

**Novo Grupo de Renormalização de Campo
Médio com Cadeias Linear e Dupla**

Dóris de Andrade Paes

Dezembro de 1994

**Novo Grupo de Renormalização de Campo Médio com
Cadeias Linear e Dupla**

DÓRIS DE ANDRADE PAES

Orientador: Prof. João Antônio Plascak

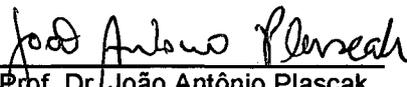
Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE
SANTA CATARINA, como requisito parcial para a obtenção
do grau de MESTRE EM FÍSICA.

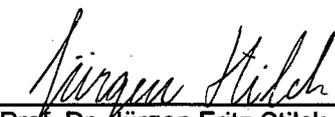
Dezembro de 1994

**NOVO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO DE CAMPO MÉDIO COM
CADEIAS LINEAR E DUPLA**

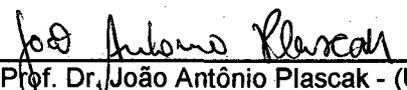
Doris de Andrade Paes

Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do Grau de Mestre em Física, com especialização em Física Teórica, e aprovada em sua forma final pelo orientador e demais membros da Banca Examinadora.

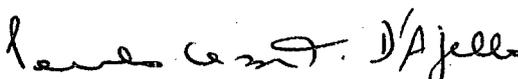

Prof. Dr. João Antônio Plascak
(Orientador/UFMG)


Prof. Dr. Jürgen Fritz Stilck
Coordenador

Banca Examinadora:


Prof. Dr. João Antônio Plascak - (UFMG)


Prof. Dr. Wagner Figueiredo - (UFSC)


Prof. Dr. Paulo Cesar T. D'Ájello - (UFSC)

Aos meus queridos pais,
à minha irmã gêmea Ceres
e ao Eduardo.

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. João Antônio Plascak, pela paciência, incentivo à conclusão deste trabalho e pela grande influência intelectual que exerceu sobre mim.

A minha querida mãe, pelo encorajamento nos momentos difíceis.

Ao meu pai, meu grande mestre.

A Sônia que com sua amizade e compreensão tornou essa caminhada mais fácil e mais agradável.

Ao Marcelo Stemmer pelo carinho, atenção e incentivo.

Ao Diego, Jaqueline, Waguinho e Luiz Themystoklis pela valiosa ajuda na parte computacional.

Aos professores Paulo César D'ajello e Wagner Figueiredo pela amizade, apoio e interesse pela minha formação científica. Em particular, ao Prof. Wagner Figueiredo pela leitura crítica do manuscrito.

Ao Prof. Osiel Bonfim pelas valiosas discussões com respeito a parte numérica.

Ao Prof. Michel Spira pela ajuda em algumas partes desse trabalho.

Agradecimento especial ao CNPq pelo apoio financeiro.

Sumário

RESUMO	v
ABSTRACT	vi
1 INTRODUÇÃO	1
2 Modelo de Ising e Desigualdade de Bogoliubov	5
2.1 Modelo de Ising	5
2.2 Desigualdade de Bogoliubov	7
3 Aproximação de campo médio para o Modelo de Ising	9
3.1 H_0 com spins livres	9
3.2 H_0 com pares de spins	11
3.3 H_0 com cadeias lineares	13
3.4 H_0 com cadeias duplas	16
3.5 Resultados tipo Campo Médio	19
4 Grupos de Renormalização de Campo Médio	21
4.1 Grupo de Renormalização	21
4.2 Grupo de Renormalização de Campo Médio	22
4.3 Novo Grupo de Renormalização de Campo Médio	24

5	Grupos de Renormalização de Campo Médio aplicados ao Modelo de Ising	26
5.1	Grupo de Renormalização de Campo Médio	26
5.1.1	Blocos de 1 e 2 spins	26
5.1.2	Cadeias linear e dupla	28
5.2	Novo Grupo de Renormalização de Campo Médio	29
5.2.1	Blocos de 1 e 2 spins	29
5.2.2	Cadeias linear e dupla	30
5.3	Resultados e Conclusões	31
	REFERÊNCIAS	32

Lista de Figuras

1.1	(a): Esboço do diagrama de fases de um fluido simples no plano $p \times T$, e (b): Diagrama de fases de um ferromagneto simples no plano $H \times T$	2
3.1	Cadeia dupla de Ising.	16
5.1	Blocos de um e dois spins. b e b' são as magnetizações dos spins das fronteiras.	27
5.2	Cadeias linear e dupla com as respectivas magnetizações das fronteiras numa rede plana quadrada (condições periódicas na horizontal).	28

Lista de Tabelas

3.1	Valores de K_c para o Modelo de Ising d-dimensional ($d = 1,2,3$) hipercúbico.	20
5.1	Valores de K_c e ν para o modelo de Ising em $d=2$ e $d=3$ segundo o GRCM e o NGRCM para diferentes blocos.	31

Resumo

O novo grupo de renormalização de campo médio (NGRCM) foi recentemente proposto para o estudo das transições de fases de segunda-ordem. Com o parâmetro de ordem obtido através da teoria de campo médio para blocos finitos, bons resultados foram obtidos quando se aplicou o NGRCM ao modelo de Ising d -dimensional ($d=1,2,3$). Neste trabalho nós usamos o NGRCM no estudo do modelo de Ising calculando o parâmetro de ordem para a cadeia linear e a cadeia dupla. Neste caso, resultados melhores foram obtidos mesmo quando comparados a outros métodos.

Abstract

The new mean field renormalization group (NMFRG) has been recently proposed in the study of second-order phase transitions. By computing the order parameter for finite clusters through mean field theory, quite good results have been obtained when applying the NMFRG to the Ising model in d -dimensions ($d=1,2,3$). In this work we use the NMFRG to study the Ising model by computing the order parameter for linear and double chain clusters. In this case, better results are obtained even when compared to other approaches.

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

É fato conhecido que as substâncias encontradas na natureza apresentam várias fases, as quais podem ser representadas em um diagrama. No caso de um fluido simples, como a água, o diagrama de fases no plano temperatura-pressão está esquematizado na figura 1(a). As linhas grossas neste diagrama são linhas de coexistência de fases sendo que, na passagem de uma fase para outra, certas quantidades termodinâmicas envolvidas (como volume e entropia) apresentam descontinuidades [veja, por exemplo, referência 1].

Além das transições de fases em fluidos, um dos fenômenos mais interessantes na Física do Estado Sólido é o ferromagnetismo. Em alguns metais como o Fe e o Ni, uma fração finita de spins dos átomos tornam-se espontaneamente polarizadas na mesma direção, dando origem a um campo magnético macroscópico [2]. Esta fase, chamada ferromagnética, acontece somente à baixas temperaturas. Em altas temperaturas, os spins estão orientados desordenadamente, não produzindo portanto nenhum campo magnético, dando origem à chamada fase paramagnética. A figura 1(b) ilustra o diagrama de fases de um ferromagneto simples no plano $H \times T$. A linha cheia neste diagrama é uma linha de coexistência de duas fases ferromagnéticas onde numa delas os spins estão orientados em uma direção e, na outra, os spins possuem orientação oposta. Ao cruzarmos esta linha observamos uma descontinuidade na magnetização do sistema.

Este processo de mudança de fase ordinário, chamado transição de primeira ordem, pode ser entendido tratando as várias fases como entidades separadas cada qual com sua própria energia livre de Gibbs que, na transição, tornam-se iguais.

Nas figuras 1(a) e 1(b) temos linhas de coexistência de duas fases as quais terminam abruptamente num ponto crítico, caracterizado por uma temperatura crítica T_c . A transição neste ponto é conhecida como transição de segunda ordem e é caracterizada por uma variação contínua das grandezas termodinâmicas como a entropia e volume (para os fluidos) e magnetização (ferromagneto). Os pontos críticos ocorrem num grande número de sistemas como fluidos, mistura de fluidos, ligas, materiais ferromagnéticos e ferroelétricos, etc.

No caso de ferromagnetos, que é o assunto do presente trabalho, a magnetização é o chamado parâmetro de ordem do sistema, uma vez que a passagem por T_c causa ao sistema uma mudança em seu estado de organização. Neste caso, na ausência de campo magnético, o sistema passa da fase ferromagnética (fase ordenada para $T < T_c$) para a fase paramagnética (fase desordenada para $T > T_c$).

