_\gamma)_j^c\,m_\beta^t\}/[1 - (K_\alpha)_{tj}(\theta_\alpha)_j^c\,m_\alpha^t - \\ &- (K_\beta)_{tj}(\theta_\beta)_j^c\,m_\beta^t - (K_\gamma)_{tj}(\theta_\gamma)_j^c\,m_\gamma^t]\end{aligned} \tag{4.64}$$

de modo que as equações (4.63), desprezando-se os termos $0[(K_\alpha)_{tj}^2]$,

podem ser reescritas como:

$$(m_\alpha)_j^c = (\theta_\alpha)_j^c + (K_\alpha)_{tj}\, m_\alpha^t \{1 - [(\theta_\alpha)_j^c]^2\} + (K_\beta)_{tj}\, m_\beta^t\, [(\theta_\gamma)_j^c - (\theta_\alpha)_j^c (\theta_\beta)_j^c] + (K_\gamma)_{tj} m_\gamma^t\, [(\theta_\beta)_j^c - (\theta_\alpha)_j^c\, (\theta_\gamma)_j^c] \qquad (4.65)$$

Por meio de um procedimento absolutamente idêntico ao utilizado nas passagens de (2.70) a (2.73) as transmissividades $\vec{\theta}_j^c$ podem ser isoladas obtendo-se:

$$(\theta_\alpha)_j^c = (m_\alpha)_j^c - (K_\alpha)_{tj} m_\alpha^t \{1 - [(m_\alpha)_j^c]^2\} - (K_\beta)_{tj}\, m_\beta^t\, [(m_\gamma)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\beta)_j^c] - (K_\gamma)_{tj}\, m_\gamma^t\, [(m_\beta)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\gamma)_j^c] \qquad (4.66)$$

As equações de TAP generalizadas para o modelo de Ashkin-Teller podem ser finalmente obtidas substituindo-se as equações (4.66) nas equações (4.61), i. e.:

$$m_\alpha^t = \{ 1 + \exp\{- 2 \sum_{j=1}^{z+1} \{(K_\beta)_{tj} (m_\beta)_j^c - (K_\beta)_{tj}^2\, m_\beta^t \{1 - [(m_\beta)_j^c]^2\} - (K_\alpha)_{tj} (K_\beta)_{tj}\, m_\alpha^t\, [(m_\gamma)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\beta)_j^c] - (K_\beta)_{tj} (K_\gamma)_{tj}\, m_\gamma^t\, [(m_\alpha)_j^c - (m_\beta)_j^c (m_\gamma)_j^c] +$$

$$+ (K_\gamma)_{tj}(m_\gamma)^c_j - (K_\gamma)^2_{tj}\, m^t_\gamma \{1 - [(m_\gamma)^c_j]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m^t_\alpha [(m_\beta)^c_j - (m_\alpha)^c_j (m_\gamma)^c_j] -$$

$$- (K_\beta)_{tj}(K_\gamma)_{tj} m_\beta [(m_\alpha)^c_j - (m_\beta)^c_j (m_\gamma)^c_j]\}\} - \exp\{-$$

$$- 2 \sum_{j=1}^{z+1} \{(K_\alpha)_{tj}(m_\alpha)^c_j - (K_\alpha)^2_{tj}\, m^t_\alpha \{1 -$$

$$- [(m_\alpha)^c_j]^2\} - (K_\alpha)_{tj}(K_\beta)_{tj}\, m^t_\beta [(m_\gamma)^c_j -$$

$$- (m_\alpha)^c_j (m_\beta)^c_j] - (K_\alpha)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m^t_\gamma [(m_\beta)^c_j -$$

$$- (m_\alpha)^c_j (m_\gamma)^c_j] + (K_\gamma)_{tj}(m_\gamma)^c_j -$$

$$- (K_\gamma)^2_{tj}\, m^t_\gamma \{1 - [(m_\gamma)^c_j]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m^t_\alpha [(m_\beta)^c_j - (m_\alpha)^c_j (m_\gamma)^c_j] -$$

$$- (K_\beta)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m^t_\beta [(m_\alpha)^c_j -$$

$$- (m_\beta)^c_j (m_\gamma)^c_j]\}\} - \exp\{-2 \sum_{j=1}^{z+1} \{(K_\alpha)_{tj}(m_\alpha)^c_j -$$

$$- (K_\alpha)^2_{tj}\, m^t_\alpha \{1 - [(m_\alpha)^c_j]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\beta)_{tj}\, m^t_\beta [(m_\gamma)^c_j - (m_\alpha)^c_j (m_\beta)^c_j] -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m^t_\gamma [(m_\beta)^c_j - (m_\alpha)^c_j (m_\gamma)^c_j] +$$

$$+ (K_\beta)_{tj}(m_\beta)^c_j - (K_\beta)^2_{tj}\, m^t_\beta \{1 - [(m_\beta)^c_j]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\beta)_{tj}\, m^t_\alpha [(m_\gamma)^c_j - (m_\alpha)^c_j (m_\beta)^c_j] -$$

$$- (K_\beta)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m_\gamma^t\, [(m_\alpha)_j^c - (m_\beta)_j^c (m_\gamma)_j^c]\}\}\} \;/$$

$$/\{\, 1 + \exp[\, -2 \sum_{j=1}^{z+1} \{(K_\beta)_{tj}\, (m_\beta)_j^c -$$

$$- (K_\beta)_{tj}^2\, m_\beta^t\, \{1 - [(m_\beta)_j^c\,]^2\,\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\beta)_{tj}\, m_\alpha^t\, [(m_\gamma)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\beta)_j^c] -$$

$$- (K_\beta)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m_\gamma^t\, [(m_\alpha)_j^c - (m_\beta)_j^c\, (m_\gamma)_j^c] +$$

$$+ (K_\gamma)_{tj}(m_\gamma)_j^c - (K_\gamma)_{tj}^2\, m_\gamma^t\{\, 1 - [(m_\gamma)_j^c]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}\, m_\alpha^t\, [(m_\beta)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\gamma)_j^c]\, (K_\alpha)_{tj} -$$

$$- (K_\beta)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m_\beta^t\, [(m_\alpha)_j^c - (m_\gamma)_j^c (m_\beta)_j^c]\}\} +$$

$$+ \exp\{\, - 2 \sum_{j=1}^{z+1} \{(K_\alpha)_{tj}\, (m_\alpha)_j^c -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}^2\, m_\alpha^t\, \{1 - [(m_\alpha)_j^c]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\beta)_{tj}\, m_\beta^t\, [(m_\gamma)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\beta)_j^c\,] -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m_\gamma^t\, [(m_\beta)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\gamma)_j^c\,] +$$

$$- (K_\gamma)_{tj}(m_\gamma)_j^c - (K_\gamma)_{tj}^2\, m_\gamma^t\, \{1 - [(m_\gamma)_j^c]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m_\alpha^t\, [(m_\beta)_j^c - (m_\alpha)_j^c\, (m_\gamma)_j^c] -$$

$$- (K_\beta)_{tj}\, (K_\gamma)_{tj}\, m_\beta^t\, [(m_\alpha)_j^c - (m_\beta)_j^c\, (m_\gamma)_j^c]\}\} +$$

$$+ \exp\{\, - 2 \sum_{j=1}^{z+1} \{\, (K_\alpha)_{tj}\, (m_\alpha)_j^c -$$

$$- (K_\alpha)^2_{tj}\, m^t_\alpha \{1 - [(m_\alpha)^c_j]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\beta)_{tj}[(m_\gamma)^c_j - (m_\alpha)^c_j(m_\beta)^c_j]\, m^t_\beta -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m^t_\gamma\, [(m_\beta)^c_j - (m_\alpha)^c_j\, (m_\gamma)^c_j] +$$

$$+ (K_\beta)_{tj}(m_\beta)^c_j - (K_\beta)^2_{tj}\, m^t_\beta \{1 - [(m_\beta)^c_j]^2\} -$$

$$- (K_\alpha)_{tj}(K_\beta)_{tj}\, m^t_\alpha\, [(m_\gamma)^c_j - (m_\alpha)^c_j\, (m_\beta)^c_j] -$$

$$- (K_\beta)_{tj}(K_\gamma)_{tj}\, m^t_\gamma\, [(m_\alpha)^c_j - (m_\beta)^c_j\, (m_\gamma)^c_j]\}\}\} \tag{4.67}$$

A respeito dessas equações vale a pena observar que:

i) As equações de TAP para o modelo de Ising são recuperadas fazendo-se duas das constantes de interação $(K_\alpha)_{tj}$ iguais a zero.

ii) Impondo que $(K_\alpha)_{tj} = (K_\beta)_{tj} = (K_\gamma)_{tj}$ tem-se que $(m_\alpha)^c_j = (m_\beta)^c_j = (m_\gamma)^c_j$ e que $m^t_\alpha = m^t_\beta = m^t_\gamma$. Nessas condições reobtemos a equação de TAP para o modelo de Potts.

4.2.2. A energia interna do vidro de spin de Ashkin-Teller.

Seguindo-se o procedimento introduzido no Capítulo II a energia interna para o vidro de spin de Ashkin-Teller isotrópico é obtida fazendo-se a média com relação à desordem das

correlações (transmissividades) entre o spin do topo (σ_t, s_t) e um spin da camada central (σ_j, s_j), i.e.:

$$U = -\frac{b}{2\beta}\left[(K_1)_{tj}\left(\langle\sigma_t\sigma_j\rangle + \langle s_t s_j\rangle + \right.\right.$$

$$\left.\left. + (K_3)_{tj}\langle\sigma_t s_j \sigma_j s_j\rangle\right]_{av} \qquad (4.68)$$

onde $[\ ]_{av}$ indica a média com relação à desordem.

Usando a notação:

$$\theta_1^{tc} = \langle\sigma_t\sigma_j\rangle = \langle s_t s_j\rangle \qquad (4.69a)$$

$$\theta_3^{tc} = \langle\sigma_t s_t \sigma_j s_j\rangle \qquad (4.69b)$$

essas correlações podem ser facilmente obtidas das equações (4.24) como:

$$\theta_1^{tc} = \frac{(K_1)_{tj} + \theta_1^{tg}(\theta_1)_j^c + (K_1)_{tj}\theta_3^{tg}(\theta_3)_j^c + (K_3)_{tj}\theta_1^{tg}(\theta_1)_j^c}{1 + 2\,(K_1)_{tj}\theta_1^{tg}\,(\theta_1)_j^c + (K_3)_{tj}\theta_3^{tg}(\theta_3)_j^c} \qquad (4.70a)$$

$$\theta_1^{tc} = \frac{(K_3)_{tj} + \theta_3^{tg}(\theta_3)_j^c + 2\,(K_1)_{tj}\theta_1^{tg}(\theta_1)_j^c}{1 + 2\,(K_1)_{tj}\theta_1^{tg}(\theta_1)_j^c + (K_3)_{tj}\theta_3^{tg}(\theta_3)_j^c} \qquad (4.70b)$$

onde foram usadas as equações (4.30).

