UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

ESTUDO DE COMPORTAMENTO CRÍTICO
NÃO UNIVERSAL EM MODELO DE ISING
COM DEFEITOS.

Luiz Gallisa Guimarães

Dissertação apresentada ao Ins-
tituto de Física e Química de
São Carlos para obtenção do Tí-
tulo de Mestre em Física Básica

Orientador: Prof.Dr. JOSÉ ROBERTO DRUGOWICH DE FELÍCIO .

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

São Carlos

1986

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

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____
Luiz Gallisa Guimarães

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 20 DE março DE 1986.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. José Roberto Drugowich de Felício - Orientador

Dr. Roberto Nicolau Onody

Dr. Mário José de Oliveira

Este trabalho teve o apoio financeiro do CNPq e FAPESP.

Aos meus pais,
pela semente e pelo solo.

E a vida,
por suas trilhas
cheias de sol
e surpresas de chuva.

Agradeço, sinceramente

ao Prof. Drugowich pela eterna paciência e constantes incentivos na transformação das minhas confusas idéias neste nosso, simples porém, dedicado trabalho.

aos amigos, Buriti, Gilson, Márcio, Moacir e Lena pelos nossos momentos.

À Rô, pelo conforto de sua existência.

À Ciça e à Nicete pela consideração e atenção sempre dispensadas.

À Márcia e a Wilson por terem posto no meu mundo dois raiozinhos, um de sol outro de lua, Minho e Teluca.

À Marly, pela arte deste trabalho datilográfico.

ÍNDICE

LISTA DE ILUSTRAÇÕES	I
LISTA DE TABELAS	II
RESUMO	III
ABSTRACT	IV
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO II- TEORIA DE ESCALA PARA SISTEMAS FINITOS.....	5
II-A - Determinação da temperatura e expoentes críticos através do F.S.S.	5
II-B - O método das amplitudes	12
II-C - Amplitudes universais e Inva- riância Conforme	15
CAPÍTULO III - O MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL COM DEFEITOS LINEARES.	19
III-A - Expoentes críticos variáveis no modelo de Ising.	19
III-B - A abordagem do F.S.S.	23
III-C - Defeitos lineares e Invariân- cia Conforme.	25
CAPÍTULO IV - PROPRIEDADES CRÍTICAS NÃO UNIVERSAIS DA HAMILTONIANA DE ISING EM CAMPO TRANSVER- SO COM DEFEITO	32
IV-A - Relação entre Mecânica Estatísti- ca e teoria de Campo Hamiltonia- na na rede.	32
IV-B - O algoritmo de Lanczos.	36
IV-C - Esquema de Nigthingale.	39
IV-D - Razão de Amplitudes.....	42
IV-E - O Hamiltoniano de Potts ($q=3$) com impureza.	44
IV-F - Conclusões.	46

APÊNDICE A - EXPOENTES CRÍTICOS VARIÁVEIS.	47
APÊNDICE B - TRANSFORMAÇÃO CONFORME E FORMA DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO.	49
REFERÊNCIAS.	51

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1.** Calor específico em função da temperatura para sistemas finitos em uma direção ($L=2,3,4,5$ e 6) e infinito na outra. A energia de interação é $-JS_i S_j$, e as condições de contorno são periódicas 6
- Figura 2.** Calor específico de uma rede finita (linha cheia) e de uma rede infinita (curva tracejada). A linha cheia tem um máximo perto da verdadeira temperatura crítica do sistema. 6
- Figura 3.** As curvas da figura anterior quando superpostas apresentam diferenças significativas somente na região $T \sim T_c$ 7
- Figura 4.** A transformação $w(Z) = \frac{L}{2\pi} \ln Z$ mapeia o plano Z em uma cinta finita na direção θ ($-L/2 < \theta < L/2$) e infinita em ρ 18
- Figura 5.** Modelo de Ising bidimensional com um defeito linear (acoplamento diferente) do tipo: a) linha e b) escada. 20
- Figura 6.** Gráfico de $y_{h_1} = 1 - \eta^*$ contra $D = J'/J - 1$ 25
- Figura 7.** A transformação logarítmica mapeia o plano Z com um defeito linear ($x=0$) em uma cinta com dois defeitos equidistantes. 27
- Figura 8.** Resultados para η^* obtidos com o método das amplitudes. a) defeito do tipo linha e b) escada. 30
- Figura 9.** Reticulado bidimensional usado para calcular a função de correlação. 35

LISTA DE TABELAS

TABELA I	- Estimativas da temperatura crítica e expoente ν obtidos através do estudo de sistemas finitos.	10
TABELA II	- Estimativas do expoente $y_{h_1} = 1 - \eta_H^*$ obtidas com o método usual do F.S.S. (defeito do tipo linha).	41
TABELA III	- Estimativas do expoente η_H^* obtidas com o método das amplitudes (defeito em linha).	43
TABELA IV	- Estimativas do expoente η_H^* obtidas com o método das amplitudes (defeito tipo escada).	43

RESUMO

Nós estudamos análogos quânticos unidimensionais de modelos de Ising em duas dimensões com defeito linear do tipo linha e escada. A abordagem foi a do Grupo de Renormalização Fenomenológico mas argumentos de invariância conforme tiveram que ser utilizados para relacionar o expoente crítico η_H^* (da função de correlação temporal do spin no defeito) a uma razão de diferenças de energia para cadeias finitas. Para diagonalizar os Hamiltonianos utilizamos o método da tridiagonalização de Lanczos. Os resultados obtidos estão em absoluta concordância com a fórmula de Peschel e Schotte obtida pelo método da bosonização.

ABSTRACT

We study quantum analogs of two-dimensional Ising models with a linear defect. Conformal invariance and scaling arguments are used to relate the exponent η_H^* (of the time-correlation function of the spin at the defect) to a finite chain mass-gap ratio. Close agreement is found with the pertinent exact results.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O cálculo dos expoentes críticos em modelos de mecânica estatística ainda hoje desperta um grande interesse entre os pesquisadores da área. Em geral esses números permitem dividir os modelos em classes de universalidade que incluem problemas completamente distintos "*a priori*" exibindo no entanto o mesmo tipo de comportamento crítico. As técnicas utilizadas para determinar esses números são muitas e vão desde séries de alta temperatura (Stanley 1971) até sofisticadas transformações envolvendo células adequadamente escolhidas (Yeomans e Stinchcombe 1980). De acordo com a teoria do grupo de renormalização todos os modelos pertencentes a uma certa classe de universalidade têm o seu comportamento crítico governado por um só ponto fixo, que não depende dos detalhes da Hamiltoniana e sim de características mais gerais tais como dimensionalidade do sistema e do spin (Wilson e Kogut 1974). Existem no entanto alguns modelos bidimensionais que resistem a essa classificação apresentando expoentes críticos que dependem continuamente dos parâmetros da Hamiltoniana. Destes últimos o mais conhecido talvez seja o modelo de Baxter (1971) cujos expoentes térmicos (α_{ev}) e elétricos (β_e, x_p) variam em função da interação de quatro spins (λ), que não existe no modelo de Ising original ($\lambda=0$).

Recentemente, no entanto, Bariev (1979) mostrou que esse comportamento crítico não universal pode ser encontrado também no modelo de Ising (1925), desde que uma linha inteira de acoplamentos (horizontais ou verticais) seja alterada, passando assim a constituir-se em um defeito unidimensional do modelo bidimensional de Ising. Nesse caso porém, o índice crítico variável é o

que descreve o decaimento da função de correlação spin-spin ao longo da linha de defeitos, que não é uma propriedade global do sistema (os expoentes ν e α e mesmo a temperatura crítica do modelo não mudam com a colocação do defeito linear). Esse resultado exato, logo confirmado por McCoy e Perk (1980), passou a ser usado como teste de uma variedade de esquemas normalmente utilizados para a obtenção dos índices críticos. Vale a pena citar o trabalho de Lam e Zhang (1983) que, trabalhando com pequenas células auto-duais, não conseguiu encontrar a principal característica desses modelos: uma linha de pontos fixos. Svrakic (1983) entretanto, usando uma expansão de cumulante já empregada para estudar efeito de superfície (Oliveira et al 1978) consegue obter a linha de pontos fixos e mostrar que o acoplamento modificado é marginal, isto é, não aumenta nem diminui após uma operação do GR. Infelizmente nesse esquema não se pode obter o expoente crítico não universal η^* . Uma outra técnica menos transparente, mas muito confiável, e já testada em modelos não universais (Nightingale 1982), foi empregada por Nightingale e Blöte (1983) para tratar esse problema. Trata-se de uma técnica que associa a hipótese de escala para sistemas finitos (Finite-size scaling) ao método da matriz de transferência, e que vem sendo usada com bastante sucesso nos últimos anos (veja Barber 1983 para uma revisão completa da técnica e de suas aplicações). No caso do defeito linear em modelos bidimensionais de Ising os resultados também são satisfatórios mas estão longe de competir em precisão com cálculos semelhantes feitos pela mesma técnica em sistemas homogêneos. A razão para isso poderá ser entendida na leitura dos próximos capítulos, mas está relacionada com a perda da invariância translacional e com a própria forma de executar o cálculo (mede-se a resposta do sistema a um campo magnético que só atua na linha de defeitos).

Paralelamente a essas investigações do modelo bidimensional iniciou-se o estudo do comportamento da cadeia (quântica) de Ising em campo transverso com impureza. Esse modelo quântico em uma dimensão (1D) a $T=0$ é mapeado no modelo clássico de Ising (2D) com defeitos que foi apresentado acima e deveria também exibir o comportamento exótico mencionado no início desse capítulo. O primeiro trabalho nessa linha foi o de K.Uzelac (1981) que aborda o problema via grupo de renormalização no espaço real. Basicamente divide-se o sistema em células e separa-se o Hamiltoniano em duas partes: intercélulas e intracélulas. Resolve-se exatamente o Hamiltoniano da célula, eliminam-se os auto-estados associados a energias mais altas e nessa nova base reescreve-se o Hamiltoniano intracelular. Os novos parâmetros do Hamiltoniano guardam relações com os antigos e dessa forma se pode pesquisar pontos fixos. O cálculo do expoente η_H^* da auto-função de correlação do spin situado na impureza (que é não universal) é feito através da relação de escala entre η e β que é o expoente da magnetização no defeito. Os resultados de Uzelac demonstram uma variação de η_H^* mas não têm nenhuma confiabilidade numérica. Por outro lado Peschel e Schotte (1984) usando bosonização foram capazes de encontrar a correta dependência de η_H^* com a intensidade da impureza e seus resultados são exatamente iguais ao limite Hamiltoniano daqueles obtidos por Bariev, McCoy e Perk.