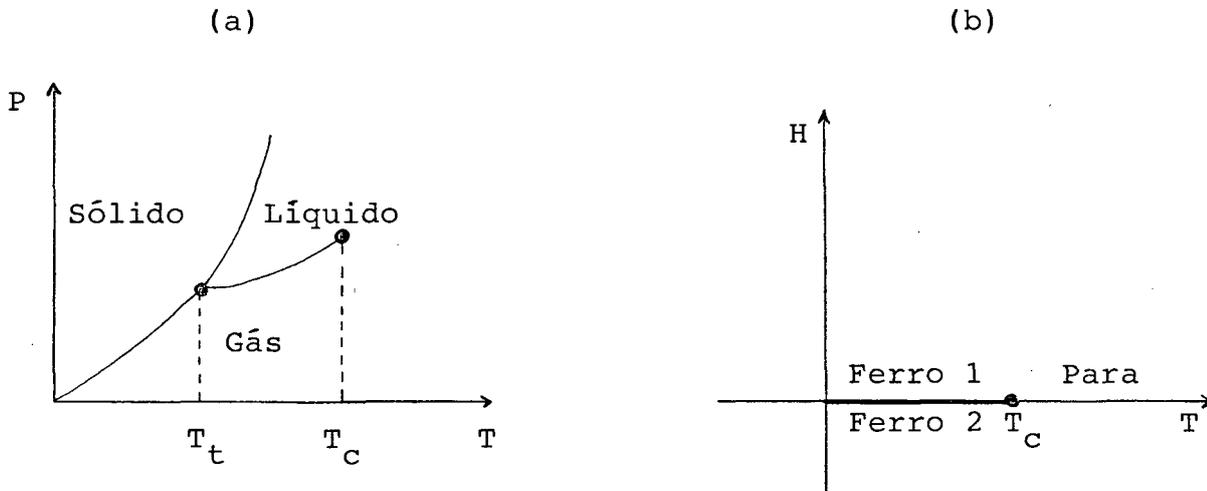


Figura 1.1: (a) Esboço do diagrama de fases de um fluido simples no plano $P \times T$. As linhas grossas indicam transição de primeira ordem. T_t e T_c designam as temperaturas dos pontos triplo e crítico, respectivamente. (b) Diagrama de fases de um ferromagneto simples no plano $H \times T$.

Nas proximidades do ponto crítico, podemos descrever o comportamento de uma série de grandezas termodinâmicas através dos "expoentes críticos"[3]. Assim, o expoente β da magnetização M é definido pela relação:

$$M \approx B|t|^\beta, \quad (1.1)$$

onde $t = (T - T_c)/T_c$ e B uma constante. O expoente γ está relacionado à susceptibilidade $\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T, H=0}$, isto é:

$$\begin{aligned} \chi &\approx C_+ |t|^{-\gamma} & T > T_c, \\ \chi &\approx C_- |t|^{-\gamma} & T < T_c. \end{aligned} \quad (1.2)$$

O expoente δ está associado à isoterma crítica, sendo dado pela relação:

$$H \approx |M(T = T_c, H)|^\delta, \quad (1.3)$$

e o expoente α , que está relacionado ao calor específico, é definido por:

$$\begin{aligned} C_{H=0} &\approx A_+ |t|^{-\alpha} & T > T_c, \\ C_{H=0} &\approx A_- |t|^{-\alpha'} & T < T_c. \end{aligned} \quad (1.4)$$

O problema na descrição dos fenômenos críticos é justamente a determinação dos valores assumidos por estes expoentes. Tais expoentes não são independentes e relacionam-se entre si através das chamadas relações de escala. Estas relações podem ser obtidas de um esquema mais geral, conhecido como hipótese de escala, que supõe que na vizinhança do ponto crítico a parte singular da energia livre é uma função homogênea generalizada de seus parâmetros [4]. Dentre estas relações podemos citar:

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 & \text{Rushbrooke,} \\ \alpha + \beta(1 + \gamma) &= 2 & \text{Griffiths,} \\ \gamma &= \beta(\delta - 1) & \text{Widom,} \end{aligned}$$

onde os expoentes para $T > T_c$ são iguais aos expoentes para $T < T_c$. Em geral, expoentes críticos acurados só podem ser obtidos em poucos modelos estatísticos não triviais que podem ser resolvidos exatamente. Daí a necessidade de se elaborar métodos aproximados. Dentre eles estão as teorias de campo médio, que foram oportunas qualitativamente, prevendo uma série de propriedades dos diagramas de fases, entre elas a existência de um ponto crítico, bem como a validade das leis de escala. Contudo, falharam quantitativamente, pois além de fornecer expoentes críticos em franco desacordo com os resultados experimentais e com os poucos resultados exatos, fornecem também os mesmos expoentes independentemente da dimensão do espaço e da dimensão do parâmetro de ordem. É bem sabido que vários sistemas diferentes apresentam os mesmos expoentes críticos, indicando a sua independência das características microscópicas. Na realidade, de acordo com a universalidade do ponto crítico, somente algumas quantidades determinam o seu comportamento como: a dimensão espacial (d); a dimensão do parâmetro de ordem (n) e o alcance das interações.

A teoria do grupo de renormalização (GR) [5] veio formar uma base conceitual para as idéias de universalidade e para as relações de escala. Pode-se dizer que o esquema do GR forma as bases microscópicas que estavam faltando nas teorias de escala. Além disso, ele

proporciona uma técnica muito eficiente para calcular valores para os expoentes críticos e nisto reside todo o seu sucesso.

Dentre os vários métodos de grupo de renormalização existem os chamados grupos de renormalização fenomenológicos, onde a informação da criticalidade de sistemas infinitos é obtida através do conhecimento de grandezas físicas de sistemas equivalentes finitos. Assim, temos o grupo de renormalização de campo médio (GRCM)[6] e o novo grupo de renormalização de campo médio (NGRCM)[7], que são os métodos de GR estudados neste trabalho. Eles foram aplicados a vários modelos estatísticos e bons resultados foram obtidos mesmo ao se considerar sistemas finitos bem pequenos. Em particular, o NGRCM foi aplicado no estudo do Modelo de Ising d-dimensional considerando blocos de L^d spins (L é a aresta de cada bloco) e resultados melhores (tanto para T_c quanto para os expoentes) foram obtidos se comparados ao GRCM utilizando blocos de mesmo tamanho [7].

O objetivo do presente trabalho é aplicar o NGRCM no estudo do Modelo de Ising utilizando os resultados obtidos para a cadeia linear e cadeia dupla, de forma análoga ao já realizado com o GRCM.

Capítulo 2

Modelo de Ising e Desigualdade de Bogoliubov

Neste capítulo trataremos, de forma sucinta, do Modelo de Ising e da Desigualdade de Bogoliubov, sendo esta última um método variacional elegante onde aproximações de campo médio, cada vez melhores, podem ser obtidas de um modo sistemático.

2.1 Modelo de Ising

O modelo de Ising tem sido generalizado e amplamente estudado. O hamiltoniano desse modelo pode ser escrito como:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum S_i, \quad (2.1)$$

onde a primeira soma se estende sobre os pares vizinhos mais próximos, sendo que cada par entra uma só vez na soma; J é a correspondente energia de interação ou constante de acoplamento; h é o campo externo e $S_i = \pm 1$. Em tal modelo, a disposição dos spins delineia uma estrutura geométrica chamada rede. Para uma dimensão, os spins estão uniformemente espaçados e alinhados ao longo de uma reta. Em duas dimensões, um arranjo possível é aquele cuja célula unitária da rede seja quadrada, estando os vértices ocupados por spins. No caso tridimensional uma possibilidade é a rede ser cúbica, com os spins ocupando os seus vértices. Note que para $J > 0$ e $h=0$ os spins tendem a se alinhar no mesmo sentido e obtemos o modelo ferromagnético. Um par de vizinhos mais próximos, quando paralelos, contribui com $-J$ para a energia total do sistema, proporcionando uma grande magnetização. Um par de vizinhos próximos quando antiparalelos, contribui com $+J$ para a energia total do sistema. Já para $J < 0$ há uma tendência dos spins a se alinharem antiparalelamente de modo que obtemos o modelo antiferromagnético.

Há dois estados possíveis que apresentam menor energia (temperatura nula) no caso ferromagnético, ou todos os spins valendo +1 ou com todos os spins valendo -1. Mas se alterarmos o sentido de alguns spins, teremos estados de maior energia, ocorrendo uma diminuição na magnetização espontânea (temperatura não nula).