Expandindo os lados direitos dessas equações e desprezando os termos $0\,[(K_\alpha)_{tj}^2]$ obtém-se que:

$$\theta_1^{tc} = (K_1)_{tj} + \theta_1^{tg}\,(\theta_1)_j^c + (K_1)_{tj}\,\theta_3^{tg}(\theta_3)_j^c +$$

$$+ (K_3)_{tj}\, \theta_1^{tg}\, (\theta_1)_j^c + 2(K_1)_{tj}[\theta_1^{tg}(\theta_1)_j^c]^2 +$$

$$+ (K_3)_{tj}\theta_1^{tg}\, \theta_3^{tg}\, (\theta_1)_j^c\, (\theta_3)_j^c \qquad (4.71a)$$

$$\theta_3^{tc} = (K_3)_{tj} + \theta_3^{tg}(\theta_3)_j^c + 2(K_1)_{tj}\, \theta_1^{tg}(\theta_1)_j^c +$$

$$+ 2(K_1)_{tj}\, \theta_1^{tg}\, \theta_3^{tg}\, (\theta_1)_j^c\, (\theta_3)_j^c +$$

$$+ (K_3)_{tj}\, [\theta_3^{tg}\, (\theta_3)_j^c\,]^2 \qquad (4.71b)$$

Substituindo a expressão acima na equação (4.68) obtemos que a energia interna pode ser escrita como:

$$U = -\frac{b}{2\beta}\, [2(K_1)_{tj}^2 + (K_3)_{tj}^2 +$$

$$+ 2(K_1)_{tj}\theta_1^{tg}\, (\theta_1)_j^c + (K_3)_{tj}\, \theta_3^{tg}\, (\theta_3)_j^c +$$

$$+ 2(K_1)_{tj}^2\, \theta_3^{tg}\, (\theta_3)_j^c +$$

$$+ 4(K_1)_{tj}(K_3)_{tj}\, \theta_1^{tg}\, (\theta_1)_j^c +$$

$$+ 4(K_1)_{tj}^2\, [\theta_1^{tg}\, (\theta_1)_j^c]^2 +$$

$$+ 2(K_3)_{tj}^2\, [\theta_3^{tg}\, (\theta_3)_j^c]^2 +$$

$$+ 4(K_1)_{tj}(K_3)_{tj}\, \theta_1^{tg}\, \theta_3^{tg}(\theta_1)_j^c\, (\theta_3)_j^c\,]_{av} \qquad (4.72)$$

A seguir apresentamos a forma explicita da e-

nergia interna para os casos particulares analisados na secção 4. 2. Para tornar esses resultados os mais gerais possíveis vamos supor em todos os casos que o atrator é um duplo ciclo definido pelos pontos $[m_1^s, q_1^s, m_3^s, q_3^s]$ e $[m_1^{s+1}, q_1^{s+1}, m_3^{s+1}, q_3^{s+1}]$. A energia interna em uma fase caracterizada por um ponto fixo é obtida facilmente fazendo-se: $m_1^s = m_1^{s+1}$, $q_1^s = q_1^{s+1}$, $m_3^s = m_3^{s+1}$, $q_3^s = q_3^{s+1}$.

a) Primeiro Caso: $\tilde{K}_1 = K_3^o = 0$.

$$U = -\frac{1}{2\beta}\left[\tilde{K}_3^2 + 2\,K_1^o\, m_1^s\, m_1^{s+1} + 2\,\tilde{K}_3\, q_3^s\, q_3^{s+1}\right] \tag{4.73a}$$

b) Segundo Caso: $K_1^o = \tilde{K}_3 = 0$

$$U = -\frac{1}{2\beta}\left[2\,\tilde{K}_1^2 + K_3^o\, m_3^s\, m_3^{s+1} + 2\,\tilde{K}_1^2\, m_3^s\, m_3^{s+1} + 4\,\tilde{K}_1^2\, q_1^s\, q_1^{s+1}\right] \tag{4.73b}$$

c) Terceiro Caso: $K_1^o = K_3^o = 0$

$$U = -\frac{1}{2\beta}\left[2\,\tilde{K}_1^2 + \tilde{K}_3^2 + 2\,\tilde{K}_1^2\, m_3^s\, m_3^{s+1} + 4\,\tilde{K}_1^2\, q_1^s\, q_1^{s+1} + 2\,\tilde{K}_3^2\, q_3^s\, q_3^{s+1}\right] \tag{4.73c}$$

CAPÍTULO V

CONCLUSÃO

Como já observamos na introdução o objetivo deste trabalho consiste na utilização da rede de Bethe para a elaboração de teorias de campo médio para sistemas de spins. Para isso desenvolvemos um novo formalismo que além de ser matematicamente muito simples é bastante abrangente podendo também ser aplicado no estudo de muitos outros modelos que não foram abordados aqui. Esse formalismo, devido principalmente a sua simplicidade, nos permitiu também esclarecer algumas propriedades dessa rede e de redes correlatas. A este respeito merecem destaque os seguintes aspectos:

i) Em primeiro lugar, ele permite esclarecer porque a solução de sistemas de spins na rede de Bethe correspondem à aproximação de Bethe-Peierls. Observe que após infinitas renormalizações a rede pode ser reduzida a apenas o spin do topo e os da camada central com estes últimos submetidos à ação de um campo magnético efetivo. Essa é justamente a idéia central da aproximação de Bethe-Peierls como já foi observado na introdução.

ii) No Capítulo II mostramos como a aproximação de acoplamento constante pode ser reproduzida utilizando o formalismo.

iii) Finalmente, uma vez que as propriedades locais de spins localizados profundamente em seu interior são determinadas única e exclusivamente pelo aglomerado utilizado no processo de renormalização, mostramos como se relacionam os resultados obtidos utilizando três redes diferentes: a rede de Bethe, a árvore de Cayley fechada e a árvore de Cayley decorada.

Os resultados obtidos para os diferentes modelos aqui analisados podem ser resumidos da seguinte forma:

1) Modelo de Ising: O modelo de Ising é utilizado neste trabalho apenas para a apresentação do formalismo desenvolvido não sendo portanto nosso objetivo a obtenção de resultados novos para esse modelo. Todos os resultados conhecidos porém são reobtidos de uma maneira que, vale a pena ressaltar novamente, é muito simples e clara. Essa simplicidade é ainda mais evidente quando se trata de sistemas aleatórios para os quais reobtemos as equações de SK na forma de um mapeamento em termos da média e da variância da distribuição do campo externo efetivo que atua em uma dada camada. É importante salientar que as equações de TAP são também reobtidas de forma igualmente direta.

2) Modelo de Potts: Dentre os resultados obtidos para esse modelo em sua versão regular queremos destacar a dependência da ordem da transição entre as fases paramagnética e ferromagnética com o sinal do campo externo. Para campos externos positivos, que favorecem o alinhamento dos spins em um mesmo estado, a transição foi obtida como sendo de 1ª ordem. Isso porque o parâmetro de ordem apresenta uma discontinuidade na temperatura crítica. Mostramos também que em uma determinada faixa de temperaturas essas duas soluções coexistem. Para campos externos negativos, que desfavorecem o estado sobre o qual atuam, a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética é de segunda ordem não havendo discontinuidade no parâmetro de ordem nem coexistência de soluções. No que diz respeito à versão antiferromagnética desse modelo mostramos que não há transição de fase a temperaturas finitas matendo-se a fase paramagnética estável até T=0.

O modelo de Potts com interações aleatórias entre primeiros vizinhos foi estudado no Capítulo III tendo seu diagrama de fases sido obtido a partir da caracterização dos atratores das equações de SK generalizadas para esse modelo. Foram analisados os ca-

sos p= 3,4,5,6,8. Nesses diagramas (para $p\neq 2$) destaca-se a inexistência de uma fase vidro de spin no sentido usual. Isto é uma consequência direta do fato das transmissividades (correlações) não terem paridade definida. Apesar de não ser possível uma comparação com os resultados já conhecidos a inexistência dessa fase pode ser a responsável por algumas das contradições existentes na literatura e apresentadas na introdução desta tese.

Nesses diagranas ($p\geq 6$) destacamos também a ocorrência da fase designada por aleatória. Apesar de dificuldades computacionais nos terem impedido de proceder a uma análise mais detalhada dessa fase é importante salientar que ela é obtida de um mapeamento que envolve apenas grandezas macroscópicas o que, para sistemas aleatórios, é bastante raro.

3) Modelo de Ashkin-Teller: O modelo de Ashkin-Teller isotrópico regular foi analisado em duas versões: na rede de Bethe e supondo que as interações têm alcance infinito. Esses resultados podem ser considerados como complementares uma vez que enquanto que no primeiro estudamos apenas propriedades locais de spins pertencentes à rede de Bethe no segundo a energia livre é que desempenha o papel mais importante. Outro resultado importante relativo a esse modelo, como observamos na introdução, é inexistência da fase $\langle\sigma\rangle\neq 0$, $\langle s\rangle=\langle\sigma s\rangle=0$.

No que concerne ao modelo de Ashkin-Teller com interações aleatórias todos os resultados obtidos devem ser necessariamente destacados devido à complexidade do modelo e ao fato de ser este o único estudo relativo a este sistema. Um ponto que merece ser ressaltado porém é o fato de sempre que o sistema apresenta algum tipo de ordem com relação às variáveis $\sigma(s)$ o mesmo ocorre com σs sendo que, para estas últimas, a ordem geralmente é ferromagnética. Isso porque devido à simetria presente no Hamiltoniano temos $\langle\sigma\rangle$ =

<s> o que faz com que o valor esperado de σs tenda a se aproximar dos quadrado dessas grandezas. A única excessão, por razões óbvias ocorre quando K_3^o é muito negativo. Nessa situação as variávies σs apresentam um alinhamento do tipo antiferromagnético.

Finalmente, dois pontos comuns a todos os modelos devem ser destacados. Em primeiro lugar, mostramos neste trabalho que não é possível obter-se uma fase do tipo vidro de spin quando consideramos a distribuição discreta $\pm$ J. Como vimos no Capítulo II esse resultado é uma consequência direta da necessária divisão dos parâmetros da distribuição de probabilidades pela razão da ramificação da rede quando supomos que esta tende ao infinito.

Ainda relativo ao estudo do sistemas aleatórios e apesar de não terem sido analisadas merece destaque também a obtenção de equações de TAP generalizadas para os modelos de Potts e Ashkin-Teller. Este é certamente um passo importante no entendimento das propriedades desses vidros de spin, como o foi no caso do vidro de spin de Ising.

Diante do exposto resta-nos apenas indicar as direções nas quais pretendemos dar prosseguimento a este trabalho. Além de natural extensão do formalismo aqui apresentado para a solução de outros modelos, e.g., o modelo Z(5), dois outros caminhos nos parecem igualmente naturais; a análise das equações de TAP para o modelo de Potts e a determinação das demais funções termodinâmicas para esses vidros de spin.

No que diz respeito a este último aspecto vale a pena observar que um bom número dessas funções termodinâmicas tais como magnetização, susceptibilidades e valores específicos podem ser obtidas de forma direta ou quase que direta dos resultados aqui apresentados. Outras, podem ser obtidas a partir da extensão do procedimento proposto por Thompson para o cálculo da energia livre.

Quanto às equações de TAP generalizadas para o modelo de Ashkin-Teller estas nos parecem por demais complexas. O caminho natural será o estudo dos mesmos casos particulares discutidos no Capítulo IV.

