

Maicon Saul Faria

*Efeitos de aperiodicidade no
comportamento crítico de modelos
magnéticos na rede de Bethe*

Florianópolis, Santa Catarina

agosto de 2006

Maicon Saul Faria

*Efeitos de aperiodicidade no
comportamento crítico de modelos
magnéticos na rede de Bethe*

Não universalidade em campo-médio

Orientador: Nilton da Silva Branco

Co-orientador: Marcelo H. R. Tragtenberg

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA

Florianópolis, Santa Catarina

agosto de 2006

*A minha mãe, minha esposa,
meus irmãos e amigos*

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Nilton da Silva Branco, por quem sinto profunda admiração e gratidão por ter me orientado neste trabalho e na minha formação acadêmica.

Ao Prof. Dr. Marcelo Tragtenberg, pela sua colaboração na minha orientação.

Aos amigos do grupo de mecânica estatística, Sergio Tadeu Maciel e Prof. Dr. Maurício Girardi, pela sua amizade e por nossas discussões.

À comunidade de usuários e desenvolvedores GNU/Linux que forneceram o suporte e as ferramentas necessárias para a realização do presente trabalho.

Aos amigos Ms. Daniel Girardi e Ms. Marcos Daniel Vozer Felisberto, grandes companheiros que me ajudaram e influenciaram.

À minha esposa Carmen, pela revisão deste trabalho, pelo apoio e pelas suas colaborações, mesmo aquelas que, não sendo poucas, passaram despercebidas.

À Universidade Federal de Santa Catarina a qual tenho orgulho de ter me graduado e agora estar obtendo o título de mestre.

Ao apoio financeiro do CNPQ, da CAPES e da FAPESC.

Resumo

Demonstramos neste trabalho que a modulação dos parâmetros de interação dos hamiltonianos de Ising e Blume-Capel, segundo seqüências aperiódicas, pode ocasionar uma mudança de classe de universalidade na rede de Bethe e oscilação log-periódica da magnetização. Observamos possível mudança do expoente crítico da magnetização β em relação a seu valor em sistemas homogêneos ou periódicos. Esta mudança não ocorre quando a seqüência de Fibonacci é usada. Na seqüência de duplicação de período caracterizamos o expoente β como uma função da razão J_A/J_B . Na seqüência de Rudin-Shapiro obtemos evidências de que esta aperiodicidade causa mudança na classe de universalidade do sistema.

Abstract

In this work we show that modulations in the interaction parameters of Ising and Blume-Capel hamiltonians, using aperiodic sequences, may produce a change in the universality class in the Bethe lattice. We observe changes in the magnetization critical exponent β when compared to its value in homogeneous and periodic systems. This change does not happen when we use the Fibonacci sequence. On the other hand, we show that, for the period-duplication sequence, β is a function of the ratio J_A/J_B . In the Rudin-Shapiro sequence we obtain evidences that this aperiodicity leads the system to a new universality class.

Sumário

Agradecimentos	p. 2
Resumo	p. 3
Abstract	p. 4
Introdução	p. 7
1 Sequências Aperiódicas	p. 11
1.1 Definição de seqüências aperiódicas	p. 11
1.2 Matriz de substituição	p. 12
1.3 Flutuação	p. 14
1.4 Exemplos de seqüências aperiódicas	p. 15
2 Comportamento crítico	p. 18
2.1 Transições de fase	p. 18
2.2 Transição contínua e comportamento crítico	p. 19
2.3 Funções homogêneas generalizadas	p. 20
2.4 Funções log-periódicas	p. 22
3 Rede de Bethe	p. 24
3.1 Definição	p. 24
3.2 Obtenção da magnetização	p. 25
3.3 Limite de campo médio	p. 29
3.4 Interpretação da magnetização	p. 30

3.4.1	Caso homogêneo	p. 31
3.4.2	Caso não-homogêneo.	p. 32
3.4.3	Magnetização do spin central	p. 34
3.4.4	Definição de uma magnetização	p. 37
3.5	Cálculo da derivada	p. 39
3.6	Temperatura crítica.	p. 41
4	Metodologia	p. 44
4.1	Magnetização no limite termodinâmico	p. 45
4.1.1	Erro na magnetização	p. 47
4.1.2	Erro no expoente β	p. 47
4.2	Criação das seqüências	p. 48
4.2.1	Duplicação de periodo	p. 50
4.2.2	Rudin-Shapiro	p. 51
4.3	Mapa da derivada	p. 52
5	Resultados	p. 54
5.1	Fibonacci	p. 55
5.2	Duplicação de período	p. 56
5.3	Rudin-Shapiro	p. 61
5.4	Mapa da derivada	p. 63
	Conclusão e perspectivas	p. 65
	Conclusão	p. 65
	Perspectivas	p. 67
	Referências	p. 68

Introdução

A descoberta de estruturas denominadas *quasi-cristais* [1] e a possibilidade da criação de *super-redes* [2], suscitaram várias questões em relação às propriedades físicas desses materiais. Uma estrutura *quasi-cristalina* é caracterizada por sítios dispostos respeitando uma ordem de longo alcance. Como em uma estrutura cristalina, um quasi-cristal possui espectros de difração com picos pronunciados; entretanto, diferentemente de uma rede de Bravais, não podemos localizar todos os sítios pertencentes a essa rede usando uma combinação linear, de coeficientes inteiros, dos vetores de base. Tampouco, podemos definir vetores de base, em uma rede formada por sítios dispostos dessa maneira.

Os quasi-cristais não possuem simetria translacional, ou seja, não podemos transladar a rede, por uma distância finita, fazendo com que todos os sítios da rede coincidam com as posição dos sítios da nova rede original. Apresentamos na figura 1 um exemplo de quasi-cristal.

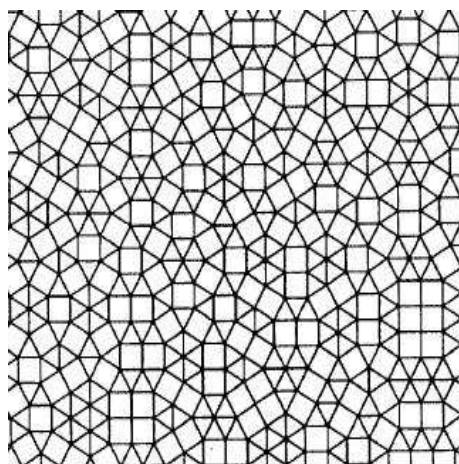


Figura 1: Na figura é mostrado um quasi-cristal em duas dimensões, construído a partir de triângulos e quadrados. Cada ponto de intersecção representa um sítio.

Muitos resultados experimentais mostram a existência de *quasi-cristais*. Estas estruturas são encontradas em ligas de alumínio Al-Ni-Co, Al-Pd-Mn e Al-Cu-Fe, bem como, Ti-Zr-Ni e Zn-Mg-Ho.

Quasi-cristais podem ser obtidos através dos ladrilhamentos de Penrose [3], como exemplificado na figura 2, ou ainda através de inúmeros outros métodos.

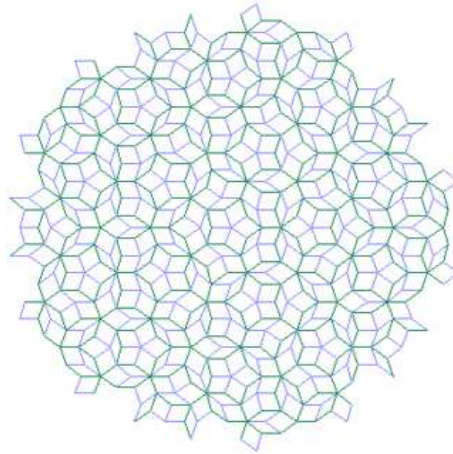


Figura 2: Um ladrilhamento de Penrose

As denominadas *super-redes* podem, em alguns casos, ser vistas como o equivalente unidimensional de *quasi-cristais*. Isto ocorre quando elas apresentam um caráter aperiódico em uma direção, como pode ser visto na figura 3..

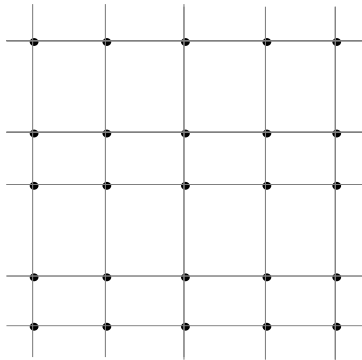


Figura 3: Mostramos na figura uma super-rede em que, na vertical, as distâncias entre os planos mudam aperiódicamente.

Experimentalmente, as super-redes podem ser construídas a partir de técnicas tal como feixe molecular epitaxial [2]; assim, é possível criar redes com planos de diferentes compostos dispostos de maneira aperiódica, como mostrado na figura 4.

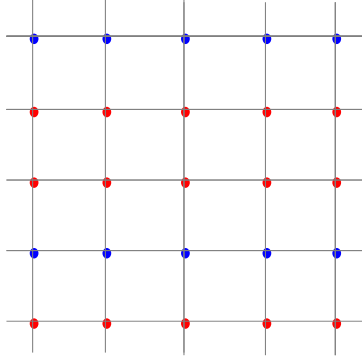


Figura 4: Nesta figura vemos uma super-rede, em que os pontos azuis e vermelhos representam dois diferentes compostos dispostos aperiódicamente.

Vários estudos foram realizados com a finalidade de identificar o comportamento crítico de modelos bem fundamentados [4],[5] e [6] na presença de modulações aperiódicas.

Uma das questões que surgem, em relação às transições de fase presentes nestas estruturas [7], é de que maneira elas são diferentes das de materiais homogêneos ou periódicos. Com este intuito as investigações do comportamento crítico de sistemas aperiódicos, especialmente em abordagens de modelos magnéticos como o de Ising, motivaram a elaboração de uma generalização do critério de Harris [8], comumente chamada de critério de Harris-Luck [9]¹. Este critério estabelece a relevância de um tipo de aperiódicidade em relação ao comportamento crítico de um sistema, e pode ser descrito em função do expoente de flutuação ω da aperiódicidade como em [7] : uma dada aperiódicidade, distribuída em $d_a \leq d$ dimensões espaciais de um modelo em d -dimensões, é *relevante* se $\omega > \omega_c$, *marginal* se $\omega = \omega_c$ e *irrelevante* se $\omega < \omega_c$. Sendo que:

$$\omega_c = 1 - \frac{1}{d_a \nu_0}, \quad (1)$$

onde ν_0 é o expoente de correlação do modelo homogêneo o expoente de flutuação da aperiódicidade será definido na seção 1.3 desta dissertação.

Com o objetivo de determinar o comportamento crítico de um sistema magnético aperiódico, estudamos 3 tipos de aperiódicidade definidas a partir das seqüências conhecidas

¹O critério de Harris não será explorado neste trabalho devido à dificuldade de aplicá-lo à rede de Bethe, visto que esta rede pode ser considerada como de dimensão infinita.

como: seqüências de Fibonacci, duplicação de período e Rudin-Shapiro. Especificamente tratamos os modelos de Ising e Blume-Capel, na rede de Bethe, no limite de campo médio. Esta investigação tem o intuito de estudar os efeitos introduzidos por modulações aperiódicas em sistemas em altas dimensões além de discutir aspectos sobre as aproximações de campo médio de sistemas aperiódicos; especialmente determinar se aproximações de campo médio podem apresentar efeitos, como mudanças de classe de universalidade, acarretados por um tipo de aperiodicidade.

Este trabalho pode ser comparado ao realizado por Iglói e Palágyi [10], onde uma aproximação de campo médio do modelo de Ising, do tipo desigualdade de Bogoliubov, foi usada para obter o expoente da magnetização β em uma rede hipercúbica com interações ditadas pela seqüência de Fibonacci.

Dentre as motivações para a escolha da rede de Bethe como uma abordagem de campo médio, podemos citar o fato desta aproximar bem, do ponto de vista qualitativo, sistemas tri-dimensionais e o fato de estarmos fazendo uma abordagem complementar a de Iglói e Palágyi [10]. Do ponto de vista técnico, os modelos estudados têm fácil elaboração nesta rede, em particular obtemos de forma exata o valor da temperatura crítica dos modelos aqui tratados.

Procuraremos também, ao longo desse trabalho, definir e obter barras de erro das grandezas em jogo, a fim de mostrarmos sem sombra de dúvida, que mesmo aproximações de campo médio podem trazer à tona vários aspectos qualitativos sobre o comportamento crítico de sistemas aperiódicos, tais como mudanças de classes de universalidade e aparecimento de oscilações log-periódica.

1 *Seqüências Aperiódicas*

Neste capítulo vamos definir o que são as seqüências aperiódicas determinísticas, que iremos denominar simplesmente de seqüências aperiódicas. Iremos estudar e classificar as seqüências através de matrizes de substituição, cujos autovalores definem a flutuação característica das seqüências aperiódicas. Assim, obteremos o expoente de flutuação e, de posse desta informação classificaremos as seqüências estudadas em termos desta flutuação.

1.1 Definição de seqüências aperiódicas

As estruturas do nosso interesse, denominadas seqüências, são formadas por um conjunto de elementos (letras) $\alpha_1\alpha_2\alpha_3 \dots \alpha_\infty$, onde $\alpha_j \in \mathcal{A}$, $\forall j \in \mathbb{N}$, sendo \mathcal{A} um conjunto de elementos que chamaremos de alfabeto.

Estas seqüências são denominadas aperiódicas quando não são formadas por subseqüências que se repetem periodicamente; contudo, estamos nos referindo a seqüências determinísticas, as quais são construídas a partir de regras determinísticas.

As seqüências aperiódicas em que estamos interessados são obtidas, entre outras formas, através de um tipo de regra determinística chamada regra de substituição e a aplicação desta regra será representada pela letra ξ . A seqüência é obtida simplesmente aplicando infinitas vezes a regra ξ a uma semente $\alpha \in \mathcal{A}$:

$$(\dots(\xi(\xi(\xi(\alpha))))\dots) = \xi^\infty(\alpha),$$

$$\xi^\infty(\alpha) = \alpha_1\alpha_2\alpha_3 \dots \alpha_\infty \tag{1.1}$$

1.2 Matriz de substituição

Considerando um alfabeto \mathcal{A} com duas letras, por exemplo, A e B , podemos definir uma regra de substituição ξ :

$$\begin{aligned}\xi(A) &\rightarrow A^v B^l, \\ \xi(B) &\rightarrow A^u B^h.\end{aligned}\tag{1.2}$$

Como exemplo do uso desta regra, tomemos $v = 1, l = 1, u = 2$, e $h = 0$, assim obtemos:

$$\begin{aligned}\xi(A) &\rightarrow AB, \\ \xi(B) &\rightarrow AA.\end{aligned}\tag{1.3}$$

Deste modo, podemos construir uma seqüência através de uma semente, por exemplo A , aplicando sucessivamente a regra ξ :

$$\begin{aligned}\xi(A) &\rightarrow AB \\ \xi^2(A) &\rightarrow ABAA \\ \xi^3(A) &\rightarrow ABAAABAB \\ &\vdots\end{aligned}\tag{1.4}$$

Seqüências que podem ser obtidas a partir deste método de construção farão parte de nosso estudo.

Podemos extrair informações relevantes sobre as seqüências aperiódicas, mesmo perdendo informação a respeito da ordem em que as letras se apresentam, analisando a matriz de substituição \mathcal{M} , definida por

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \#_{\alpha_1}\xi(\alpha_1) & \#_{\alpha_1}\xi(\alpha_2) & \dots \\ \#_{\alpha_2}\xi(\alpha_1) & \#_{\alpha_2}\xi(\alpha_2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},\tag{1.5}$$

onde $\alpha_j \in \mathcal{A}$, $\forall j \in \mathbf{N}$ e $\#_{\alpha_j}\xi(\alpha_i)$ representa o número de letras α_j que aparecem na aplicação da regra ξ na letra α_i .

Vamos nos limitar a um alfabeto $\mathcal{A} = \{A, B\}$ tendo em mente que todos os resultados a seguir são facilmente generalizáveis para qualquer alfabeto, simplesmente usando a equação (1.5) ao invés de

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \#_A\xi(A) & \#_A\xi(B) \\ \#_B\xi(A) & \#_B\xi(B) \end{pmatrix}.\tag{1.6}$$

Como exemplo de matriz de substituição, podemos usar a regra da expressão (1.2)

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} v & u \\ l & h \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Uma vez que uma seqüência pode ser construída a partir de consecutivas aplicações de uma regra de substituição, através da matriz \mathcal{M} e das operações convencionais de matrizes, é possível obter uma relação entre o número de letras A e B de sucessivas aplicações

$$\begin{pmatrix} \#_A \xi(\alpha)^{k+1} \\ \#_B \xi(\alpha)^{k+1} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} \#_A \xi(\alpha)^k \\ \#_B \xi(\alpha)^k \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

Observando que a equação (1.8) vale para todo $k \in \mathbb{N}$, podemos escrever

$$\begin{pmatrix} \#_A \xi(\alpha)^{k+1} \\ \#_B \xi(\alpha)^{k+1} \end{pmatrix} = \mathcal{M}^k \begin{pmatrix} \#_A(\alpha) \\ \#_B(\alpha) \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

O número de letras A ou B pode ser obtido através das entradas dos vetores vistos na equação (1.9). Este vetores por sua vez, podem ser representados por uma combinação linear de dois vetores linearmente independentes, ou seja

$$\begin{pmatrix} \#_A(\alpha) \\ \#_B(\alpha) \end{pmatrix} = c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2, \quad (1.10)$$

escolhendo os vetores \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 como sendo os autovetores associados ao maior e o menor autovalor, respectivamente, e com ajuda da equação (1.9) vemos que:

$$\begin{pmatrix} \#_A \xi(\alpha)^{k+1} \\ \#_B \xi(\alpha)^{k+1} \end{pmatrix} = \lambda_1^k c_1 \mathbf{u}_1 + \lambda_2^k c_2 \mathbf{u}_2, \quad (1.11)$$

onde λ_1 é o maior autovalor e λ_2 o menor.