Para temperaturas suficientemente baixas, esta estabilização levará a um fenômeno cooperativo chamado magnetização espontânea. Embora cada spin interaja apenas com os seus vizinhos mais próximos, um dado momento magnético pode influenciar o alinhamento dos spins que estão separados por distâncias macroscópicas. Sendo assim, os spins são ditos estarem correlacionados. A máxima distância para a qual tal correlação pode ser detectada é chamada comprimento de correlação. Regiões que estão separadas por uma distância maior que este comprimento são independentes. As correlações de longo alcance entre spins estão associadas com uma ordem de longo alcance que produz uma magnetização líquida na rede, mesmo na ausência de campo magnético.

Tanto para altas, quanto para baixas temperaturas, o comprimento de correlação é aproximadamente zero, ao passo que para $T = T_c$ quaisquer dois spins estão correlacionados, não importando a distância entre eles.

À medida que a temperatura se eleva, a magnetização espontânea decresce e a temperatura na qual não há mais magnetização espontânea é chamada temperatura crítica ou temperatura de Curie. Com o aumento da temperatura, se $T_c > 0$ há uma transição de fase de ordem para desordem.

Resolver este modelo significa calcular a função partição, ou seja,

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta H), \quad (2.2)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura e a soma se estende sobre todas as configurações possíveis dos spins S_i . De posse da função partição obtem-se a energia livre de Gibbs:

$$G = -k_B T \ln Z \quad (2.3)$$

e, por conseguinte, toda a termodinâmica do sistema.

A solução exata da versão unidimensional [8] obtida por Ising em 1925 não apresenta qualquer singularidade nas funções termodinâmicas, resultando na inexistência de uma transição a um estado ordenado para qualquer temperatura diferente de zero, ou seja, nenhuma transição é observada para $T \neq 0$. Para duas dimensões, a solução analítica exata a campo externo nulo foi encontrada por Onsager [9], apresentando uma transição de fase de segunda ordem, cuja característica é a singularidade apresentada por certas

quantidades termodinâmicas, tais como o calor específico e a susceptibilidade, na temperatura crítica. No modelo tridimensional, a dificuldade de se obter uma solução exata, devido às dificuldades inerentes ao próprio modelo, que leva em conta um grande número de interações, levou ao aprimoramento de inúmeras técnicas aproximadas, as quais podemos citar: o campo molecular de Weiss (ou aproximação de campo médio), que é a mais rudimentar; de Bethe-Peierls, que reproduz o resultado exato do modelo de Ising em uma dimensão a campo nulo [10]; e expansões em série de altas e baixas temperaturas, fornecendo a localização mais precisa da temperatura de transição [11].

2.2 Desigualdade de Bogoliubov

A solução de problemas em geral quando existe interações entre spins só se conhece para alguns poucos modelos se o campo externo é nulo. Podemos, entretanto, obter uma solução aproximada usando os princípios variacionais, sendo um deles baseado na desigualdade de Bogoliubov [12]. Ilustraremos aqui o caso clássico embora os mesmos resultados podem ser obtidos ao se estudar modelos quânticos. Para facilitar, definimos o operador:

$$V = H - H_o, \quad (2.4)$$

onde H é o hamiltoniano que se quer estudar e H_o é o hamiltoniano tentativa do qual conhecemos a solução exata. Ele é parametrizado e deve ser o mais próximo possível de H .

A função partição e a média térmica em relação ao hamiltoniano tentativa H_o são dadas, respectivamente por:

$$Z_o = \sum_{\{S\}} \exp(-\beta H_o), \quad (2.5)$$

$$\langle A \rangle_o = (1/Z_o) \sum_{\{S\}} A \exp(-\beta H_o). \quad (2.6)$$

Notamos que:

$$Z_o \langle \exp -\beta V \rangle_o = \sum_{\{S\}} \exp(-\beta V) \exp(-\beta H_o) = \sum_{\{S\}} \exp(-\beta H) \quad (2.7)$$

ou seja:

$$Z = Z_o \langle \exp(-\beta V) \rangle_o. \quad (2.8)$$

Usando a relação matemática:

$$e^x \geq 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (2.9)$$

e sabendo que $\overline{x^2} > \bar{x}^2$, podemos escrever:

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_o = \langle 1 - \beta V + \frac{\beta^2 V^2}{2!} + \dots \rangle_o, \quad (2.10)$$

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_o = 1 - \beta \langle V \rangle_o + \frac{\beta^2 \langle V^2 \rangle_o}{2!} + \dots, \quad (2.11)$$

$$e^{-\beta \langle V \rangle_o} = 1 - \beta \langle V \rangle_o + \frac{\beta^2 \langle V \rangle_o^2}{2!} + \dots \quad (2.12)$$

Logo teremos:

$$\langle e^{-\beta V} \rangle_o \geq e^{-\beta \langle V \rangle_o}. \quad (2.13)$$

Multiplicando por Z_o e usando a relação (2.8) teremos:

$$Z = Z_o \langle e^{-\beta V} \rangle_o \geq Z_o e^{-\beta \langle V \rangle_o}. \quad (2.14)$$

Tomando o logaritmo e multiplicando ambos os lados por $-k_B T$ temos para a energia livre de Gibbs:

$$G \leq G_o + \langle H - H_o \rangle_o \equiv \Phi, \quad (2.15)$$

que é conhecida como desigualdade de Bogoliubov. A energia livre de campo médio é dada pelo lado direito desta desigualdade quando minimizada em relação aos parâmetros do hamiltoniano H_o . Assim, quanto mais próximo H_o estiver de H , melhor será a aproximação de campo médio. Aproximações para o modelo de Ising com diferentes tentativas H_o serão discutidas no próximo capítulo.

Capítulo 3

Aproximação de campo médio para o Modelo de Ising

Neste capítulo vamos determinar, na aproximação de campo médio, a energia livre do modelo de Ising dado por:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i, \quad (3.1)$$

definido numa rede hipercúbica de coordenação q . Utilizaremos o método variacional baseado na desigualdade de Bogoliubov, descrito na seção anterior, com hamiltonianos tentativa H_o compostos por somas de spins livres, pares de spins, cadeias lineares e, finalmente, cadeias duplas. Muitos dos cálculos realizados neste capítulo serão utilizados posteriormente dentro do esquema dos grupos de renormalização de campo médio (capítulo 5).

3.1 H_o com spins livres

A escolha mais simples para o hamiltoniano tentativa consiste numa soma de spins não interagentes

$$H_o = \sum_{spins} H_1, \quad (3.2)$$

sendo H_1 o hamiltoniano para um spin

$$H_1 = -\eta S_1, \quad (3.3)$$

onde η representa o parâmetro variacional. Tem-se nesse caso

$$Z_o = Z_1^N, \quad (3.4)$$

onde N é o número total de spins e

$$Z_1 = \sum_{S_1=\pm 1} e^{\beta\eta S_1} = 2 \cosh \beta\eta. \quad (3.5)$$

O valor médio $\langle S_1 \rangle_o \equiv m$ é dado por:

$$m = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z_1}{\partial \eta} \right) = \tanh \beta\eta. \quad (3.6)$$

Numa rede hipercúbica de N spins temos $\left(\frac{Nq}{2}\right)$ pares de spins mais próximos de modo que podemos escrever:

$$\langle H - H_o \rangle_o = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \langle S_i S_j \rangle_o - (h - \eta) \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle_o, \quad (3.7)$$

$$\langle H - H_o \rangle_o = -J \frac{Nq}{2} m^2 - Nm(h - \eta). \quad (3.8)$$

Temos então para o lado direito da equação (2.15)

$$\Phi = G_o - J \frac{Nq}{2} m^2 - Nm(h - \eta), \quad (3.9)$$

onde

$$G_o = -k_B T \ln Z_o = -N k_B T \ln [2 \cosh \beta\eta]. \quad (3.10)$$

Minimizando Φ com relação a η , isto é, impondo que $\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 0$, resulta em:

$$-Nm - NqJm \left(\frac{\partial m}{\partial \eta} \right) - (h - \eta)N \left(\frac{\partial m}{\partial \eta} \right) + Nm = 0, \quad (3.11)$$

ou seja

$$\eta = Jqm + h. \quad (3.12)$$

A energia livre aproximada é obtida pelas equações (3.6),(3.9),(3.10) e (3.12), de onde todas as propriedades termodinâmicas podem ser calculadas. Em particular, para campo externo nulo ($h=0$) as equações (3.6) e (3.12) fornecem uma equação auto-consistente para se determinar m .