Mais recentemente, no entanto, o problema do defeito linear em modelo de Ising bisimensional foi reanalisado por Turban (1985) utilizando uma nova abordagem do "*Finite-size scaling*" (FSS) que nós designaremos por método das amplitudes. Como ficará claro no Capítulo II esse novo método tem se revelado uma excelente alternativa para a determinação de índices críticos e descreve adequadamente o comportamento do expoente η^* em questão.

Nessa dissertação, nós retomamos o estudo do análogo

quântico unidimensional do modelo de Ising com defeito linear, com o intuito de determinar o comportamento de η_H^* . Para isso utilizamos as técnicas do FSS adaptadas ao estudo teorias Hamiltonianas na rede (no estilo de Nigthingale-Blöte 1982) bem como a generalização do método das amplitudes para o contexto Hamiltoniano. O primeiro método revelou as mesmas deficiências já encontradas no estudo do análogo clássico mas a segunda alternativa concorda extremamente bem com os resultados de Peschel e Schotte (1984).

O trabalho está apresentado na seguinte sequência: no Capítulo II um resumo das idéias do FSS que inclui o método das amplitudes, assunto ainda não disponível na forma de artigos de revisão, no Capítulo III uma reunião dos principais trabalhos a respeito do modelo bidimensional com defeito linear, e no Capítulo IV a nossa contribuição ao estudo do análogo quântico unidimensional. Também no Capítulo IV estão resumidos os resultados para o expoente η_H no caso do modelo de Potts - 3 estados com impureza. Nesse caso a impureza não induz comportamento não universal e deveríamos ter apenas três valores distintos para η_H . No Apêndice-A procuramos explicar a razão da não-universalidade encontrada no modelo de Ising e no apêndice-B usamos uma transformação conforme infinitesimal para encontrar a forma da função de correlação para pontos próximos do defeito.

CAPÍTULO II

TEORIA DE ESCALA PARA SISTEMAS FINITOS

II-A) Determinação de temperatura e expoentes críticos através do FSS (Finite-size scaling)

Embora uma transição de fase só ocorra no limite termodinâmico é possível extrair informações a respeito das propriedades críticas (de sistemas infinitos) a partir do estudo de seus análogos finitos. As primeiras idéias desse campo foram lançadas por Michael Fisher, Barber e Ferdinand no início da década passada ainda que Domb (1960) já tivesse obtido alguns resultados importantes para modelos de Ising em redes finitas (veja figura 1). Para entender as tentativas iniciais vamos recorrer à figura 2 na qual estão mostrados o calor específico do modelo de Ising bidimensional para uma rede infinita (tracejado) e aquele de uma rede finita (linha cheia). Como se pode ver a divergência logarítmica desaparece, quando $L \neq \infty$, mas ainda deixa seu vestígio na forma de um pico arredondado cuja altura cresce quando o tamanho do sistema aumenta (veja-figura 1), e cuja posição $T_m(l)$ se aproxima de T_c (temperatura crítica do sistema infinito) quando l cresce, segundo

$$\frac{T_m(l) - T_c}{T_c} \sim \frac{B}{l^\lambda} \quad (II-1)$$

onde $l=L/a$ é o tamanho do sistema. O expoente λ que caracteriza a rapidez de aproximação não tem uma interpretação simples mas nós voltaremos a falar sobre ele na sequência dessa seção.

Figura 1. Calor específico em função da temperatura para sistemas finitos.

Figura 2. Calor específico de uma rede finita (linha cheia) e de uma rede infinita (curva tracejada).

Figura 3. As curvas da figura anterior quando superpostas apresentam diferenças significativas somente na região $T \approx T_c$.

Em casos onde já se conhece a "resposta", como acontece com o modelo de Ising bidimensional, é possível formar uma outra sequência de temperaturas $T^*(l)$ que serviriam para determinar T_c (o que não tem vantagem nenhuma porque ela já é conhecida). O que se faz é superpor a curva do sistema finito àquela do sistema infinito e obter $T^*(l)$ como a temperatura para a qual as duas curvas começam a separar-se (conforme indica na figura 3). Essa temperatura também se aproxima de T_c , sob a forma

$$\frac{T^*(l) - T_c}{T_c} \sim \frac{C}{l^\theta} \quad (\text{II-2})$$

Ao contrário do expoente λ , o índice θ da equação (II-2) tem um significado interessante: ele é o inverso do expoente crítico ν do comprimento de correlação (ξ). Para concluir o que acaba de ser dito basta lembrar que $T^*(l)$ é a temperatura para a qual a finitu-

de do sistema começa a se refletir na medida, e isso só deve ocorrer quando o comprimento de correlação for comparável ao tamanho do sistema, isto é

$$\xi(T^*(L)) \sim L. \quad (\text{II-3})$$

Como nas vizinhanças da temperatura crítica o comprimento de correlação do sistema infinito varia conforme

$$\xi(T) \propto \left(\frac{T-T_c}{T_c} \right)^{-\nu} \quad (\text{II-4})$$

segue

$$L^{-1/\nu} \sim \frac{T^*(L)-T_c}{T_c} \quad (\text{II-5})$$

e por comparação de (II-2) com (II-5) chegamos a

$$\theta = 1/\nu. \quad (\text{II-6})$$

Salientamos que em muitos casos $\lambda=\theta=1/\nu$ (veja Barber 1983).

Do que vimos até aqui ficou claro que, embora a idéia fosse interessante os progressos realizados e a eficiência dos métodos deixavam muito a desejar. Mas de qualquer forma ficou a conclusão de que o tamanho (L) do sistema tem a propriedade de tirar o sistema da criticalidade quando ele não for infinito ($L^{-1}=0$). Na linguagem do Grupo de Renormalização, que é contemporânea dos estudos com sistemas finitos, diremos que L^{-1} é um campo relevante, da mesma forma que o campo magnético e a temperatura. Assim sob uma operação do GR (Wilson e Kogut 1974) o comprimento de correlação deve se transformar como

$$\xi_L(t, h, L^{-1}) = b \xi_{L/b} (b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^1 L^{-1}) \quad (\text{II-7})$$

onde b é o fator de ampliação do parâmetro da rede, $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ é a "distância" da temperatura crítica e h é o campo magnético. É interessante observar na equação (II.7) que, ao contrário de t e h que escalam com expoentes desconhecidos y_t e y_h , o novo campo L^{-1} tem um expoente conhecido "a priori" desde que L^{-1} é inverso de comprimento que por sua vez escala como momento.

Voltando à equação (II-7) e repetindo m vezes a operação do GR obteremos

$$\xi_L(t, L^{-1}) = b^m \xi_{L/b^m} (b^{m y_t} t, b^m L^{-1}) \quad (\text{II-8})$$

onde já fizemos o campo magnético igual a zero. Em seguida escolhemos m para que

$$b^m L^{-1} = L_0^{-1}$$

e obtemos

$$\xi_L(t, L^{-1}) = \frac{L'}{L_0} \xi_{L_0} (L^{y_t} t) \quad (\text{II-9})$$

o que mostra que na temperatura crítica do sistema infinito ($t=0$) o comprimento de correlação só depende do tamanho do sistema e é proporcional a ele. Foi Nigthingale (1976) quem percebeu a possibilidade de extrair dessa forma a temperatura crítica dos modelos, pois ela é a solução da equação

$$\frac{L}{\xi_L(T_c)} = \frac{L'}{\xi_{L'}(T_c)} \quad (\text{II-10})$$

Na Tabela I são mostradas as estimativas de T_c obtidas dessa forma para o modelo de Ising bidimensional. Entretanto o método é muito mais poderoso e permite calcular por exemplo o expoente $\nu = 1/y_t$. Para isso é preciso obter-se a derivada de ξ com relação à temperatura. Assim, derivando (II-7) obtemos

TABELA I - Estimativas da temperatura crítica e expoente ν obtidos através do estudo de sistemas finitos.

Tabela I

REDES	K_c	$y_t = 1/\nu$
2,3	0.422361	1.0792
3,4	0.430884	1.0591
4,5	0.435953	1.0369
5,6	0.438258	1.0233
6,7	0.439310	1.0157
7,8	0.439831	1.0113
8,9	0.440116	1.0085
9,10	0.440286	1.0067
10,11	0.440394	1.0054
11,12	0.440466	1.0045
EXATO	0.440687	1.0000

$$\xi_L(T) = b^{1+y_t} \xi_{L/b}(b^{y_t} t, bL^{-1}), \quad (\text{II-11})$$

e seguindo os mesmos passos dados para ir de (II-7) para (II-10) chegamos a

$$y_t = \frac{1}{\nu} = \frac{\ln[\xi_L(T_c)/\xi_{L'}(T_c)]}{\ln[L/L']} - 1 \quad (\text{II-12})$$

Os resultados para ν do Ising bidimensional também estão na Tabela I.

É preciso salientar que a obtenção de T_c exige o cálculo do comprimento de correlação que é dado por (Domb, 1960)

$$\xi^{-1} = \ln\left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right), \quad (\text{II-13})$$

onde λ_0 e λ_1 são os dois maiores auto-valores da matriz de transferência. Isso significa que será necessário diagonalizar matrizes matrizes de transferência para sistemas finitos, cujo tamanho L seja tão grande quanto possível. Entretanto o cálculo de ν necessita da determinação numérica de derivadas o que multiplica o trabalho pelo menos por um fator 3.