Partindo da equação (1.11) podemos obter o número de letras N depois de k substituições simplesmente decompondo a (1.11) em componentes e as somando:

$$N = \#_A \xi(\alpha)^{k+1} + \#_B \xi(\alpha)^{k+1} = \lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22}), \quad (1.12)$$

sendo u_{ij} a componente j do autovetor i .

Além de representarmos o crescimento da seqüência através dos autovetores e autovalores podemos também escrever a fração de letras A e B na seqüência, respectivamente dadas por:

$$P_A \equiv \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\#_A \xi(\alpha)^{k+1}}{N}, \quad (1.13)$$

$$P_B \equiv \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\#_B \xi(\alpha)^{k+1}}{N}, \quad (1.14)$$

ou ainda,

$$P_A = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k c_1 u_{11} + \lambda_2^k c_2 u_{21}}{\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22})}, \quad (1.15)$$

$$P_B = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k c_1 u_{12} + \lambda_2^k c_2 u_{22}}{\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22})}. \quad (1.16)$$

Para $c_1 \neq 0$ e visto que $\lambda_1 > \lambda_2$ a equação (1.15) fica:

$$P_A = \frac{u_{11}}{u_{11} + u_{12}}, \quad (1.17)$$

$$P_B = \frac{u_{21}}{u_{11} + u_{12}}. \quad (1.18)$$

1.3 Flutuação

Nas seções anteriores obtivemos grandezas convenientes, a fim de nesta seção definirmos o expoente de flutuação ω que, no contexto do critério de Harris-Luck, é determinante para mudanças do comportamento crítico de um sistema. Vamos definir a flutuação, por exemplo de letras A , como

$$g = |\#_A \xi(\alpha)^{k+1} - P_A N|. \quad (1.19)$$

Desta forma a flutuação medirá a diferença entre o número de letras A obtidas a partir de k substituições e o número assintótico de letras A da seqüência $P_A N$.

Escrevendo a flutuação em termos de uma lei de potência

$$g \propto N^\omega, \quad (1.20)$$

podemos relacionar o expoente ω com os autovalores da matriz de substituição de uma seqüência no limite assintótico de k infinito, usando as equações (1.12), (1.17) e (1.19) na (1.20):

$$\left| \lambda_2^k c_2 \left[u_{21} - \frac{u_{11}(u_{21} + u_{22})}{u_{11} + u_{12}} \right] \right| = \left[\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22}) \right]^\omega,$$

sendo que, com $c_1 \neq 0$ e $\lambda_2 < \lambda_1$, obtemos no limite de k infinito

$$\left| \lambda_2^k c_2 \left[u_{21} - \frac{u_{11}(u_{21} + u_{22})}{u_{11} + u_{12}} \right] \right| = [\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12})]^\omega. \quad (1.21)$$

Tomando o logaritmo em ambos os lados da (1.21)

$$k \ln |\lambda_2| + \ln \left| c_2 \left[u_{21} - \frac{u_{11}(u_{21} + u_{22})}{u_{11} + u_{12}} \right] \right| = \omega k \ln \lambda_1 + \omega \ln c_1 (u_{11} + u_{12}) \quad (1.22)$$

No limite de k infinito obtemos de (1.22)

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1} \quad (1.23)$$

1.4 Exemplos de seqüências aperiódicas

Agora iremos apresentar alguns exemplos de seqüências aperiódicas, as quais são de longa data utilizadas em outros trabalhos correlatos:

- Fibonacci

$$\begin{aligned} \xi(A) &\rightarrow AB \\ \xi(B) &\rightarrow A \end{aligned} \quad (1.24)$$

A matriz de substituição dessa seqüência é

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- duplicação de período

$$\begin{aligned} \xi(A) &\rightarrow AB \\ \xi(B) &\rightarrow AA \end{aligned} \quad (1.25)$$

Neste caso

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Outra seqüência estudada, conhecida como seqüência de Rudin-Shapiro, necessita de um alfabeto de quatro letras para ser construída:

- Rudin-Shapiro

$$\begin{aligned}
 \xi(A) &\rightarrow AC \\
 \xi(B) &\rightarrow DC \\
 \xi(C) &\rightarrow AB \\
 \xi(D) &\rightarrow DB
 \end{aligned}
 \tag{1.26}$$

Neste caso

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Podemos então sumarizar grandezas relevantes em nosso estudo para as seqüências aqui citadas:

seqüência	λ_1	λ_2	P_A	ω
Fibonacci	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{2}{1+\sqrt{5}}$	-1
Duplicação de periodo	2	-1	$\frac{2}{3}$	0
Rudin-Shapiro ¹	2	$\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Tabela 1: Nesta tabela são mostrados parâmetros característicos das seqüências.

Estas diferentes seqüências são responsáveis por vários fenômenos observados na criticalidade dos modelos estudados, como será visto no capítulo 5. Entre estes fenômenos, chamamos a atenção para uma mudança do tipo de lei de escala de grandezas termodinâmicas na criticalidade: ao invés da típica lei de potência, observaremos um comportamento

chamado de log-periódico para algumas seqüências. Isto será corroborado a partir de argumentos de grupo de renormalização exato. Este fenômeno está intimamente ligado à maneira na qual estas seqüências crescem a cada aplicação das suas respectivas regras de substituição.

Note que, como já foi comentado, não aplicaremos o critério de Harris-Luck na rede de Bethe. Entretanto, interpretaremos os valores do expoente ω mostrados na tabela 1, como uma indicação de que a flutuação cresce quando se vai da seqüência de Fibonacci para a de duplicação de período e desta para a de Rudin-Shapiro.

¹Rudin-Shapiro de duas letras, onde $C = A$ e $D = B$ (após formada a seqüência); λ_1 e λ_2 são os dois maiores autovalores.

2 *Comportamento crítico*

Neste capítulo vamos descrever o comportamento crítico de sistemas periódicos e aperiódicos. Através do procedimento do grupo de renormalização, é possível mostrar que as funções termodinâmicas obedecem relações funcionais nas proximidades do ponto crítico, cujas soluções possíveis são chamadas de *homogêneas generalizadas* as quais caracterizam o comportamento crítico das grandezas termodinâmicas. No caso de sistemas aperiódicos veremos a possibilidade da existência de um termo *log-periódico* na lei de escala, obedecida pelo sistema próximo à criticalidade.

2.1 Transições de fase

Transições de fase são fenômenos comumente observados e caracterizados por singularidades na energia livre [11]. Essas singularidades são responsáveis por descontinuidade ou divergência em alguma derivada da energia livre; as derivadas, por sua vez, são grandezas termodinâmicas medidas experimentalmente.

Especificamente em sistemas magnéticos, uma das derivadas da energia livre é a magnetização

$$m = -\frac{1}{\mathcal{N}} \left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H} \right)_T, \quad (2.1)$$

onde \mathcal{F} é a energia livre de Gibbs, \mathcal{N} representa o número de sítios, H o campo magnético externo e T a temperatura.

A magnetização aqui é definida pelo valor médio da projeção do momento magnético ao longo de um eixo. No caso de um sistema composto por \mathcal{N} sítios fixos que possuem momento magnético de spin, a magnetização é dada pelo valor médio da projeção dos momentos magnéticos de spin s_i em um eixo qualquer, definido como o eixo z

$$m = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} s_i. \quad (2.2)$$

Neste estudo estamos interessados em transições entre fases ferromagnéticas e paramagnéticas *Ferro-Para*, ou seja, transições de uma fase com os momentos magnéticos de spin ordenados em uma direção, chamada fase ferromagnética, para uma fase paramagnética, onde os momentos magnéticos de spin estão totalmente desordenados, estabelecendo uma magnetização zero.

Nas transições *Ferro-Para* a grandeza que caracteriza a transição, denominada *parâmetro de ordem*, é justamente a magnetização. Transições em que a magnetização é descontínua, enquanto função da temperatura, são chamadas de transições de *primeira ordem*; quando a magnetização é contínua e alguma de suas derivadas não o é, chamamos a transição de *contínua*, sendo que uma descontinuidade na primeira derivada da magnetização pela temperatura é denominada transição de *segunda ordem*.

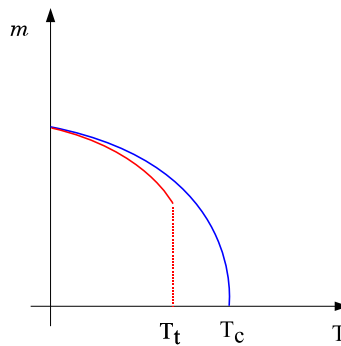


Figura 5: Em azul é representada uma transição de segunda ordem, em vermelho é mostrada um transição de primeira ordem

2.2 Transição contínua e comportamento crítico

Nas proximidades de uma transição de fase as grandezas termodinâmicas podem ser escritas na forma de leis de potência; como exemplo, podemos representar a magnetização a campo nulo como função da temperatura na forma

$$m \propto t^\beta, \quad (2.3)$$

onde $t = \frac{T_c - T}{T_c}$ é a temperatura reduzida, sendo que T_c representa a temperatura crítica e β o expoente crítico da magnetização. Usualmente nos referimos a este comportamento como comportamento crítico.

De fato, não só a magnetização tem um comportamento tipo lei de potência, mas vá-

rias outras grandezas também possuem expoentes críticos associados a elas, como exemplificado na tabela abaixo:

Calor específico a campo zero	$C_H \propto t ^{-\alpha}$
Suscetibilidade isotérmica a campo zero	$\chi_T \propto t ^{-\gamma}$
Isoterma crítica	$H \propto m ^{\frac{\delta}{ m }}$
Comprimento de correlação	$\xi \propto t ^{-\nu}$

Tabela 2: Nesta tabela descrevemos como leis de potência o comportamento crítico de algumas grandezas termodinâmicas.

2.3 Funções homogêneas generalizadas

Vários procedimentos experimentais e teóricos serviram de base para determinação dos expoentes críticos de vários modelos. Notavelmente se observou que distintos modelos, tinham o mesmo conjunto de expoentes críticos. Resultados diversos classificavam os modelos em conjuntos de mesmos expoentes críticos, chamados classes de universalidade.

Foi observado que as grandezas importantes para a determinação de uma classe de universalidade são: dimensão, alcance das interações e simetria do parâmetro de ordem. Detalhes microscópicos — como tipo de rede, existência de interações de segundos vizinhos, etc — não afetam os valores dos expoentes críticos.

A teoria de grupo de renormalização teve papel fundamental na compreensão destas constatações e também esclareceu questões sobre a forma, tipo lei de potência, das grandezas termodinâmicas; isto se deve ao fato dos potenciais termodinâmicos serem funções homogêneas generalizadas nas proximidades da criticalidade, o que explica também o fato dos expoentes obedecerem certas relações.

Como exemplo de uma relação funcional cuja solução são funções homogêneas generalizadas, podemos escrever o termo singular da energia livre por sítio $f_s = \frac{\mathcal{F}_s}{N}$

$$f_s(t, H) = b^{-d} f_s(b^{y_t} t, b^{y_h} H), \quad (2.4)$$

sendo que b é o fator de escala da transformação de renormalização e y_t e y_h são expoentes ligados aos expoentes das grandezas termodinâmicas.

O termo singular da energia livre deve ser uma função tipo lei de potência como descrito anteriormente:

$$f_s(t) = \mathcal{A}(t)t^x. \quad (2.5)$$

para $t \simeq 0$ e $H = 0$.

Substituindo a equação (2.5) na (2.4) podemos obter $\mathcal{A}(t)$ e x :

$$(b^{y_t}t)^x \mathcal{A}(b^{y_t}t) = b^d \mathcal{A}(t)t^x. \quad (2.6)$$

Para obtermos a solução da (2.6) seria interessante separar a igualdade em duas outras, uma contendo a função \mathcal{A} e a outra com as potências t . Entretanto, o termo de proporcionalidade torna não óbvia a separação das funções.

Para contornar esta ambiguidade devemos observar que por hipótese $\mathcal{A}(t)$ é uma função qualquer, desde que não seja uma lei de potência em t . Tendo isto em mente, poderíamos considerar, observando a equação (2.6), que:

$$\mathcal{A}(b_t^y t) = b^{(d-y_t x)^\kappa} \mathcal{A}(t),$$

$$t^x = b^{(d-y_t x)^{1-\kappa}} t^x,$$

onde $\kappa \in \mathbb{R}$. Entretanto, $\kappa \neq 0$ contrariaria a hipótese anterior, visto que $\mathcal{A}(t)$ teria um termo tipo lei de potência. Assim sendo, necessariamente:

$$\mathcal{A}(b^{y_t}t) = \mathcal{A}(t). \quad (2.7)$$

Segue imediatamente de (2.7) e (2.6) que:

$$x = \frac{d}{y_t}. \quad (2.8)$$

Se o fator de escala da transformação b puder assumir qualquer valor real, então a função $\mathcal{A}(t)$ é constante. Esse fato, acrescido da equação (2.8), leva a uma energia livre da forma:

$$f_s \propto t^{\frac{d}{y_t}}. \quad (2.9)$$

Entretanto, é possível, se o fator de escala for limitado, termos outras formas funcionais para o termo $A(t)$. No caso de sistemas com determinados tipos de discretização do fator de escala b , mostraremos na próxima seção que $A(t)$ pode ser uma função *log-periódica* [12].

2.4 Funções log-periódicas

Funções log-periódicas são funções oscilatórias e periódicas em termos do log de uma variável, ou seja, dada uma função $\mathcal{P}(t)$ periódica em t , $\mathcal{L} = \mathcal{P}[\log(t)]$ seria uma função log-periódica. Como exemplo:

$$\mathcal{L}(t) = \cos[\log(t)]. \quad (2.10)$$

Uma variedade de trabalhos recentes em sistemas periódicos ou aperiódicos mostram comportamentos críticos com leis de escalas log-periódicas [13]. Isto pode acontecer quando existe algum tipo de discretização do sistema que também discretize os possíveis fatores de escala em uma transformação do procedimento de grupo de renormalização. Voltando nossa atenção para a equação (2.7), supondo que o fator de escala b possa somente assumir potências de um determinado valor, digamos l , a igualdade (2.7) fica limitada a:

$$\mathcal{A}(b^{y_t}t) = \mathcal{A}(t), \quad \forall b \in \{l, l^2, l^3, \dots\},$$

ou ainda,

$$\mathcal{A}(l^{y_t}t) = \mathcal{A}(l^{2y_t}t) = \mathcal{A}(l^{3y_t}t) = \dots = \mathcal{A}(t). \quad (2.11)$$

Existe então a possibilidade nesse caso da função $\mathcal{A}(t)$ ser uma função log-periódica cujo período τ é dado por

$$\tau = y_t \log(l). \quad (2.12)$$

As seqüências aperiódicas estudadas neste trabalho são responsáveis pela discretização do parâmetro de renormalização b . No caso das seqüências de duplicação de período e Rudin-Shapiro, é somente possível efetuar uma transformação de grupo de renormalização exata se b for dado por potências inteiras de 2; no caso da seqüência de Fibonacci, b só pode assumir valores iguais aos número de Fibonacci 1, 2, 3, 5, 8, 13, ...

Assim como a energia livre, a magnetização também deve ser uma função homogênea generalizada. Usando as equações (2.1) e (2.4) obtemos

$$m(t) = b^{y_h - d} m(b^{y_t}t, b^{y_h}H) \quad (2.13)$$

O tipo de discretização que leva a energia livre a ser log-periódica faz com que magnetização também o seja e, portanto, procedendo da mesma forma que fora feito com a energia livre obtemos

$$m(t) = t^{\frac{d-y_h}{y_t}} P''[\log(t)] \quad (2.14)$$

O termo tipo lei de potência em t define o expoente crítico da magnetização

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} . \quad (2.15)$$

A parte log-periódica da magnetização $P''[\log(t)]$, será chamada de amplitude log-periódica.

Cabe salientar que o período da amplitude log-periódica da magnetização deve ser o mesmo da energia livre mostrado através na equação (2.12) e através do mesmo podemos calcular o expoente de correlação ν usando o fato de ν estar relacionado com o expoente y_t segundo

$$\nu = \frac{1}{y_t} . \quad (2.16)$$

Como já foi comentado, um dos grandes méritos da teoria de grupo de renormalização foi explicar as relações de igualdades entre os expoentes críticos, através da constatação de que as funções termodinâmicas são homogêneas generalizadas nas proximidades do ponto crítico. É possível escrever os expoentes críticos na análise de modelos magnéticos em função de y_t e y_h como, por exemplo:

$$\alpha = 2 - dy_t , \quad (2.17)$$

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} , \quad (2.18)$$

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} , \quad (2.19)$$

Assim, a partir do conhecimento do expoente β e do período da amplitude log-periódica podemos calcular todos os expoentes críticos .

3 Rede de Bethe

De maneira semelhante a abordagens de campo médio, a rede de Bethe é uma boa aproximação de sistemas em altas dimensões. Nosso interesse particular na rede de Bethe decorre da relativa facilidade na obtenção da magnetização e da determinação exata e analítica da temperatura crítica.

Definiremos neste capítulo a rede de Bethe e obteremos a magnetização como função da temperatura para os modelos de Ising e Blume-Capel.

3.1 Definição

A rede de Bethe pode ser definida a partir de uma sub-região interna de um estrutura denominada árvore de Cayley. Para construirmos uma árvore de Cayley devemos considerar um sítio, ligado a z vizinhos, os quais, por sua vez, estão ligados a novos $z - 1$ sítios e assim sucessivamente, de modo a não permitir anéis fechados, como mostrado na figura 6.