Perto da transição ($h=0, T \leq T_c$) a magnetização m é muito pequena, e como $\eta = Jqm$ temos $\eta \approx 0$ de modo que podemos expandir (3.6) em série de Taylor para obter:

$$m = \beta\eta - \frac{1}{3}(\beta\eta)^3 \quad (3.13)$$

ou

$$m = \beta Jqm - \frac{1}{3}(\beta Jqm)^3, \quad (3.14)$$

$$m = \left[\frac{3(\beta Jq - 1)}{(\beta Jq)^3} \right]^{1/2}, \quad (3.15)$$

Da equação acima obtém-se a temperatura crítica T_c quando $m = 0$, ou seja, $\beta_c Jq = 1$. Chamando $\beta J = K$, temos:

$$K_c = 1/q, \quad (3.16)$$

e, da equação (3.15), vemos que o expoente crítico da magnetização é $1/2$.

3.2 H_o com pares de spins

Com o intuito de se levar em conta algumas interações no hamiltoniano tentativa, podemos tomar H_o como uma soma de pares desconexos de spins, isto é:

$$H_o = \sum_{\text{pares}} H_2, \quad (3.17)$$

onde H_2 é o hamiltoniano de um par de spins,

$$H_2 = -JS_1S_2 - \eta(S_1 + S_2), \quad (3.18)$$

e temos $N/2$ pares desconexos no hamiltoniano tentativa. Temos nesse caso (já utilizando a relação $K = \beta J$)

$$Z_o = Z_2^{\frac{N}{2}}, \quad (3.19)$$

onde

$$Z_2 = \sum_{S_1, S_2 = \pm 1} e^{K S_1 S_2 + \beta \eta (S_1 + S_2)}, \quad (3.20)$$

$$Z_2 = 2e^{-K} + 2e^K \cosh 2\beta \eta, \quad (3.21)$$

e

$$G_o = \left(-\frac{Nk_B T}{2} \right) \ln[2e^{-K} + 2e^K \cosh 2\beta \eta]. \quad (3.22)$$

A magnetização com relação a H_o , isto é, $m \equiv \langle S_1 \rangle_o = \langle S_2 \rangle_o$ é dada por:

$$m = \frac{1}{2\beta} \frac{\partial \ln Z_2}{\partial \eta} = \left(\frac{\sinh 2\beta \eta}{\cosh 2\beta \eta + e^{-2K}} \right). \quad (3.23)$$

Para o valor médio $\langle H - H_o \rangle_o$ temos:

$$\langle H - H_o \rangle_o = -J \frac{Nq}{2} m^2 + J \frac{N}{2} m^2 - hNm + \eta Nm, \quad (3.24)$$

$$\langle H - H_o \rangle_o = -\frac{NJ}{2} (q-1)m^2 - hNm + \eta Nm, \quad (3.25)$$

de modo que a função Φ pode ser escrita como:

$$\Phi = G_o - \frac{NJ}{2} (q-1)m^2 - hNm + \eta Nm. \quad (3.26)$$

Minimizando a equação acima com relação ao parâmetro variacional η obtemos:

$$-Nm - JN(q-1)m \frac{\partial m}{\partial \eta} + Nm + \eta N \frac{\partial m}{\partial \eta} + hN \frac{\partial m}{\partial \eta} = 0, \quad (3.27)$$

ou seja,

$$\eta = Jm(q-1) + h. \quad (3.28)$$

As equações (3.22), (3.23), (3.26) e (3.28) fornecem agora a energia livre do sistema sendo a magnetização dada pelas equações (3.23) e (3.28). Para $h=0$ e próximo da transição temos $m \approx 0$ e $\eta \approx 0$ de modo que a equação (3.23) pode ser expandida em potências de η resultando em:

$$m = \frac{1}{1 + e^{-2K}} 2\beta\eta + \frac{4}{3} \frac{(e^{-2K} - 2)}{(e^{-2K} + 1)^3} (\beta\eta)^3, \quad (3.29)$$

e lembrando que $\eta = Jm(q-1)$ temos:

$$m = \frac{1}{1 + e^{-2K}} 2K(q-1)m + \frac{4}{3} \frac{(e^{-2K} - 2)}{(e^{-2K} + 1)^3} [K(q-1)]^3 m^3. \quad (3.30)$$

A temperatura crítica nesta aproximação é obtida quando o coeficiente de ordem m do lado direito da equação acima for igual a um, isto é,

$$2K_c(q-1) = 1 + e^{-2K_c}, \quad (3.31)$$

e uma análise semelhante à feita nas equações (3.14) e (3.15) mostra que o expoente crítico da magnetização continua sendo $1/2$.

3.3 H_o com cadeias lineares

Esta aproximação consiste em considerar o hamiltoniano tentativa como soma de cadeias lineares paralelas [13] e fazer uso do método da matriz de transferência para se obter a solução exata do modo unidimensional [14]. Assim temos:

$$H_o = \sum_{\text{cadeias lineares}} H_L, \quad (3.32)$$

sendo o hamiltoniano para uma cadeia linear dado por:

$$H_L = -J \sum_{i=1}^{N'} S_i S_{i+1} - \eta \sum_{i=1}^{N'} S_i, \quad (3.33)$$

onde η é o parâmetro variacional, N' é o número de spins na cadeia e admitimos condições periódicas de contorno $S_1 = S_{N'+1}$.

A função partição para H_L pode ser desenvolvida para obtermos:

$$Z_L = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H_L} = \sum_{\{S_i\}} e^{K \sum_{i=1}^{N'} S_i S_{i+1} + \beta \eta \sum_{i=1}^{N'} S_i}, \quad (3.34)$$

$$Z_L = \sum_{\{S_i\}} e^{K S_1 S_2 + \frac{1}{2} \beta \eta (S_1 + S_2)} e^{K S_2 S_3 + \frac{1}{2} \beta \eta (S_2 + S_3)} \dots e^{K S_{N'} S_1 + \frac{1}{2} \beta \eta (S_{N'} + S_1)}, \quad (3.35)$$

$$Z_L = \sum_{\{S_1, S_2, \dots, S_{N'}\}} \mathbf{T}(S_1, S_2) \mathbf{T}(S_2, S_3) \dots \mathbf{T}(S_{N'}, S_1), \quad (3.36)$$

onde, pelo fato de $S_i = \pm 1$, a matriz $\mathbf{T}(S_i, S_{i+1})$ pode ser escrita como:

$$\mathbf{T}(S_i, S_{i+1}) = \begin{pmatrix} T(+, +) & T(+, -) \\ T(-, +) & T(-, -) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{K+\beta\eta} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-\beta\eta} \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

A soma sobre um determinado S_i equivale agora a um produto matricial de forma que a equação (3.36) resulta em:

$$Z_L = \sum_{\{S_1\}} \mathbf{T}^{N'}(S_1, S_1) = \text{Tr} \mathbf{T}^{N'} = \lambda_o^{N'} + \lambda_1^{N'}, \quad (3.38)$$

onde Tr é o traço da matriz e λ_o e λ_1 são os autovalores de \mathbf{T} . Sendo λ_o o maior autovalor e considerando $N' \rightarrow \infty$ temos:

$$Z_L = \lambda_o^{N'} \left(1 + \frac{\lambda_1^{N'}}{\lambda_o^{N'}} \right) = \lambda_o^{N'}, \quad (3.39)$$

ou seja, a função partição é dada simplesmente, no limite termodinâmico, pelo maior autovalor elevado ao número de spins. No caso da matriz (3.37) é fácil obter:

$$\lambda_o = e^K \cosh \beta \eta + [e^{2K} \sinh^2 \beta \eta + e^{-2K}]^{1/2}, \quad (3.40)$$

(o autovalor λ_1 é dado pela expressão acima com o sinal "+" trocado por "-").

Se no hamiltoniano H temos N spins, no hamiltoniano tentativa temos $(N^{1/d})^{d-1}$ cadeias lineares cada uma com $N^{1/d}$ spins (o que equivale também a termos $(N^{1/d})^{d-1}N^{1/d} = N$ pares de spins cujas interações foram levadas em conta no H_o). Assim obtemos:

$$G_o = -Nk_B T \ln \lambda_o, \quad (3.41)$$

$$m = \langle S_i \rangle_o = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \ln \lambda_o}{\partial \eta}, \quad (3.42)$$

$$m = \frac{\sinh \beta \eta}{[\sinh^2 \beta \eta + e^{-4K}]^{1/2}}, \quad (3.43)$$

e então:

$$\langle H - H_o \rangle_o = -J \frac{Nq}{2} m^2 + JNm^2 + N\eta m - Nhm, \quad (3.44)$$

de modo que podemos escrever:

$$\Phi = G_o - \frac{JN}{2} (q-2)m^2 + N\eta m - Nhm. \quad (3.45)$$

A minimização de Φ em relação a η resulta em:

$$\eta = J(q-2)m + h, \quad (3.46)$$

e a energia livre é agora dada pelas equações (3.40),(3.41),(3.43),(3.45) e (3.46) sendo a magnetização dada por (3.43) e (3.46).