Ainda dentro desse esquema podemos calcular outros expoentes. Para isso é preciso lembrar que o comprimento de correlação que nas vizinhanças de T_c vai como

$$\xi \propto \left(\frac{T-T_c}{T_c} \right)^{-\nu} = t^{-\nu} \quad (\text{II-14})$$

para um sistema finito vai como

$$\xi \propto L. \quad (\text{II-15})$$

Sendo assim, qualquer grandeza termodinâmica Q que num sistema infinito diverge como

$$Q \propto t^{-w} \quad (\text{II-16})$$

para um sistema finito varia como

$$Q \propto L^{w/\nu} \quad (\text{II-17})$$

No caso da susceptibilidade magnética, por exemplo, teremos

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu} \quad (\text{II-18})$$

Como

$$\chi = - \left. \frac{\partial^2 G}{\partial h^2} \right|_T, \quad (\text{II-19})$$

$$G = kT \ln \lambda_0, \quad (\text{II-20})$$

fica claro que para encontrar γ/ν precisamos calcular derivadas segundas com relação ao campo magnético h , e finalmente obter

$$\frac{\gamma}{\nu} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln[\chi_L/\chi_{L'}]}{\ln|L/L'|} \quad (\text{II-21})$$

Embora a abordagem de Nigthingale* seja formalmente simples e bastante precisa a sua execução se torna difícil pois, como vimos anteriormente, ela envolve o cálculo numérico de derivadas e acarreta o uso exagerado de tempo de CPU (unidade central de processamento). Essa dificuldade porém, só foi superada recentemente em razão de uma descoberta feito por acaso no estudo da localização de Anderson (Pichard e Sarma 1981). A seguir apresentaremos um breve histórico desse novo método para calcular expoentes críticos.

II-B) O método das amplitudes

Derrida e de Seze (1982) estudando o modelo de Potts isotrópico observaram que na criticalidade ($T=T_c$) havia uma relação simples entre o expoente η da função de correlação spin-spin $\langle \sigma(0)\sigma(\vec{r}) \rangle$ e a amplitude do inverso do comprimento de correlação associado. Essa relação se expressa como

$$A_\sigma = \pi\eta \quad (\text{II-22})$$

onde

$$A_\sigma = L/\xi_L(T_c).$$

* O esquema de Nigthingale pode ser aplicado, com pequenas modificações, ao estudo de teorias de campo Hamiltoniano na rede (Romany e Wild 1980, Hammer e Barber 1980).

Recordamos que o comprimento de correlação $\xi_L(T_c)$ é dado por

$$\xi_L^{-1}(T_c) = \ln\left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right) \quad (\text{II-23})$$

onde λ_0 e λ_1 são os dois maiores autovalores da matriz de transferência da cinta calculados na temperatura crítica do sistema infinito (obtida anteriormente por extrapolação ou por dualidade como é o caso do modelo de Potts). Mais tarde Nigthingale e Blöte(1983) trabalhando com resultados exatos para o modelo de Ising bidimensional finito verificaram a validade de uma equação análoga à (II-22) para o segundo comprimento de correlação.

$$\tilde{\xi}_L = \left[\ln \frac{\lambda_0}{\lambda_2} \right]^{-1} \quad (\text{II-24})$$

onde λ_2 é o terceiro maior autovalor da matriz de transferência (MT).

Nesse caso, para um sistema isotrópico a relação é

$$A_\epsilon = \pi \eta_E, \quad (\text{II-25})$$

onde

$$A_\epsilon = \frac{L}{\tilde{\xi}_L(T_c)},$$

e η_E o expoente da função de correlação energia-energia cuja relação com o expoente ν é

$$\eta_E = 2\left(2 - \frac{1}{\nu}\right). \quad (\text{II-26})$$

Nesse mesmo trabalho Nigthingale e Blöte generalizaram as equações (II-22) e (II-25) para modelos anisotrópicos. Agora o expoente fica determinado pela média geométrica das amplitudes, calculadas em duas cintas perpendiculares entre si. Para o modelo

de Ising anisotrópico a amplitude do comprimento de correlação (com acoplamento J_1 na direção finita e J_2 na direção infinita) é dada por

$$A_{1\sigma} = \frac{\pi}{4} (\sinh 2\beta_c J_2 / \sinh 2\beta_c J_1)^{1/2}, \quad (\text{II-27})$$

onde $\beta_c = (kT_c)^{-1}$. Na outra situação (J_1 na direção infinita e J_2 na direção finita) a amplitude é dada por

$$A_{2\sigma} = \frac{\pi}{4} (\sinh 2\beta_c J_1 / \sinh 2\beta_c J_2)^{1/2}. \quad (\text{II-28})$$

Finalmente a média geométrica das duas amplitudes

$$A = (A_{1\sigma} A_{2\sigma})^{1/2} = \frac{\pi}{4} = \pi \eta. \quad (\text{II-29})$$

é igual a π vezes o expoente η .

Foram investigados, com o uso desse método, o modelo de Baxter o modelo de Potts e o modelo cúbico. Em todos eles os resultados foram extremamente satisfatórios, e encorajaram a investigação de uma possível generalização das equação (II-22) e (II-25) para o caso de Hamiltonianas quânticas na rede. A conclusão é que no contexto Hamiltoniano somente a razão das amplitudes é universal e um índice crítico só pode ser determinado se um outro for conhecido (Penson e Kolb 1984, Alcaraz e Drugowich de Felício 1984). Para concluir essa seção queremos salientar os grandes benefícios que esse método nos traz. O primeiro é a possibilidade de se calcular expoentes críticos sem passar pelo cálculo das derivadas. O segundo é a chance de obter diretamente expoentes magnéticos (η por exemplo) que até então só podiam ser calculados através da inclusão de um campo que se acople com o operador em questão. Na próxima seção iremos discutir as razões para que essas amplitudes sejam universais.

II-C) Amplitudes Universais e Invariância Conforme

A inesperada universalidade da amplitude do comprimento de correlação foi justificada recentemente por John Cardy (1984a) com base no princípio da invariância conforme. Segundo esse princípio um modelo de mecânica estatística deve ser, no ponto crítico, invariante não somente por transformações de escala mas também conformalmente invariantes o que significa dizer que as funções de correlação devem se transformar de forma simples mesmo que o sistema seja submetido a uma rotação seguida de uma dilatação local por um fator $b(\vec{r})$. Em 3 dimensões essa invariância já permite obter algumas conclusões tais como a regra de seleção para as funções de correlação e a restrição da função de 3 pontos. Em duas dimensões porém, qualquer função analítica pertence a esse grupo chamado conforme (Churchil 1960) o que possibilita obter por exemplo, os conjuntos dos números mágicos (índices críticos) pertencentes a modelos com pontos fixos discretos (veja Dotsenko 1984 e Friedan Qiu e Shenker 1984).

A idéia de Cardy se resume em lançar mão de uma transformação ($w=lnz$) que muda a geometria do sistema (mapeia o plano todo em uma cinta infinita). Esse mapeamento é extremamente conveniente uma vez que ele relaciona os dois sistemas de interesse: o plano infinito (que gostaríamos de estudar) e a cinta (que podemos estudar via matriz de transferência). A função de correlação em uma e outra geometria não são independentes e estão relacionadas pela equação

$$\langle \phi(z_1) \phi(z_2) \rangle_{T_C} = |w'(z_1)|^x |w'(z_2)|^x \langle \phi(w_1) \phi(w_2) \rangle_{T_C}, \quad (II-30)$$

onde x é a dimensão anômala da quantidade ϕ e $w'(Z)$ é a derivada de w com relação a Z . Escolhendo

$$w = \frac{L}{2\pi} \ln Z \quad (\text{II-31})$$

o plano todo é mapeado na cinta - $\frac{L}{2} \leq \text{Im} w \leq \frac{L}{2}$, conforme se mostra na figura 4, e lembrando que na criticalidade a função de correlação se comporta como $|z_1 - z_2|^{-2x}$ obtemos para a função de correlação na cinta

$$\langle \phi(w_1) \phi(w_2) \rangle_{T_c} = |z_1|^x |z_2|^x \langle \phi(z_1) \phi(z_2) \rangle_{T_c}, \quad (\text{II-32})$$

$$\langle \phi(w_1) \phi(w_2) \rangle \sim \frac{e^{\frac{2\pi}{L}(w_1 + w_2)}}{\left| e^{\frac{2\pi}{L}w_1} - e^{\frac{2\pi}{L}w_2} \right|^{2x}}, \quad (\text{II-33})$$

ou ainda

$$\langle \phi(w_1) \phi(w_2) \rangle_{T_c} \sim \frac{1}{\left| \sinh \frac{\pi}{L}(w_1 - w_2) \right|^{2x}}, \quad (\text{II-43})$$

que para $|w_1 - w_2| \gg \frac{L}{\pi}$ resulta em

$$\langle \phi(w_1) \phi(w_2) \rangle \sim \exp \left(- \frac{2\pi}{L} x |w_1 - w_2| \right). \quad (\text{II-35})$$

Uma análise da equação (II-35) revela que a forma funcional da função de correlação mudou radicalmente, deixando de ser polinomial e passando a uma exponencial. À primeira vista esse resultado é estranho porque estamos obtendo um decaimento exponencial para um sistema que está na temperatura crítica. Entretanto, não se pode esquecer que a nova geometria é de um sistema essencialmente unidimensional que por sua vez não sofre transição de fase à temperatura finita.

Voltando à equação (II-35) podemos concluir que o compri-

mento de correlação (que é basicamente a distância a partir da qual a função de correlação fica reduzida a 1/3 da inicial) de uma cinta infinita em uma direção e finita na outra é dado por

$$\xi = \frac{1}{2\pi x} L, \quad (\text{II-36})$$

ou ainda

$$A = 2\pi x = \frac{L}{\xi}. \quad (\text{II-37})$$

No caso da função de correlação spin-spin x corresponde à dimensão anômala de σ que está relacionado com η através de

$$\eta = 2x \quad (\text{II-38})$$

o que leva à equação

$$A_{\sigma} = \pi\eta = \frac{L}{\xi_L(T_c)} \quad (\text{II-39})$$

verificada numericamente por vários autores (Derrida e de Seze 1982, Nigthingale e Blöte 1983). Esse procedimento pode ser facilmente estendido para o caso de um modelo semi-infinito e a previsão é de que

$$A = \pi X_s = \pi\eta_s/2 \quad (\text{II-40})$$

onde X_s é a dimensão anômala do operador σ da superfície. Os resultados de Cardy (1984b) para o caso de condições livres e anti-periódicas foram também confirmadas por Burkhardt e Guim (1985) no caso do modelo de Ising.

Figura 4. A transformação $w(Z) = \frac{L}{2\pi} \ln Z$ mapeia o plano Z em uma cinta finita na direção $\theta (-L/2 < \theta < L/2)$ e infinita em ρ .

CAPÍTULO III

O MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL COM DEFEITOS LINEARES

III-A) Expoentes críticos variáveis no modelo de Ising

Em alguns modelos bidimensionais pode ocorrer uma variação contínua dos expoentes críticos com os parâmetros da Hamiltoniana. O exemplo mais conhecido é o modelo de Baxter (1971) cujos índices críticos dependem da intensidade da interação de quatro spins. Esse resultado, conforme explicação de Kadanoff e Wegner (1971) é consequência da igualdade entre as dimensões da rede ($d=2$) e da perturbação.