APÊNDICE A

CRITÉRIOS DE ESTABILIDADE E O EXPOENTE DE LIAPUNOV

Um ponto fixo será dito estável quando os iterados seguintes de qualquer ponto em sua vizinhança se encontrarem sucessivamente mais próximos do ponto fixo. A partir dessa definição o critério de estabilidade de um ponto fixo θ^* de um mapeamento unidimensional do tipo

$$\theta_{s+1} = f(\theta_s) \tag{A.1}$$

pode ser determinado linearizando-se essa equação em torno do ponto fixo. Com isso obtém-se:

$$\theta_{s+1} = f(\theta^*) + f'(\theta^*)(\theta_s - \theta^*) + \tag{A.2}$$

Como $f(\theta^*) = \theta^*$, essa equação pode ser reescrita como:

$$f'(\theta^*) \cong \frac{\theta_{s+1} - \theta^*}{\theta_s - \theta^*} \tag{A.3}$$

Observe que para que θ_{s+1} se encontre mais próximo de θ^* do que θ_s é necessário que

$$|\theta_{s+1} - \theta^*| < |\theta_s - \theta^*| \tag{A.4}$$

de modo que a condição para que o ponto fixo θ^* seja estável será dada por:

$$|f'(\theta^*)| < 1 \tag{A.5}$$

Para um mapeamento bi-dimensional do tipo:

$$\theta_{s+1} = f(\theta_s, \gamma_s) \tag{A.6a}$$

$$\gamma_{s+1} = g(\theta_s, \gamma_s) \tag{A.6b}$$

o procedimento para a obtenção do critério de estabilidade de um ponto fixo (θ^*, γ^*) é uma generalização direta do utilizado para mapeamentos unidimensionais. Linearizando as equações A.6 em torno do ponto fixo obtemos:

$$\theta_{s+1} = f(\theta^*, \gamma^*) + (\theta_s - \theta^*)\, f'_{\theta_s}(\theta^*, \gamma^*) + (\gamma_s + \gamma^*) f'_{\gamma_s}(\theta^*, \gamma^*) + \tag{A.7a}$$

$$\gamma_{s+1} = g(\theta^*, \gamma^*) + (\theta_s - \theta^*)\, g'_{\theta_s}(\theta^*, \gamma^*) + (\gamma_s + \gamma^*)\, g'_{\gamma_s}(\theta^*, \gamma^*) \tag{A.7b}$$

onde $f'_{\theta_s}(\theta^*, \gamma^*)$ e $g'_{\theta_s}(\theta^*, \gamma^*)$ são respectivamente as derivadas parciais de $f(\theta_s, \gamma_s)$ e $g(\theta_s, \gamma_s)$ com relação a θ_s, calculadas no ponto fixo (θ^*, γ^*) e analogamente, $f'_{\gamma_s}(\theta^*, \gamma^*)$ e $g'_{\gamma_s}(\theta^*, \gamma^*)$ são as derivadas dessas mesmas funções com relação a γ_s. Utilizando uma notação matricial a equação (A.7) pode ser reescrita como:

$$\begin{bmatrix} \delta_{s+1} \\ \eta_{s+1} \end{bmatrix} \cong J(\theta^*, \gamma^*) \begin{bmatrix} \delta_s \\ \eta_s \end{bmatrix} \tag{4.8a}$$

onde $\delta_i = \theta_i - \theta^*$ (4.8b)

$$\eta_i = \gamma_i - \gamma^* \tag{4.8c}$$

e $J(\theta^*, \gamma^*)$ é o Jacobiano das transformações (A.6) definido por:

$$J(\theta,\gamma)=\begin{bmatrix}\partial f(\theta,\gamma)/\partial\theta & \partial f(\theta,\gamma)/\partial\gamma \\ \partial g(\theta,\gamma)/\partial\theta & \partial g(\theta\ \gamma)/\partial\gamma\end{bmatrix} \tag{A.9}$$

De (A.8) fica claro que a estabilidade de um ponto fixo (θ^*,γ^*) é determinada pelos autovalores λ_1 e λ_2 do Jacobiano (A.9), calculado nesse ponto, pelas relações:

$$|\lambda_1| < 1 \tag{A.10a}$$

$$|\lambda_2| < 1 \tag{A.10b}$$

A.1. O EXPOENTE DE LIAPUNOV

Um aspecto importante no estudo de atratores, como o obtido na secção 3.3. para a fase aleatória, é a determinação de sua natureza. Para isso estuda-se a distância entre os iterados após n iterações de dois pontos inicialmente próximos. Vamos considerar o mapeamento (A.1) e supor que dois pontos vizinhos θ_0 e θ_0' se encontrem inicialmente separados por uma distância ε_0. Após uma iteração teremos:

$$\theta_1 = f(\theta_0) \tag{A.11a}$$

$$\theta_1' = f(\theta_0') = f(\theta_0 + \varepsilon_0) \tag{A.11b}$$

Definindo-se $\varepsilon_1 = \theta_1' - \theta_1$ como sendo a distância entre os primeiros iterados de θ_0 e θ_0' e expandindo-se o lado direito de (A.11b) obtém-se:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 |f'(\theta_0)| \tag{A.12}$$

Repetindo-se esse procedimento para a segunda iteração teremos:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 |f'(f(\theta_0))| = \varepsilon_0 |f'(\theta_0) f'(\theta_1)| \qquad (A.13)$$

onde ε_2 é a distância entre os segundos iterados de θ_0 e θ_0'. É fácil de ver então que após n iterações os n-ésimos iterados dos pontos iniciais θ_0 e θ_0' estarão separados por:

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 \prod_{i=0}^{n-1} |f'(\theta_i)| = \varepsilon_0 \exp \left[\sum_{i=0}^{n-1} \ell n |f'(\theta_i)| \right] =$$

$$= \varepsilon_0 \, e^{n \bar{\lambda}} \qquad (A.14)$$

onde

$$\bar{\lambda} = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ell n \, |f'(\theta_i)| \qquad (A.15)$$

é chamado de expoente de Liapunov. Esse expoente é usado então para se classificar atratores como o obtido na secção 3.3. de acordo com o seguinte critério:

i) Se $\bar{\lambda} < 0$ separação entre os n-ésimos iterados de θ_0 e θ_0' diminui exponencialmente e o atrator é dito periódico.

ii) Se $\bar{\lambda} = 0$ essa separação se mantém constante e o atrator é dito unidimensional ou quase contínuo.

iii) Se $\bar{\lambda} > 0$ a separação cresce exponencialmente e o atrator é dito estranho.

Para mapeamentos bi-dimensionais essa idéia pode ser facilmente generalizada sendo o expoente de Liapunov definido como[80] :

$$\bar{\lambda} = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \ln \lambda_{max} \tag{A.16}$$

onde λ_{max} é o maior auto-valor da matriz:

$$J = \prod_{i=0}^{n-1} J(\theta_i, \gamma_i) \tag{A.17}$$

com $J(\theta_i, \gamma_i)$ definido em (A.9).

APÊNDICE B

INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

Os mapeamentos obtidos para os vidros de spin, i.e., as equações de SK generalizadas invariavelmente envolvem o cálculo de integrais do tipo:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} f(x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\, p(x) f(x) \qquad (B.1)$$

Como na implementação desses mapeamentos essas integrais são calculadas inúmeras vezes é necessário que se exija do método de integração a ser empregado uma precisão bastante grande. Neste apêndice nós mostraremos que o método recomendado nos livros textos para a avaliação de integrais do tipo (B-1) é bastante impreciso em determinadas situações e para resolver essa dificuldades apresentamos um método alternativo para esse cálculo.

B.1. Quadratura de Gauss-Hermite

O problema de se encontrar o valor numérico da integral de uma função de uma única variável é, devido ao seu significado geométrico, geralmente chamado de quadratura. Geralmente, esse problema é resolvido aproximando-se a integral por uma combinação linear de valores da função, ou seja, fazendo-se:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, p(x) f(x) \approx \sum_{K=1}^{n} A_K^n\, f(x_K^n) \qquad (B.2)$$

onde p(x) é chamada de função peso. A equação (B.2) é normalmente conhecida como fórmula de quadratura. Nessa fórmula os x_K^n são ge-

ralmente designados por nodos e os A_K^n são pesos a eles associados. O significado dessa equação pode ser facilmente visualizado. Definindo-se

$$P = \int_a^b dx\ p(x) \tag{B.3}$$

(B.2) pode ser reescrita na forma:

$$P^{-1} \int_a^b dx\ p(x) f(x) \approx \sum_{K=1}^{n} B_K^n\ f(x_K^n). \tag{B.4}$$

Nessa equação os coeficientes B_K^n devem ser interpretados como pesos associados aos valores $f(x_K^n)$. Se nós exigimos que a equação (B.4) deve ser exata sempre que f é uma constante então os pesos B_K^n devem satisfazer a condição de normalização:

$$\sum_{K=1}^{n} B_K^n = 1 \tag{B.5}$$

Dessa forma, a soma do lado direito de (B.4) passa a ter o significado de média ponderada dos valores $f(x_K^n)$ e o problema da avaliação da integral se reduz a encontrar pesos B_K^n tal que a média ponderada dos valores de $f(x_K^n)$ seja aproximadamente igual ao valor médio da integral. Dessa argumentação é fácil de se ver também que quanto maior o valor de n mais precisa será essa aproximação.

Na situação específica de integrais do tipo (B.1), ou seja, quando:

$$p(x) = e^{-x^2}$$

os livros textos[81,82] recomendam que sejam usados como nodos os zeros de polinomios de Hermite de ordem n. Esses livros também fornecem tabelas dos pesos A_K^n para diferentes valores de n. Essa re-

comendação, como veremos a seguir, pode se mostrar bastante inadequada em alguns exemplos específicos. Consideremos - apenas por uma questão de simplicidade pois a generalização é óbvia - o mapeamento obtido para o modelo de Ising onde

$$f(x) = \tan h\ (A + B_x)\ . \qquad (B.7)$$

Na situação em que B é grande (temperatura muito baixa) essa função varia muito rapidamente em torno do ponto $x_o = -A/B$ no qual ela se anula. Se A>>B isso não traz nenhum problema porque x_o se encontra em uma região em que a função peso anula o integrando. Isso é expresso na fórmula de quadratura pelo fato de os pesos A_K^n serem muito pequenos para x_K^n grandes. Quando $A \lesssim B$ entretanto, essa variação é importante e deve ser considerada. Quando utilizamos a fórmula de quadratura (B.2) devemos então fazer com que um grande número de nodos se localize nessa região. Utilizando os zeros de polinomio de Hermite porém, isso não é possível pois, como os extremos de integração são supostos fixos ($-\infty$ e $+\infty$) o mesmo ocorre com esses nodos. Nas figuras 44, nas quais os zeros do polinomio de Hermite são indicados por cruzes, podemos ver que quando a função varia muito rapidamente esse método de integração pode levar a resultados absurdos. Note que, como os zeros de polinomio de Hermite são simétricos com relação à origem, em ambos os casos é nulo o resultado da integração por esse processo enquanto que os resultados verdadeiros são significativamente diferentes.

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

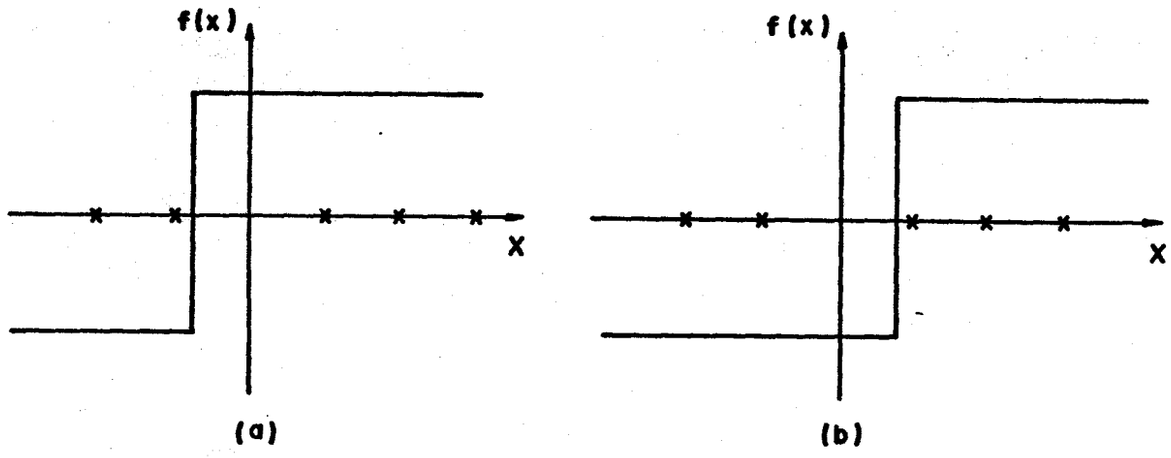


Figura 44 - Gráfico da função (B.7) para A e B muito grandes. (a) A>0 (b) A<0.