Para $h=0$ e próximo da transição podemos expandir (3.43) em potências de η para obter:

$$m = e^{2K} \beta \eta + \frac{1}{6} (e^{2K} - 3e^{6K}) (\beta \eta)^3 + \dots \quad (3.47)$$

e como agora $\eta = J(q-2)m$ temos:

$$m = e^{2K} K (q-2)m + \frac{1}{6} (e^{2K} - 3e^{6K}) [K(q-2)m]^3, \quad (3.48)$$

de onde obtemos, na aproximação com cadeias lineares, a temperatura crítica:

$$e^{2K_c} K_c (q-2) = 1, \quad (3.49)$$

e, de (3.48) temos novamente o expoente da magnetização igual a 1/2.

3.4 H_o com cadeias duplas

Uma extensão imediata da aproximação da seção anterior é tomar o hamiltoniano tentativa como soma de cadeias duplas paralelas onde a técnica da matriz de transferência pode novamente ser utilizada[13]. Temos então:

$$H_o = \sum_{\text{cadeias duplas}} H_D, \quad (3.50)$$

sendo

$$H_D = -J \sum_{i=1}^{N'} (S_i^a S_{i+1}^a + S_i^b S_{i+1}^b + S_i^a S_i^b) - \eta \sum_{i=1}^{N'} (S_i^a + S_i^b), \quad (3.51)$$

o hamiltoniano para uma cadeia dupla de spins (conforme a figura 3.1) consistindo de $2N'$ spins ($N' = N^{1/d}$) com condições periódicas de contorno ($S_1^a = S_{N'+1}^a, S_1^b = S_{N'+1}^b$). H_o possui agora $(N^{1/d})^{d-1}/2$ cadeias duplas, cada uma com $2N^{1/d}$ spins sendo que as interações de $(N^{1/d})^{d-1}/2 \times 3N^{1/d} = 3N/2$ pares de spins são levadas em conta no hamiltoniano tentativa.

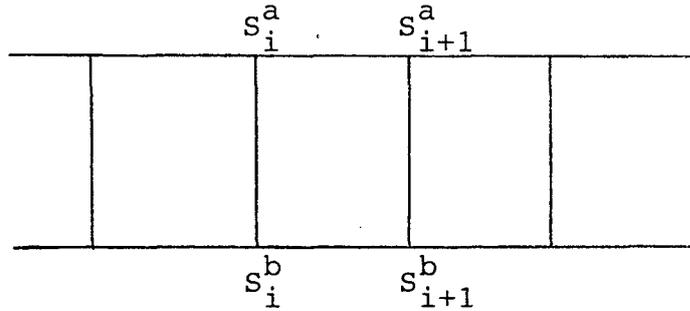


Figura 3.1: Cadeia dupla de Ising.

A energia livre G_o , associada a H_o , pode ser obtida utilizando a técnica da matriz de transferência de modo análogo ao utilizado no caso de cadeias lineares. Obtem-se então:

$$G_o = \frac{-Nk_B T}{2} \ln \lambda_o, \quad (3.52)$$

onde λ_o é o maior autovalor da matriz de transferência definida por:

$$\mathbf{T}(S_i^a, S_i^b; S_{i+1}^a, S_{i+1}^b) = e^{K[S_i^a S_{i+1}^a + S_i^b S_{i+1}^b + \frac{1}{2}(S_i^a S_i^b + S_{i+1}^a S_{i+1}^b)] + \frac{\eta}{2}(S_i^a + S_{i+1}^a + S_i^b + S_{i+1}^b)}, \quad (3.53)$$

ou seja:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{3K+2\beta\eta} & e^{\beta\eta} & e^{\beta\eta} & e^{-K} \\ e^{\beta\eta} & e^K & e^{-3K} & e^{-\beta\eta} \\ e^{\beta\eta} & e^{-3K} & e^K & e^{-\beta\eta} \\ e^{-K} & e^{-\beta\eta} & e^{-\beta\eta} & e^{3K-2\beta\eta} \end{pmatrix}. \quad (3.54)$$

Uma diagonalização parcial de \mathbf{T} é obtida através da matriz:

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.55)$$

resultando em:

$$\mathbf{U}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{M} & 0 \\ 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

onde:

$$\lambda_3 = 2e^{-K} \sinh 2K, \quad (3.57)$$

e \mathbf{M} é uma matriz 3x3 cujos elementos são dados por:

$$\begin{aligned} M_{11} &= 2e^{-K} \cosh 2K, \\ M_{22} &= e^{-K} + e^{3K} \cosh 2\beta\eta, \\ M_{33} &= -e^{-K} + e^{3K} \cosh 2\beta\eta, \\ M_{12} &= M_{21} = 2 \cosh \beta\eta, \\ M_{13} &= M_{31} = 2 \sinh \beta\eta, \\ M_{23} &= M_{32} = e^{3K} \sinh 2\beta\eta. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Os três autovalores restantes são então obtidos da matriz \mathbf{M} através da solução de uma equação cúbica e podem ser escritos analiticamente como:

$$\lambda_n = \frac{2}{3}\alpha^{1/2} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{1}{2}\delta\alpha^{-3/2}\right) + \frac{2\pi}{3}n\right] - \frac{p}{3}, \quad (3.59)$$

onde $n= 0,1$ ou 2 e

$$\begin{aligned}
\alpha &= p^2 - 3s, \\
\delta &= 2p^3 - 9ps + 27r, \\
p &= -(M_{11} + M_{22} + M_{33}), \\
s &= (M_{11}M_{22} + M_{22}M_{33} + M_{33}M_{11}) - (M_{12}^2 + M_{23}^2 + M_{31}^2), \\
r &= M_{11}M_{23}^2 + M_{22}M_{13}^2 + M_{33}M_{12}^2 - M_{11}M_{22}M_{33} - 2M_{12}M_{23}M_{31}.
\end{aligned} \tag{3.60}$$

Dos quatro autovalores $(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ notamos que λ_0 é sempre o maior.

Temos então:

$$\langle H - H_0 \rangle_0 = -J \frac{Nq}{2} m^2 + J \frac{3N}{2} m^2 + N\eta m - Nhm, \tag{3.61}$$

onde

$$m = \langle S_i \rangle_0 = \frac{1}{2\beta} \frac{\ln \lambda_0}{\eta}, \tag{3.62}$$

de modo que para a função Φ obtemos:

$$\Phi = G_0 - \frac{JN}{2} (q-3)m^2 + N\eta m - Nhm, \tag{3.63}$$

cuja minimização com relação a η resulta em:

$$\eta = J(q-3)m + h. \tag{3.64}$$

A energia livre é então obtida de (3.62-64) com G_0 e λ_0 dados pelas equações (3.52), (3.59) e (3.60).

Podemos notar que, nesta aproximação, não é possível obter a temperatura crítica de uma maneira tão simples como nos casos anteriores, pois a equação auto-consistente para m é muito complicada. Podemos, entretanto, para $h=0$ e perto da transição onde $m \approx 0$

e $\eta \approx 0$, expandir o maior autovalor em potências de η e calcular numericamente as derivadas de λ_o até a ordem desejada. Assim temos:

$$\lambda_o = \lambda_o^o + \frac{1}{2!} D2(\beta\eta)^2 + \frac{1}{4!} D4(\beta\eta)^4 + \dots \quad (3.65)$$

onde $\lambda_o^o = \lambda(\eta = 0)$, $D2 = \left[\frac{\partial^2 \lambda_o}{\partial (\beta\eta)^2} \right]_{\eta=0}$, $D4 = \left[\frac{\partial^4 \lambda_o}{\partial (\beta\eta)^4} \right]_{\eta=0}$ e as derivadas de ordem ímpares para $\eta = 0$ são todas nulas. As derivadas de segunda e quarta ordem, D2 e D4, são obtidas numericamente (convém ressaltar que é possível expandir a matriz (3.53) em potências de η e obter, através da teoria de perturbações, o termo D2 analiticamente sem grandes problemas [13]).