Mais tarde Bariev (1979) mostrou que era possível obter expoentes variáveis (não universais) no próprio modelo de Ising, bastando para isso substituir a constante de acoplamento ao longo de apenas uma linha de uma rede quadrada. Como se pode ver na Figura 5 há duas possibilidades de se colocar o "defeito", que doravante designaremos por defeito do tipo linha (Figura 5.a) e defeito do tipo escada (Figura 5.b). A forma da Hamiltoniana e o resultado encontrado por Bariev nos dois casos serão apresentados a seguir.

a) Defeito do tipo "linha"

Sendo J_2 e J_1 as constantes de troca ao longo da direção vertical e horizontal respectivamente, e trocando-se J_2 por J_2' ao longo de toda linha (l, p) obteremos um sistema cuja Hamiltoniana clássica é dada por:

$$H = - J_1 \sum_{l,m} S_{l,m} S_{l,m+1} - J_2 \sum_{l,m \neq p} S_{l,m} S_{l+1,m} -$$

Figura 5a. Modelo de Ising bidimensional com um defeito do tipo linha

Figura 5b. Modelo de Ising bidimensional com um defeito do tipo escada.

$$- J'_2 \sum_{\ell} S_{\ell,p} S_{\ell+1,p} \quad (\text{III-1})$$

Onde $S_{\ell m}$ são variáveis de Ising clássicas, isto é, $S_{\ell,m} = \pm 1$, e p um inteiro escolhido.

b) Defeito do tipo "escada"

Aqui a alteração na constante de acoplamento ($J_1 \rightarrow J'_1$) ocorre entre os pares (ℓ,p) e $(\ell,p+1)$ para todos os valores de ℓ . A Hamiltoniana clássica desse sistema é

$$H = - J_2 \sum_{\ell,m} S_{\ell m} S_{\ell+1,m} - J_1 \sum_{\ell,m \neq p} S_{\ell,m} S_{\ell,m+1} - J'_1 \sum_{\ell} S_{\ell,p} S_{\ell,p+1} \quad (\text{III-2})$$

Vale a pena notar que as duas redes, embora defeituosas, possuem invariância translacional ao longo da direção vertical, e portanto o valor médio de $S_{\ell,p}$ não depende de ℓ , podendo ser calculado a partir da correlação spin-spin na direção horizontal, conforme indicado na equação (III-3)

$$\langle \sigma \rangle = \langle S_{\ell,p} \rangle = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\langle S_{\ell,p} S_{\ell,p+R} \rangle}{\langle S_{\ell,p+R} \rangle}, \quad (\text{III-3})$$

onde σ está sendo usado para denotar o spin pertencente à linha de defeitos. Para o cálculo do limite (III-3) o autor escreveu a Hamiltoniana do modelo numa representação de férmions não interagentes que permite escrever a função de Green de dois pontos $\langle S_{\ell,p} S_{\ell,p+R} \rangle$ como uma função de Green de muitos pontos, que por sua vez pode ser calculada pelo método do Pfaffiano (McCoy e Wu 1972).

Finalmente Bariev mostrou que a temperatura crítica dos

modelos com defeito é idêntica àquela dos análogos puros ($\sinh 2\beta_c J_1 \sinh \beta_c J_2 = 1$) e que a magnetização dos spins pertencentes à linha de defeitos $\langle \sigma \rangle$ desaparece nas vizinhanças de T_c com um expoente não universal. Mais precisamente, tem-se com ($J_1 = J_2$)

$$\langle \sigma \rangle \sim t^{\beta(\theta)} \quad (\text{III-4})$$

com

$$\beta(\theta) = \frac{1}{2\pi^2} [\arccos(-\theta)]^2 \quad (\text{III-5})$$

onde θ é dado por

$$\theta = \tanh[2(J'_2 - J_2)/kT] \quad (\text{III-6})$$

no caso de defeito do tipo linha, e vale

$$\theta = \frac{\cosh(2J_1/kT) - \cosh(2J'_1/kT)}{\cosh(2J_1/kT)\cosh(2J'_1/kT) - 1} \quad (\text{III-7})$$

se o defeito for do tipo escada.

Cabe aqui salientar que McCoy e Perk (1980) também abordaram esse problema mas a função de correlação calculada por eles só envolve spins pertencentes à linha de defeitos. Os seus resultados confirmam as equações (III-4) - (III-7).

Chamamos a atenção do leitor para o fato de que o expoente não universal pertence a uma grandeza local, não havendo nenhuma alteração, por exemplo, do expoente ν do comprimento de correlação que continua valendo 1, independente da constante defeituosa. Também queremos salientar que nesse caso é o expoente magnético que se altera ao contrário do modelo de Baxter (1971) em que o expoente da magnetização permanece inalterado enquanto os térmicos (α, ν) variam como função da perturbação.

Para concluir essa seção devemos mencionar que a marginalidade da perturbação só pode persistir se a sua dimensão de escala for sempre igual à dimensão física do defeito ($d^*=1$) o que impede a variação do índice crítico do operador energia. Essa questão voltará a ser discutida nesta dissertação. Na próxima seção apresentaremos os resultados, para esses modelos, obtidos pela técnica do Finite-size scaling tanto na sua forma original como na versão mais moderna (Cardy, 1984a).

III-B) A abordagem do FSS

Trabalhar com defeitos lineares na rede quadrada é uma tarefa simples dentro do esquema usual do FSS. Isto foi feito por Nigthingale e Blöte já em 1982, que usaram uma teoria de escala desenvolvida por Burkhardt e Eisenriegler (1981) a qual passamos a discutir.

A energia livre do defeito f^* definida como a diferença entre a energia do sistema com e sem defeito deve escalar como

$$f^*(t, h, h_1, |D|, L) = b^{-d^*} f^*(b^{y_t} t, b^{y_h} h, b^{y_{h_1}} h_1, b^{y^*} |D|, bL^{-1}) \quad (\text{III-8})$$

onde D é o excesso de acoplamento no defeito definido como $D = \frac{J'}{J} - 1$. O campo magnético h atua sobre todos os spins enquanto que h_1 só atua nos spins do defeito, L é o tamanho do sistema e d^* a dimensão física do defeito.

De (III-8) podemos expressar o comportamento de algumas funções termodinâmicas na vizinhança da criticalidade. Como exemplo a magnetização $\langle \sigma \rangle$ de algum spin da linha de defeitos é dado por

$$\langle \sigma \rangle = b^{-d^*+y_h} g(b^{y_t} t, b^{y^*} |D|, bL^{-1}) \quad (\text{III-9})$$

Escolhendo $b=L$, ficamos com

$$\langle \sigma \rangle = L^{-d^*+y_h} g(L^{y_t}, L^{y^*} |D|, 1). \quad (\text{III-10})$$

Se y^* for irrelevante ($y^* < 0$) o termo $L^{y^*} |D|$ será desprezível para L grande e portanto a magnetização da linha de defeitos será igual a magnetização de qualquer outra linha. No caso $y^* > 0$ (relevante) o comportamento da magnetização ao longo do defeito será radicalmente diferente daquele de um sistema puro. Entretanto se $y^* = 0$ (marginal) a situação se torna muito interessante uma vez que essa é a condição necessária para que o modelo exiba comportamento não universal (Kadanoff e Wegner, 1971). No Apêndice-A o leitor poderá encontrar um resumo das idéias desses autores, bem como sua aplicação ao modelo em estudo. Desde já, no entanto, podemos observar a dependência explícita de $\langle \sigma \rangle$ com o excesso de acoplamento D . Esse efeito também se manifesta na susceptibilidade magnética do spin no defeito e com o auxílio da fórmula (II-21) se pode obter indiretamente o valor do índice η^* . Os resultados assim obtidos por Nigthingale e Blöte (1982) estão mostrados na Figura 6. É preciso salientar que essas estimativas são indiretas e ainda muito imprecisas. Quando lançadas num gráfico essas diferenças quase não aparecem em virtude da escala escolhida.

Figura 6. Gráfico de $y_{h1} = 1 - \eta^*$ contra $D = J'/J - 1$.

III-C) Defeitos lineares e Invariância Conforme

Vimos no capítulo anterior que sistemas conformalmente invariantes apresentam uma preciosa relação entre seus expoentes críticos e as amplitudes dos comprimentos de correlação. Em particular no caso da correlação spin-spin essa relação se escreve

$$A_{\sigma} = \pi \eta \quad (\text{III-11})$$

onde η é igual a duas vezes a dimensão anômala do spin (x_{σ}). Lembremos também que se estivermos trabalhando com uma cinta com condições livres de contorno a relação acima passa a ser (veja equação II-35)

$$A_{\sigma}^L = \pi \eta_s / 2 \quad (\text{III-12})$$

uma vez que essa geometria corresponde ao plano semi-infinito ($x > 0$, y qq.). Nesse caso a amplitude está relacionada com o expoente crítico da superfície (η_s). Como podemos observar desses casos, para que a amplitude do comprimento de correlação forneça o índice desejado é necessário que a cinta contenha os principais ingredientes do sistema original. Porém, essa representação não pode ser feita de maneira ingênua, pois assim como a cinta é a imagem do plano obtida pelo mapeamento logarítmico é preciso descobrir de que forma o defeito linear do sistema original se mapeará no sistema finito (cinta). Vejamos o que acontece no caso do defeito tipo linha (figura 5.a). Nesse caso a transformação $w = \frac{L}{2\pi} \ln z$ ($Z = x + iy = \exp(t + i\theta)$) leva o defeito $x=0, y$ qualquer em duas linhas paralelas (t qualquer, $\theta = \pi/2$ e t qualquer, $\theta = -\pi/2$) desde que a parte $y > 0$ do defeito corresponde a $\theta = \pi/2$ e a parte $y < 0$ a $\theta = -\pi/2$ (veja Figura 7). O caso do defeito tipo escada pode ser entendido da mesma forma já que no estudo das propriedades críticas o parâmetro de rede é totalmente imaterial e as ligações defeituosas estão "essencialmente" localizadas na reta $x=0, y$ qualquer. Podemos também lançar mão de uma propriedade importante das transformações conforme que é a conservação local dos ângulos (veja Churchill 1960). Como uma consequência disso o defeito tipo escada também se mapeia na cinta como dois defeitos do mesmo tipo e paralelos. É importante frisar que as condições de contorno devem ser periódicas, uma vez que o sistema original é infinito, e portanto deveremos trabalhar apenas com número par de sítios. A razão para isso é que com um número ímpar de sítios nunca conseguiríamos reproduzir a geometria da Figura 7, pois a distância entre os dois defeitos não seria a mesma pelos dois caminhos (o direto e aquele que usa o contorno).