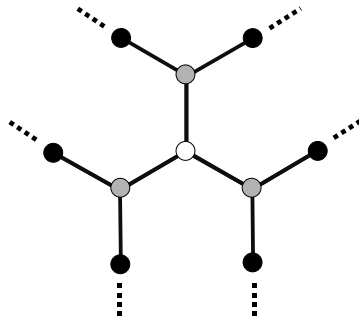


Figura 6: Rede de Bethe com $z = 3$, onde são mostrados os sítios da N -ésima geração — denominado também de sítio central — em branco, a $(N - 1)$ -ésima geração em cinza e a $(N - 2)$ -ésima geração em preto.

A rede de Bethe é justamente a região central da árvore de Cayley, longe da superfície, onde todos os sítios podem ser considerados equivalentes, possuindo todos eles z vizinhos.

Cada geração, representada por n , possui η sítios, onde

$$\eta = z(z-1)^{N-n-1}, \quad (3.1)$$

quando $n \in (N-1, N-2, \dots, 1)$, sendo que na N -ésima geração $\eta = 1$.

Somando a equação (3.1) sobre todas as gerações, podemos obter o número total de sítios \mathcal{N}

$$\mathcal{N} = z \left[\frac{(z-1)^{N-1} - 1}{z-2} \right] + 1. \quad (3.2)$$

Mesmo no limite $N \rightarrow \infty$, a árvore Cayley com $z \neq 2$ possui uma fração finita do total de sítios na superfície. Isto pode ser evidenciado, considerando a razão entre (3.1) e (3.2),

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\eta}{\mathcal{N}} = \frac{z-2}{z-1}. \quad (3.3)$$

3.2 Obtenção da magnetização

Para obtermos a magnetização da rede de Bethe com as interações entre os sítios dadas pelos hamiltonianos de Ising e Blume-Capel, devemos realizar o cálculo da função de partição \mathcal{Z}

$$\mathcal{Z} = \sum_s \exp(-\beta\mathcal{H}), \quad (3.4)$$

onde a soma é realizada sobre todos os microestados, sendo que

$$\beta\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} s_i s_j, \quad (3.5)$$

para o modelo de Ising, onde $K_{ij} = \frac{J_{ij}}{k_B T}$, $s_i = \pm 1$, com a soma efetuada sobre todos os pares de sítios primeiros vizinhos.

No modelo de Blume-Capel

$$\beta\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} s_i s_j + \sum_i D_i s_i^2, \quad (3.6)$$

onde $s_i = \pm 1, 0$, $D_i \equiv \frac{\Delta_i}{k_B T}$, com Δ sendo o campo cristalino.

A fim de obtermos a função de partição, vamos definir funções de partição parciais $\mathcal{Z}_\alpha(\lambda)$, como sendo a soma sobre todos os microestados dos sítios posteriores a um dado sítio da α -ésima geração com o spin deste no estado λ , como mostrado na figura 7. A

função de partição pode ser escrita como

$$\mathcal{Z} = \sum_{\lambda} \mathcal{Z}_N(\lambda). \quad (3.7)$$

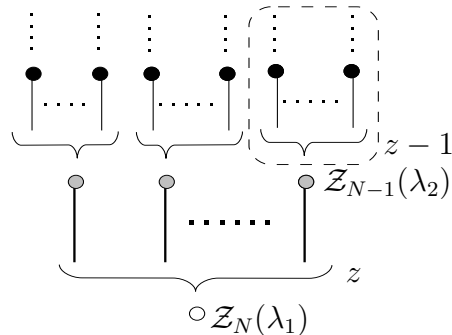


Figura 7: $\mathcal{Z}_N(\lambda_1)$ é a função de partição parcial com spin raiz no estado λ_1 , e $\mathcal{Z}_{N-1}(\lambda_2)$ é a função de partição parcial, com spin raiz no estado λ_2 , do ramo envolvido pela linha tracejada.

Tendo em vista o hamiltoniano de Blume-Capel, descrito na equação (3.6), é possível obter uma relação entre as funções de partição parciais:

$$\mathcal{Z}_N(+) = e^{-D_N} [e^{K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(+) + \mathcal{Z}_{N-1}(0) + e^{-K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(-)]^z, \quad (3.8)$$

$$\mathcal{Z}_N(0) = [\mathcal{Z}_N(+) + \mathcal{Z}_N(0) + \mathcal{Z}_N(-)]^z, \quad (3.9)$$

$$\mathcal{Z}_N(-) = e^{-D_N} [e^{-K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(+) + \mathcal{Z}_{N-1}(0) + e^{+K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(-)]^z. \quad (3.10)$$

Estas relações podem ser escritas dessa forma porque os ramos são independentes, tornando possível fatorar as funções de partição parciais. Considerando, nessa análise, que os z ramos são equivalentes, teremos um produtório de z termos idênticos como mostrado nas equações (3.8), (3.9) e (3.10). Para que os ramos sejam equivalentes, a interação de um sítio com os seus vizinhos deve ser a mesma para todos os sítios de uma geração, ou seja

$$K_{ij} = K_n, \quad (3.11)$$

para i e j relativos à n -ésima geração.

As funções de partição parciais das gerações não contendo o sítio central são dadas,

usando as mesmas considerações anteriores, por:

$$\mathcal{Z}_n(+) = e^{-D_N} [e^{K_n} \mathcal{Z}_{n-1}(+) + \mathcal{Z}_{n-1}(0) + e^{-K_n} \mathcal{Z}_{n-1}(-)]^{z-1}, \quad (3.12)$$

$$\mathcal{Z}_n(0) = [\mathcal{Z}_n(+) + \mathcal{Z}_n(0) + \mathcal{Z}_n(-)]^{z-1}, \quad (3.13)$$

$$\mathcal{Z}_n(-) = e^{-D_N} (e^{-K_n} \mathcal{Z}_{n-1}(+) + \mathcal{Z}_{n-1}(0) + e^{+K_n} \mathcal{Z}_{n-1}(-))^{z-1}. \quad (3.14)$$

Para obtermos a magnetização do sítio central, ou seja da N-ésima geração, devemos lembrar que a função de partição parcial \mathcal{Z}_N , da forma como foi definida, pode ser interpretada como a probabilidade (peso estatístico) da rede possuir o sítio central no estado de spin λ , e portanto

$$m_N = \frac{\sum_{\lambda} \lambda \mathcal{Z}_N(\lambda)}{\sum_{\lambda} \mathcal{Z}_N(\lambda)}. \quad (3.15)$$

Igualmente definiremos o valor médio quadrático da projeção de spin

$$q_N = \frac{\sum_{\lambda} \lambda^2 \mathcal{Z}_N(\lambda)}{\sum_{\lambda} \mathcal{Z}_N(\lambda)}. \quad (3.16)$$

No caso do modelo de Blume-Capel, em que $\lambda \in \{1, 0, -1\}$, as equações (3.15) e (3.16) tornam-se:

$$m_N = \frac{\mathcal{Z}_N(+) - \mathcal{Z}_N(-)}{\mathcal{Z}_N(+) + \mathcal{Z}_N(0) + \mathcal{Z}_N(-)}, \quad (3.17)$$

$$q_N = \frac{\mathcal{Z}_N(+) + \mathcal{Z}_N(-)}{\mathcal{Z}_N(+) + \mathcal{Z}_N(0) + \mathcal{Z}_N(-)}, \quad (3.18)$$

onde tomamos a liberdade de escrever as projeções de spin $+1, 0$ e -1 como $+$, 0 e $-$, respectivamente. Excluindo o estado 0 de (3.17) e (3.18), obtemos m_N e q_N para o hamiltoniano de Ising:

$$m_N = \frac{\mathcal{Z}_N(+) - \mathcal{Z}_N(-)}{\mathcal{Z}_N(+) + \mathcal{Z}_N(-)}, \quad (3.19)$$

$$q_N = 1. \quad (3.20)$$

Podemos definir, de maneira equivalente, o que iremos chamar de magnetização parcial, m_n e valor médio quadrático parcial da n-ésima geração, q_n , no modelo de Blume-Capel:

$$m_n = \frac{\mathcal{Z}_n(+) - \mathcal{Z}_n(-)}{\mathcal{Z}_n(+) + \mathcal{Z}_n(0) + \mathcal{Z}_n(-)}, \quad (3.21)$$

$$q_n = \frac{\mathcal{Z}_n(+) + \mathcal{Z}_n(-)}{\mathcal{Z}_n(+) + \mathcal{Z}_n(0) + \mathcal{Z}_n(-)}. \quad (3.22)$$

No caso do modelo de Ising:

$$m_n = \frac{\mathcal{Z}_n(+)-\mathcal{Z}_n(-)}{\mathcal{Z}_n(+)+\mathcal{Z}_n(-)}, \quad (3.23)$$

$$q_n = 1. \quad (3.24)$$

Para ambos os modelos, $n \in \{N-1, N-2, N-3, \dots, 1\}$.

Cabe salientar que m_n e q_n não têm necessariamente o sentido de magnetização como fora definido nas equações (3.15) e (3.16), pois as funções de partição parciais, que não $\mathcal{Z}_N(\lambda)$, não representam a probabilidade (peso estatístico) de um sítio na geração n encontrar-se no estado λ . Discutiremos mais detalhadamente essa questão na próxima seção.

A partir de agora, faremos referência somente ao modelo de Blume-Capel.

Substituindo as equações (3.8), (3.9) e (3.10) na (3.17), obtemos:

$$m_N = \frac{\{[e^{K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(+) + \mathcal{Z}_{N-1}(0) + e^{-K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(-)]^z - [e^{-K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(+) + \mathcal{Z}_{N-1}(0) + e^{+K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(-)]^z\}}{\{[e^{K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(+) + \mathcal{Z}_{N-1}(0) + e^{-K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(-)]^z + e^{D_N} [\mathcal{Z}_{N-1}(+) + \mathcal{Z}_{N-1}(0) + \mathcal{Z}_{N-1}(-)]^z + [e^{K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(+) + \mathcal{Z}_{N-1}(0) + e^{-K_N} \mathcal{Z}_{N-1}(-)]^z\}}. \quad (3.25)$$

De (3.21) e (3.22) decorrem as seguintes relações, para todo n (incluindo N):

$$\frac{\mathcal{Z}_n(+)}{\mathcal{Z}_n(+)+\mathcal{Z}_n(0)+\mathcal{Z}_n(-)} = \frac{q_n+m_n}{2}, \quad (3.26)$$

$$\frac{\mathcal{Z}_n(0)}{\mathcal{Z}_n(+)+\mathcal{Z}_n(0)+\mathcal{Z}_n(-)} = 1-q_n, \quad (3.27)$$

$$\frac{\mathcal{Z}_n(-)}{\mathcal{Z}_n(+)+\mathcal{Z}_n(0)+\mathcal{Z}_n(-)} = \frac{q_n-m_n}{2}, \quad (3.28)$$

Podemos então dividir todos os termos da (3.25) por $[\mathcal{Z}_{N-1}(+)+\mathcal{Z}_{N-1}(0)+\mathcal{Z}_{N-1}(-)]$ e obter

$$m_N = \frac{\{[q_{N-1}(\cosh(K_N)-1)+m_{N-1}\sinh(K_N)+1]^z - [q_{N-1}(\cosh(K_N)-1)-m_{N-1}\sinh(K_N)+1]^z\}}{\{[q_{N-1}(\cosh(K_N)-1)+m_{N-1}\sinh(K_N)+1]^z + [q_{N-1}(\cosh(K_N)-1)-m_{N-1}\sinh(K_N)+1]^z\}} + e^{D_N}. \quad (3.29)$$

Considerando o mesmo procedimento até aqui descrito e tendo em vista as relações de recorrência (3.12), (3.13) e (3.14)

$$m_n = \frac{\left\{ [q_{n-1}(\cosh(K_n) - 1) + m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta - [q_{n-1}(\cosh(K_n) - 1) - m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta \right\}}{\left\{ [q_1(\cosh(K_n) - 1) + m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta + [q_{n-1}(\cosh(K_n) - 1) - m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta \right\} + e^{D_n}}, \quad (3.30)$$

onde $\zeta = z$ quando $n = N$ e $\zeta = z - 1$ para $n \in \{N - 1, N - 2, N - 3, \dots, 1\}$.

Analogamente podemos obter, através da equação (3.16)

$$q_n = \frac{\left\{ [q_{n-1}(\cosh(K_n) - 1) + m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta + [q_{n-1}(\cosh(K_n) - 1) - m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta \right\}}{\left\{ [q_{n-1}(\cosh(K_n) - 1) + m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta + [q_{n-1}(\cosh(K_n) - 1) - m_{n-1}\sinh(K_n) + 1]^\zeta + e^{D_n} \right\}}, \quad (3.31)$$

3.3 Limite de campo médio

Agora, iremos considerar as relações de recorrência (3.30) e (3.31) no limite denominado limite de campo médio da rede de Bethe. Este limite é obtido fazendo:

$$\begin{aligned} J_n &\rightarrow 0, \\ z &\rightarrow \infty, \end{aligned}$$

de modo que $\tilde{J}_n \equiv zJ_n$ seja finito. As equações (3.30) e (3.31) tornam-se então:

$$m_n = \frac{(1 + K_n m_{n-1})^z - (1 - K_n m_{n-1})^z}{(1 + K_n m_{n-1})^z + (1 - K_n m_{n-1})^z + e^{D_n}}, \quad (3.32)$$

$$q_n = \frac{(1 + K_n m_{n-1})^z + (1 - K_n m_{n-1})^z}{(1 + K_n m_{n-1})^z + (1 - K_n m_{n-1})^z + e^{D_n}}, \quad (3.33)$$

onde usamos $\zeta \simeq z$ para todo $n \in \{N, N - 1, N - 2, N - 3, \dots, 1\}$.

Usando a relação

$$\lim_{z \rightarrow \infty, K_n \rightarrow 0} (1 \pm K_n m_{n-1})^z \simeq e^{\pm z K_n m_{n-1}}, \quad (3.34)$$

finalmente obtemos:

$$m_n = \frac{2 \sinh(\tilde{K}_n m_{n-1})}{2 \cosh(\tilde{K}_n m_{n-1}) + e^{D_n}}, \quad (3.35)$$

$$q_n = \frac{2 \cosh(\tilde{K}_n m_{n-1})}{2 \cosh(\tilde{K}_n m_{n-1}) + e^{D_n}}, \quad (3.36)$$

onde $\tilde{K}_n \equiv \frac{\tilde{J}_n}{k_B T}$.

Note que, neste limite, a grandeza q_n não desempenha papel algum no cálculo da temperatura crítica, do expoente da magnetização e do limite de estabilidade da fase paramagnética.

Relações de recorrência como as anteriores também podem ser obtidas quando consideramos o hamiltoniano de Ising na rede de Bethe. De fato, com um procedimento análogo ao usado no caso do hamiltoniano de Blume-Capel, no limite de campo médio obtemos a seguinte relação

$$m_n = \tanh(\tilde{K}_n m_{n-1}). \quad (3.37)$$

Esta expressão é idêntica à que é obtida através de uma análise de campo médio do modelo de Ising homogêneo, em uma rede com z primeiros vizinhos; daí o nome limite de campo médio.

3.4 Interpretação da magnetização

Na última seção, discutimos uma relação de recorrência entre as magnetizações de sucessivas gerações, a qual permite o cálculo da magnetização do sítio central. Entretanto, a magnetização do sítio central é a única que foi bem caracterizada em nossa análise. Como já foi salientado, somente a definição vista na equação (3.15) é efetivamente uma definição do valor médio da projeção de spin, a qual caracteriza a magnetização.

Para as outras gerações, que não a do sítio central, as definições (3.21) e (3.23), seriam somente variáveis que respeitam essa relação de recorrência. De fato, a probabilidade de um sítio da n -ésima geração estar no estado, digamos λ , é dada pela soma da probabilidade de todos os microestados em que o sítio em consideração se encontra no estado λ . Por outro lado, $\mathcal{Z}_n(\lambda)$ representa a soma sobre todos os microestados, com o sítio raiz no estado λ , dos sítios das gerações posteriores à da raiz desse ramo: $n - 1, n - 2, \dots, 1$. Sendo assim, em (3.21) e (3.23) estamos desconsiderando $N - n$ gerações que contribuem para a determinação da magnetização. Podemos ilustrar essa distinção com o exemplo mostrado pela figura 8.

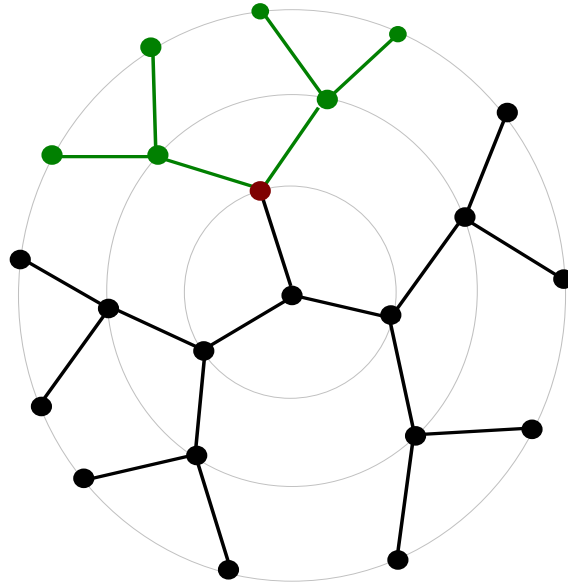


Figura 8: A soma sobre todos os estados $\mathcal{Z}_{N-1}(\lambda)$ é realizada sobre os sítios em verde, o sítio raiz no estado de spin λ é mostrado em vermelho

Nesta seção, iremos considerar as dificuldades mencionadas e entender como podemos abordar o problema da rede de Bethe com interações aperiódicas.