Dessas figuras é fácil de ver também que o resultado da integração será o mesmo enquanto o zero da função permanecer entre dois nodos mudando significativamente quando um desses nodos for ultrapassado. Isso pode ser também verificado na figura 45 onde apresentamos o valor da integral:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \tan h \left[A + B_x\right] dx \qquad (B.8)$$

como uma função da razão A/B (linha tracejada) com $B=10^4$.

B.2. Quadratura de Gauss-Legendre

Como já observamos anteriormente a solução para esse problema pode ser obtida concentrando-se os nodos x_K^n na região em que a função varia rapidamente. Isso pode ser conseguido utilizando-se a fórmula da quadratura de Gauss-Legendre:

$$\int_a^b e^{-x^2} f(x)\, dx \cong \sum_{K=1}^{n} C_K^n\, g\,(x_K^n) \qquad (B.9)$$

onde:

$$g(x) = e^{-x^2} f(x) \qquad (B.10)$$

Nesse caso, os nodos são os zeros de polinomios de Legendre. Os pesos C_K^n, bem como os x_K^n são também tabelados [81] para os limites de integração a= -1, b=1. Essa fórmula fornece bons resultados por duas razões:

i) os extremos de integração podem ser alterados por mudanças de variáveis.

ii) os zeros dos polinomios de Legendre se concentram nas proximidades dos extremos de integração.

Dessa forma, para que a região em que o integrando varia rapidamente seja considerada com precisão basta que a integral seja dividida em duas fazendo com que x_o seja extremo de integração:

$$\int_a^b e^{-x^2} f(x)\,dx = \int_a^{x_o} e^{-x^2} f(x)\,dx + \int_{x_o}^a e^{-x^2} f(x)\,dx \qquad (B.11)$$

O fato dos extremos de integração serem finitos não introduz nenhum problema pois, como f(x) é limitada, devido à Gaussiana o integrando pode ser, para todos os efeitos, considerado nulo para $|x| \geq 9$. Observe que a menor exponencial que nosso computador consegue calcular é exp(-84).

O resultado da integração de (B.8) por esse processo é também apresentado na figura 45 em (linha cheia).

Esse método de integração apresenta ainda a vantagem adicional de a integral convergir rapidamente com n para o valor exato. Para n=12 e n=96 a maior diferença obtida é da ordem de 10^{-4}.

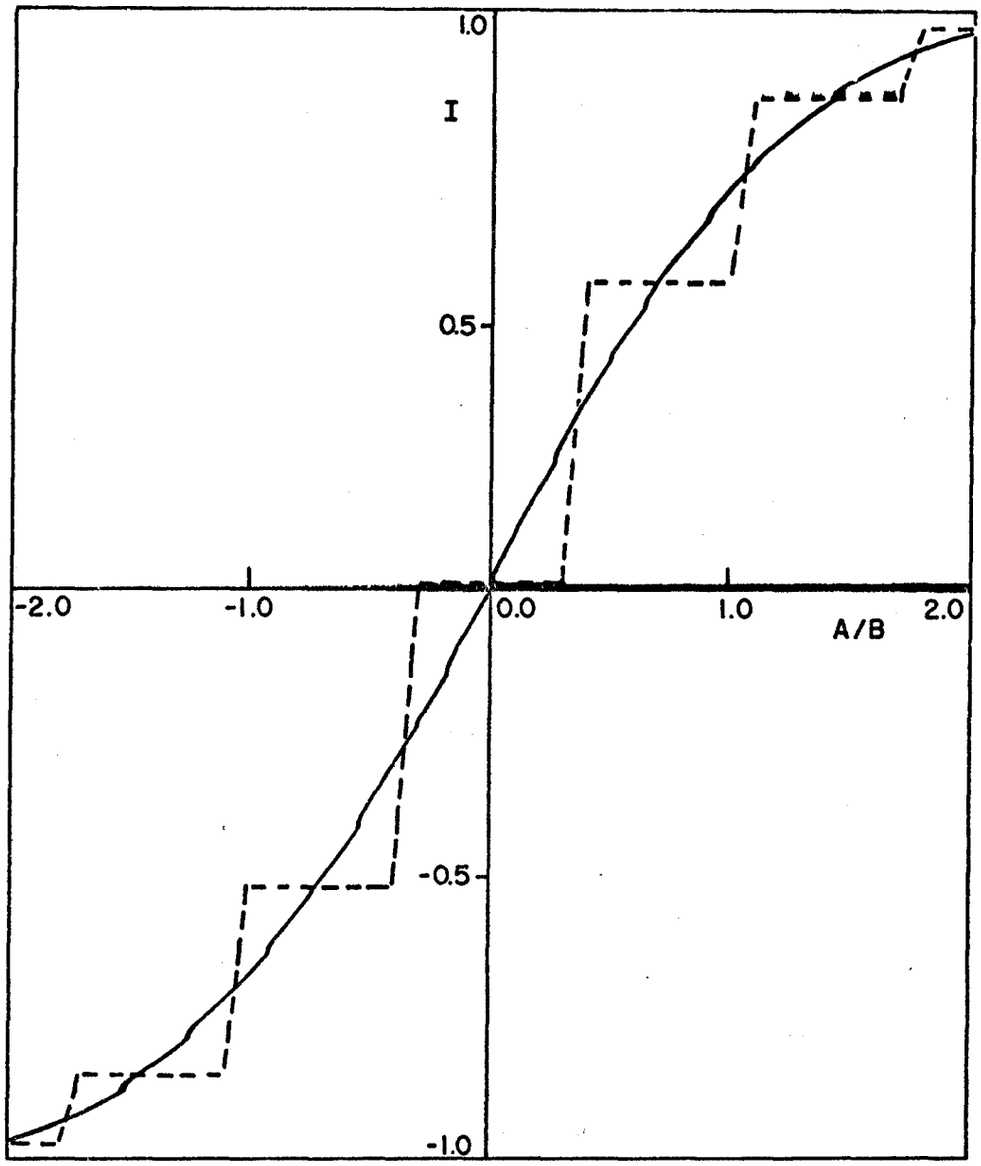


Figura 45 -Comparação entre os métodos de integração numérica de Gauss-Hermite e de Gauss-Legendre.

Nesta figura apresentamos os resultados obtidos para a integral $I = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \tan h\,(A+BX)\,dx$ para $B=10^4$. A linha cheia (tracejada) é obtida utilizando-se a fórmula de quadratura de Gauss-Legendre (Hermite) com 12 (20) pontos de quadratura. A variação brusca no valor da integral usando o método de quadratura de Gauss-Hermite ocorre sempre que o zero da tangente hiperbólica ($X_o = -A/B$) ultrapassa um dos modos.

Apesar disso entretanto, em nossos cálculos utilizamos sempre no mínimo 96 pontos de quadratura.

Finalmente, cabe-nos observar que a extensão dessa metodologia para o cálculo das integrais duplas presentes no mapeamento obtido para o modelo de Ashkin-Teller é direta.

APÊNDICE C

O MODELO DA ASHKIN-TELLER DE ALCANCE INFINITO

De (4.3) a Hamiltoniana para o modelo de Ashkin-Teller de alcance infinito é escrita como:

$$H = \tilde{J}_1 \sum_{(i,j)} \sigma_i\sigma_j + \tilde{J}_2 \sum_{\langle i,j\rangle} S_iS_j + \tilde{J}_3 \sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_iS_i\sigma_iS_j +$$

$$+ h_1 \sum_i \sigma_i + h_2 \sum_i S_i + h_3 \sum_i \sigma_iS_i \qquad (C.1)$$

onde a soma em <i,j> deve ser efetuada sobre todos os pares de spins e as constantes de troca K_i devem ser divididas pelo número de partículas ($\tilde{J}_i = J_i/N$) para que se garanta um limite termodinâmico razoável.

A função de partição Z_{AT} é obtida usando-se uma generalização do método introduzido por Kac. Inicialmente cada soma em <i,j> na equação (C.1) é substituída, a menos de uma constante, pelo quadrado da soma sobre todos os spins. A seguir, fazendo uso por três vezes consecutivas da identidade de Hubbard-Stratonovich:

$$\exp(a^2) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/2 + 2^{1/2} a x)\, dx \qquad (C.2)$$

as variáveis de spin ficam desacopladas de modo que o traço pode ser facilmente efetuado. Com isso obtemos:

$$Z_{AT} = 2^{2N} e^{-\beta L} (2\pi)^{-3/2} \iiint_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-1/2(x_1^2+x_2^2+x_3^2)\right]$$

$$\left\{ \prod_{i=1}^{3} \cos h\,(\tilde{K}_i x_i + b_i) \times \left[1 + \prod_{i=1}^{3} \tan h(\tilde{K}_i x_i + b_i)\right]\right\}^N dx_1 dx_2 dx_3 \qquad (C.3)$$

onde $\tilde{K}_i^2 = \beta\tilde{J}_i$, $b_i = \beta h_i$, $2L = \sum_{i=1}^{3} J_i$ e $\beta^{-1} = K_B T$.

No limite termodinâmico as integrais na equação (C.3) podem ser avaliadas pelo método de Laplace de modo que a energia livre por sítio pode ser escrita como (veja figura 46):

$$-\beta f(K_i, b_i) = 2\,\ell n 2 + \max\{g(x_i, K_i, b_i)\} \qquad \text{(C.4a)}$$

onde $K_i = \beta J_i$ e

$$g(x_i, K_i, b_i) = \sum_{i=1}^{3} \left[-\frac{1}{2} K_i\, x_i^2\, \ell n \cos h(K_i x_i + b_i)\right] +$$

$$+ \ell u \left[1 + \prod_{i=1}^{3} \tan h\,(K_i x_i + b_i)\right] \qquad \text{(C.4b)}$$

As condições de extremo para $g(x_i, K_i, b_i)$ são:

$$x_\alpha = \tan h\,(K_\alpha x_\alpha + b_\alpha) + \sec h^2(K_\alpha x_\alpha + b_\alpha)\,\tan h(K_\beta x_\beta + b_\beta)$$

$$\tan h\,(K_\gamma x_\gamma + b_\gamma)/D \qquad \text{(C.5a)}$$

onde utilizamos a mesmo convenção introduzida no Capítulo IV para os índices α, β e γ e:

$$D = 1 + \prod_{i=1}^{3} \tan h\,[K_i x_i + b_i] \qquad \text{(C.5b)}$$

Tomando-se as derivadas parciais de $-\beta f$ com relação aos campos externos obtém-se diretamente que os valores esperados das variáveis de spin são idênticos às coordenadas do ponto de extremo; e.i, $\langle\sigma\rangle = x_1$, $\langle s\rangle = x_2$, $\langle\sigma s\rangle = x_3$ (veja figura 47). Observe que as equações (C.5) são as mesmas equações de campo médio já obtidas por Ditizian et al, apresentadas nas equações (1.16). Nesse caso

entretanto, não é legítimo o estudo do modelo antiferromagnético uma vez que, como pode ser verificado por inspeção da equação (C. 3) é necessário impor-se que os J_i sejam positivos para que se possa garantir que a função de partição seja real. Além disso, devido ao fato de as interações serem de alcance infinito não é possível dividir-se a rede em duas sub-redes.