Figura 7. A transformação logarítmica mapeia o plano Z com um defeito linear ($x=0$) em uma cinta com dois defeitos equidistantes.

Falta ainda mostrar que usando esse tipo de sistema encontram-se realmente o expoente η^* do defeito. Para isso Loic Turban (1985) lançou mão da forma da função de correlação para pontos próximos a um defeito, que pode ser obtida pela imposição da invariância conforme (veja Apêndice-B), e é dada por

$$\langle \phi(Z_1) \phi(Z_2) \rangle = |x_1 x_2|^{-2x_\phi} \tilde{F} \left[\frac{(y_1 - y_2)^2 + x_1^2 + x_2^2}{x_1 x_2} \right], \quad (\text{III-13})$$

ou ainda

$$\langle \phi(Z_1) \phi(Z_2) \rangle = |x_1 x_2|^{-2x_\phi} \tilde{F} \left[\frac{e^{t_1 - t_2} + e^{t_2 - t_1} - 2 \sin \theta_1 \sin \theta_2}{\cos \theta_1 \cos \theta_2} \right] \quad (\text{III-14})$$

Quando o argumento (ρ) de $\tilde{F}$ tender a infinito então, $\tilde{F}$ deve decair como ρ^{-2x^*} , onde x^*_ϕ é o expoente do operador ϕ no defeito. Nesse limite a equação (III-14) se reescreve

$$\begin{aligned} \langle \phi(Z_1) \phi(Z_2) \rangle \sim & \left| \cos \theta_1 \cos \theta_2 \right|^{2(x^*_\phi - x)} \exp\{-2x^*_\phi |t_1 - t_2| + \\ & + 2x_\phi |t_1 + t_2| \} . \end{aligned} \quad (\text{III-15})$$

Lembrando que a função de correlação no plano infinito (Z) está relacionada com a função de correlação na cinta através de (II-25) obtém-se finalmente

$$\langle \phi(w_1) \phi(w_2) \rangle_{T_C} \sim \exp\left\{ - \frac{2\pi}{L} x^*_\phi |t_1 - t_2| \right\} . \quad (\text{III-16})$$

Da equação (III-16) segue que o inverso do comprimento de correlação é dado por

$$\xi_L^{-1} = \frac{2\pi}{L} x^*_\phi . \quad (\text{III-17})$$

Portanto no caso da correlação spin-spin a amplitude do comprimento de correlação fornece diretamente o expoente η^* do defeito, na forma

$$A_\sigma = \frac{L}{\xi_L(T_C)} = 2\pi x^*_\phi = \pi \eta^* \quad (\text{III-18})$$

onde $\xi_L(T_C) = \left[\ln \frac{\lambda_0}{\lambda_1} \right]_{T_C}^{-1}$ e λ_0 (λ_1) é o maior (segundo maior)

autovalor da matriz de transferência do modelo de Ising com L sítios e dois defeitos. Para o caso do efeito em linha teremos

$$\hat{T}_a = \exp\left\{ \tilde{K} \sum_{i \neq 1, \frac{L}{2}+1} \sigma_i^x + \tilde{K}' \left(\sigma_1^x + \sigma_{\frac{L}{2}+1}^x \right) \right\} \exp\left\{ K \sum_i^Z \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z \right\} \quad (\text{III-19})$$

onde $K = \frac{J}{kT}$ e $\tilde{K}$, $\tilde{K}'$ são respectivamente os duais dos acoplamentos K e K' , segundo a relação

$$e^{-2\tilde{K}} = \tanh 2K. \quad (\text{III-20})$$

No caso do defeito tipo escada teremos

$$\hat{T}_b = \exp \left\{ \tilde{K} \sum_i \sigma_i^x \right\} \exp \left\{ K \sum_{i \neq 1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + K' \left(\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_{\frac{L}{2}}^z + 1 \right) \sigma_{\frac{L}{2}+1}^z \right\} e^{\frac{L}{2} + 1} \quad (\text{III-21})$$

As matrizes σ^x , σ^y são matrizes de Pauli e convém trabalhar na base em que σ^x é diagonal pois dessa maneira o produto $(\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z)$ sempre vira dois spins, conservando a paridade $(\pi \sigma_i^x)$ que nessa base é automaticamente diagonal. Os resultados de Turban (1985) estão reunidos na Figura 8 onde se pode notar uma boa concordância para $\alpha = K'/K$ grande, e apenas razoável para α pequeno. Para se ter bons resultados na região $\alpha < 1$ seria preciso avançar até redes maiores o que se torna uma tarefa impossível dentro do esquema de matriz de transferência (as matrizes ficam muito grandes inviabilizando o processo de diagonalização). A essa altura começamos a pensar numa forma alternativa, para resolver o problema, que não sofra das limitações da matriz de transferência. A solução, que tem sido empregada com sucesso em outros casos, é trabalhar com o limite Hamiltoniano, isto é, diagonalizar o operador $(\hat{A} + \hat{B})$ ao invés de $\exp(\hat{A}) \exp(\hat{B})$. A vantagem desse procedimento é que a Hamiltoniana só liga N elementos de uma matriz que tem dimensão $2^N \times 2^N$, e essa matriz "rarefeita" pode ser facilmente diagonalizada por um método iterativo conhecido como algoritmo de Lanczos. Se a propriedade que estamos calculando for universal o limite Hamiltoniano não mudará o seu valor. Porém esse não é o nosso caso uma vez que o índice que desejamos obter depende fortemente do valor da constante de acoplamento, e sem nenhuma dúvida é sensível ao li-

mite de alta anisotropia. Por outro lado o cálculo do expoente crítico da função de auto-correlação do spin da Hamiltoniana (quântica) defeituosa do modelo de Ising no campo transversal a $T=0$ é em si uma questão interessante e relacionada com problemas bem conhecidos como o modelo XY com acoplamento modificado e a absorção de raios-X (Peschel e Schotte 1984, Schotte e Schotte 1969). No próximo capítulo usaremos o método das amplitudes para tratar o problema do defeito linear na versão Hamiltoniana.

Figura 8a. Resultados para η^* obtidos com o método das amplitudes (defeito do tipo linha).

Figura 8b. Resultados para η^* obtidos com o método das amplitudes (defeito do tipo escada).

CAPÍTULO IV

PROPRIEDADES CRÍTICAS NÃO UNIVERSAIS DA HAMILTONIANA
DE ISING EM CAMPO TRANSVERSO COM DEFEITO

IV-A) Relação entre Mecânica Estatística e teoria de Campo Hamiltoniana na Rede

O problema da obtenção do espectro da matriz de transferência " $\hat{T}$ " pode ser visto de maneira totalmente equivalente ao processo de diagonalização do seguinte Hamiltoniano Quântico:

$$\hat{H} = - \frac{1}{\tau} \ln \hat{T} \quad (\text{IV-1})$$

Entretanto o operador $\hat{T}$ é em geral composto por produtos de exponenciais de operadores que não comutam, por exemplo:

$$\hat{T} = \exp(\hat{A})\exp(\hat{B}) , \quad \text{com } [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0,$$

ou

$$\hat{T} = \exp(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots), \quad (\text{IV-2})$$

o que torna a determinação dos seus autovalores uma tarefa difícil. No limite de tempo contínuo, $\tau \rightarrow 0$, as parcelas $\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \dots$ não contribuirão significativamente desde que $\hat{A}$ e $\hat{B}$ sejam proporcionais a τ . Assim, $\hat{H}$ resulta

$$\hat{H} = - \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\hat{A} + \hat{B}}{\tau} , \quad (\text{IV-3})$$

onde τ é um parâmetro infinitesimal escolhido convenientemente. Como τ está associado ao parâmetro da rede na direção temporal

(Kogut 1979), e o espaçamento da rede é um parâmetro irrelevante na transição de fase, o limite $\tau \rightarrow 0$ não deve afetar as características universais do comportamento crítico do sistema. Dentro dessa aproximação é possível estabelecer um paralelismo entre as duas teorias que exploramos a seguir

i) Energia livre

Vimos na seção anterior que o operador $\hat{T}$ pode ser aproximado por $\hat{T} = \exp\{-\tau\hat{H}\}$. Uma vez que $\hat{T}$ é hermitiano ($\hat{T}^\dagger = \hat{T}$) $\hat{H}$ também o é, e portanto a base que diagonaliza simultaneamente $\hat{T}$ e $\hat{H}$ é formada por um conjunto de autovetores $\{|i\rangle\}$ ortonormais cujos autovalores são reais. Os espectros de $\hat{H}$ e $\hat{T}$ são dados respectivamente por $\{E_i\}$ e $\{\exp(-E_i\tau)\}$. Além disso podemos escrever

$$\hat{T} = \sum_i |i\rangle e^{-E_i\tau} \langle i| \quad (\text{IV-4})$$

onde $\{|i\rangle\}$ é a base que diagonaliza $\hat{T}$ e $\hat{H}$.

Na realidade, para o cálculo da energia livre precisamos da expressão de $\hat{T}^M$ onde M é o número de camadas na direção temporal. Assim,

$$\hat{T}^M = \sum_i |i\rangle e^{-E_i M\tau} \langle i| \quad (\text{IV-5})$$

Para obter a função de partição Z do sistema é preciso calcular o traço de $\hat{T}^M$

$$Z = \text{tr}\{\hat{T}^M\} = \sum_l \langle l | \hat{T}^M | l \rangle$$

que resulta em

$$Z = \sum_l e^{-E_l M\tau}$$

Caso o estado fundamental " E_0 " seja único (não seja degenerado) à medida que $M \rightarrow \infty$ a parcela dominante no somatório acima será $e^{-E_0 M \tau}$, isto é, a energia livre fica

$$f = - \frac{1}{M} kT \ln Z = \tau kT E_0 \quad (\text{IV-6})$$

ii) Função de correlação

Suponhamos agora que se queira calcular a função de correlação, na rede quadrada, entre os operadores $\hat{\phi}(n_1 n_0)$ e $\hat{\phi}(0,0)$ como mostra a Figura 9.