Tomando o logaritmo de (3.65) e expandindo mais uma vez obtemos:

$$\ln \lambda_o = \ln \lambda_o^o + \frac{1}{2} \frac{D2}{\lambda_o^o} (\beta\eta)^2 + \left[\frac{1}{4!} \frac{D4}{\lambda_o^o} - \frac{1}{8} \left(\frac{D2}{\lambda_o^o} \right)^2 \right] (\beta\eta)^4 + \dots, \quad (3.66)$$

De (3.62) e (3.66) temos:

$$m = \frac{1}{2} \left\{ \frac{D2}{\lambda_o^o} \beta\eta + \left[\frac{1}{6} \frac{D4}{\lambda_o^o} - \frac{1}{2} \left(\frac{D2}{\lambda_o^o} \right)^2 \right] (\beta\eta)^3 + \dots \right\}, \quad (3.67)$$

e lembrando que agora $\eta = J(q-3)m$, temos finalmente:

$$m = \frac{1}{2} \frac{D2}{\lambda_o^o} K(q-3)m + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{6} \frac{D4}{\lambda_o^o} - \frac{1}{2} \left(\frac{D2}{\lambda_o^o} \right)^2 \right] [K(q-3)m]^3. \quad (3.68)$$

A equação acima é análoga às anteriores, donde se obtém para a temperatura crítica nesta aproximação :

$$\frac{1}{2} \frac{D2}{\lambda_o^o} K_c(q-3) = 1. \quad (3.69)$$

3.5 Resultados tipo Campo Médio

A tabela 3.1 abaixo ilustra os valores obtidos para K_c do modelo de Ising d-dimensional hipercúbico (d=1,2,3), de acordo com as quatro aproximações discutidas neste capítulo, em comparação com os resultados exatos ou obtidos por expansões em séries.

Nota-se que valores cada vez melhores são obtidos ao se levar em conta mais interações no hamiltoniano tentativa. Em particular, as aproximações com blocos finitos (CM e Pares) fornecem um K_c finito no modelo unidimensional em desacordo com o resultado exato $T=0$. Já a aproximação de cadeia linear (ACL) fornece o resultado exato em uma dimensão.

Convém ressaltar que, embora haja uma melhora na obtenção da temperatura crítica com hamiltoniano tentativa que levam em conta um maior número de interações entre pares de spins, os expoentes críticos são sempre os mesmos e independem da dimensionalidade da rede.

Tabela 3.1: Valores de K_c para o Modelo de Ising d-dimensional ($d = 1,2,3$) hipercúbico de acordo com as aproximações discutidas neste capítulo. Na discriminação dos vários métodos denominamos:

- CM - Campo Médio Usual, Equação (3.16);
- Pares - Aproximação de Pares, Equação (3.31);
- ACL - Aproximação de Cadeia Linear, Equação (3.49);
- ACD - Aproximação de Cadeia Dupla, Equação (3.69).

	K_c		
	d = 1	d = 2	d = 3
CM	0,5	0,25	0,167
PARES	0,639	0,265	0,171
ACL[13]	∞	0,284	0,176
ACD[13]	-	0,317	0,182
Exato	∞	0,441[9]	0,222[11]

Capítulo 4

Grupos de Renormalização de Campo Médio

Este capítulo trata, em linhas gerais, do grupo de renormalização, mais especificamente do grupo de renormalização de campo médio (GRCM) e do novo grupo de renormalização de campo médio (NGRCM). Discutiremos suas hipóteses básicas bem como suas relações de recorrência, através das quais informações sobre a criticalidade do sistema em estudo podem ser obtidas.

4.1 Grupo de Renormalização

Devido a dificuldade de se caracterizar a transição de fases de segunda ordem surgiram várias abordagens que tentam explicar o que acontece no ponto crítico. Dentre estas destacam-se a aproximação de campo médio, pela sua simplicidade, e a teoria de grupo de renormalização, pelo seu êxito.

Se a teoria fornece a função partição para todas as temperaturas, muito bem, porém, o principal é a determinação da função partição na região crítica, isto é, para T próximo a T_c .

O grupo de renormalização foi introduzido por Wilson baseado na construção de blocos de Kadanoff [15], para solucionar problemas com muitos graus de liberdade. Essa técnica permite reduzir, passo a passo, os graus de liberdade ao se estudar um determinado sistema sem a perda de identidade com o sistema original. Desta maneira, podemos obter um problema com um menor número de graus de liberdade e de solução mais fácil que a do problema original. Ao invés de se considerar todos os spins do sistema, utiliza-se da técnica de blocos de spins por um bloco representativo com um só spin, cujo objetivo é eliminar do sistema flutuações de magnitude menor que as dimensões do bloco de spins considerado. Devemos conhecer todas as configurações dos spins em todos os blocos

na rede original para assim termos a probabilidade da configuração do bloco de spin correspondente.

Para cada transformação , temos um sistema diferente do original e assim, um novo acoplamento K' em função de K , sendo K inversamente proporcional à temperatura ($K = J/k_B T$). Os pontos fixos são associados aos pontos críticos do sistema devido à invariância por escala apresentada pelo sistema na criticalidade.

Nesse processo de transformação , o comportamento de longo alcance da nova rede é equivalente ao comportamento que é observado na rede original para uma temperatura diferente.

Nas proximidades do ponto crítico, o comprimento de correlação ξ é muito grande, ou em outras palavras, muito maior que a distância mínima representada pelos parâmetros de rede. Isto é um indício de que os fenômenos críticos [16] são um problema de grande distância, que envolvem muitos graus de liberdade. Kadanoff [17], ao dividir o sistema em blocos de l^d spins ($l \ll \xi$, sendo l um múltiplo do espaçamento de rede a e d a dimensão do sistema) supôs que cada bloco se comportava como um spin efetivo com interações simples, de tal maneira que podia se escrever um hamiltoniano efetivo tipo Ising para blocos de spin.

As idéias de Kadanoff deram origem ao chamado grupo de renormalização no espaço real.

4.2 Grupo de Renormalização de Campo Médio

O método de grupo de renormalização tipo campo médio [6] é uma técnica recente, simples e eficiente que permite calcular as propriedades críticas de um sistema de spins. O método de GRCM surgiu dentro do espírito chamado grupo de renormalização fenomenológico, que se baseia na comparação das magnetizações de sistemas de diferentes tamanhos finitos, onde se supõe uma lei de escala entre as magnetizações desses sistemas. O método consiste em comparar dois aglomerados finitos de spin de diferentes tamanhos, tratando as interações entre os spins de cada aglomerado exatamente e os spins do restante da rede são simulados por um campo efetivo semelhante ao que é feito na aproximação de campo médio.

A magnetização do aglomerado finito e o campo efetivo têm significado físico de magnetizações e, portanto, ambos representam o parâmetro de ordem do sistema.

Para dois aglomerados finitos N' e N ($N' < N$) as magnetizações $m_{N'}$ e m_N e os campos efetivos b' e b de cada aglomerado são supostos terem a mesma relação de escala, semelhante à do grupo de renormalização , resultando assim numa relação do tipo $K' = f(K)$ entre as constantes de acoplamento K' e K dos aglomerados de spin N' e N , respectiva-

mente. Assim, impondo uma relação de escala para as magnetizações temos:

$$m_{N'}(K', b') = \delta m_N(K, b), \quad (4.1)$$

onde δ está relacionado com o fator de escala e, em geral, depende de algum expoente crítico.

A lei de escala para os campos efetivos b' e b é suposta ser a mesma, isto é:

$$b' = \delta b. \quad (4.2)$$

As relações acima devem ser válidas perto da transição e, portanto, m_N e b ($m_{N'}$ e b') devem ser pequenos. Como para $b = 0$ ($b' = 0$), $m_N = 0$ ($m_{N'} = 0$), podemos expandir as magnetizações para ambos os blocos e escrever:

$$m_{N'}(K', b') = C_{N'}(K')b', \quad (4.3)$$

$$m_N(K, b) = C_N(K)b, \quad (4.4)$$

onde $C_N(K) = \left[\frac{\partial m_N}{\partial b} \right]_{b=0}$ e o mesmo para o bloco N' .

Assim das equações (4.1-4) obtemos:

$$C_{N'}(K') = C_N(K), \quad (4.5)$$

que é independente de fator de escala e expoente crítico. A equação acima é vista como uma relação de recorrência de onde se obtém o ponto fixo não trivial (ponto crítico) $K' = K = K^* = K_c$. Estimativas do expoente crítico ν são obtidas através de:

$$\left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K^*} = \lambda = L^{1/\nu}, \quad (4.6)$$

onde L é o fator de escala, o qual, para blocos finitos é dado por $L = (N/N')^{1/d}$. Este método já foi aplicado a uma variedade de sistemas e bons resultados foram obtidos mesmo ao se considerar blocos pequenos [6].