Como já observamos na introdução dessa tese Ditizian et al[56] determinaram o diagrama de fase do modelo de Ashkin-Teller a partir da análise numérica das equações (C.5). Nesse apêndice nós fazemos uso de uma outra estratégia que se baseia no estudo analítico das soluções das equações (C.5) e de sua estabilidade.

Uma vez que os x_i' s, são identificados como sendo os valores esperados das variáveis de spin as diferentes fases do modelo podem ser caracterizadas, no caso particular em que os campos externos são nulos, simplesmente verificando-se se as soluções das equações (C.5) são triviais ou não. Desse modo são encontradas as seguintes soluções:

I) Fase paramagnética

$$x_1 = x_2 = x_3 = 0 \tag{C.6}$$

II) Fase parcialmente ordenada (Ising)

$$x_\alpha = x_\beta = 0 \quad , \quad x_\gamma = \tan h(K_\gamma x_\gamma) \tag{C.7}$$

III) Fase completamente ordenada (Baxter)

$$x_1 = \langle\sigma\rangle \neq 0 \ , \ x_2 = \langle s\rangle \neq 0 \quad , \quad x_3 = \langle\sigma s\rangle \neq 0 \tag{C.8}$$

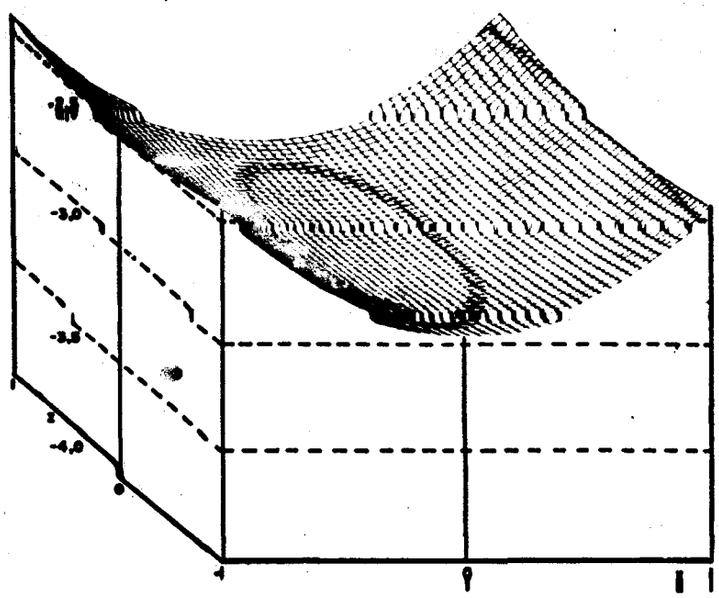
A maximização de $g(x_i, K_i, b_i)$ requer que a segunda deriva-

Figura 46 - Energia livre para o modelo de Ashkin-Teller de alcance infinito.

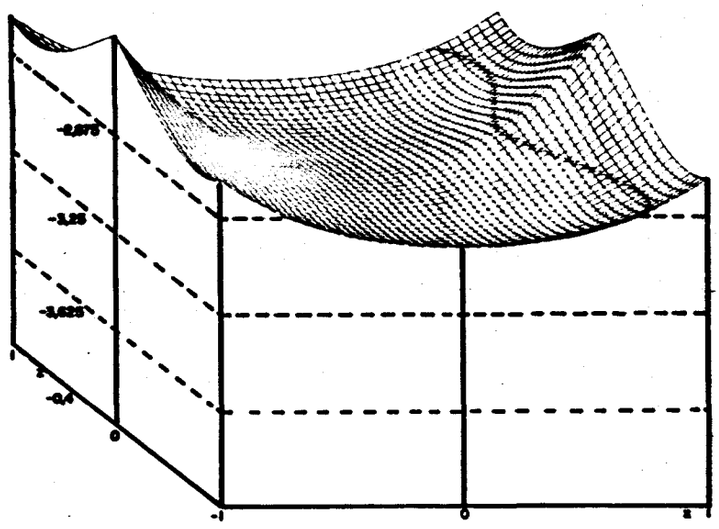
Nesta figura apresentamos o gráfico do funcional energia livre $f(x, z, p, t) = -2t\ \ell n2 + x^2 + \frac{1}{2} z^2 - t\ \ell n[\cos h^2(x/t) \cos h (pz/t)] - t\ \ell n\ [1 + \tan h^2(x/t) |\tan h\ (pz/t)|]$ como uma função de $x = \langle\sigma\rangle$ e $z = \langle\sigma s\rangle$ para os seguintes valores dos parâmetros p e t: a) p= 0.2; t= 2.2. O mínimo na origem caracterizando a fase paramagnética é facilmente observado. b) p= 2.5; t= 2.2. O mínimo global ocorre em $\langle\sigma\rangle=0$; $\langle\sigma s\rangle \neq 0$ caracterizando a fase de Ising. Na origem observa-se um ponto de sela, como previsto (P'-sad). c) p=0.95; t=1.1. O sistema se encontra na fase de Baxter mas mostra dois tipos de mínimos: um mínimo local na origem e quatro mínimos globais em $x = \pm x_o$, $Z = \pm Z_o$.

Observe que no texto analisamos o funcional

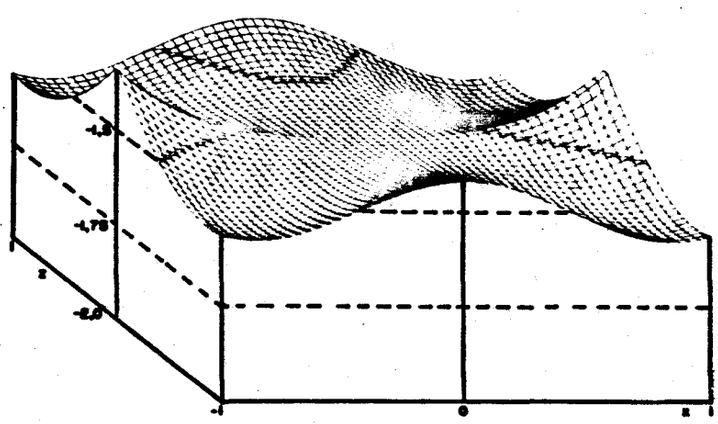
$$g(x_1, x_2, x_3; p, t) = -\frac{1}{t} f(x, y, z; p, t) - 2\ \ell n2.$$



(a)



(b)

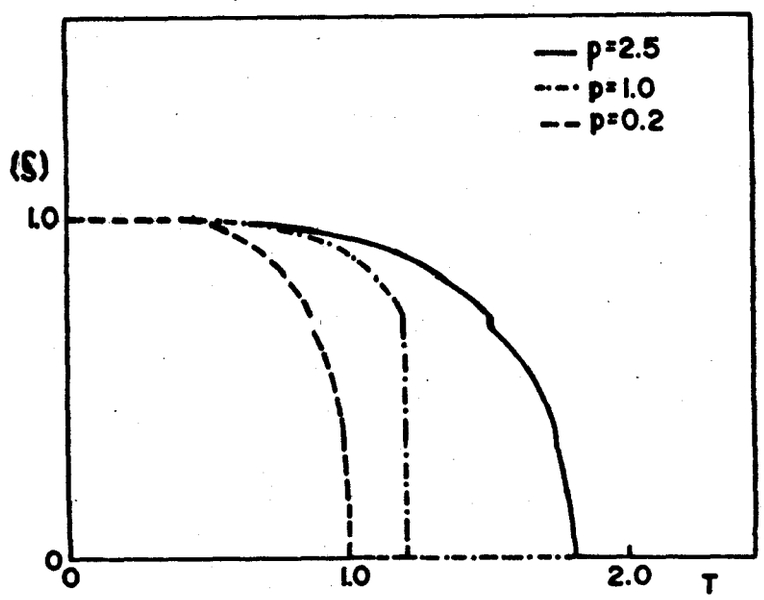


(c)

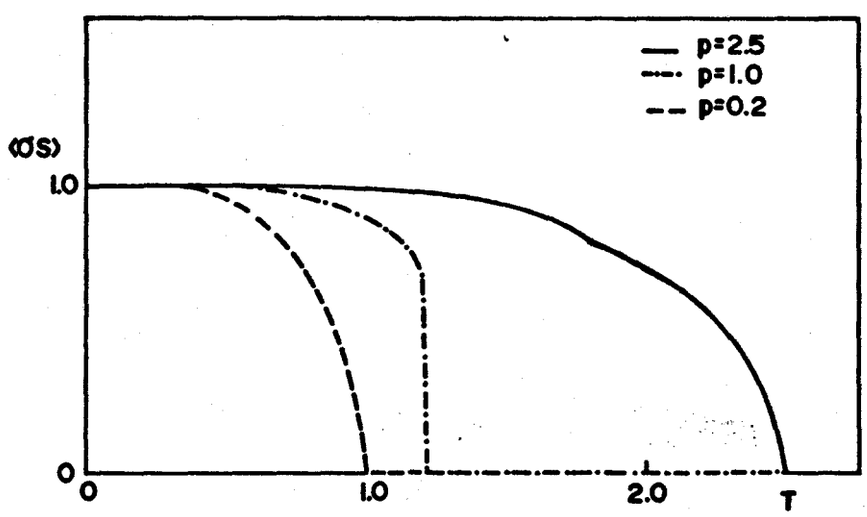
Figura 47 - Magnetização do modelo de Ashkin-Teller em função da temperatura.

Nesse gráfico apresentamos as magnetizações $\langle s \rangle$ ($\langle \sigma \rangle$) (a) e $\langle \sigma s \rangle$ (b) para os seguintes valores de p: 0.2 (linha tracejada) ; p=1 (linha tracejada e pontilhada) e p=2.5 (linha cheia). Para p=1 o modelo de Ashkin-Teller se reduz ao modelo de Potts com 4 estados. Nessa situação, como era de se esperar, as curvas tracejadas e pontilhadas em (a) e (b) coincidem. Isso é uma consequência da simetria da Hamiltoniana (para $K_1 = K_2 = K_3$) com relação à transformação $s_i \to s_i$ e $\sigma_i \to \sigma_i s_i$ que faz com que $\langle \sigma \rangle = \langle s \rangle = \langle \sigma s \rangle$.

Note que, para p= 2.5, a curva $\langle \sigma s \rangle$ acusa a transição ocorrida em $\langle s \rangle$ ($\langle \sigma \rangle$).