3.4.1 Caso homogêneo

A magnetização de uma rede é definida por

$$M_N = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} m_i, \quad (3.38)$$

onde \mathcal{N} representa o número de sítios da rede e m_i aqui representa a magnetização dos sítio e não a magnetização parcial.

No caso homogêneo, as interações são todas idênticas, ou seja, tanto K_n quanto D_n são constantes para todo n . Assim, a rede de Bethe como foi definida na seção 3.1, por se tratar da região afastada da superfície de uma árvore de Cayley, tem todos os seus sítios equivalentes. Desta forma, no caso ferromagnético ($J > 0$), o cálculo da magnetização do sítio central é suficiente para caracterizar a magnetização de toda a rede de Bethe.

No limite de campo médio, a magnetização parcial da n -ésima, que não a N -ésima, pode ser interpretada como a magnetização do spin central de uma rede de Bethe com $N - n$ gerações.

Podemos definir a magnetização da rede de Bethe com N gerações quando as interações são uniformes

$$M_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N m_n, \quad (3.39)$$

onde m_n representa a magnetização parcial da n -ésima geração. Podemos também no limite de campo médio e no caso ferromagnético, considerando o caso dos sítios serem equivalentes

$$m_n = m_i = M_N = m_N. \quad (3.40)$$

A equivalência entre as magnetizações definidas através das equações (3.38) e (3.39) perde a validade no caso antiferromagnético, onde $J < 0$. Neste caso devemos usar a magnetização (3.39) para manter a equivalência entre a abordagem na rede de Bethe e outras abordagens de campo médio, mesmo sendo a (3.38) a representação adequada da magnetização da rede de Bethe.

Pode-se mostrar [14] que, para o caso homogêneo, as informações relevantes para este trabalho (temperatura crítica e expoente da magnetização) serão as mesmas se obtidas usando a magnetização parcial (m_{N-1}) ou a magnetização do spin central (m_N), mesmo para z finito.

3.4.2 Caso não-homogêneo.

Agora iremos tratar os problemas que emergem do fato de termos alguma não homogeneidade nas interações. Vamos considerar primeiramente uma rede de Bethe com um sítio que interage com um de seus vizinhos através dos parâmetros K' e D' diferentes das outras interações, como pode ser visto na figura 9.

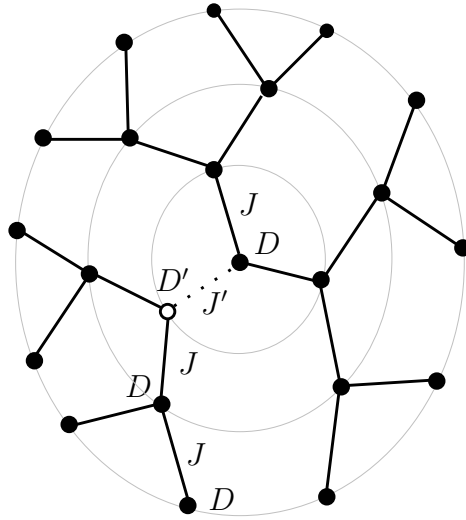


Figura 9: Todos os sítios em preto interagem igualmente com seus vizinhos; salvo o sítio mostrado em branco, que interage com o sítio central segundo diferentes constantes.

A magnetização do spin central ainda pode ser obtida sem muita dificuldade, basta observarmos, com cuidado, que as relações entre as funções de partição parciais, nas equações (3.8) - (3.10), sofrem modificações:

$$\mathcal{Z}_N(+)=\left(e^{K'-D'}\mathcal{Z}_{N-1}(+)+e^{-D'}\mathcal{Z}_{N-1}(0)+e^{-K'-D'}\mathcal{Z}_{N-1}(-)\right)\left(e^{K-D}\mathcal{Z}_{N-1}(+)+e^{-D}\mathcal{Z}_{N-1}(0)+e^{-K-D}\mathcal{Z}_{N-1}(-)\right)^{z-1}, \quad (3.41)$$

$$\mathcal{Z}_N(0)=\left(\mathcal{Z}_N(+)+\mathcal{Z}_N(0)+\mathcal{Z}_N(-)\right)^z, \quad (3.42)$$

$$\mathcal{Z}_N(-)=\left(e^{-K'-D'}\mathcal{Z}_{N-1}(+)+e^{-D'}\mathcal{Z}_{N-1}(0)+e^{+K'-D'}\mathcal{Z}_{N-1}(-)\right)\left(e^{-K-D}\mathcal{Z}_{N-1}(+)+e^{-D}\mathcal{Z}_{N-1}(0)+e^{+K-D}\mathcal{Z}_{N-1}(-)\right)^{z-1}. \quad (3.43)$$

A magnetização da rede de Bethe também pode ser considerada igual à magnetização do sítio central, isso porque somente um sítio difere dos demais, e no limite de campo médio ele pode ser desconsiderado. O mesmo não acontece quando uma fração finita de ligações é diferente das demais.

Temos interesse justamente no caso em que os sítios das gerações interagem com os das anteriores segundo uma regra aperiódica, como foi discutido no capítulo 2. Nesses casos a magnetização da rede de Bethe não é necessariamente igual à do sítio central, sendo que, claramente, os sítios não são equivalentes. Caso queiramos calcular a magnetização

da rede de Bethe devemos tomar cada um dos sítios como se fosse o central e fazermos a média dessas magnetizações de spin central. Entretanto essa tarefa mostra-se difícil, quando visto que as relações de recorrência entre as funções de partição parciais são muito mais complicadas que as mostradas nas equações (3.41) - (3.43).

3.4.3 Magnetização do spin central

A dificuldade em se obter a magnetização da rede de Bethe usando relações de recorrência quando tratamos de sistemas aperiódicos nos leva a somente abordarmos a magnetização do sítio central, e por conseqüência, estudarmos somente o comportamento crítica da mesma. No entanto, mesmo resumindo nosso estudo à magnetização do sítio central, observamos dificuldades de obtenção de um valor fixo de magnetização mesmo no limite termodinâmico. Isso é visto se iterarmos a equação (3.35) ou ainda (3.37), tantas vezes quanto as que forem necessárias para que a escolha do valor inicial de magnetização m_1 não influa nas magnetizações.

As interações são regidas pelas seqüências aperiódicas definidas no capítulo 2, de modo que:

$$D_n = D_A, \quad (3.44)$$

$$K_n = K_A, \quad (3.45)$$

quando a n -ésima letra de uma seqüência corresponder à letra A , e

$$D_n = D_B, \quad (3.46)$$

$$K_n = K_B, \quad (3.47)$$

quando a n -ésima letra de uma seqüência corresponder à letra B . Como exemplo podemos considerar a seqüência ABA , como mostrado na figura 10.

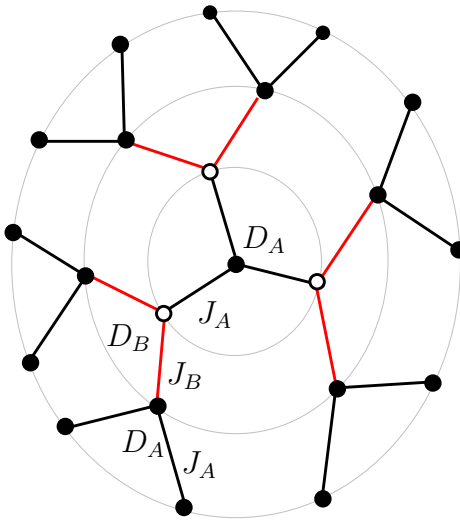


Figura 10: Na figura, as ligações em vermelho representam constantes de interação J_B e as ligações em preto, representam J_A . Sobre os sítios brancos e pretos, agem os campos cristalinos D_B e D_A respectivamente

Os gráficos apresentados a seguir mostram a magnetização do sítio central em função do tamanho da rede, obtidas com as relações (3.35) e (3.37). As magnetizações dizem respeito a tamanhos naturais das seqüências aperiódicas, definidos pela maneira em que as seqüências inflam, como mostrado no capítulo 2.

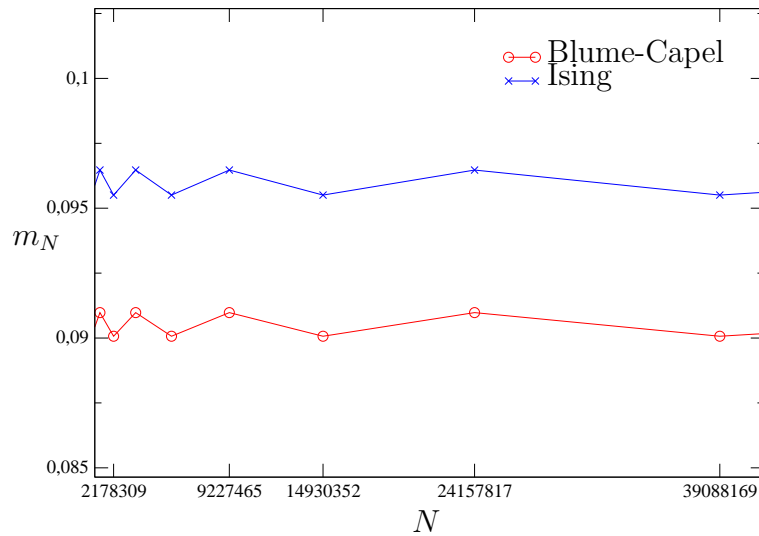


Figura 11: A figura mostra a magnetização do sítio central em função do tamanho da rede, para a seqüência de Fibonacci e o hamiltoniano de Blume-Capel com $D_A = D_B = 0$, $\tilde{K}_A \cong 0,8$ e $\tilde{K}_B \cong 4,0$, e para o de Ising com $\tilde{K}_A \cong 0,5$ e $\tilde{K}_B \cong 2,7$.

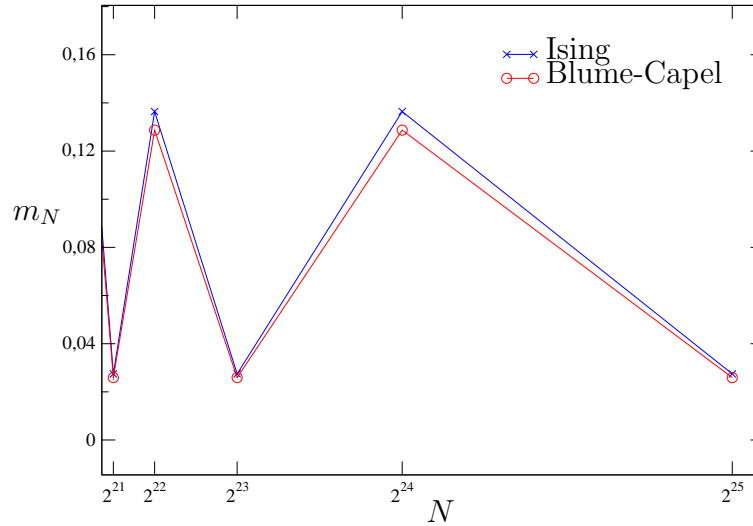


Figura 12: A figura mostra a magnetização do sítio central em função do tamanho da rede usando a seqüência de duplicação de período, no modelo de Blume-Capel com $D_A = D_B = 0$, $\tilde{K}_A \cong 0,9$ e $\tilde{K}_R \cong 4,5$, e no de Ising com $\tilde{K}_A \cong 0,6$ e $\tilde{K}_R \cong 3,0$.

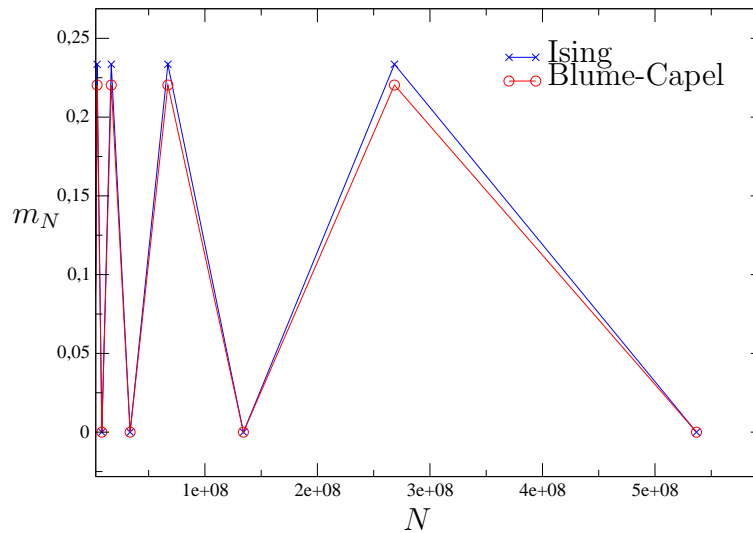


Figura 13: A figura mostra a magnetização do sítio central em função do tamanho da rede usando a seqüência de Rudin-Shapiro no modelo Blume-Capel com $D_A = D_B = 0$, $\tilde{K}_A \cong 1,1$ e $\tilde{K}_B \cong 2,1$, e no de Ising com $\tilde{K}_A \cong 0,7$ e $\tilde{K}_B \cong 1,4$.

As figuras 11 - 13 mostram que a magnetização do sítio central muda em função do tamanho da rede em consideração, por maior que seja o tamanho da mesma, apesar disto a média é bem definida como será mostrado na próxima seção.

3.4.4 Definição de uma magnetização

Tendo em vista a dificuldade em determinarmos a magnetização da rede de Bethe, iremos considerar um novo esquema para sua obtenção, considerando a soma de todas as magnetizações parciais.

Vamos propor uma magnetização, em analogia a (3.39), definida por

$$M_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N m_n, \quad (3.48)$$

onde m_n representa a magnetização parcial de um sítio da n -ésima geração.

Não podemos tomar uma média sobre a magnetização de todos os sítios da rede como foi proposto no caso homogêneo (3.38), pois uma geração possui uma fração finita dos sítios da rede formada a partir dela, como foi visto na equação (3.3). Note que esta definição da magnetização (3.48) é mais adequada, comparada à (3.38), quando queremos obter através da rede de Bethe uma aproximação para modelos antiferromagnético ($J < 0$) em redes de Bravais bipartites.

A grandeza proposta como magnetização, colocada através da equação (3.48), permite a obtenção do limite termodinâmico como mostrado nas figuras 14 - 16.

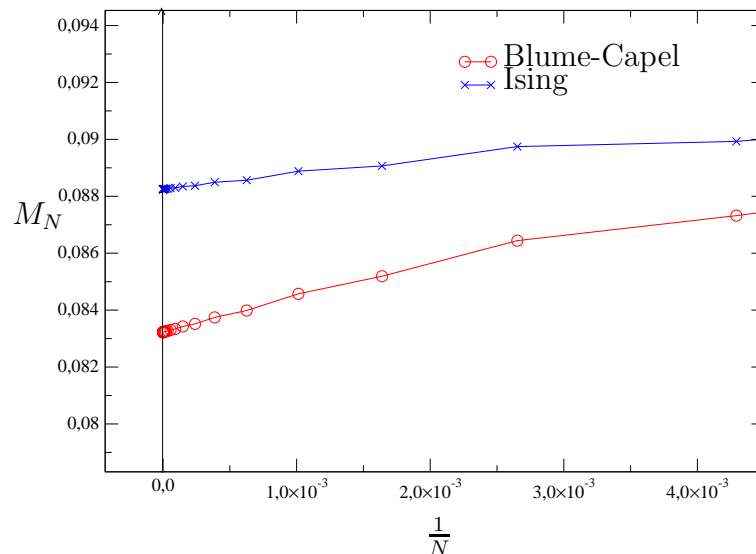


Figura 14: A figura mostra a magnetização em função do tamanho da rede de Bethe usando a seqüência de Fibonacci, para o hamiltoniano de Blume-Capel com $D_A = D_B = 0$, $\tilde{K}_A \cong 0,8$ e $\tilde{K}_B \cong 4,0$, e para o de Ising com $\tilde{K}_A \cong 0,5$ e $\tilde{K}_B \cong 2,7$.

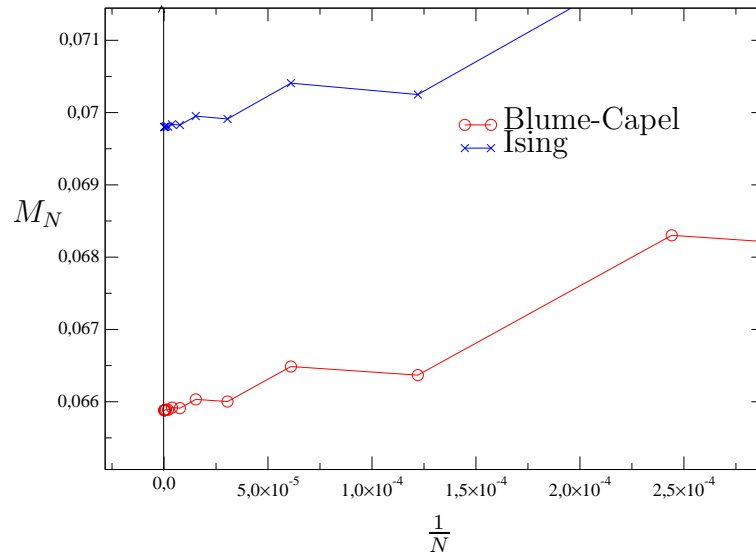


Figura 15: A figura mostra a magnetização em função do tamanho da rede de Bethe usando a seqüência de duplicação de período, modelo de Blume-Capel com $D_A = D_B = 0$, $\tilde{K}_A \cong 0,9$ e $\tilde{K}_B \cong 4,5$, e para o de Ising com $\tilde{K}_A \cong 0,6$ e $\tilde{K}_B \cong 3,0$.