4.3 Novo Grupo de Renormalização de Campo Médio

As magnetizações obtidas no capítulo anterior, em suas várias aproximações, podem ser escritas numa forma compacta e geral como:

$$m_N = f_N(K)m_N + g_N(K)m_N^3, \quad (4.7)$$

onde N aqui designa o número de spins para blocos finitos (N=1 spins livres, N=2 pares de spins) ou a largura da cadeia (N=1 linear, N=2 dupla). A equação acima é equivalente a:

$$m_N = \left[\frac{1 - f_N(K)}{g_N(K)} \right]^{1/2}, \quad (4.8)$$

a qual pode ser reescrita na forma:

$$m_N = \left(\frac{1 - f_N(K)}{g_N(K)} \frac{K}{K - K_c} \right)^{1/2} \left(\frac{K - K_c}{K} \right)^{1/2}, \quad (4.9)$$

$$m_N = a_N(K)\epsilon_N^{1/2}, \quad (4.10)$$

onde:

$$a_N(K) = \left(\frac{1 - f_N(K)}{g_N(K)} \frac{K}{K - K_c} \right)^{1/2}, \quad (4.11)$$

$$\epsilon_N = \frac{K - K_c^N}{K}, \quad (4.12)$$

e K_c^N é a temperatura crítica de campo médio para o bloco considerado obtido de $1 - f_N(K_c^N) = 0$. Estas expressões são gerais e se aplicam a qualquer aproximação de tipo campo médio.

Com as magnetizações assim obtidas para dois blocos diferentes N e N' podemos impor uma relação de escala dada por (4.1) e supor também que as temperaturas reduzidas $\epsilon_N^{1/2}$ e $\epsilon_{N'}^{1/2}$ satisfaçam a mesma relação, isto é:

$$\epsilon_{N'}^{1/2} = \delta \epsilon_N, \quad (4.13)$$

Com as equações (4.1),(4.10) e (4.13) obtemos:

$$a_{N'}(K') = a_N(K), \quad (4.14)$$

que é a relação de recorrência segundo o novo grupo de renormalização de campo médio [7], onde pontos críticos e expoentes podem ser obtidos de maneira análoga ao discutido na seção anterior. Este esquema foi aplicado com bons resultados, ao problema de percolação dirigida e no modelo de Ising [7] e, mais recentemente, foi estendido ao modelo de Ising diluído via teoria de campo efetivo [18]. O emprego destas duas técnicas de grupo de renormalização será discutido no próximo capítulo.

Capítulo 5

Grupos de Renormalização de Campo Médio aplicados ao Modelo de Ising

Utilizaremos aqui alguns resultados obtidos no capítulo 3, aliados às técnicas de grupo de renormalização discutidas no capítulo anterior, no estudo das propriedades críticas do modelo de Ising. Embora vários dos resultados aqui discutidos já foram relatados na literatura, ênfase deve ser dada à utilização das cadeias linear e dupla no NGRCM, que, como dito na introdução, é o objetivo do presente trabalho.

5.1 Grupo de Renormalização de Campo Médio

Aplicaremos primeiramente o GRCM, exposto na seção 4.2, utilizando blocos finitos e cadeias.

5.1.1 Blocos de 1 e 2 spins

O hamiltoniano para o bloco de 1 spin, figura 5.1(a), é dado por:

$$H_1 = -qJ'b' S_1, \quad (5.1)$$

o qual é idêntico ao dado pela equação (3.3) com $\eta = qJ'b'$. Como b' é pequeno, temos diretamente de (3.13) a magnetização :

$$m_1 = c_1(K')b', \quad (5.2)$$

onde:

$$c_1(K') = qK'. \quad (5.3)$$

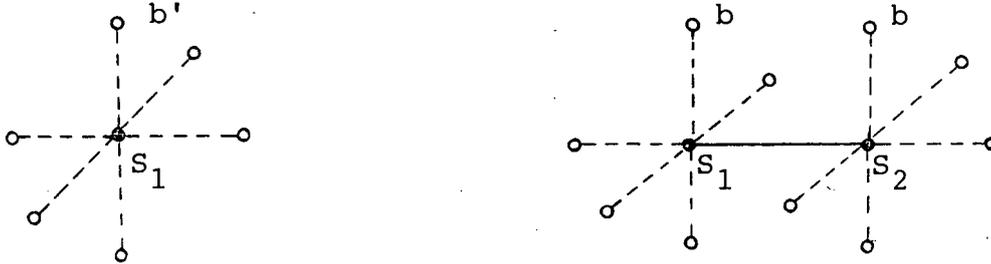


Figura 5.1: Blocos de um e dois spins. b e b' são as magnetizações dos spins das fronteiras.

Para o bloco de 2 spins, figura 5.1(b), temos:

$$H_2 = -JS_1S_2 - (q-1)Jb(S_1 + S_2), \quad (5.4)$$

que é idêntico ao dado pela equação (3.18) com $\eta = (q-1)Jb$. Para b pequeno, a equação (3.29) nos fornece:

$$m_2 = c_2(K)b, \quad (5.5)$$

onde:

$$c_2(K) = \frac{2(q-1)K}{1 + e^{-2K}}. \quad (5.6)$$

A relação de recorrência, de acordo com (4.5), é então:

$$qK' = \frac{2(q-1)K}{1 + e^{-2K}}, \quad (5.7)$$

de onde se obtém, além dos pontos fixos triviais $K' = K = 0$ e $K' = K = \infty$, o ponto crítico:

$$K' = K = K_c = \frac{1}{2} \ln(q/q - 2). \quad (5.8)$$

Vemos claramente que com estes blocos pequenos já obtemos o resultado exato $T_c = 0$ para o modelo unidimensional ($q=2$). Valores de K_c e expoentes críticos para outras dimensionalidades encontram-se na tabela 5.1. Em particular, para $d=2$ tem-se $K_c = 0,346$, um valor bem melhor que $K_c = 0,25$ e $K_c = 0,265$ (veja tabela 3.1) obtidos para cada bloco separadamente. Com relação aos expoentes críticos, vemos agora sua dependência com a dimensionalidade da rede, como era de se esperar.

5.1.2 Cadeias linear e dupla

É fácil verificar que o hamiltoniano para a cadeia linear da figura 5.2(a) é dado por (3.33) com $\eta = (q - 2)J'b'$.

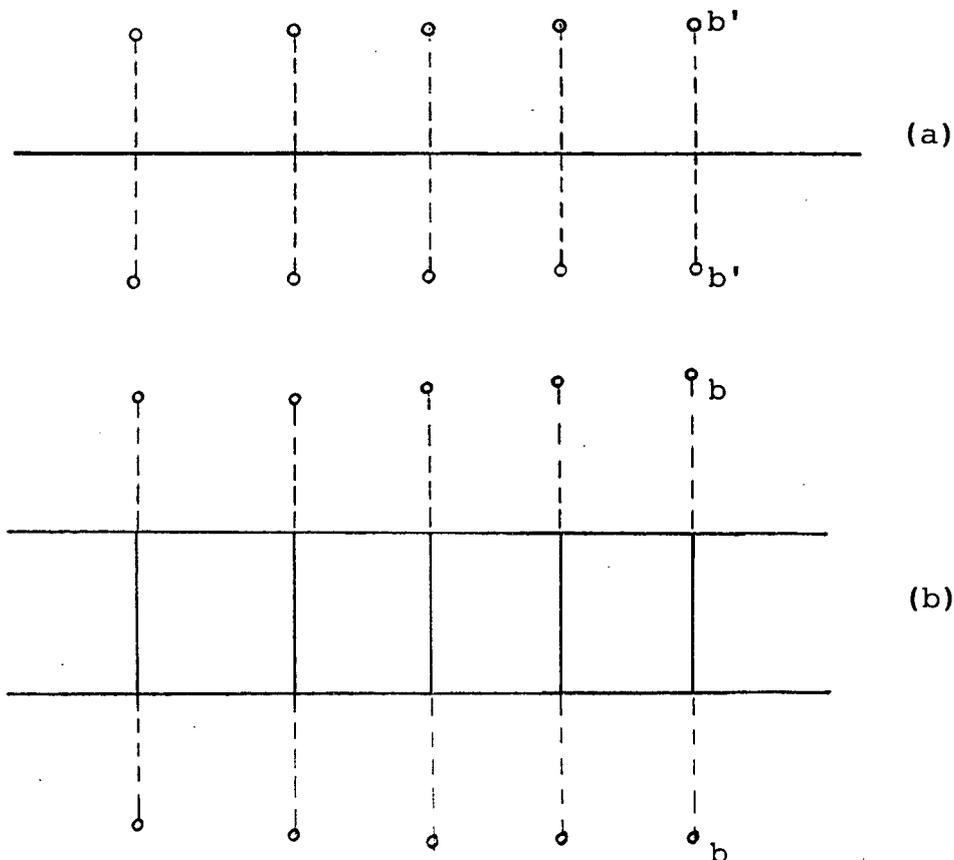


Figura 5.2: Cadeias linear e dupla com as respectivas magnetizações das fronteiras numa rede plana quadrada (condições periódicas na horizontal).