(a)

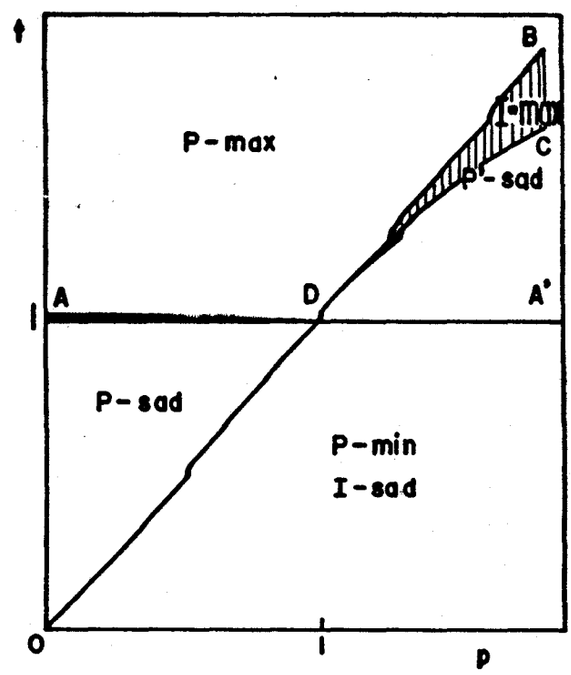


(b)

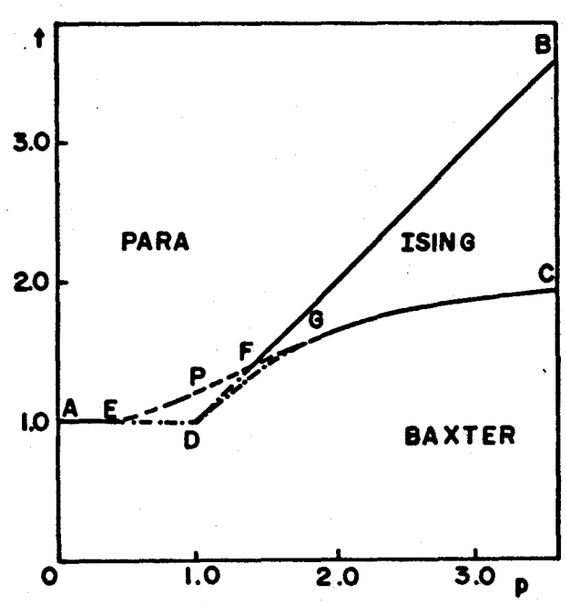
Figura 48 - Diagrama de fases para o modelo de Ashkin-Teller de alcance infinito.

Em (a) apresentamos no plano p-t as regiões nas quais o extremo de $g(x_1, x_3; p,t)$ pode ser determinado analiticamente. Na região P-max (P-min) $g(x_1,x_3)$ tem um máximo (mínimo) na origem. Nas regiões P'-sad e P-sad os pontos de sela de $g(x_1,x_3)$ na origem se encontram girados de $\pi/2$ um com relação ao outro. Na região BDC o máximo de $g(x_1,x_3)$ é determinado pela solução de Ising, enquanto que região I-sad - que coincide com P-min - essa solução corresponde a um ponto de sela.

Em (b) é apresentado o diagrama de fases do modelo. Na fase paramagnética $\langle\sigma\rangle = \langle s\rangle = \langle\sigma s\rangle = 0$, na fase de Ising $\langle\sigma\rangle = \langle s\rangle = 0$; $\langle\sigma s\rangle \neq 0$ e na fase de Baxter $\langle\sigma\rangle = \pm \langle s\rangle \neq 0$; $\langle\sigma s\rangle \neq 0$. Na região EDF (DFG) a fase de Baxter coexiste com a fase paramagnética (Ising).



(a)



(b)

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

da direcional $\nabla\bar{u}\ \nabla\bar{u}\ g(x_i,K_i,b_i)$ na direção de um vetor unitário arbitrário $\bar{u} = (\cos\alpha_1, \cos\alpha_2, \cos\alpha_3)$ calculada no ponto de extremo seja negativa; i.e

$$\nabla u \nabla u\ g(x_i,K_i,b_i) = \sum_{i \le j=1}^{3} 2^{(1-\delta_{ij})}\ g_{x_i x_j} \cos\alpha_j < 0 \qquad \text{(C.9a)}$$

Essa forma quadrática é homogênea se e somente se:

$$\text{a)}\quad g_{xx} < 0; \quad \text{b)} \begin{vmatrix} g_{xx} & g_{xy} \\ g_{xy} & g_{yy} \end{vmatrix} > 0 \quad ; \quad \text{c)} \begin{vmatrix} g_{xx} & g_{yx} & g_{xz} \\ g_{yy} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{xI} & g_{yz} & g_{zz} \end{vmatrix} < 0 \qquad \text{(C.9b)}$$

($g(x_i,K_i,b_i)$ é um mínimo se e só se todos os determinantes forem positivos.

De acordo com as equações (C.9) a solução paramagnética corresponderá a um máximo de $g(x_i,K_i,b_i)$ se e somente se:

$$g_{x_i x_j}\ (0,\ K_i,b_i) = K_i\ (K_i-1) < 0 \qquad \text{(C.10)}$$

Restrigindo-nos ao modelo isotrópico ($J_1=J_2$) as linhas de instabilidade $t=1\,(t=1/\beta J_1)$ e $t=p\,(p=J_3/J_1)$ são obtidas fazendo as segundas derivadas $g_{x_1x_1}$ e $g_{x_3x_3}$ na origem iguais à zero. Dessa forma, as condições de estabilidade (C.10) são satisfeitas na região indicada por P-max na figura 48a. Nós observamos também que a estrutura analítica do funcional energia livre na origem pode ser facilmente determinada em outras regiões do espaço de parâmetros. Revertendo todas as desigualdades em (C.10) determinamos a região P-min no plano p-t onde $g(0,0,K_1,K_3,0)$ é um mínimo. Nas regiões ODA(P-Sad) e BDA'(P'-Sad) as derivadas segundas $g_{x_1x_1}$ e $g_{x_3x_3}$ têm sinais opostos de modo que $g(x_1,x_3,K_1,K_3,0)$ tem um ponto de sela

na origem.

A estabilidade para as soluções de Ising pode ser determinada de forma análoga obtendo-se que essa solução maximizará $g(x_i, K_i, 0)$ se e somente se:

$$a)\ K_1<1;\quad b)\ (K_1-1)(K_2-1)> K_1K_2x_3^2\quad ,\ c)\ K_3(1-x_3^2)< 1 \qquad (C.11)$$

Para que se possa obter uma solução não trivial para x_3 devemos impor também que $K_3>1$. No caso particular em que $J_1=J_2$ essas equações podem ser reescritas como:

$$1- t/p <(t-1)^2 \quad ; \quad p>t>1 \qquad (C.12)$$

Dessas igualdades obtemos as seguintes informações a respeito da região de estabilidade da solução de Ising: a linha DB que foi obtida das condições de estabilidade para a solução paramagnética pode também ser obtida da equação (C.12) igualando-se o limite inferior à zero. Dessa forma, as regiões no plano p-t nas quais as soluções paramagnética e de Ising maximizam $g(x_1,x_3,K_1,K_3,0)$ não se superpõe, isto é, não há nenhuma região no espaço de parâmetros onde dois máximos, determinados pelas soluções paramagnética e de Ising, coexistam. Nós interpretamos esse resultado como sendo um indicativo de que a transição entre essas fases é de segunda ordem. A equação da linha DC, que juntamente com DB delimitam a região I-max é obtida fazendo x_3^2 igual ao limite superior:

$$t - 1 = \tan h\ [p/t(t-1)] \qquad (C.13)$$

Nós observamos que a solução $t=1$, $K_3\neq 1$ corresponde à solução trivial da equação (C.7). Essa solução é aceitável apenas se $K_3=1$ de modo que DC contém o ponto $t=p=1$. No limite de p infinitamente gran-

de essa fronteira vai assintôticamente por valores inferiores para t=2. Verifica-se facilmente que essa linha de estabilidade é uma função côncava e monotona crescente do parâmetro p. A solução numérica da equação (C.13) é mostrada na figura 48a. Queremos ressaltar o fato do limite inferior para z^2 ser idêntico à condição de maximização para $-\beta f$ do modelo de Ising de alcance infinito. Isso é equivalente à afirmação de que o quadrado da magnetização espontânea é uma função côncava da temperatura. Isso pode ser provado tomando-se a derivada parcial da equação (C.7) com relação à temperatura reduzida ($t = 1/\beta J_3$) e usando-se a segunda desigualdade de Griffiths em adição ao fato de $|\langle\sigma s\rangle| \leq 1$. Desse modo a condição (C.11c) é sempre satisfeita. Como uma consequência dessa propriedade nós observamos que a solução de Ising não pode nunca minimizar o funcional $g(x_1,x_3,K_1,K_3,0)$. Finalmente na região P-min, além do mínimo na origem, $g(x_1,x_3,K_1,K_3,0)$ apresentará também um ponto de sela determinado pela solução de Ising.

A determinação da região de estabilidade para a solução de Baxter poderia em princípio fornecer-nos todos os dados necessários para que se possa traçar o diagrama de fases. É desnecessário dizer porém que não foi possível efetuar essa determinação analiticamente. Mesmo assim nós podemos recolher outros resultados, que juntamente com os obtidos acima, são suficientes para que se trace um diagrama de fases qualitativamente correto. Parte dessa informação vem de dois casos particulares do modelo de Ashkin-Teller. Em p=0 esse modelo desacopla em dois modelos de Ising independentes. Sua temperatura crítica $t_c^I=1$ foi corretamente obtida da análise da estabilidade da solução paramagnética. Esse fato revela que em p=0 não há superposição das soluções paramagnética e de Baxter. Em p=1 o modelo de Ashkin-Teller isotrópico se reduz ao modelo de Potts com 4 estados cuja temperatura crítica $t_c^P = 4/(3\ln 3) = 1.21$ se situa dentro da região P-max. Dessa forma, no intervalo de temperatu

ra $t_c^P > t > 1$ o máximo absoluto de $g(x_1, x_3, K_1 = K_3, 0)$, que é determinado numericamente como correspondendo à solução de Baxter, coexiste com o máximo relativo correspondente à solução paramagnética. Essa coexistência de dois máximos deve persistir para outros valores de p uma vez que o ponto crítico de Potts ($p=1$, $t = t_c^P$) deve pertencer a uma linha crítica. Somos então levados a concluir que nessa parte do espaço de parâmetros há uma região na qual mais do que um máximo de $g(x_1, x_3, K_1, K_3, 0)$ coexistem. Em outras palavras, as regiões P-max e I-max, determinadas pelas condições de estabilidade, são parcialmente invadidas pelas região do espaço de parâmetros na qual o mínimo (absoluto) de $g(x_1, x_3, K_1, K_3, 0)$ é determinado pela solução de Baxter. Finalmente observamos que a linha de transição entre a fase de Baxter e as demais além de passar pelos pontos $p=0$, $t=1$ e $p=1$, $t=t_c^P$ tem que terminar na linha de instabilidade DC. Isso porque se ela terminasse na linha DB com o aumento da temperatura para $p>1$ teríamos uma sequência não física de fases: Baxter - Ising-Baxter - paramagnética.

No que diz respeito à ordem das transições nós observamos que a coexistência do máximo absoluto determinado pela solução de Baxter com o máximo relativo determinado pelas soluções de Ising ou paramagnética nos permite interpretar as transições entre essas fases como sendo de 1ª ordem nessa região. Nós observamos também que para valores grandes de J_3 a Hamiltoniana (C.1) se reduz a Hamiltoniana do tipo Ising. Note que nas vizinhanças de B (veja figura 48a) o acoplamento J_1 é suficientemente fraco quando comparado com J_3 e a temperatura muito alta de modo que não há polarização de σ e de s. O ordenamento parcial do sistema é uma consequência do acoplamento J_3 apenas e o sistema se comporta como um sistema de Ising na variável σs. Por outro lado, perto do ponto C o modelo de Ashkin-Teller também se reduz a um modelo de Ising com uma constante de troca de $2J_1$. Devido ao fato de J_3 ser muito grande e à tem-

peratura relativamente baixa o parâmetro de ordem $\langle\sigma s\rangle$ é aproximado igual à unidade. Com isso, quase que certamente teremos $\sigma=s$. O fato de as variáveis σ e s se manterem fixadas é então o responsável pela redução do modelo de Ashkin-Teller ao modelo de Ising[56]. Desse modo, longe da região do espaço de parâmetros onde temos coexistência de soluções, as linhas de instabilidade devem coincidir com as linhas de transição. Consequentemente, neste limite ($J_3 \to \infty$) as transições devem ser de segunda ordem. Como uma última observação nós queremos salientar que a mudança na natureza do extremo na origem, préviamente interpretado por Baracca et al[55] como outra não analiticidade do funcional energia livre é recuperado e extendido pelo nosso estudo da estabilidade da fase paramagnética. Note que cruzando-se as linhas $\overline{ED}$ e $\overline{DF}$ o máximo relativo na origem torna-se um ponto de sela, exceto no ponto D (t=p=1) no qual ele torna-se um mínimo relativo como também foi detetato por Baracca et al.