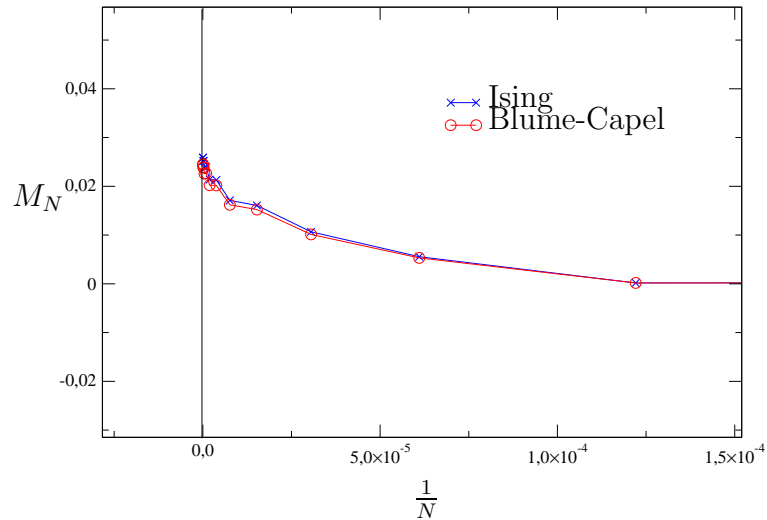


Figura 16: A figura mostra a magnetização em função do tamanho da rede de Bethe usando a seqüência de Rudin-Shapiro, modelo Blume-Capel com $D_A = D_B = 0$, $\tilde{K}_A \cong 1,1$ e $\tilde{K}_B \cong 2,1$, Ising $\tilde{K}_A \cong 0,7$ e $\tilde{K}_B \cong 1,4$.

Outro aspecto relevante em relação a essa grandeza, que aqui por diante chamaremos somente de magnetização, é que no caso homogêneo ferromagnético, no limite de campo médio, ela representa fielmente a magnetização da rede de Bethe. Esta definição de magnetização também é adequada se observamos esta abordagem na rede de Bethe, como

uma abordagem de campo médio análoga ao trabalho de *Iglói* e *Palágyi* [10], onde a magnetização é perfeitamente caracterizada e definida da mesma forma.

3.5 Cálculo da derivada

Com a definição da magnetização feita na seção anterior temos o caminho aberto para o cálculo do expoente crítico da magnetização. Este cálculo pode ser feito através da equação (2.14) onde obtemos que

$$M_N(t) = t^\beta P''[\log(t)]. \quad (3.49)$$

Tomando o logaritmo em ambos os lados de (3.49)

$$\log(M_N) = \beta \log(t) + P'[\log(t)], \quad (3.50)$$

sendo que $P'[\log(t)]$ é uma nova função periódica de $\log(t)$.

Para obtermos o expoente β podemos derivar a equação (3.50) em relação a $\log(t)$

$$\frac{d \log(M_N(t))}{d \log(t)} = \beta + P[\log(t)] \quad (3.51)$$

É possível, desta forma, determinar o expoente β calculando a derivada do lado esquerdo da equação (3.51). Podemos obtê-la numericamente, tomando a magnetização de dois valores de temperatura próximos, ou ainda, podemos usar uma expressão para a derivada em função das magnetizações parciais e da temperatura. Nesta seção vamos justamente calcular uma expressão analítica para a derivada apresentada acima.

Partindo do lado direito da (3.51), podemos escrever

$$\frac{d \log(M_N(t))}{d \log(t)} = \frac{t}{M_N} \frac{dM_N}{dt}. \quad (3.52)$$

Usando as equação (3.48) e (3.52)

$$\frac{d \log(M_N(t))}{d \log(t)} = \frac{t}{NM_N} \sum_{n=1}^N \frac{dm_n}{dt}. \quad (3.53)$$

Tendo em vista que as magnetizações parciais são obtidas através da equação de

recorrência mostrada na (3.37), podemos entender m_n como uma função de várias variáveis

$$m_n = f(m_1, \tilde{K}_2, \tilde{K}_3, \tilde{K}_4, \dots, \tilde{K}_n). \quad (3.54)$$

Concluimos então que

$$\frac{dm_n}{dt} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial m_n}{\partial \tilde{K}_k} \frac{d\tilde{K}_k}{dt}, \quad \text{para } n \geq 2. \quad (3.55)$$

$$\frac{dm_n}{dt} = 0, \quad \text{para } n = 1.$$

Todavia a magnetização parcial m_n é uma função das variáveis citadas na equação (3.54) segundo uma cadeia de variáveis explícitas e implícitas:

$$m_n = f(m_{n-1}(m_{n-2}(\dots(m_1, \tilde{K}_2)\dots), \tilde{K}_{n-1}), \tilde{K}_n), \quad (3.56)$$

Assim sendo:

$$\frac{\partial m_n}{\partial \tilde{K}_k} = \prod_{l=k+1}^n \frac{\partial m_l}{\partial m_{l-1}} \frac{\partial m_k}{\partial \tilde{K}_k}, \quad \text{para } k \neq n. \quad (3.57)$$

Finalmente, usando as equações (3.53), (3.55) e (3.57) obtemos:

$$\frac{d \log(M_N(t))}{d \log(t)} = \frac{t}{NM_N} \sum_{n=2}^N \sum_{k=1}^n \left[(1 - \delta_{k,n}) \left(\prod_{l=k+1}^n \frac{\partial m_l}{\partial m_{l-1}} \right) \frac{\partial m_k}{\partial \tilde{K}_k} + \delta_{k,n} \frac{\partial m_n}{\partial \tilde{K}_k} \right] \frac{d\tilde{K}_k}{dt}. \quad (3.58)$$

As derivadas da equação (3.58) podem ser obtidas a partir das relações de recorrência (3.35) e (3.37)

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_l}{\partial m_{l-1}} &= \left\{ 1 - \left[\tanh \left(\tilde{K}_l m_{l-1} \right) \right]^2 \right\} \tilde{K}_l, \\ \frac{\partial m_k}{\partial \tilde{K}_k} &= \left\{ 1 - \left[\tanh \left(\tilde{K}_k m_{k-1} \right) \right]^2 \right\} \tilde{m}_{k-1}, \end{aligned}$$

quando considerado o hamiltoniano de Ising, ou

$$\frac{\partial m_l}{\partial m_{l-1}} = 2 \frac{\cosh(K_l m_{l-1}) K_l}{2 \cosh(K_l m_{l-1}) + 1} - 4 \frac{[\sinh(K_l m_{l-1})]^2 K_l}{[2 \cosh(K_l m_{l-1}) + 1]^2}, \quad (3.59)$$

$$\frac{\partial m_k}{\partial \tilde{K}_k} = 2 \frac{\cosh(K_k m_{k-1}) m_{k-1}}{2 \cosh(K_k m_{k-1}) + 1} - 4 \frac{[\sinh(K_k m_{k-1})]^2 m_{k-1}}{[2 \cosh(K_k m_{k-1}) + 1]^2}, \quad (3.60)$$

para o hamiltoniano de Blume-Capel.

A expressão (3.58) é geral, sendo válida para qualquer grandeza obtida através de relações de recorrência do tipo

$$x_i = f(a_i x_{i-1}), \quad (3.61)$$

desde que f seja sempre derivável.

Este procedimento pode ser usado para determinar se o expoente crítico, associado a uma dada grandeza, varia quando acrescentado algum tipo de desordem nas interações do hamiltoniano.

3.6 Temperatura crítica.

Obteremos nesta seção a temperatura crítica da transição de segunda ordem encontrada nos diagramas de fase dos hamiltonianos de Ising e Blume-Capel na rede de Bethe. Para definirmos a temperatura crítica vamos estudar o limite de estabilidade da fase paramagnética. Iremos considerar relações de recorrência gerais, como a mostrada pela equação (3.56), por exemplo.

Podemos escrever a equação citada acima, omitindo as variáveis não importantes em nossa análise, como

$$m_n = f(m_{n-1}). \quad (3.62)$$

Nos hamiltonianos estudados a solução da relação de recorrência em que todas as magnetizações parciais são iguais a zero sempre existe. Vamos portanto, obter a temperatura crítica, que será caracterizada quando essa solução deixa de ser estável.

Considerando um hamiltoniano em que todas as interações são idênticas, a condição para que a fase paramagnética seja estável pode ser obtida se efetuarmos uma variação em m_{n-1}

$$m_n + \delta m_n = f(m_{n-1} + \delta m_{n-1}). \quad (3.63)$$

Quando essa variação é pequena, ou seja $\delta m_{n-1} \simeq 0$, podemos aproximar a equação (3.63) em primeira ordem no ponto $m_{n-1} = 0$

$$\delta m_n = \left[\frac{\partial f(m_{n-1})}{\partial m_{n-1}} \right]_{m_{n-1}=0} \delta m_{n-1}. \quad (3.64)$$

A estabilidade da fase paramagnética está relacionada diretamente à derivada do lado direito de (3.64). Quando essa é menor que um, a fase é estável; caso seja maior que um,

a fase é instável. Isto se deve ao fato de que, no caso estável, a cada iteração da relação de recorrência, a variação imposta a m_n será sempre menor que a anterior e, no limite termodinâmico, em que n vai a infinito, essa variação é zero. Resumindo:

$$\left[\frac{\partial f(m_{n-1})}{\partial m_{n-1}} \right]_{m_{n-1}=0} = \begin{cases} < 1, & \text{estável;} \\ > 1, & \text{instável.} \end{cases} \quad (3.65)$$

Essa interpretação não pode ser usada imediatamente no caso de um hamiltoniano com interações não constantes, o que justamente acontece em nosso estudo.

No capítulo 1 obtivemos a probabilidade de, dado um elemento, obtermos uma determinada letra. No caso de um alfabeto de duas letras, devemos lembrar a expressão (1.18)

$$P_B = \frac{u_{12}}{u_{11} + u_{12}}. \quad (3.66)$$

Agora consideremos novamente (3.56), sendo que omitiremos as variáveis desnecessárias para a análise

$$m_n = f(m_{n-1}(m_{n-l})). \quad (3.67)$$

onde l é grande o suficiente para que (1.17) e (1.18) representem as probabilidades de obtenção das letras A e B respectivamente.

Vamos pretenciosamente tomar a variação de m_{n-l} , em primeira ordem, da equação (3.67)

$$\delta m_n = \left[\frac{\partial f(m_{n-1}(m_{n-l}))}{\partial m_{n-l}} \right]_{(m_{n-1}, \dots, m_1)=0} \delta m_{n-l}. \quad (3.68)$$

Podemos ver, que no caso em que a derivada do lado direito de (3.68) é menor que um

$$\frac{\delta m_n}{\delta m_{n-l}} < 1. \quad (3.69)$$

Equivalentemente,

$$\frac{\delta m_{n+l}}{\delta m_n} < 1 \quad (3.70)$$

se

$$\left[\frac{\partial f(m_{n+l-1}(m_n))}{\partial m_n} \right]_{(m_{n+l-1}, \dots, m_1)=0} < 1. \quad (3.71)$$

Concluimos, através das equações (3.69) e (3.70), que após l iterações as variações $\delta m_n, \delta m_{n+l}, \delta m_{n+2l}, \dots, \delta m_\infty$, vão diminuindo até zero, desde que todas as respectivas

derivadas, como a (3.71), sejam menores que um.

Como l é qualquer, a condição para a estabilidade da solução em que todas as magnetizações parciais são zero, é

$$\left[\frac{\partial f(m_{n+l-1}(m_n))}{\partial m_n} \right]_{(m_{n+l-1}, \dots, m_1)=0} < 1, \quad \forall l \rightarrow \infty, \quad (3.72)$$

ou ainda, tomando a derivada:

$$\prod_{k=l-1}^n \left[\frac{\partial f(m_{n+k})}{\partial m_{n+k}} \right]_{m_{n+k}=0} < 1, \quad \forall l \rightarrow \infty. \quad (3.73)$$

Claramente, o limite de estabilidade é obtido com:

$$\prod_{k=l-1}^n \left[\frac{\partial f(m_{n+k})}{\partial m_{n+k}} \right]_{m_{n+k}=0} = 1, \quad \forall l \rightarrow \infty. \quad (3.74)$$

A condição (3.74) aplicada às relações de recorrência (3.37) e (3.35) com $D_n = 0$ leva a respectivamente:

$$\prod_{k=l-1}^n \left[\frac{\partial f(m_{n+k})}{\partial m_{n+k}} \right]_{m_{n+k}=0} = \prod_{k=l-1}^n \tilde{K}_{n+k} = (1+r)^{l P_B} \tilde{K}_A^l, \quad (3.75)$$

$$\prod_{k=l-1}^n \left[\frac{\partial f(m_{n+k})}{\partial m_{n+k}} \right]_{m_{n+k}=0} = \prod_{k=l-1}^n \frac{2}{3} \tilde{K}_{n+k} = (1+r)^{l P_B} \left[\frac{2}{3} \tilde{K}_A \right]^l, \quad (3.76)$$

onde

$$(1+r) = \frac{\tilde{K}_B}{\tilde{K}_A}. \quad (3.77)$$

A temperatura crítica pode agora ser obtida do limite de estabilidade da fase paramagnética:

- Para o modelo de Ising

$$(1+r)^{P_B} \tilde{K}_A = 1, \quad (3.78)$$

- Para Blume-Capel

$$\frac{2}{3} (1+r)^{P_B} \tilde{K}_A = 1. \quad (3.79)$$

4 *Metodologia*

Como visto no capítulo 3, podemos calcular a magnetização da rede de Bethe usando relações de recorrência. Estas, no limite de campo médio, mostrado pelas equações (3.35) e (3.37) relativas aos modelos de Blume-Capel e Ising reespectivamente, podem ser iteradas tantas vezes quanto o número de gerações da rede de Bethe. Deste fato emerge uma pergunta: quantas gerações a rede deve ter, ou equivalentemente, quantas vezes devemos iterar essas relações de recorrência ?

Para responder esta questão devemos considerar o objetivo inicial desse trabalho; queremos obter o comportamento crítico de um modelo com interações aperiódicas na rede de Bethe. Para completarmos tal tarefa, devemos lembrar que transições de fase são fenômenos associados a singularidades de grandezas termodinâmicas e estas singularidades só podem ocorrer em sistemas de tamanho infinito, que no caso da rede de Bethe significaria um número infinito de gerações.

Esse tamanho infinito necessário para a observação de uma transição de fase corresponde ao limite termodinâmico. Obviamente, se buscarmos uma solução numérica das relações de recorrência, não poderemos fazê-la neste limite, por não podermos iterar estas relações infinitas vezes. Ainda assim, é possível tomar vantagem dessa abordagem numérica se determinarmos um valor aproximado do limite termodinâmico e associarmos a esta aproximação uma barra de erro.

Neste capítulo discutiremos um método para a determinação de uma aproximação da magnetização em relação ao seu valor no limite termodinâmico. Trataremos alguns aspectos técnicos ligados ao algoritmo de criação das seqüências aperiódicas e, por fim, estudaremos como os erros numéricos de nossa abordagem se propagam no cálculo do expoente crítico da magnetização β .

4.1 Magnetização no limite termodinâmico

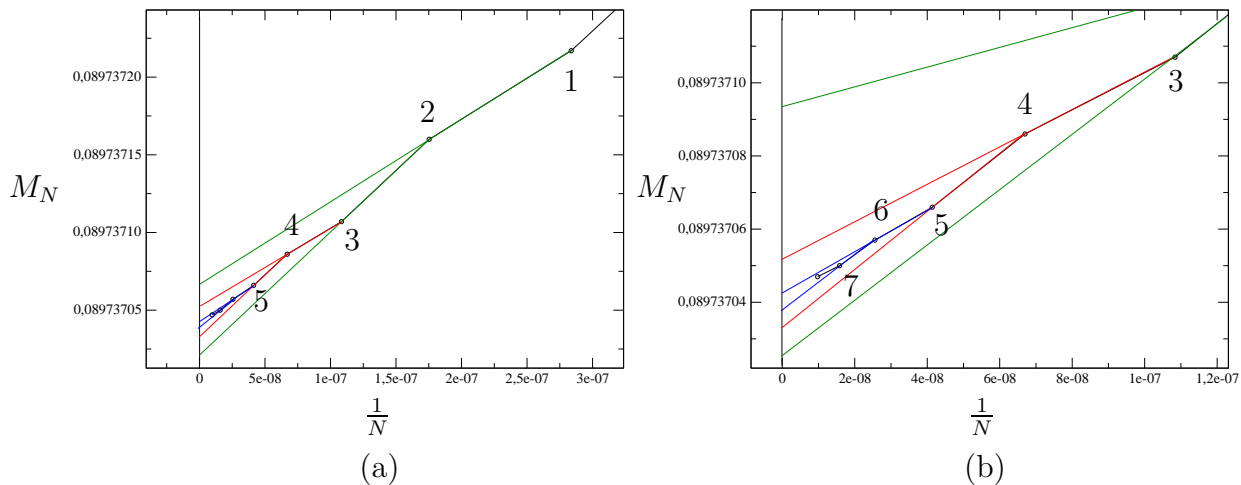
O método construído a seguir para determinar uma aproximação da magnetização no limite termodinâmico, é baseado no comportamento da magnetização em função do número de gerações da rede de Bethe.

Os números de gerações em questão são chamados de números *naturais*. No caso da seqüência de Fibonacci os números naturais são os números de Fibonacci 1, 2, 3, 5, 8, 13, ... ; para as seqüências de duplicação de período e Rudin-Shapiro os números são potências inteiras de 2: 2, 4, 8, 16, 32, A utilização destes números de gerações não é uma mera escolha, mas sim uma necessidade advinda de estarmos estudando aperiodicidades inerentes a seqüências obtidas a partir de regras de substituição.