Portanto, da equação (3.47) temos:

$$c_1(K') = e^{2K'}(q-2)K'. \quad (5.9)$$

Como o hamiltoniano para a cadeia dupla, figura 5.2(b) é dado por (3.51) com $\eta = (q-3)Jb$, a equação (3.67) nos fornece:

$$C_2(K) = \frac{1}{2} \frac{D2}{\lambda_0^2} K(q-3), \quad (5.10)$$

de modo que a relação de recorrência para estas cadeias é dada por:

$$e^{2K'}(q-2)K' = \frac{1}{2} \frac{D2}{\lambda_0^2} K(q-3), \quad (5.11)$$

cujos resultados encontram-se também na tabela 5.1. Devemos notar que agora o fator de escala é dado por $L=2$ para a rede plana e que o fator de escala fica indefinido ao se considerar a rede cúbica (embora, neste caso, o valor para a temperatura crítica possa ser obtido sem restrições [19]).

5.2 Novo Grupo de Renormalização de Campo Médio

Aplicaremos agora o NGRM, exposto na seção 4.3, no estudo da criticalidade do modelo de Ising utilizando blocos finitos e cadeias linear e dupla.

5.2.1 Blocos de 1 e 2 spins

Para 1 spin, as equações (3.14),(4.7) e (4.11) nos fornecem:

$$a_1(K') = \left(\frac{(1-qK')}{-1/3(qK')^3} \frac{K'}{K' - K_c^1} \right)^{1/2}, \quad (5.12)$$

onde $K_c^1 = 1/q$. Por outro lado, para 2 spins temos de (3.30),(4.7) e (4.11):

$$a_2(K) = \left(\frac{1-f_2(K)}{g_2(k)} \frac{K}{K - K_c^2} \right)^{1/2}, \quad (5.13)$$

onde K_c^2 está dado na tabela 3.1 (aproximação de Pares) e:

$$f_2(K) = \frac{2(q-1)K}{1+e^{-2K}}, \quad (5.14)$$

$$g_2(K) = \frac{4(e^{-2K}-2)^2}{3(1+e^{-2K})} (q-1)^3 K^3. \quad (5.15)$$

Da relação de recorrência $a_1(K') = a_2(K)$ obtem-se os valores listados na tabela 5.1 para $K = K' = K_c$ e ν do modelo de Ising. Note que neste caso novamente se obtem o resultado exato para T_c no modelo unidimensional.

5.2.2 Cadeias linear e dupla

Utilizaremos agora os resultados obtidos para as cadeias linear e dupla dentro do contexto do NGRCM. Para a cadeia linear, de acordo com as equações (3.48),(4,7) e (4.11) temos:

$$a_1(K') = \left(\frac{1-f_1(K')}{g_1(K')} \frac{K'}{K'-K_c^1} \right)^{1/2}, \quad (5.16)$$

com K_c^1 dado no tabela 3.1 (ACL) para $d=2$ e $d=3$ e:

$$f_1(K') = K' e^{2K'} (q-2), \quad (5.17)$$

$$g_1(K') = \frac{1}{6} (e^{2K'} - 3e^{6K'}) (K')^3 (q-2)^3. \quad (5.18)$$

Considerando a cadeia dupla obtemos:

$$a_2(K) = \left(\frac{1-f_2(K)}{g_2(K)} \frac{K}{K-K_c^2} \right)^{1/2}, \quad (5.19)$$

com K_c^2 listado na tabela 3.1 (ACD) e:

$$f_2(K) = \frac{1}{2} \frac{D2}{\lambda_o} (q-3)K, \quad (5.20)$$

$$g_2(K) = \frac{1}{2} \left[\frac{D4}{6\lambda_o} - \frac{1}{2} \left(\frac{D2}{\lambda_o} \right)^2 \right], \quad (5.21)$$

onde os termos que aparecem nas equações (5.20) e (5.21) estão todos definidos na seção 3.4 do capítulo 3. Lembramos que os termos D2 e D4 foram obtidos numericamente. A tabela 5.1 contém resultados obtidos através da relação de recorrência $a_1(K') = a_2(K)$ para os dados acima. Novamente aqui, para $d=3$ temos somente K_c uma vez que o fator de escala fica indefinido ao se considerar cadeias desse tipo.

5.3 Resultados e Conclusões

Os valores de K_c e do expoente crítico ν , obtidos através do GRCM e do NGRCM para os vários sistemas finitos aqui considerados, estão sumarizados na tabela 5.1, juntamente com os valores exatos ou de expansões em série. Como em todos os casos se obtém o valor esperado para T_c no modelo unidimensional, a tabela contém somente os dados para $d=2$ e $d=3$.

Através de uma análise da tabela 5.1, vemos que o uso de cadeias melhora os resultados em ambos métodos, tanto no GRCM com no NGRCM, como era de se esperar. Vemos também que o NGRCM apresenta sempre melhores resultados que o GRCM, se considerarmos os mesmos sistemas finitos em cada um.

Em particular, o NGRCM empregando cadeias é o que produz melhores resultados, sendo estes comparáveis aos valores obtidos utilizando-se blocos com $N=16$ e $N' = 9$, donde se obtém $K_c = 0,420$ e $\nu = 1,15$ (veja referência).

Concluimos, portanto, que o uso de tiras infinitas segundo o esquema do NGRCM pode ser promissor, inclusive no estudo de outros sistemas estatísticos onde o método da matriz de transferência possa ser empregado. Ressaltamos, entretanto, que para tiras mais largas (por exemplo, a cadeia tripla) os resultados analíticos dificilmente podem ser obtidos e, neste caso, devemos tratar o problema de uma forma numérica, a partir da obtenção da matriz de transferência.

Tabela 5.1: Valores de K_c e ν para o modelo de Ising em $d=2$ e $d=3$ segundo o GRCM e o NGRCM para diferentes blocos.

	$d = 2$		$d = 3$	
	K_c	ν	K_c	ν
GRCM - Blocos[6]	0,346	1,667	0,203	1,537
GRCM - Cadeias[19]	0,388	1,527	0,208	-
NGRCM - Blocos[7]	0,380	1,477	0,215	1,258
NGRCM - Cadeias	0,419	1,421	0,217	-
Exato	0,441[9]	1,0[9]	0,222[11]	0,637[11]

Bibliografia

- [1] H. E. Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Claredon Press, Oxford (1971), Capítulo 1
- [2] R. Eisberg and R. Resnick, "Quantum Physics", John Wiley and Sons, New York (1974), capítulo 14
- [3] H. E. Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Claredon Press, Oxford (1971), Capítulo 3
- [4] H. E. Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena", Claredon Press, Oxford (1971), Capítulo 11
- [5] D. J. Wallace and R. K. Zia, Rep. Progr. Phys., Vol.41 (1978) 1
- [6] J. O. Indekeu, A. Maritan and A. L. Stella, J. Phys.A: Math. Gen.15 (1982) L291
- [7] J. Kamphorst Leal da Silva, R. A. Nogueira, J. A. Plascak and M. Droz, J. Phys.A: Math. Gen.27 (1994) 1495
- [8] D. Chandler, "Introduction to Modern Statistical Mechanics", (Oxford University Press 1987), Capítulo 5
- [9] L. Onsager, Phys. Rev.65 (1944) 117
- [10] H. A. Bethe, Proc. Roy. Soc. (London) A150 (1935) 552 and R. E. Peierls, Proc. Cambridge Phil. Soc.32 (1936) 477
- [11] C. Domb, "Phase Transitions and Critical Phenomena", Vol.3, ed. C. Domb and M. S. Green (London Academic 1974)
- [12] H. Falk, Am. J. Phys.38 (1970) 858
- [13] J. A. Plascak e N. P. Silva, Phys. Stat. Solid.B110 (1982) 669
- [14] H. E. Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Claredon Press, Oxford (1971), Capítulo 8
- [15] K. G. Wilson and J. Kogut, Phys. Rep.17 (1975) 75

- [16] M. E. Fisher, Rep. Prog. Phys.**30** (1967) 615
- [17] C. J. Thompson, "Mathematical Statistical Mechanics", Princeton University Press (1979)
- [18] F. O. Coelho, Tese de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais (1994) - não publicado
- [19] J. A. Plascak e N. P. Silva, J. Phys.**C19** (1986) 4493