Para tanto temos que obter o seguinte traço:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\phi}(n_1 n_0) \hat{\phi}(0,0) \rangle &= \text{tr} \{ \hat{T}^P \hat{\phi}(n) \hat{T}^{n_0} \hat{\phi}(0) \hat{T}^L \} / Z \\ &= \{ \sum_m \langle m | \hat{T}^P \hat{\phi}(n) \hat{T}^{n_0} \hat{\phi}(0) \hat{T}^L | m \rangle \} / Z \\ &= \{ \sum_{i,m} e^{-E_m (P+L) \tau} e^{-n_0 E_i \tau} \langle m | \hat{\phi}(n) | i \rangle \langle i | \hat{\phi}(0) | m \rangle \} / Z. \end{aligned} \quad (\text{IV-7})$$

Como $P+n_0+L = M$ podemos tomar $M \rightarrow \infty$ concomitantemente com $P \rightarrow \infty$, $L \rightarrow \infty$ e n_0 fixo. Feito isso e admitindo a unicidade do estado fundamental a equação (IV-7) pode ser escrita como:

$$\langle \hat{\phi}(n, n_0) \hat{\phi}(0,0) \rangle \sim \sum_i e^{-n_0 (E_i - E_0) \tau} \langle 0 | \hat{\phi}(n) | i \rangle \langle i | \hat{\phi}(0) | 0 \rangle \quad (\text{IV-8})$$

Figura 9. Reticulado bidimensional usado para calcular a função de correlação.

Um resultado de interesse em (IV-8) aparece quando tomamos os operadores sobre a mesma linha na direção temporal ($n=0$), isto é:

$$\langle \phi(n_0) \phi(0) \rangle \simeq \sum_i e^{-n_0(E_i - E_0)} |\langle 0 | \phi(0) | i \rangle|^2. \quad (\text{IV-9})$$

No limite em que $n_0 \gg 1$, $\langle \phi(n_0) \phi(0) \rangle \simeq e^{-n_0 K_\phi}$, onde K_ϕ é o inverso do comprimento de correlação, que de acordo com (IV-9) é proporcional à diferença entre as energias do estado fundamental e a do primeiro estado excitado $|l\rangle$ cujo elemento de matriz $\langle 0 | \phi(0) | l \rangle$ não se anule, isto é:

$$K_\phi = (E_l - E_0)\tau = 1/\xi = G\tau \quad (\text{VI-10})$$

Dessas duas últimas seções fica claro que para calcular grandezas termodinâmicas e estatísticas do modelo clássico (em d dimensões), na região crítica, basta encontrar os autovalores mais baixos de $\hat{H}$. Entretanto ainda que $\hat{H}$ seja um operador mais simples do que $\hat{T}$ eles têm a mesma dimensão, o que acaba tornando a sua diagonalização também proibitiva a partir de um certo tamanho. Para se ter uma idéia se quisermos tratar uma cinta (ou uma cadeia no caso Hamiltoniano) de L sítios com q estados por sítios a dimensão de $\hat{T}$ (e $\hat{H}$) será q^L . Isso significa que para modelos com 2 estados por sítio (tipo Ising) deveremos diagonalizar matrizes $2^L \times 2^L$ (que para $L=14$ já têm cerca de 250.000 entradas). O grande número de zeros de $\hat{H}$ permite, no entanto, que seus autovalores possam ser calculados através do modelo de Lanczos (1950), que por muito tempo foi abandonado em favor de outras técnicas melhores (Wilkinson 1975), mas que é extremamente adequado quando se quer calcular apenas os menores autovalores. Na próxima seção discutiremos em detalhes o método mencionado acima.

IV-B) O Algoritmo de Lanczos

O método de Lanczos (1950) para diagonalização de matrizes consiste em procurar uma base na qual a Hamiltoniana seja tridiagonal. Escrevendo essa nova base como $\{x_i\}$ e montando a matriz X cujas colunas sejam os elementos de base teremos*

$$X^+ H X = T \quad (\text{IV-11})$$

com

$$X^+ X = I \quad (\text{IV-12})$$

Na equação IV-11 H é a matriz a ser diagonalizada e T é a forma

* É importante não confundir T (de tridiagonal) com a matriz de transferência ($\hat{T}$).

que H toma na nova base. De (IV-12) segue que os vetores de Lanczos são ortonormais

$$x_i^+ x_j = \delta_{ij} \quad (\text{IV-13})$$

e de (IV-11) podemos escrever

$$HX = XT \quad (\text{IV-14})$$

que em virtude de T ser tridiagonal

$$T = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & 0 \\ & b_2 & a_3 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & b_{N-1} \\ & & & b_{N-1} & a_N \end{pmatrix} \quad (\text{IV-15})$$

fornece as equações

$$\begin{aligned} Hx_1 &= a_1 x_1 + b_1 x_2 \\ Hx_2 &= b_1 x_1 + a_2 x_2 + b_2 x_3 \\ Hx_i &= b_{i-1} x_{i-1} + a_i x_i + b_i x_{i+1} \end{aligned} \quad (\text{IV-16})$$

Essas equações podem ser usadas recursivamente para determinar todos os a_i , b_i e os vetores x_i . Para exemplificar escolhemos um vetor unitário x_1 e tomamos o produto escalar dele com a primeira equação de Lanczos para obter

$$a_1 = x_1^+ Hx_1 \quad (\text{IV-17})$$

Naturalmente se H for hermitiano a_1 será real. A seguir calcula-

-se b_1 e x_2 através de

$$b_1 x_2 = Hx_1 - a_1 x_1 \quad , \quad (\text{IV-18})$$

já que $x_2^+ x_2 = 1$. De maneira análoga são determinados todos os outros elementos e vetores. Ignorando a existência de erros de arredondamento a única coisa que pode fazer o algoritmo falhar é obter um b_i igual a zero. Isso acontecerá se o primeiro vetor de Lanczos x_1 for escolhido ortogonal a algum autovetor de H e será inevitável se H tiver degenerescência. A solução é escolher o próximo x ortogonal a todos os outros já encontrados e prosseguir o cálculo. Isso pode ser difícil de implementar na prática mas nós nunca encontramos essa situação. Há muitas vantagens no método de Lanczos. A maior delas é a desobrigação de armazenar todos os elementos da matriz (mesmo quando nulos), pois aqui nós nunca escrevemos H como matriz. Tudo o que precisa ser guardado são os vetores (a diagonal e a subdiagonal) que formam a matriz T e 3 vetores de Lanczos (x_{i+1}, x_i, x_{i-1}). Esses vão cedendo lugar aos outros à medida em que i vai crescendo, uma vez que nós em geral só estamos interessados nos autovalores. Entretanto o maior mérito do algoritmo está na rapidez com que os autovalores de $\tilde{T}$ (a parte de T calculada até um certo $\tilde{N}$) convergem para os autovalores de T no caso dos autovalores mais baixos. Isso significa que após um número relativamente pequeno de interações (aproximadamente 50) já obtemos com precisão 10^{-12} o estado fundamental e os primeiros estado excitados de H independentemente (ou quase) da dimensão da matriz. Essa convergência pode ser monitorada a cada passo (a partir de um certo $\tilde{N}$) o que dá confiabilidade ao resultado e serve também para eliminar autovalores expúreos que eventualmente apareçam. Para tornar o método ainda mais eficiente podemos fazer uso das simetrias de H . Nos casos por nós estudados, a paridade $P = \pi_1^x \sigma_1^x$ é conservada e como os autovalores de σ^x são

tal podemos dividir o espectro em dois setores (par e ímpar) que o algoritmo não mistura. Finalmente devemos mencionar que um recurso muito útil, em problemas análogos a esse, é o de escrever cada estado como uma combinação linear daqueles que diferem entre si apenas por uma translação (por exemplo $+++++$, $+++++$, $+++++$, $+++++$, $+++++$ e $+++++$). Como todos eles podem ser obtido por rotação de apenas um basta guardar o "representativo". Entretanto no caso desta dissertação não foi possível usar esse recurso uma vez que o sistema não é homogêneo. Essa dificuldade praticamente multiplica por L (número de sítios) as tabelas que devemos guardar na construção dos vetores de Lanczos e reduz bastante o L máximo que pode ser investigado.

IV-C) Esquema de Nigthingale

A matriz de transferência do modelo de Ising com defeito linear do tipo linha é dado por

$$\hat{T}_a = \exp\left\{\tilde{K}_2' \sum_{i=1}^L \sigma_i^x\right\} \exp\left\{K_1 \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z\right\}, \quad (\text{IV-19})$$

enquanto que para o defeito do tipo escada é

$$\hat{T}_b = \exp\left\{\tilde{K}_2 \sum_{i=1}^L \sigma_i^x\right\} \exp\left\{K_1' \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + K_1 \sum_{i=2}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z\right\}. \quad (\text{IV-20})$$

Nas equações (IV-19 e 20) $K_1 = J_1/kT$ é a interação normal ao longo da camada, e $\tilde{K}_2$ é o dual do acoplamento na direção perpendicular dado por

$$e^{-2\tilde{K}_2} = \tanh 2K_2. \quad (\text{IV-21})$$

Se agora tomarmos o limite de alta anisotropia em que

$$K_1 \rightarrow 0$$

e

$$K_2 \rightarrow \infty$$

com

$$K_1 e^{-2K_2} = \text{finito}$$

podemos aproximar $\hat{T}_a$ por

$$\hat{T}_a \approx \exp\left\{K_1 \left[\sum_{i=1}^L \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z + \frac{K_2}{K_1} \sum_{i=2}^L \sigma_i^X + \frac{\tilde{K}_2}{K_1} \sigma_1^X \right] \right\} \quad (\text{IV-22})$$

e

$\hat{T}_b$ por

$$\hat{T}_b \approx \exp\left\{K_1 \left[\sum_{i=2}^L \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z + \frac{K_1'}{K_1} \sigma_1^Z \sigma_2^Z + \frac{\tilde{K}_2}{K_1} \sum_{i=1}^L \sigma_i^{X'} \right] \right\} \quad (\text{IV-23})$$

Quando $\tilde{K}_2 = K$ e $L \rightarrow \infty$ o gap se anula, correspondendo à divergência do comprimento de correlação do modelo bidimensional que ocorre quando $\sinh 2K_1 \sinh 2K_2 = 1$ (no limite $K_1 \rightarrow 0$ e $K_2 \rightarrow \infty$ essa relação se escreve $K_1 e^{2K_2} = 1$ ou seja $K_1 = e^{-2K_2}$ que por sua vez é igual a $\tilde{K}_2$ de acordo com a relação de dualidade (IV-21)). Como se sabe do estudo do modelo bidimensional a presença do defeito linear não altera o acoplamento crítico e portanto para estudarmos a variação do índice da susceptibilidade magnética do defeito, com o acoplamento defeituoso, vamos sempre calcular

$$\chi_L = \left. \frac{\partial^2 \ln E_0}{\partial h_1^2} \right|_{\tilde{K}_2 = K_1} \quad (\text{IV-24})$$

onde h_1 é o campo magnético que só atua no spin 1, e E_0 é o menor autovalor de

$$\hat{H}_a = - \sum_{i=1}^L \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z - \sum_{i=2}^L \sigma_i^X - \lambda \sigma_1^X \tag{IV-25}$$

ou de

$$\hat{H}_b = - \sum_{i=2}^L \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z - \sum_{i=1}^L \sigma_i^X - \lambda \sigma_1^Z \sigma_2^Z . \tag{IV-26}$$

Usando as equações (IV-24) e (II-21) podemos extrair a razão γ/ν que está relacionada com η_H^* através de

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1 - \eta_H^* \tag{IV-27}$$

Os resultados, embora razoáveis, convergem lentamente para os valores exatos e o tempo de CPU cresce muito quando L aumenta. Na Tabela II estão alguns exemplos que ilustram o que acabamos de afirmar.