Recordando a definição de magnetização feita no capítulo 3 através da equação (3.48):

$$M_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N m_n, \quad (4.1)$$

vemos que, através de sucessivas iterações de (3.37), podemos calcular M_N e obter o comportamento representado nas figuras 17 .



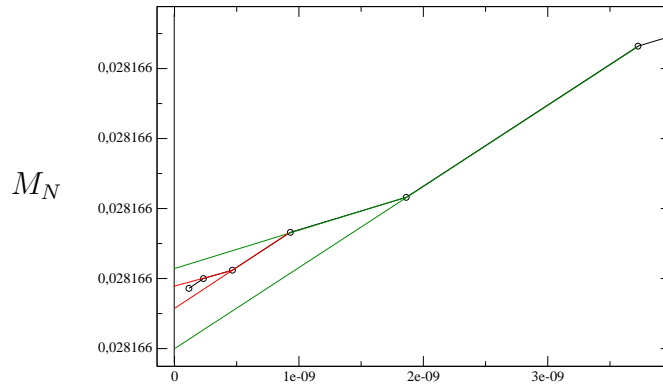
Figuras 17: Gráficos mostram a magnetização como função de tamanhos naturais da rede de Bethe, obtidos para a seqüência de Fibonacci, com o modelo de Ising com $r = 4$ e $K_A = 0,54$.

O gráfico (b) é um aumento de uma região de (a).

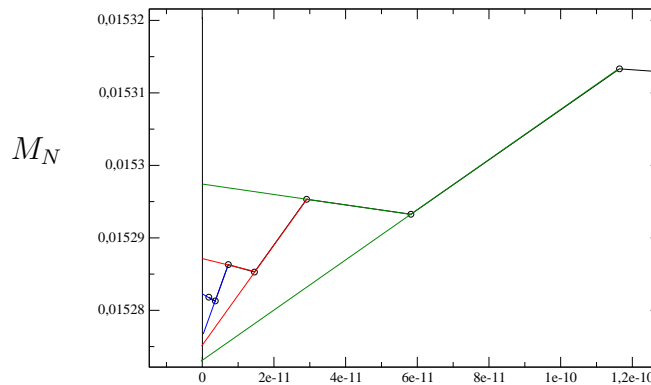
Através de uma análise sistemática das curvas, como as mostradas nas figuras 17(a) e 17(b), foi possível traçarmos os pares de retas mostradas em verde (segmentos de reta $\overline{12}$ e $\overline{23}$), em vermelho ($\overline{34}$ e $\overline{45}$) e em azul ($\overline{56}$ e $\overline{67}$).

Essas retas permitem a obtenção da magnetização da rede de Bethe no limite termodinâmico. Para isto, devemos observar que todas as magnetizações de redes de Bethe maiores dos que as usadas para construir um determinado par de segmentos de reta, apresentam-se dentro da região interna a estes pares e a linha que marca N infinito ($1/N = 0$). Desta forma é possível construir um critério para calcularmos a magnetização no limite termodinâmico, assim como definir uma margem de segurança em relação ao valor da mesma e assim obter uma barra de erro usando a distância entre os pontos em que cada um dos segmentos de reta intercepta a marca de N infinito.

Este método de extrapolação pode ser usado com as outras seqüências observadas neste trabalho, tanto no estudo do modelo de Ising como no estudo do modelo de Blume-Capel.



Figuras 18: Na figura mostramos a magnetização como função de tamanhos naturais da rede de Bethe obtidos para a seqüência de duplicação de período, usando o modelo de Ising com $r = 1$ e $K_A = 0,58$.



Figuras 19: Mostramos nesta figura a magnetização para tamanhos naturais, usando a seqüência de Rudin-Shapiro no modelo de Ising com $r = 1$ e $K_A = 0,71$.

4.1.1 Erro na magnetização

Para definirmos o erro associado à obtenção do limite termodinâmico, vamos representar os valores de M_N , em que o par de segmentos de reta intercepta a marca de N infinito, por M' e M'' . Devemos lembrar também, que cada ponto mostrado no gráfico, representa um tamanho natural da seqüência em questão. Disto, resulta que:

$$M' = \frac{N_{l-1}M_{N_{l-1}} - N_{l-2}M_{N_{l-2}}}{N_{l-1} - N_{l-2}}, \quad (4.2)$$

$$M'' = \frac{N_l M_{N_l} - N_{l-1} M_{N_{l-1}}}{N_l - N_{l-1}}, \quad (4.3)$$

onde N_l é um tamanho natural da seqüência. Podemos então estimar a magnetização do limite termodinâmico como:

$$M_\infty = \frac{M'' + M'}{2}. \quad (4.4)$$

A barra de erro pode ser definida como:

$$\Delta_E M_\infty = \left| \frac{M'' - M'}{2} \right|. \quad (4.5)$$

Para a seqüência de duplicação de período, extrapolamos as magnetizações obtidas usando o método de extrapolação BST [15]. Os resultados foram os mesmos dos obtidos com o procedimento aqui exposto; no caso do método BST, entretanto, a barra de erro é subestimada [14].

4.1.2 Erro no expoente β

Como visto no capítulo 3, o expoente crítico da magnetização em sistemas com simetria discreta pode ser escrito segundo a equação (3.51). Já foi salientado nesse mesmo capítulo que podemos proceder de duas formas a fim de calcular o expoente β : discutimos o mapa da derivada e a possibilidade de efetuarmos numericamente a derivada do lado direito de (3.51). Neste último caso não teremos somente o erro associado ao limite termodinâmico da magnetização, mas também o erro devido ao cálculo numérico da derivada.

O cálculo numérico pode ser efetuado, expandindo os logaritmos em série de Taylor:

$$\frac{d \log M_\infty(t)}{d \log(t)} = \frac{\Delta \log\{M_\infty[\log(t)]\}}{\Delta \log(t)} - \frac{1}{24} \frac{d^3 \log M_\infty(t)}{d \log(t)^3} \Delta \log(t)^2 + \mathcal{O}[\Delta \log(t)]^4 \quad (4.6)$$

onde:

$$\Delta \log\{M_\infty[\log(t)]\} = \log \left\{ M_\infty \left[\log(t) + \frac{\Delta \log(t)}{2} \right] \right\} - \log \left\{ M_\infty \left[\log(t) - \frac{\Delta \log(t)}{2} \right] \right\} \quad (4.7)$$

O erro relativo ao cálculo numérico da derivada é $\mathcal{O}[\Delta \log(t)]^2$ como visto na equação 4.6.

Para obter o erro relativo ao limite termodinâmico devemos calcular o erro propagado em cada um dos termos do lado direito da equação (4.7):

$$\begin{aligned} \Delta_E \Delta \log\{M_\infty[\log(t)]\} = & \left| \log \left\{ M_\infty \left[\log(t) + \frac{\Delta \log(t)}{2} \right] + \Delta_E M_\infty \right\} - \right. \\ & \log \left\{ M_\infty \left[\log(t) + \frac{\Delta \log(t)}{2} \right] - \Delta_E M_\infty \right\} \left| + \left| \log \left\{ M_\infty \left[\log(t) - \frac{\Delta \log(t)}{2} \right] + \Delta_E M_\infty \right\} - \right. \right. \\ & \left. \left. \log \left\{ M_\infty \left[\log(t) - \frac{\Delta \log(t)}{2} \right] - \Delta_E M_\infty \right\} \right| . \quad (4.8) \end{aligned}$$

Expandindo a equação (4.8) em série de Taylor em torno de $\Delta_E M_\infty = 0$, e tomando $\Delta \log(t) \simeq 0$:

$$\Delta_E \Delta \log\{M_\infty[\log(t)]\} = \frac{4\Delta_E M_\infty}{\ln(10)M_\infty} + \mathcal{O}\left(\frac{\Delta_E M_\infty}{M_\infty}\right)^3. \quad (4.9)$$

Agora a cada valor de $\frac{d \log M_\infty(t)}{d \log(t)}$ calculado, poderemos associar uma barra de erro $\Delta \mathcal{D}$ definido pela soma dos erros que aparecem no cálculo numérico da derivada e na aproximação ao limite termodinâmico:

$$\Delta \mathcal{D} = \frac{4\Delta_E M_\infty}{\ln(10)M_\infty \Delta \log(t)} + \mathcal{O}\left(\frac{\Delta_E M_\infty}{M_\infty \Delta \log(t)}\right)^3 + \left| \frac{1}{24} \frac{d^3 \log M_\infty(t)}{d \log(t)^3} \Delta \log(t)^2 + \mathcal{O}[\Delta \log(t)]^4 \right|. \quad (4.10)$$

4.2 Criação das seqüências

As relações de recorrência entre as magnetizações parciais obtidas no capítulo 3 e as definições de erros associados à obtenção do limite termodinâmico e ao cálculo numérico da derivada, vistas na seção anterior, permitem conhecermos o expoente crítico da magnetização com uma dada precisão, esta precisão estará vinculada a um esforço computacional em termos de tempo e memória.

Neste trabalho, estamos primeiramente interessados em observar se as seqüências aperiódicas estudadas conduzem à modificação do expoente crítico da magnetização β em relação a um sistema homogêneo. No caso homogêneo, o expoente crítico β tem o valor

igual a $1/2$, o mesmo valor encontrado em uma rede de Bethe com as interações seguindo uma seqüência periódica.

Podemos, em princípio, determinar o valor de β obtido com interações moduladas aperiodicamente, e também, através da barra de erro $\Delta\mathcal{D}$, concluir se esse valor é, sem sombra de dúvida, diferente do valor $1/2$.

No capítulo 5, veremos que, tipicamente, para obtermos um valor de β confiável teremos que considerar redes de Bethe com mais de 2^{32} gerações. Sendo assim, construindo um algoritmo equivalente à aplicação de uma regra de substituição, a fim de obter uma seqüência com o mesmo número de elementos quantas as gerações da rede de Bethe, notaremos que é necessário armazenar mais de 2^{31} elementos A e B , computacionalmente representados por 0 e 1 respectivamente. Em termos computacionais, se representarmos cada elemento 0 e 1 por uma variável de 1 byte, armazenaremos mais de 2G bytes na memória. Para o refinamento do cálculo na seqüência de duplicação de período, precisaríamos de mais memória, cerca de 64G bytes; no estudo da seqüência de Rudin-Shapiro, veremos que precisamos de ainda muito mais.

Essa quantidade de memória não é corriqueiramente encontrada em computadores convencionais. Entretanto este problema de memória pode ser superado se observamos algumas características inerentes às seqüências aperiódicas. Nas próximas seções vamos escrever as seqüências aperiódicas não como uma série de números dispostos lado a lado, mas numa forma matricial, como exemplo consideramos a seqüência finita **1 0 1 0 0 1 0 1 1 0 0 1 1 1 0 0**, esta pode ser escrita matricialmente como:

$$\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

4.2.1 Duplicação de período

Escrevendo a seqüência de duplicação de período e a colocando em uma forma matricial com 2^G colunas e 2^G linhas, temos as seguintes representações:

$$\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

$G = 2.$

$$\begin{array}{cccccccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

$G = 3.$

$$\begin{array}{cccccccccccccccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{array}$$

$G = 4.$

Podemos observar que as matrizes formadas pela seqüência aperiódica têm propriedades interessantes. Todas as linhas são idênticas a não ser nos elementos da última coluna; esta por sua vez é idêntica à primeira linha para G par e o negativo da primeira linha para G ímpar, onde negativo refere-se à troca de 0 por 1 e 1 por 0. Estas propriedades são notadas em todos os tamanhos de seqüências que formam uma matriz quadrada.

Observando as relações de recorrência entre as magnetizações parciais, vemos que a magnetização da geração n depende somente das interações entre as gerações n e $n - 1$:

$$m_n = m_n(m_{n-1}, \tilde{K}_n, \tilde{D}_n). \quad (4.11)$$

Tomando vantagem destas características, podemos calcular a magnetização de uma seqüência de 2^{2G} elementos armazenando somente 2^G elementos.

4.2.2 Rudin-Shapiro

A seqüência de Rudin-Shapiro tem propriedades análogas à de duplicação de período, entretanto mais complexas. Colocando a seqüência de Rudin-Shapiro em uma matriz 2^G colunas e 2^{G-1} linhas, obtemos, para $g = 2$ e $G = 4$, as seguintes representações:

$$\begin{array}{cccccccccccccccc}
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0
 \end{array}$$

$G = 2.$
 $G = 4.$

Escrevendo a seqüência de Rudin-Shapiro, como feito acima, é possível, através de uma seqüência com 2^G gerações, obter a magnetização de uma rede de Bethe com 2^{2G-1} gerações, bastando observar que, para G par:

- toda coluna da primeira metade da matriz que começa com 0 é igual à primeira linha ;

- colunas da primeira metade da matriz que começam com 1 são iguais ao negativo da primeira linha ;
- colunas da segunda metade da matriz que começam com 0 são iguais ao negativo, de trás para frente, da primeira linha ;
- colunas da segunda metade da matriz que começam com 1 são iguais ao inverso da primeira linha ;

É possível realizar um procedimento similar para G ímpar:

- colunas da primeira metade da matriz que começam com 0 são iguais à primeira linha ;
- colunas da primeira metade da matriz que começam com 1 são iguais ao negativo da primeira linha ;
- colunas da segunda metade da matriz que começam com 0 são iguais ao inverso da primeira linha ;
- colunas da segunda metade da matriz que começam com 1 são iguais ao negativo, de trás para frente, da primeira linha .

4.3 Mapa da derivada

Diferentemente das magnetizações parciais, dadas por relações de recorrência como mostrado em (4.11), a expressão analítica (3.58), para o cálculo da derivada do lado direito da equação (3.51), não pode ser imediatamente usada juntamente com o método de construção das seqüências aperiódicas de duplicação de período e Rudin-Shapiro. Isto porque cada derivada dependerá de todas as interações na rede de Bethe.

O objetivo desta seção é justamente mostrar como podemos calcular a derivada através de um mapa em que o método de construção das seqüências possa ser usado. Para isto

devemos definir:

$$s_i = \frac{\partial m_{i+1}}{\partial \tilde{K}_{i+1}} \frac{d\tilde{K}_{i+1}}{d\tilde{t}},$$

$$s = \frac{\partial m_2}{\partial \tilde{K}_2} \frac{d\tilde{K}_2}{d\tilde{t}}$$

$$\text{e } l_i = \frac{\partial m_{i+1}}{\partial m_i}.$$

Estas grandezas dependem somente das interações locais, ou seja, de \tilde{K}_{i+1} . Podemos obter a derivada iterando as seguintes relações de recorrência com i partindo de 2 até $N - 1$:

$$\mathcal{R} = s + \mathcal{R},$$

$$s = s_i + l_i s,$$

$$\mathcal{S} = s + \mathcal{R},$$

onde \mathcal{R} é inicialmente zero.

A derivada do lado direito de (3.58) é dada então por:

$$\frac{d \log(M_N(t))}{d \log(t)} = \frac{t\mathcal{S}}{NM_N}. \quad (4.12)$$

5 *Resultados*

Neste capítulo, vamos discutir o comportamento da derivada do lado esquerdo da equação (3.51), que iremos representar por \mathcal{D} :

$$\mathcal{D} = \frac{d \log(M_N)}{d \log(t)}, \quad (5.1)$$

em função do logaritmo da temperatura reduzida $\log(t)$. Isto será feito na proximidade da temperatura crítica, de forma que esta derivada da magnetização siga a lei de escala introduzida no capítulo 3 pela equação (3.51). Caracterizaremos também o comportamento log-periódico devido à simetria discreta introduzida pelas seqüências aperiódicas. Discutiremos o expoente crítico da magnetização obtido através dessas curvas para cada uma das seqüências em estudo, sempre tendo como base as barras de erro que permitem afirmarmos, dentre outros comportamentos, a ocorrência de mudanças de classe de universalidade em algumas seqüências.

Das fontes possíveis de erro no cálculo do expoente da magnetização, ainda não quantificada é relativa a região de escala: as grandezas termodinâmicas só serão funções homogêneas generalizadas na temperatura crítica e portanto as leis de escala da magnetização (2.3) e da derivada do logaritmo da magnetização (3.51) só serão válidas nas proximidades desta temperatura. De fato, a equação (2.3) pode ser usada como uma boa aproximação da magnetização e por consequência (3.51), pois tanto a magnetização quanto várias outras grandezas termodinâmicas podem ser expandidas como uma série de potências da temperatura reduzida nas proximidades da criticalidade, de modo que, para pequenas temperaturas reduzidas, a potência do expoente crítico é preponderante.

O efeito de não estarmos em um temperatura suficientemente próxima da temperatura crítica será observado também neste capítulo.

5.1 Fibonacci

Os resultados encontrados na rede de Bethe para os modelos de Blume-Capel, com $\Delta = 0$, e Ising, ambos com interações moduladas pela seqüência de Fibonacci, são idênticos. Estes resultados não trazem mudanças observáveis, para o expoente crítico, em relação a interações constantes ou com modulações periódicas.