De posse de todas essas informações fizemos então um estudo numérico das equações (C.5a) o que nos possibilitou obter o diagrama de fases apresentado na figura 48b.

Finalmente, nós voltamos nossa atenção para o cálculo das funções termodinâmicas. Derivando-se a energia livre (C.4) com relação à temperatura nós obtemos as seguintes expressões para e entropia e o calor específico:

$$S = 2K_B \ln 2 + K_B \sum_{i=1}^{3} \left[\ln \cos h\,(K_i x_i + b_i) - x_i (K_i x_i + b_i)\right] K_B \ln D \tag{C.14}$$

$$C = K_B T \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial T} x_i (K_i x_i + b_i) \tag{C.15}$$

onde os x_i's são soluções das equações (C.5). As equações acima fo-

ram calculadas numericamente e são apresentadas nas figuras 49 e 50. Uma outra função de interesse é a susceptibilidade magnética que pode ser obtida tomando-se a derivada parcial das equações (C. 5) com relação a b_1, b_2, b_3. As equações resultantes podem ser agrupadas em três conjuntos independentes contendo cada um três equações acopladas, como por exemplo:

$$\chi_{11} = \chi_I\ (J_1) + K_2\ F(x_1,x_2)\ \chi_{21} + K_3F(x_1,x_3)\ \chi_{31} \qquad \text{(C.16a)}$$

$$\chi_{21} = F(x_2,x_1) + K_1F(x_2,x_1)\ \chi_{11} + K_3F(x_2,x_3)\chi_{31} \qquad \text{(C.16b)}$$

$$\chi_{31} = F(x_3,x_1) + K_1F(x_3,x_1)\ \chi_{11} + K_2F(x_3,x_2)\ \chi_{21} \qquad \text{(C.16c)}$$

onde

$$\chi_I(J_1) = (1-x_1^2)/[1 - K_1(1-x_1^2)] \qquad \text{(C.16d)}$$

é a susceptibilidade magnética para o modelo de Ising e

$$F(x_i,x_j) = \frac{[x_i - \tan h\ (K_ix_i+b_i)][x_j - \tan h\ (K_jx_j+b_j)]}{[D-1][1-K_i(1-x_i^2)]}$$

Os dois outros conjuntos envolvendo χ_{22}, χ_{12}, χ_{32} e χ_{33}, χ_{33}, χ_{31}, χ_{23} podem ser escritos a partir das equações (C.16) efetuando-se permitações cíclicas nos índices.

No caso particular em que o campo externo é nulo nós observamos que as componentes χ_{ij} da susceptibilidade para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico satisfazem as relações: $\chi_{11}=\chi_{22}$; $\chi_{21}=\chi_{12}$; $\chi_{31}=\chi_{32}=\chi_{23}$ (veja figura 51). Essas igualdades são consequências da operação de simetria $\sigma_i \longleftrightarrow s_i$ que deixa a Hamiltoniana (C. 1) invariante.

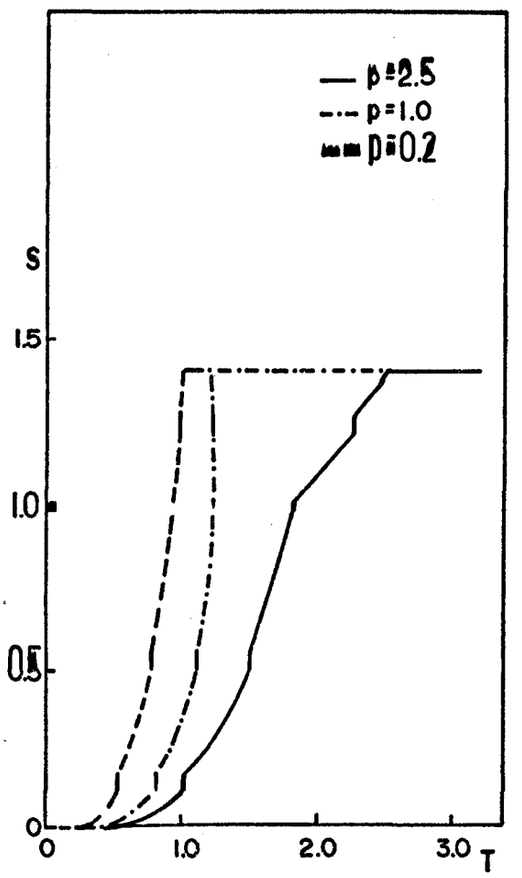


Figura 49 - Entropia em função da temperatura.

Nesta figura apresentamos a entropia obtida para campo magnético nulo em função da temperatura para os valores de p: 0.2 (linha tracejada); 1.0 (linha tracejada e pontilhada) e 2.5 (linha cheia).

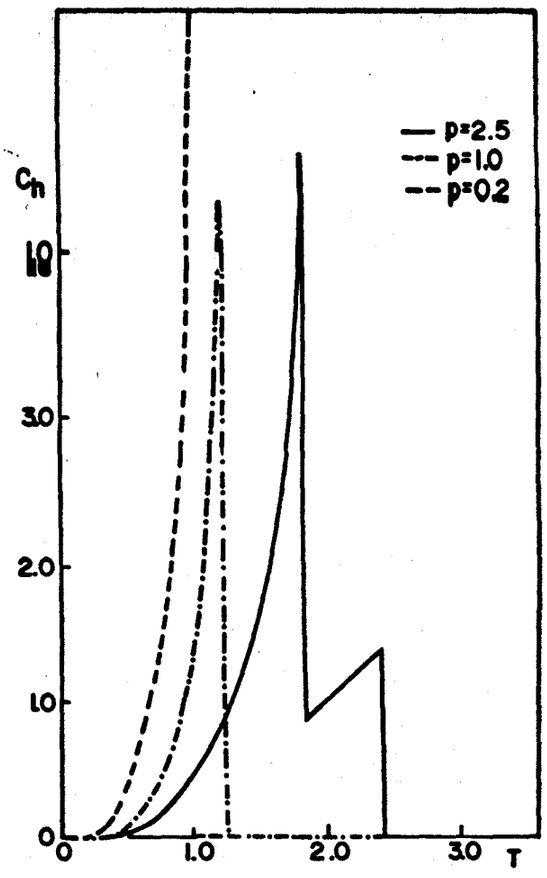


Figura 50 - Calor específico em função da temperatura.

Nesta figura mostra-se o calor específico obtido a campo magnético nulo em função da temperatura para os mesmos valores de p utilizados na figura 49; p= 0.2 (linha tracejada); p=1.0 (linha tracejada e pontilhada) e p=2.5 (linha cheia).

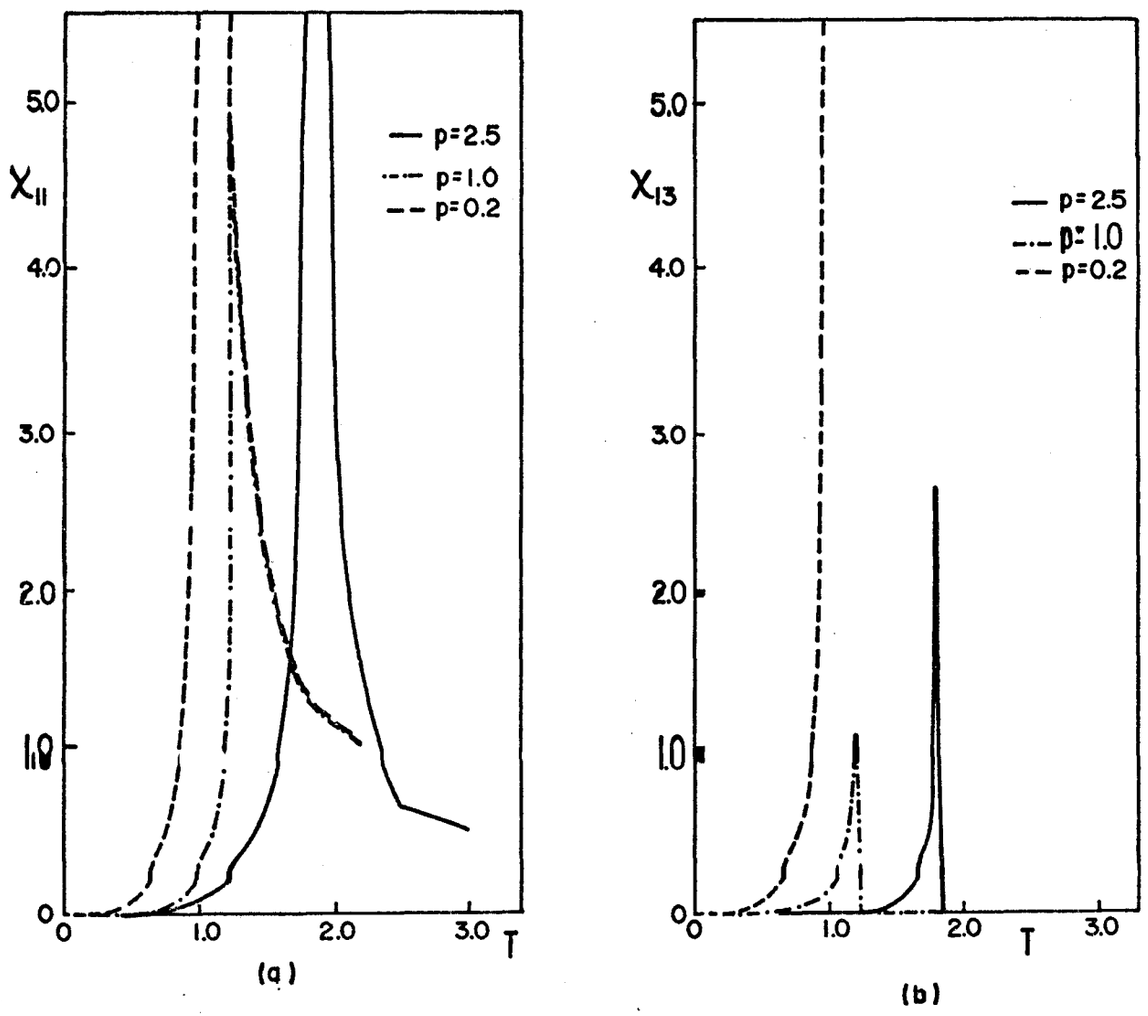
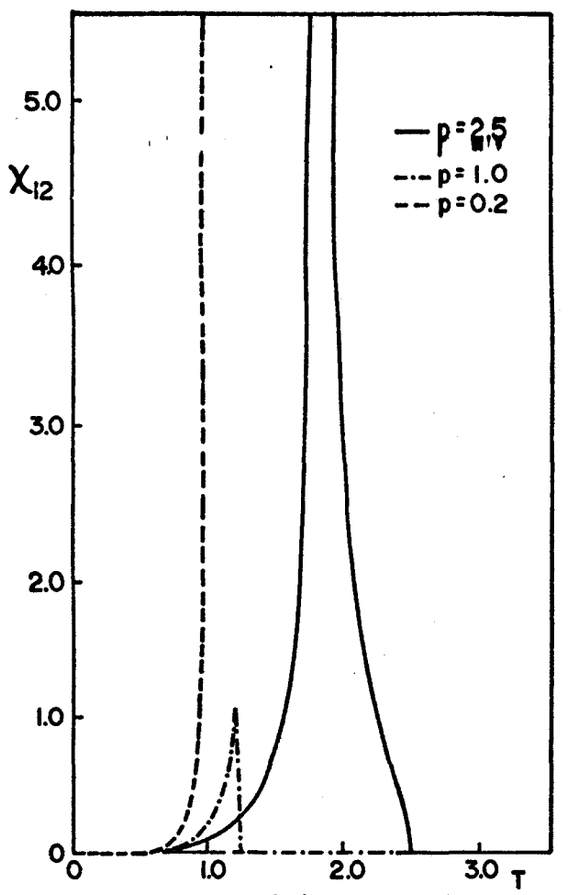


Figura 51 - Susceptibilidade magnética em função da temperatura.