TABELA II - Estimativas do expoente y_{h_1} obtidas com o método usual do F.S.S. (defeito do tipo linha)

<div><div>λ</div><div>REDES</div></div>	1.0	2.0
2,3	0.146	0.326
3,4	0.195	0.397
4,5	0.215	0.427
5,6	0.225	0.444
EXATO	0.250	0.497

IV-D) Razão de Amplitudes

Seguindo as idéias de Cardy e Turban investigamos o comportamento crítico da auto-correlação do spin no sítio "impuro" usando o método das amplitudes. A diferença é que, conforme mencionamos no Capítulo II (seção II-C), no contexto hamiltoniano as amplitudes por si só não são universais. É preciso eliminar de alguma forma os fatores não universais e uma saída pode ser dividir uma amplitude pela outra. De fato a razão das amplitudes parece estar relacionada ao quociente das dimensões anômalas correspondentes (Penson e Kolb 1984, Alcaraz e Drugowich de Felício 1984). A dificuldade está na obtenção de mais uma informação a respeito dos índices críticos pois até então temos uma equação e duas incógnitas. No caso do sistema com um defeito linear o mapeamento logarítmico obriga-nos a colocar dois defeitos equidistantes e as amplitudes deverão ser proporcionais às dimensões anômalas do operador no sítio impuro. Dessa maneira, diagonalizando os Hamiltonianos

$$\hat{H}_a = - \sum_{i=1}^L \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z - \sum_{i \neq 1, L/2+1} \sigma_i^X - \lambda (\sigma_1^X + \sigma_{\frac{L}{2}+1}^X) \quad (\text{IV-28})$$

e

$$\hat{H}_b = - \sum_{i \neq 1, L/2+1}^L \sigma_i^Z \sigma_{i+1}^Z - \sum_i \sigma_i^X - \Gamma (\sigma_1^Z \sigma_2^Z + \sigma_{L/2+1}^Z \sigma_{L/2+2}^Z) \quad (\text{IV-29})$$

e calculando a razão

$$\frac{G_1}{G_2} = \frac{E_0^- - E_0^+}{E_1^+ - E_0^+} \quad (\text{IV-30})$$

estaremos obtendo uma estimativa para a razão x_σ^*/x_ϵ^* . O cálculo

de η_H^* que é duas vezes o valor de x_σ^* envolve o conhecimento de x_ϵ^* que é a dimensão anômala do operador energia no defeito ($\sigma_1^Z \sigma_2^Z$). Acontece que, de acordo com a análise do Capítulo III esse operador é exatamente o operador marginal, que obrigatoriamente deve ter dimensão de escala igual à dimensão do defeito ($x_\epsilon^* = d^* = 1$). Em síntese, o fato de x_σ^* variar implica na conservação de x_ϵ^* (que para o modelo de Ising homogêneo vale um), o que acaba permitindo a determinação de η_H^* através da equação

$$\eta_H^* = \frac{2G_1}{G_2} \quad (\text{IV-31})$$

As Tabelas III e IV mostram os nossos resultados juntamente com o valor exato obtido de (Peschel e Schotte 1984)

$$\eta_H^* = \left[\frac{2}{\pi} \tan^{-1} \lambda \right]^2 \quad (\text{IV-32})$$

para a Hamiltoniana $\hat{H}_a$ e

$$\eta_H^* = \left[\frac{2}{\pi} \tan^{-1} \left(\frac{1}{\Gamma} \right) \right]^2 \quad (\text{IV-33})$$

para a Hamiltoniana $\hat{H}_b$. A concordância é muito boa nos dois casos para quaisquer valores de λ e de Γ , o que não ocorria com os resultados de Turban para a matriz de transferência. É interessante observar também que a soma das equações (IV-32) e (IV-33) dá o expoente que governa o decaimento da função de correlação do modelo XY com um acoplamento modificado. (veja Peschel e Schotte 1984).

TABELA III - Estimativas do expoente η_H^* obtidas com o método das amplitudes (defeito em linha).

λ REDE	0.25	0.50	1.50	3.00
4	0.02594	0.09205	0.40658	0.66417
6	0.02495	0.08939	0.39805	0.64446
8	0.02478	0.08826	0.39513	0.63869
10	0.02462	0.08796	0.39379	0.63623
12	0.02454	0.08771	0.39307	0.63496
14	0.02448	0.08756	0.39307	0.63422
EXATO	0.02432	0.08712	0.39145	0.63229

TABELA IV - Estimativas do expoente η_H^* obtidas com o método das amplitudes (defeito tipo escada).

Γ REDE	0.00	0.50	1.50	2.00
4	1.10557	0.51259	0.14768	0.09379
6	1.05209	0.50414	0.14342	0.08991
8	1.03109	0.50102	0.14196	0.08864
10	1.02067	0.49954	0.14129	0.08825
12	1.01474	0.49871	0.14093	0.08778
14	1.01104	0.49821	0.14071	0.08760
EXATO	1.00000	0.49678	0.14012	0.08712

Em tempo, queremos salientar que na equação (IV-30), $E_0^+(E_0^-)$ é o autovalor mais baixo do setor par (ímpar). Como último comentário dessa seção lembramos que o caso $r=0$ do Hamiltoniano $\hat{H}_b$ corresponde a dois sistemas desacoplados, cada um deles por sua vez correspondendo a um sistema homogêneo porém semi-infinito. Nesse caso o expoente η_H^* (da superfície) é conhecido e vale 1, portanto a razão G_1/G_2 pode ser usada para determinar x_ϵ^* . A resposta é $x_\epsilon^* \text{ (superfície)} = 2$ que está de acordo com a previsão de Cardy (1984b) e resultados de Burkhardt e Guim (1985).

IV-E) O Hamiltoniano de Potts ($q=3$) com impureza

No caso homogêneo a dimensão do operador energia é $x_\epsilon = 4/5$ de forma que

$$y^* = d^* - x_\epsilon = 1 - 4/5 = 1/5 > 0 \quad (\text{IV-34})$$

De acordo com a análise do Capítulo III não devemos esperar expoente variável com a introdução do defeito. Naturalmente teremos comportamento distinto para os casos $J' > J$, $J' = J$ e $J' < J$. Nós investigamos o caso homogêneo e obtivemos para a razão das amplitudes o valor 0.16 (que é uma boa aproximação para $(2/15)/(4/5) = 0.166$). Esses valores foram conjecturados por den Nijs (1979) e são confirmados por todos os cálculos aproximados feitos até hoje. Por outro lado o cálculo da razão para o caso $J' = 0$ (defeito tipo escada) fornece

$$\frac{x_\sigma^S}{x_\epsilon^S} = 0.32 \dots \quad (\text{IV-35})$$

Adotando o valor $x_\epsilon^S = 2$, que segundo Cardy (1984b) vale para Potts com q qualquer obtemos

$$x_{\sigma}^S \text{ (Potts-3)} = 0.64 \quad (\text{IV-36})$$

um valor próximo de $2/3$, conforme previsto também por Cardy (1984b). O caso $J' \gg J$, que deveria fornecer os índices relativos ao outro ponto fixo, conduz a resultados não físicos (a razão tende a zero). Esse comportamento não é surpreendente uma vez que para sistemas governados por um ponto fixo no acoplamento infinito pode ocorrer uma quebra do finite-size scaling. A Hamiltoniana (Potts-3) que diagonalizamos foi

$$\begin{aligned} \hat{H} = & - \sum_{i \neq 1, L/2+1} (S_i S_{i+1}^+ + S_i^+ S_{i+1}) - \frac{J'}{J} (S_1 S_2^+ + S_1^+ S_2) - \\ & - \frac{J'}{J} (S_{L/2+1} S_{L/2+2}^+ + S_{L/2+1}^+ S_{L/2+2}) - \sum_i (R_i + R_i^+) \end{aligned} \quad (\text{IV-37})$$

onde

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & e^{12\pi/3} & 0 \\ 0 & 0 & e^{14\pi/3} \end{pmatrix} \quad (\text{IV-38})$$

e

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IV-39})$$

Os estados de cada sítio não podem mais ser representados por um único bit de um inteiro e isso aumenta bastante o tempo de CPU.

IV-F) Conclusão

Para finalizar este trabalho queremos salientar que o uso da invariância conforme junto com as técnicas de matriz de transferência ou Hamiltonianos associados se revelou extremamente satisfatório para a determinação de índices críticos não universais como era o caso do modelo tratado nesta dissertação. O modelo de Potts-3 estados embora não exiba esse comportamento exótico também se mostrou tratável por essa técnica, ainda que nossa investigação nesse caso não tenha sido tão abrangente como no caso do modelo de Ising. Dando sequência a esse trabalho estamos atualmente estudando o comportamento da dimensão anômala do operador de spin para o modelo de Ashkin-Teller com superfície e fazendo um estudo detalhado do espectro do Potts-3 estados para comparar com as predições de Friedan Qiu e Shenker (1984).