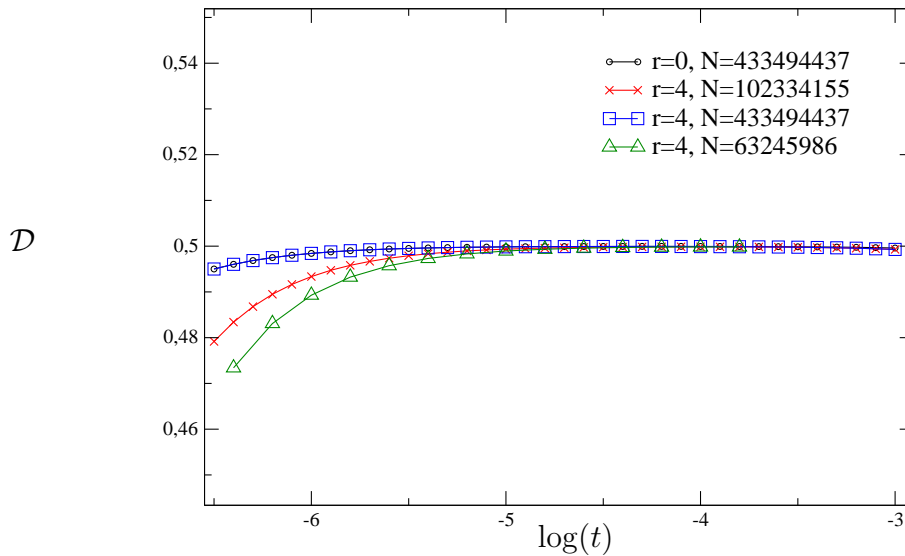


Figura 20: Na figura é mostrado \mathcal{D} em função de $\log(t)$, obtido para o modelo de Ising com interações dadas pela seqüência de Fibonacci, para dois valores de r e diversos valores do número de gerações da rede de Bethe.

Podemos notar, observando a figura 20, que o comportamento crítico do modelo de Ising com interações dadas pela seqüência de Fibonacci é idêntico ao caso homogêneo ($r = 0$). Podemos observar também que a derivada como função do logaritmo da temperatura reduzida é aproximadamente constante, mas sofre uma diminuição para valores pequenos da temperatura reduzida. Aumentando o tamanho da rede de Bethe esta diminuição se dá a temperaturas cada vez menores. Sendo que no limite termodinâmico, ela desaparece.

Este comportamento para valores de t mais próximos de zero mostrados na figura 20 pode ser entendido em termos do comprimento de correlação do sistema como função da temperatura reduzida. O comprimento de correlação nas proximidades da temperatura crítica é dado por uma lei de potência, $\xi \propto |t|^{-\nu}$, onde ν é o expoente do comprimento

de correlação.

A deflexão observada na figura 20 aparece quando a temperatura reduzida é tal que o comprimento de correlação fica próximo do número de gerações, por isso, quando aumentamos N , a diminuição de \mathcal{D} se dá a temperaturas reduzidas menores.

Por fim, concluímos que o expoente crítico da magnetização é o mesmo expoente do modelo homogêneo, $\beta = 1/2$.

5.2 Duplicação de período

Novamente os resultados obtidos em função dos modelos de Ising e Blume-Capel concordam.

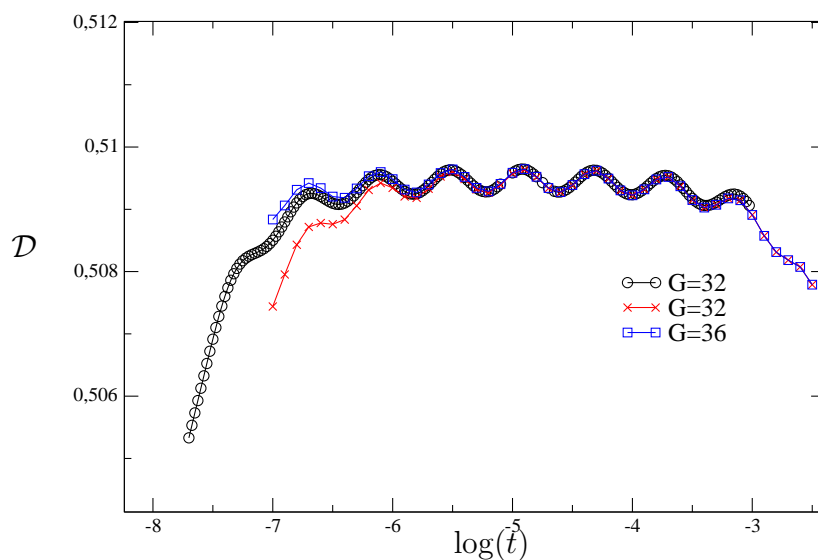


Figura 21: As curvas em azul e vermelho são para o modelo de Ising; a em preto é relativa ao modelo de Blume-Capel, todas são para $r = 1$ com 2^G gerações.

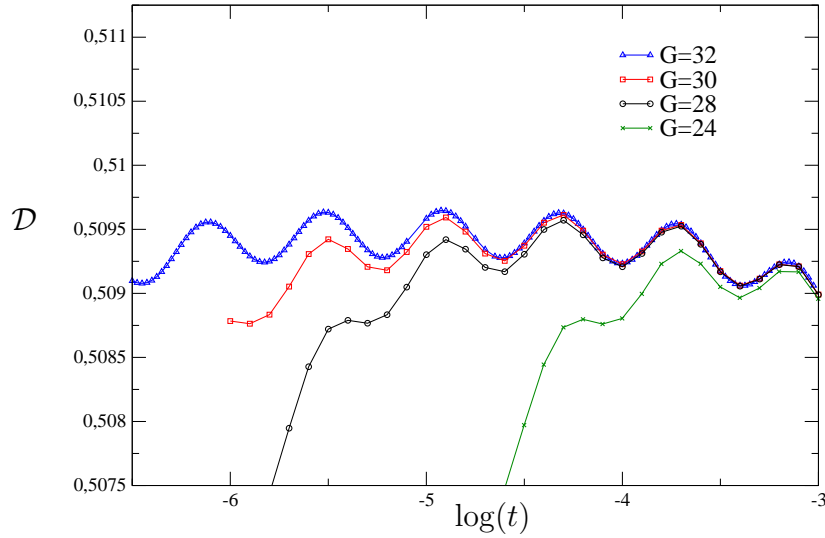


Figura 22: As curvas obtidas para o modelo de Blume-Capel com $r = 1$.

Podemos notar novamente a região em que o comprimento de correlação começa a ser considerável em relação ao tamanho da rede — exatamente como fora discutido na seqüência de Fibonacci — para t pequeno.

Observamos na figura 21 uma oscilação da derivada em torno de um valor médio; esta oscilação já foi prevista em nossa discussão no capítulo 2 sobre o fenômeno de oscilações log-periódicas, que podem vir a ocorrer em sistemas com alguns tipos de simetrias discretas. A seqüência de duplicação de período possui $l = 2$, ou seja, como foi discutido na seção 2.4, somente podemos fazer transformações exatas de grupo de renormalização usando potências inteiras de 2. Diferentemente, a seqüência de Fibonacci não possui uma simetria discreta que possa ser representada por um conjunto de potências inteiras de um parâmetro l e assim, como aparentemente observado na figura 20, não possui comportamento log-periódico.

Analisando a expressão (3.51):

$$\frac{d \log(M_N(t))}{d \log(t)} = \beta + P[\log(t)]$$

em conjunto com as curvas observadas na figura 21, podemos propôr um termo periódico em $\log(t)$ como uma função harmônica, por exemplo:

$$P[\log(t)] = a \cos(2\pi b \log(t) + c), \quad (5.2)$$

Podemos então fazer ajuste do comportamento log-periódico, mostrado nas figuras

23 e 24

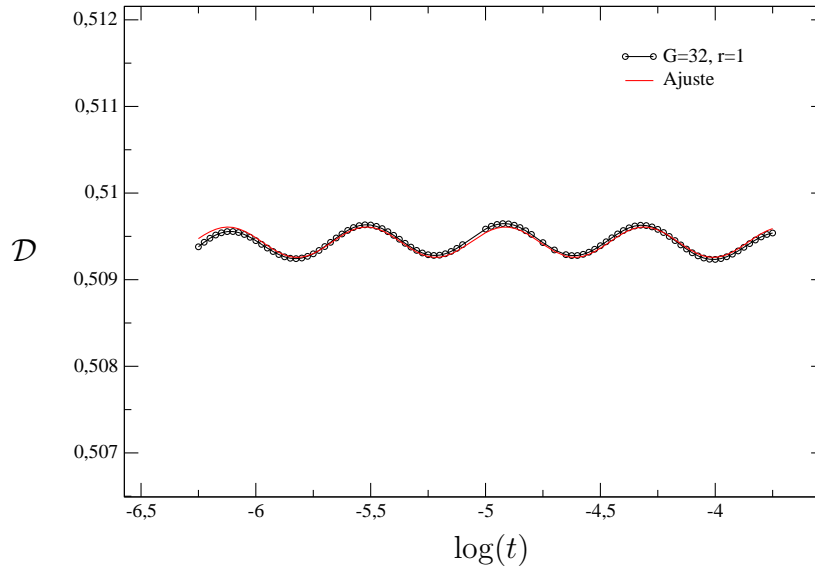


Figura 23: A curva é obtida para o modelo de Blume-Capel com $r = 1$, o ajuste dos parâmetros leva a $\beta = 0,509$, $a = 1,75 \cdot 10^{-5}$, $b = 1.656$, $c = 0,8539$ com $\chi^2 = 10^{-7}$.

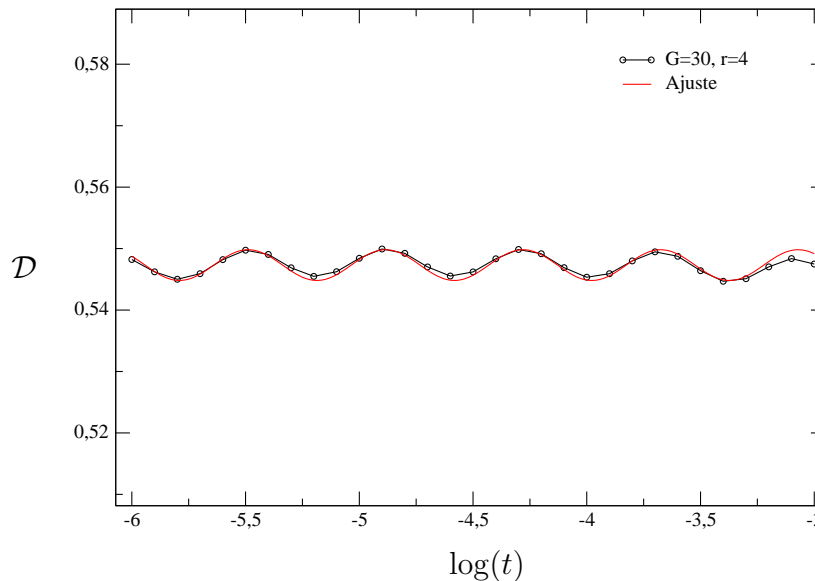


Figura 24: Com o ajuste dos parâmetros temos $\beta = 0,547$, $a = 2,15 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-5}$, $b = 1.654$, $c = 0,8539$ com $\chi^2 = 10^{-5}$.

Podemos observar qualitativamente que a amplitude da função log-periódica a é uma função de r .

Cabe salientar os motivos porque não iremos neste trabalho analisar com mais cuidado e precisão o parâmetro b , mesmo lembrando que na seção 2.4 estabelecemos como, a partir do expoente β e do conhecimento do período da função log-periódica, poderíamos conhecer todos os expoentes de um modelo: não iremos fazer um cálculo detalhado do período da

função log-periódica porque a argumentação da seção 2.4, no que diz respeito às relações entre os expoentes, é somente válida para sistemas abaixo da dimensionalidade crítica superior (no caso dos modelos de Ising e Blume-Capel, esta dimensão é quatro). Por sua vez, a dimensão da rede de Bethe pode ser considerada como infinita. Visto isso, questões sobre as igualdades entre os expoentes em sistemas aperiódicos serão estudadas em trabalhos futuros.

Podemos estipular barras de erro para cada valor da derivada do logaritmo da magnetização mostrados nas figuras 21 e 22, considerando a discussão feita no capítulo 4, onde propomos uma medida do erro dada pela equação (4.10). Assim por exemplo, para o modelo de Blume-Capel com a seqüência de duplicação de período obtemos a barra de erro para alguns valores de $\log(t)$ mostrados na figura 23 .

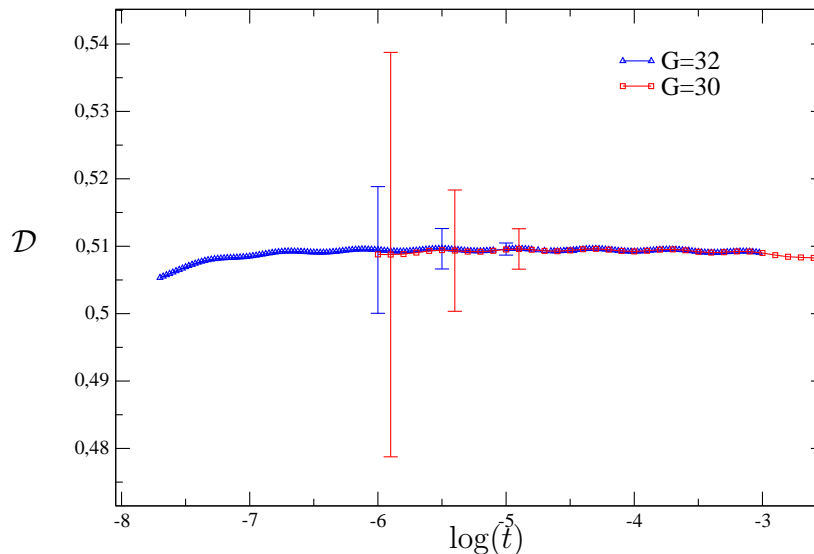


Figura 25: As curvas foram obtidas usando o modelo de Blume-Capel com $r = 1$, em vermelho temos 2^{30} gerações da rede de Bethe e em azul 2^{32}

As barras de erro observadas na figura 25 representam o erro relativo à obtenção do limite termodinâmico. Podemos perceber que a barra de erro aumenta quando a temperatura reduzida diminui: isto está justamente relacionado com o aumento do comprimento de correlação, acarretando assim, um desvio do valor obtido relativo ao limite termodinâmico. O erro devido ao cálculo numérico da derivada é da ordem de 10^{-5} como pode ser visto observando o segundo termo do lado direito da (4.10), sendo que usamos $\Delta \log(t) = 0.01$ nas curvas obtidas nesta seção.

Resta agora usar os dados, exemplificados ao longo desta seção, para discutir a mudança de classe de universalidade provocada pela modulação das interações do hamiltoniano.

niano pela seqüência de duplicação de período.

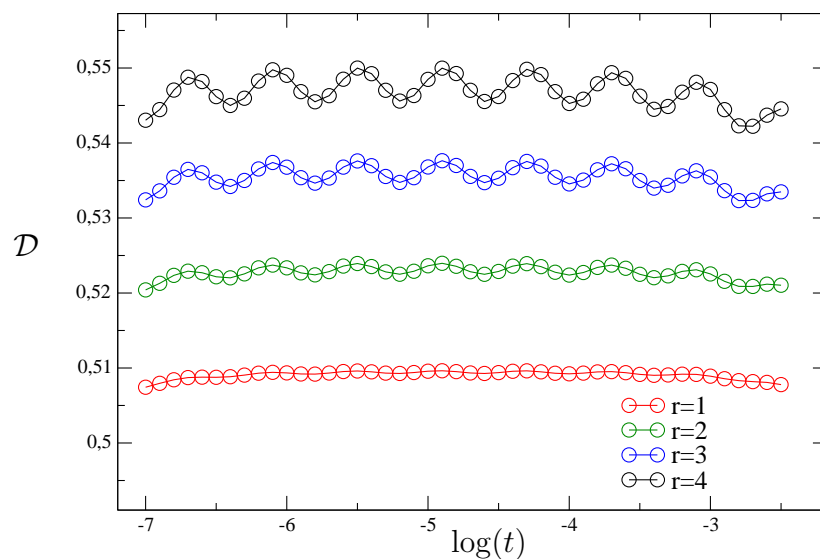


Figura 26: as curvas mostram \mathcal{D} em função de $\log(t)$ para o modelo de Ising com 2^{32} gerações

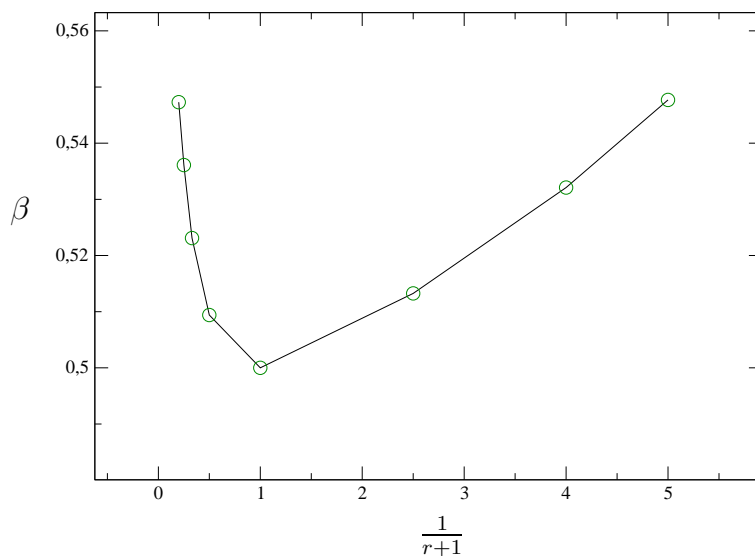


Figura 27: Na figura é mostrado o expoente β como função de r para o modelo de Ising

Na figura 27, quando $r = 0$, temos $\beta = 1/2$ como esperado. Entretanto para valores de r diferentes de zero observamos que o expoente não é universal, variando com o valor de r . Cabe lembrar que, segundo os resultados aqui observados, os modelos de Ising e Blume-Capel com $\Delta = 0$ têm comportamento críticos idênticos frente à seqüência de duplicação

de período. Resaltamos também que, mesmo não tendo realizado nenhum cálculo para Δ diferente de zero, podemos supor que nenhuma alteração em relação aos expoentes será notada, visto que o modelo de Ising pode ser interpretado como o de Blume-Capel no limite em que $\Delta \rightarrow -\infty$. Desta forma é razoável esperar que ele não deva mudar no intervalo $\Delta = 0$ até $\Delta = -\infty$.