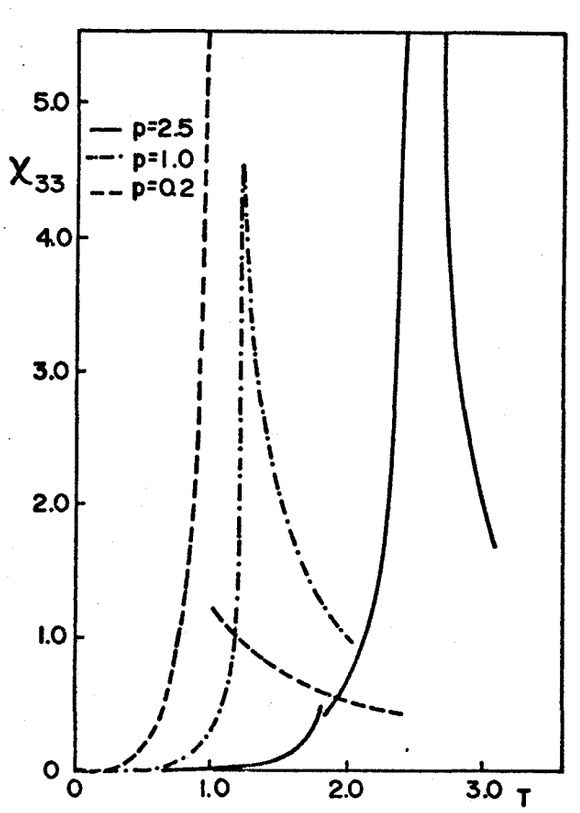
Nessas figuras são apresentados os comportamentos das diferentes componentes da susceptibilidade magnética em função da temperatura.

a) χ_{11} x T ; b) χ_{13} x T ; c) χ_{12} x T; d) χ_{33} x T

A linha cheia é obtida para p= 2.5 enquanto que a linha tracejada (tracejada e pontilhada) é obtida para p=0.2 (p=1.0).


5.0
χ_{12}
4.0
3.0
2.0
1.0
0
0
1.0
2.0
3.0
T
p=2.5
p=1.0
p=0.2

(c)


5.0
χ_{33}
4.0
3.0
2.0
1.0
0
0
1.0
2.0
3.0
T
p=2.5
p=1.0
p=0.2

(d)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

(1) R. J. BAXTER Exactly Solved Models in Statistical Mechanics Academic Press, London (1982).

(2) J. VANNIMENUS Z. Phys. B.43, 141 (1981).

(3) T. HORIGUCHI e T. MORITA J. Stat. Phys. 35, 355 (1984).

(4) B. SHAPIRO Phys. Rev. Lett. 50, 747 (1983).

(5) R. G. LARSON e H. T. DAVIS J. Phys. C. 15, 2327 (1982).

(6) S. L. A. de QUEIROZ J. Phys. A. 14, L339 (1981).

(7) B. D. HUGHES e M. SAHIMI J. Stat. Phys. 29, 781 (1982).

(8) J. E. KRIZAN Phys. Rev. B19, 4841 (1979).

(9) G. R. REICH e P. L. LEATH J. Stat. Phys. 19, 611 (1978).

(10) M. KARDAR e M. KAUFMAN Phys. Rev. Lett. 51, 1210 (1983).

(11) M. KURATA; R. KIKUCHI e T. WATARI J. Chem. Phys. 21, 434 (1953).

(12) H. A. BETHE Proc. Roy. Soc. A216. 45 (1935).

(13) H. A. BETHE Proc. Roy. Soc. 150, 552 (1935).

(14) R. PEIERLS Proc. Camb. Phil. Soc. 32, 477 (1936).

(15) R. PEIERLS Proc. Roy. Soc. 154, 207 (1936).

(16) P. W. ANDERSON Amorphous Magnetism I, eds. H. O. Hooper and A. M. de Graff. Plenum, New York, 1973.

(17) M. A. RUDERMAN e C. KITTEL Phys. Rev. 96, 99 (1954).

(18) T. KASUYA Progr. Theoret. Phys. 16, 45 (1956).

(19) K. YOSIDA Phys. Rev. 106, 893 (1957).

(20) R. RAMMAL e J. SOULETIE Magnetism of Metals and Alloys, ed M. Cyrot, North Holland, Amsterdam, 1982.

(21) J. A. MYDOSH J. Magn. Mag. Mat. 31-34, 1289 (1983).

(22) D. KUMAR Current Trends in Magnetism, eds., N. Satyamurthy and L. M. Rao, Indian Physics Association, Bombay, 1981.

(23) K. BINDER Fundamental Problems in Statistical Mechanics,ed E. G. D. Cohen, North Holland, Amsterdam, 1980.

(24) R. BROUT Phys. Rev. 115, 824 (1959).

(25) S. F. EDWARDS e P. W. ANDERSON J. Phys. F. 5, 965 (1975).

(26) M. KAC Trondhein Theorical Physics Seminar (1968) não publicado.

(27) D. SHERRINGTON e S. KIRKPATRICK Phys. Rev. Lett. 35, 1792 - (1975).

(28) S. KIRKPATRICK e D. SHERRINGTON Phys. Rev. B17, 4384 (1978)

(29) M. KAC in Statistical Physics, Phase Transitions and Superfluidity, Vol. I, eds. M. CHRETIEN et al, Gordon and Breach, New York (1968).

(30) D. J. AMIT Field Theory, The Renormalization Group, and Critical Phenomena, McGran-Hill, New York, 1978.

(31) J. L. van HEMMEN e R. G. PALMER J. Phys A12, 563 (1979).

(32) J. R. L. de ALMEIDA e D. J. THOULESS J. Phys. A11, 983(1978)

(33) A. J. BRAY e M. A. MOORE J. Phys. C12, 79 (1979).

(34) A. J. BRAY e M. A. MOORE Phys. Rev. Lett.41, 1068 (1978).

(35) A. BLANDIN; M. GABAY e T. GAREL J. Phys. C13, 403 (1980).

(36) A. J. BRAY e M. A. MOORE J. Phys. C13, 419 (1980).

(37) G. PARISI Phys. Lett. 73A, 203 (1979).

(38) G. PARISI Phys. Rev. Lett. 43. 1754 (1979).

(39) G. PARISI J. Phys. A13, 1101 (1980).

(40) G. PARISI Phys. Rep. 67, 25 (1980).

(41) G. PARISI J. Phys. A13, L115 (1980).

(42) G. PARISI J. Phys. A13, 1887 (1980).

(43) G. PARISI Phil. Mag. B41, 677 (1980).

(44) H. SOMPOLINSKY Phys. Rev. Lett. 47, 935 (1981).

(45) D. J. THOULESS; P. W. ANDERSON e R. G. PALMER Phyl. Mag. 35 593 (1977).

(46) M. CYROT Phys. Rev. Lett. 43, 173 (1979).

(47) C. de DOMINICIS; M. GABAY; T. GAREL e H. ORLAND J. Physique 41, 933 (1980).

(48) D. ELDERFIELD e D. SHERRINGTON J. Phys. C16, L497 (1983).

(49) A. ERZAN e E. J. S. LAGE J. Phys, C16, L555 (1983).

(50) D. ELDERFIELD e D. SHERRINGTON J. Phys. C16, L1169 (1983).

(51) D. ELDERFIELD e D. SHERRINGTON J. Phys. C16, L971 (1983).

(52) E. J. S. LAGE e A. ERZAN Preprint 1984.

(53) E. J. S. LAGE e J. M. NUNES da SILVA J. Phys. C17. L593 (1984).

(54) C. J. THOMPSON J. Stat. Phys. 27, 457 (1982).

(55) A. BARACCA; M. BELLESI; R. LIVI; R. RECHTMAN e S. RUFFO Phys

Lett. 99A, 156 (1983).

(56) R. V. DITZIAN; J. R. BANAVAR; G. S. GREST e L. P. KADANOFF Phys. Rev. B22, 2542 (1980).

(57) R. J. JELLITO Physica 99A, 268 (1979).

(58) M. L. GLASSER e M. K. GOLDBERG Physica 117A, 670 (1983).

(59) J. E. KRIZAN; P. F. BARTH e M. L. GLASSER Physica 119A, 230 (1983).

(60) C. J. THOMPSON J. Stat.Phys, 27, 441 (1982).

(61) S. KATSURA e M. TARIZAWA Prog. Theor. Phys. 51, 82 (1974).

(62) C. TSALLIS e S. V. F. LEVY Phys. Rev. Lett. 47, 950 (1981).

(63) E. MÜLLER-HARTMANN e J. ZITTARTZ Phys. Rev. Lett. 23, 893 (1974).

(64) E. MÜLLER-HARTMANN e J. ZITTARTZ Z. Physik B22, 59 (1975).

(65) L. EGGARTER Phys. Rev. B9, 2989 (1974).

(66) H. E. STANLEY Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1971.

(67) J. S. SMART Effective Field Theories of Magnetism, W. B. Saunders Company, Philadelphia & London, 1966.

(68) D. M. BURLEY Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 2, eds. C. Domb and M. S. Green, Academic Press, New York 1972.

(69) D. GILLESPIE Am. J. Phys. 51, 520 (1983).

(70) R. B. POTTS Proc. Camb. Phil. Soc. 48, 106 (1952).

(71) F. Y. WU Rev. Mod. Phys., 54, 235 (1982).

(72) L. MITTAG e M. J. STEPHEN J. Phys. A7, L109 (1974).

(73) P. L. CHRISTIANO e S. GOULART ROSA Jr. Phys. Lett. 101A,275 (1984).

(74) I. ONO J. Phys. C17, 3615 (1984).

(75) J. P. STRALEY e M. E. FISCHER J. Phys. A6, 1310 (1973).

(76) K. BINDER J. Stat. Phys. 24, 69 (1981).

(77) J. ASHKIN e E. TELLER Phys. Rev. 64, 178 (1943).

(78) C. FAN Phys. Lett. 39A, 136 (1972).

(79) P. L. CHRISTIANO e S. GOULART ROSA Jr. Aceito para publicação em Phys. Lett.

(80) E. OTT Rev. Mod. Phys. 53, 655 (1981).

(81) V. I. KRYLOV Approximate Calculation of Integrals, McMillan, New York, 1962.

(82) P. D. DAVIES e P. RABINOWITZ Methods of Numerical Integration, Academic Press, New York, 1975.

(83) P.L.CHRISTIANO e S.GOULART ROSA Jr. J.Phys. A18 (1985) L407.

(84) F.C.ALCARAZ e C.TSALLIS J.Phys. A15 (1982) 587.