APÊNDICE-A

EXPOENTES CRÍTICOS VARIÁVEIS

Kadanoff e Wegner (1971) mostraram que a variação dos índices críticos pode ocorrer desde que exista na Hamiltoniana um operador marginal, isto é, um termo da forma $\lambda \sum_r \tilde{u}(r)$ se transforma como $(1/r^d)$ sob uma transformação de escala $r'=r/b$, onde d é a dimensão da rede. Neste apêndice nós mostraremos que os argumentos podem ser perfeitamente reproduzidos para um operador que escale como $(1/r^{d^*})$ desde que o termo da Hamiltoniana $\lambda \sum_r \tilde{u}(r)$ só envolva um subsistema com dimensão d^* . Para entender o significado especial desse operador, cujo efeito não é aumentado nem diminuído por uma transformação do GR, vamos recordar que a transição de fase envolve flutuações de grandezas locais tais como densidade de energia, magnetização que denotaremos por $O_\alpha(\vec{r})$ onde α rotula a quantidade envolvida. Consideremos agora um produto de n operadores

$$O = \prod_{\alpha=1}^n O_{\alpha_i}(\vec{r}_i) \quad (A-1)$$

onde cada par de operadores do produto é separado por uma distância $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| = R$ muito maior que o parâmetro de rede e muito menor que o comprimento de correlação. Dessa forma teremos

$$\langle O \rangle_\lambda \approx \frac{1}{R^x}, \quad x = \sum_{j=1}^n x_{\alpha_j} \quad (A-2)$$

Se os índices dependerem de λ (coeficiente do operador marginal) então

$$\frac{\partial \langle O \rangle_\lambda}{\partial \lambda} = - \langle O \rangle_\lambda \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial x_{\alpha j}}{\partial \lambda} \right) \ln R + \dots \quad (\text{A-3})$$

a derivada do valor médio do operador O em relação a λ conterá um termo logarítmico. Mas por outro lado podemos escrever

$$\frac{\partial \langle O \rangle_\lambda}{\partial \lambda} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{\sum O e^{-\beta H}}{\sum e^{-\beta H}} = \sum_r \langle O \tilde{u} \rangle_\lambda + \dots \quad (\text{A-4})$$

Expandindo o produto de operadores de acordo com Kadanoff (1969) substituímos

$$O_\alpha(\vec{r}_1) O_\beta(\vec{r}_2) = \sum_\gamma A_{\alpha\beta,\gamma} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) O_\gamma(\vec{r}_1 + \vec{r}_2/2) \quad (\text{A-5})$$

onde

$$A_{\alpha\beta,\gamma} = \frac{a_{\alpha\beta,\gamma} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| / |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| x_\alpha + x_\beta - x_\gamma} \quad (\text{A-6})$$

é fixado por "scaling". Dessa maneira o produto $O\tilde{u}$ que aparece na equação (A-4) poderá conter um termo como

$$\frac{O_\alpha(\vec{r}_1 + \vec{r}_2/2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{d^*}} \quad (\text{A-7})$$

que substituído de volta em (A-4) fornecerá um termo logarítmico, desde que a região englobada pela soma seja d^* -dimensional. No caso do modelo de Ising com defeito linear o acoplamento entre os spins vizinhos tem dimensão $x_\epsilon = 1$ e o defeito linear envolve apenas os spins situados na linha ($d^* = 1$). Essa análise permite afirmar que esse modelo é um candidato a apresentar não universalidade.

APÊNDICE-B

TRANSFORMAÇÃO CONFORME E FORMA DA FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO

A transformação conforme especial, que em d dimensões é suficiente para fixar a forma da função de 3 pontos é

$$\frac{\vec{r}^2}{r'^2} = \frac{\vec{r}^2}{r^2} + \vec{a} \quad (\text{B-1})$$

onde $\vec{a}$ é um vetor arbitrário fixo. No caso do sistema com um defeito linear ao longo da direção y , a transformação B-1, que mapeia hiperesferas em hiperesferas, somente preservará a geometria se $\vec{a}$ for paralelo ao defeito. Escrevendo $\vec{a} = (0, \epsilon)$ onde ϵ é um infinitesimal a transformação pode ser reescrita

$$x' = x + 2\epsilon xy \quad (\text{B-2})$$

$$y' = y + \epsilon(y^2 - x^2) \quad (\text{B-3})$$

cujo Jacobiano até a mesma ordem é $(1+4\epsilon y)$. Dessa maneira a relação entre a função de correlação de dois pontos antes e depois da transformação (veja equação II-25) será

$$G(x_1, x_2, y_1 - y_2) = (1+4\epsilon y_1)^x (1+4\epsilon y_2)^x G(x'_1, x'_2, y'_1 - y'_2) \quad (\text{B-4})$$

onde

$$G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle \phi(\vec{r}_1) \phi(\vec{r}_2) \rangle \quad (\text{B-5})$$

Expandindo a equação (B-4) até 1ª ordem em ϵ teremos para G a seguinte equação diferencial

$$(y_1^2 y_2^2 - x_1^2 x_2^2) \frac{\partial G}{\partial u} + 2x_1 y_1 \frac{\partial G}{\partial x_1} + 2x_2 y_2 \frac{\partial G}{\partial x_2} + 4x(y_1 + y_2)G = 0, \tag{B-6}$$

onde $u = y_1 - y_2$. Como G não depende de $(y_1 + y_2)$ (B-6) é equivalente a

$$u \frac{\partial G}{\partial u} + x_1 \frac{\partial G}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial G}{\partial x_2} + 2xG = 0 \tag{B-7a}$$

$$(x_2^2 - x_1^2) \frac{\partial G}{\partial u} + u \left(x_1 \frac{\partial G}{\partial x_1} - x_2 \frac{\partial G}{\partial x_2} \right) = 0 \tag{B-7b}$$

A primeira equação estabelece que G é uma função homogênea de grau $2x$, ou seja

$$G = u^{-2x} F(x_1/u, x_2/u). \tag{B-8}$$

Substituindo esse resultado em (B-7b) obtemos uma equação para F que pode ser resolvida pelo método das características, e o resultado é

$$F(x_1/u, x_2/u) = \tilde{F}((u^2 + x_1^2 + x_2^2)/x_1 x_2) \tag{B-9}$$

Devemos notar que ainda não temos a forma de $\tilde{F}$. Entretanto, para satisfazer o caso limite da superfície, podemos concluir que

$$\tilde{F}(\rho) \sim \rho^{-x^*} \tag{B-10}$$

onde x^* é o expoente crítico do defeito.

REFERÊNCIAS

- ALCARAZ, F.C. e DRUGOWICH DE FELÍCIO, J.R. (1984) J.Phys. A177, L651
- BARBER, M.N. (1983) em "Phase Transitions and Critical Phenomena" Vol.8 editado por C.Domb e J.Lebowitz (A.Press)
- BARIEV, R.Z. (1979) Sov.Phys. JETP 50, 613
- BAXTER, R.J. (1971) Phys.Rev.Letters 26, 832
- BELAVIN, A.; POLIAKOV, A e ZAMOLODCHIKOV, A. (1984) Nucl.Phys. B241, 333
- BURKHARDT, T. e EISENRIEGLER, E. (1981) Phys.Rev. B24, 1236
- BURKHARDT, T. e GUIM, I. (1985) J.Phys. A18, L33
- CARDY, J. (1984a) J.Phys. A17, L385
- CARDY, J. (1984b) Nucl.Phys. B240, 514
- CHURCHILL, R. (1960) "Complex variables and applicattions" (McGraw-Hill)
- den NIJS, M.P. (1979) J.Phys. A12, 1857
- DERRIDA, B. e de SEZE, J. (1982) J.Physique 43, 475
- DOTSENKO, V. (1984) Nucl.Phys. B235, 54
- FISHER, M.E. (1971) em "Proceedings of the Enrico Fermi school" editado por M.S.Green (Academic Press)
- FRIEDAN, D.; QIU, Z. e SHENKER, S. (1984) Phys.Rev.Lett. 52, 1575
- HAMMER, C.J. e BARBER, M.N. (1980) J.Phys. A13, L169
veja também
- dos SANTOS, R.R. e SNEDDON, L. (1981) Phys.Rev. B22, 4430
- dos SANTOS, R.R. e STINCHCOMBE, R. (1981) J.Phys. A14, 3329

- ISING, E. (1925) Z.Phys. 31, 253
- KADANOFF, L.P. (1969) Phys.Rev.Lett. 23, 1430
- KADANOFF, L.P. e WEGNER, F. (1971) Phys.Rev. B4, 3989
- KOGUT, J.B. (1979) Rev.Mod.Phys. 51, 659
- LAM, P. e ZHANG, Z.Q. (1983) Z.Phys. B52, 315
- LANCZOS, C. (1950) J.Res.NBS 45, 255
- MCCOY, B e PERK, J. (1980) Phys.Rev.Lett. 44, 840
- MCCOY, B. e WU, T.T. (1973) The two-dimensional Ising Model
(Harvard University)
- NIGHTINGALE, P. (1976) Physica 83A, 561
- NIGHTINGALE, P. (1982) J.App.Phys. 53 7927
- NIGHTINGALE, P. e BLÖTE, H. (1982) J.Phys.A15, L33
- NIGHTINGALE, P. e BLÖTE, H. (1983) J.Phys.A16, L657
- OLIVEIRA, M.J.; FURMAN, D. e GRIFFITHS, R. (1978) Phys.Rev.Lett.40, 977
- PENSON, K. e KOLB, M. (1984) Phys.Rev.B30, 1470
- PESCHEL, I. e SCHOTTE, K. (1984) Z.Phys. B54, 305
- PICHARD, J. e SARMA, G. (1981) J.Phys.C14, L617
- POLIAKOV, A. (1970) JETP Letters 12, 381
- ROOMANY, R.; WILD, H. e HOLLOWAY, L. (1980) Phys.Rev. D21, 1557
- SCHOTTE, K e SCHOTTE, U. (1969) Phys.Rev.185, 509
- SVRAKIC, N. (1983) J.Phys.A16, L171
- TURBAN, L. (1985) J.Phys.A18, L325

UZELAC,K.; JULIEN,R. e PFEUTY,P. (1981) J.Phys. A14, L17

WILKINSON,J.H. (1965) The Algebraic Eigenvalue Problem (Oxford)

WILSON,K. e KOGUT,J.B. (1974) Phys.Rep. 12C, 71

YEOMANS,J. e STINCHCOMBE,R. (1979) J.Phys. C12, L169