5.3 Rudin-Shapiro

Aparentemente, usando as mesmas ferramentas empregadas nas duas outras seqüências aperiódicas, para determinação do comportamento crítico da magnetização, e por conseguinte o expoente crítico β , poderíamos caracterizar também como a seqüência de Rudin-Shapiro afeta o comportamento crítico da magnetização da rede de Bethe. Curiosamente a seqüência de Rudin-Shapiro reserva uma dificuldade adicional: o tamanho da rede de Bethe necessário para obtenção do limite termodinâmico na região de escala da magnetização é muito grande, o que impediu a caracterização eficaz do comportamento da magnetização. Embora esta dificuldade impossibilite o cálculo exato do expoente β , ainda sim podemos suspeitar que esta seqüência leva a um tipo de relação entre β e r diferente do obtido para as seqüências de Fibonacci e duplicação de período, conforme argumentamos a seguir.

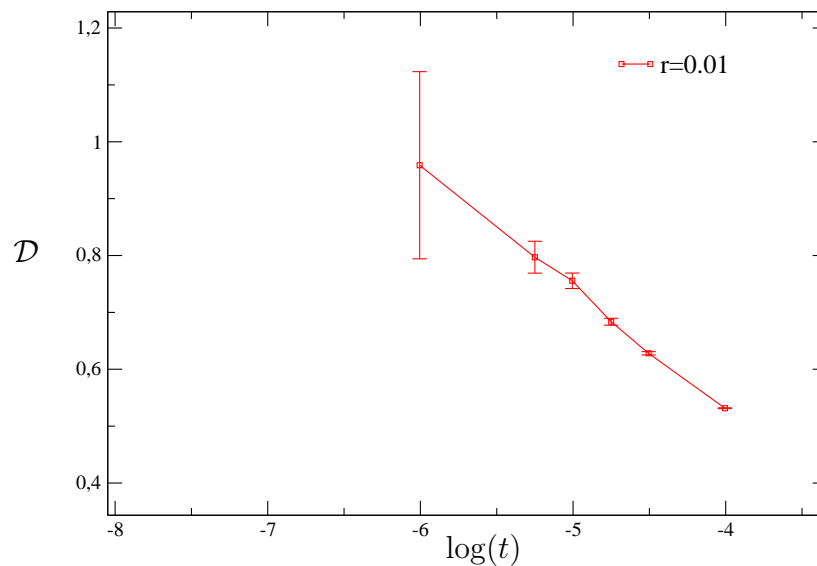


Figura 28: Curva feita a partir modelo de Ising, seqüência de Rudin-Shapiro na rede de Bethe com 2^{41} gerações.

Como pode ser observado, os pontos da figura 28 não são boas caracterizações do

comportamento crítico do modelo. Estes pontos, que claramente não podem ser modelados por uma constante mais um termo harmônico, parecem relacionadas com o fato de não estarmos em uma temperatura suficiente para que a derivada siga a lei de escala mostrada em 3.51.

Podemos notar a semelhança delas com as curvas vistas na região ainda não tão próxima da região da temperatura crítica na figura 21.

Supondo que os pontos realmente correspondam a esta região e que para temperaturas reduzidas menores, as quais não podemos explorar com uma barra de erro razoável, chegaremos a um platô que caracterizará o expoente β . Podemos inferir que, para r pequeno, veremos que o platô da curva tenderá para 0,5.

Feito assim obtemos:

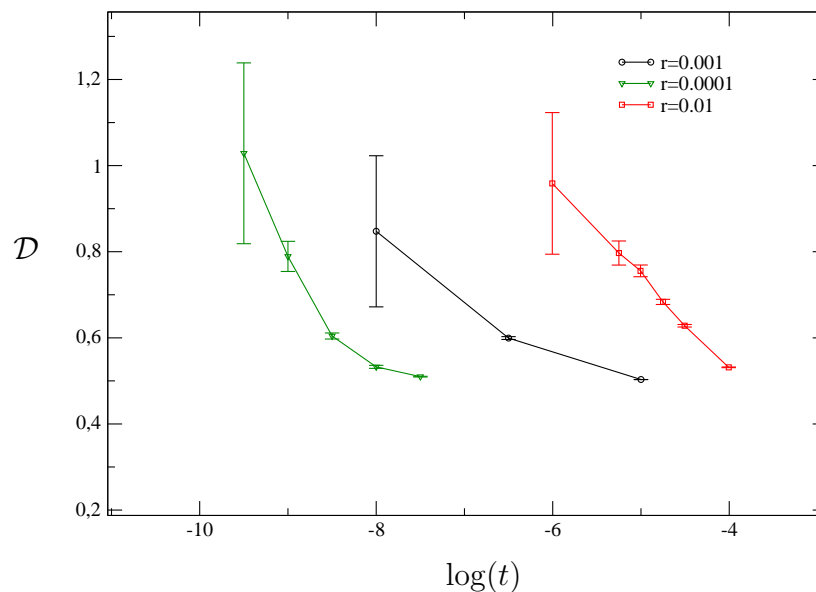


Figura 29: na figura as curvas foram obtidas com o modelo de Ising na rede de Bethe com 2^{41} gerações.

Vemos então que mesmo diminuindo drasticamente o valor de r não conseguimos ver sinal de um platô próximo de 0,5. Este fato abre espaço para especularmos que o expoente crítico β é descontínuo em $r = 0$, ou seja, $\beta = 0,5$ para $r = 0$ e $\beta \neq 0,5$ quando $r \neq 0$.

É razoável supor que tal descontinuidade possa acontecer nas duas formas mostradas na figura 30.

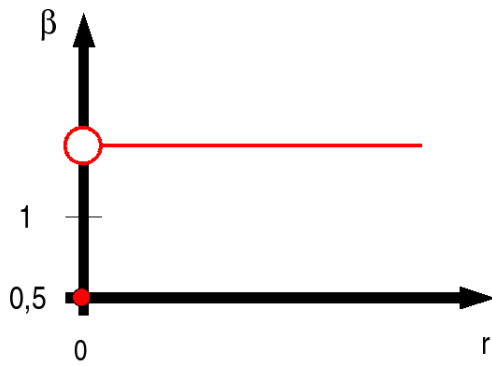


Figura 30(a)

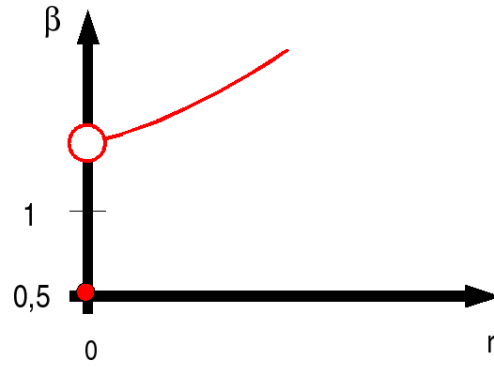


Figura 30(b)

Uma possibilidade é mostrada na figura 30(a) onde o expoente é descontínuo em $r = 0$ e constante para $r \neq 0$; outra possibilidade, vista na figura 30(b), é β descontínuo e uma função de r , como no caso de duplicação de período, quando $r \neq 0$. Usualmente o comportamento observado é o da figura 30(a).

5.4 Mapa da derivada

O mapa da derivada e a obtenção numérica da derivada são equivalentes, podemos obter a derivada \mathcal{D} em função do número de gerações da rede de Bethe como mostrado na figura 31.

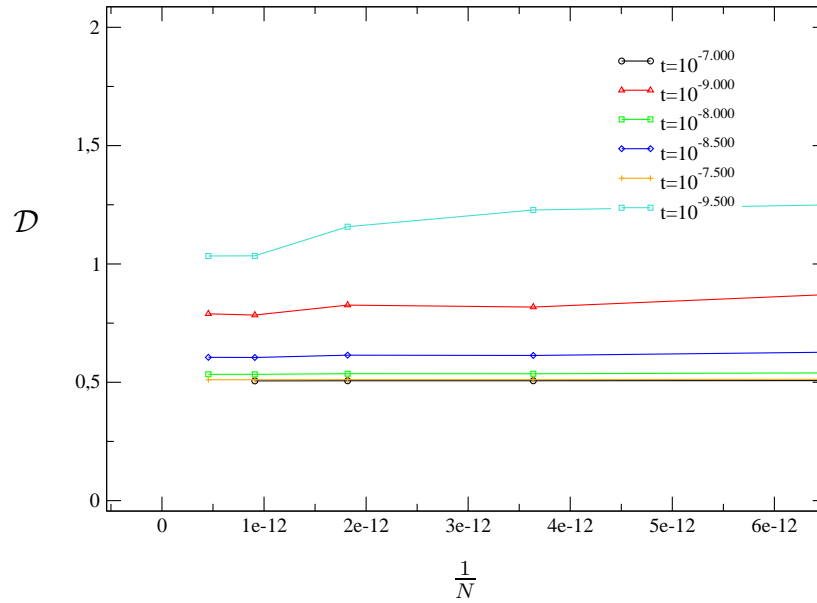


Figura 31: Na figura mostramos a derivada \mathcal{D} em função do tamanho da rede de Bethe, usando o modelo de Ising modulado pela sequência de Rudin-Shapiro, com $r = 0.001$.

Como exemplo podemos comparar os resultados mostrados na figuras 29 e 31 e notar que o cálculo analítico de \mathcal{D} através do mapa da derivada está dentro da barra de erro obtida pelo procedimento numérico, como pode ser visto na figura 32 .

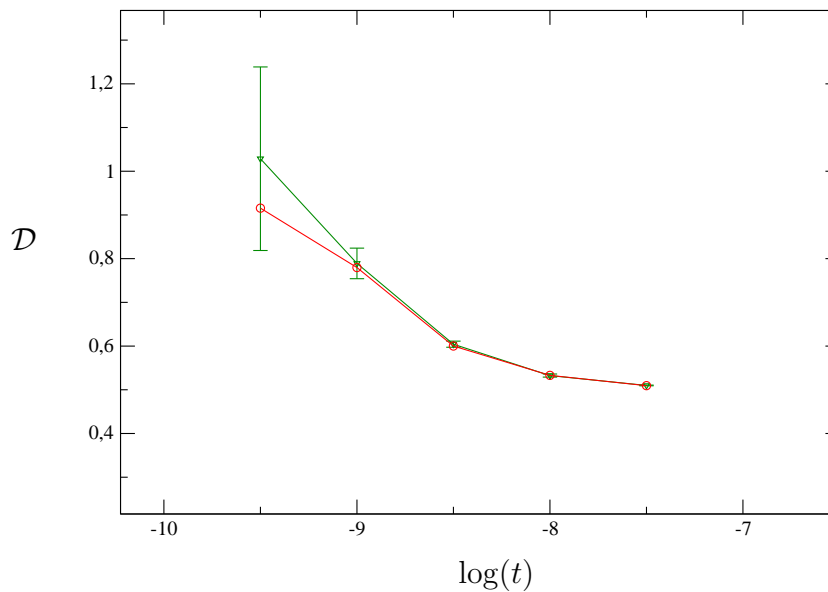


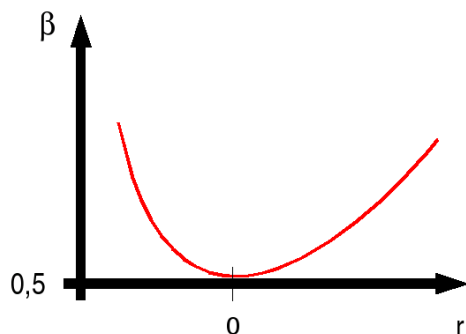
Figura 32: Na figura mostramos \mathcal{D} em função do tamanho da rede de Bethe, usando o modelo de Ising modulado pela sequência de Rudin-Shapiro, com $r = 0.001$. A curva em vermelho foi obtida como mapa da deriva e a verde numericamente.

Conclusão e perspectivas

Vamos resumir os resultados obtidos ao longo deste trabalho, lembrando que eles dizem respeito a abordagem da rede de Bethe no limite de campo médio. Citaremos ainda algumas questões a serem respondidas, no intuito de compreender aspectos em aberto colocados neste trabalho.

Conclusão

O comportamento crítico da rede de Bethe pode ser modificado se introduzirmos aperiodicidade. Observamos que a seqüência de duplicação de período levou a que o expoente β dependa de r , como visto no capítulo 5. Qualitativamente podemos representar esta dependência como visto na figura 33.



Figuras 33: Na figura mostramos qualitativamente o expoente β em função de r , na rede de Bethe com as interações dadas pela seqüência de duplicação de período.

A seqüência de Fibonacci não traz mudanças no comportamento crítico da magnetização na rede de Bethe, como foi observado no capítulo 5. Este resultado contrasta com o obtido por Iglói e Palágyi [10]. Estes autores, através de uma abordagem usando a desigualdade Bogoliubov, estudaram o comportamento crítico da magnetização de uma rede hipercúbica, com interações dadas pela seqüência de Fibonacci, usando o modelo de Ising. Como resultado, Iglói e Palágyi obtiveram uma dependência do expoente β em função

do parâmetro r qualitativamente igual à encontrada em nosso estudo da rede de Bethe com a seqüência de duplicação de período. Desta comparação é possível concluir que, estudar hamiltonianos modulados com interações aperiódicas usando diferentes abordagens de campo médio, pode levar a diferentes comportamentos críticos.

A seqüência de Rudin-Shapiro, como já foi discutido no capítulo 5, apresentou dificuldades computacionalmente proibitivas em nossa análise, e por isso não conseguimos determinar o expoente crítico β . Entretanto, como mostrado nas figuras qualitativas 30(a) e 30(b) propomos, dada a existência das evidências discutidas na seção 5.3, que o expoente β seria dado por uma função descontínua do parâmetro r .

Outro aspecto relevante é observado quando comparamos como as diferentes seqüências influenciam o número de gerações necessário para obtenção de grandezas no limite termodinâmico. A seqüência de Fibonacci faz com que uma aproximação razoável do limite termodinâmico da magnetização, com barra de erro ΔM suficientemente pequena, seja alcançada para um número de gerações menor do que o necessário, se considerarmos a seqüência de duplicação de período.

Com a seqüência de Rudin-Shapiro, necessitamos de um número de gerações da rede de Bethe ainda maior que na seqüência de duplicação de período. A partir desta constatação, podemos concluir que o tamanho de um sistema necessário, para que possamos considerá-lo no limite termodinâmico, é fortemente dependente do tipo de aperiodicidade do sistema. Experimentalmente, isto pode significar que o tipo de arranjo de um quasi-cristal, ou o tipo de aperiodicidade em uma super-rede, influencia fortemente o tamanho em que estas estruturas apresentarão comportamento típico do limite termodinâmico.

Perspectivas

- Caracterizar o expoente β dos modelos de Ising e Blume-Capel na rede de Bethe com interações dadas pela seqüência de Rudin-Shapiro, tentando contornar de alguma forma o problema computacional que emerge do número de gerações da rede.
- Calcular outros expoentes críticos usando as técnicas já descritas neste trabalho. Para isto devemos incluir o campo magnético externo nos hamiltonianos de Ising e Blume-Capel e obter relações de recorrência análogas as 3.37 e 3.35 que incluam este campo.
- Gostariamos de obter o comportamento crítico da magnetização usando outras seqüências aperiódicas usando o mesmo modelo estudado por Iglói e Palágyi [10].
- Observar como diferentes números de coordenação z podem afetar os resultados obtidos no capítulo 5. Isto pode ser feito se usarmos relações de recorrência para z finito e é um trabalho em andamento.
- O mapa da derivada descrito no capítulo 4 não trouxe vantagens significativas para a obtenção do comportamento crítico da magnetização, quando comparado ao cálculo numérico da derivada. Entretanto, esta técnica poderá ser útil em trabalhos futuros.

Referências

- [1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 53:1951, 1984.
- [2] Shi ning Zhu, Yong yuan Zhu, Yi qiang Qin, Hai feng Wang, Chuan zhen Ge, and Nai ben Ming. Experimental realization of second harmonic generation in a Fibonacci optical superlattice of LiTaO₃. *Phys. Rev. Lett.*, 78:2752, 1997.
- [3] L. A. Bursill and Peng Ju Lin. Penrose tiling observed in a quasi-crytal. *Nature*, 316:50, 1985.
- [4] J. M. Luck. Critical behavior of the aperiodic quantum Ising chain in a tranverse magnetic field. *J. Stat. Phys.*, 72:417, 1993.
- [5] E. S. Sørensen, M. V. Jaric, and M. Ronchetti. Ising model on Penrose lattices: boundary conditions. *Phys. Rev. B*, 44:9271, 1991.
- [6] S. T. R. Pinho and S. R. Salinas T.A.S. Haddad. Critical behavior of Ising model on a hierarchical lattice with aperiodic interactions. *Physica A*, 257:515, 1998.
- [7] U. Grimm. Aperiodicity and disorder - Does that matter? *cond-mat/0010392*.
- [8] A. B. Harris. Effect of random defects on the critical behaviour of Ising models. *J. Phys. C*, 7:1671, 1974.
- [9] J.M. Luck. A classification of critical phenomena on quasicrystals and other aperiodic structures. *Europhys. Lett.*, 24:349, 1993.
- [10] F. Iglói and G. Palágyi. Non-universal critical behaviour in mean-field theory of inhomogeneous systems. *Physica A*, 240:685, 1997.
- [11] J. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transtions*. Clarendon Press, 1992.
- [12] Th. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen. Wilson theory for spin systems on a triangular lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 31(23):1411–1414, Dec 1973.
- [13] R. F. S. Andrade. Emergence of log-periodic oscillatios in periodic and aperiodic Ising models. *Phys. Rev. E*, 44:9271, 1991.
- [14] N. S. Branco. *Comunicação privada*, 2006.
- [15] J. L. Monroe. Extrapolation and the bulirsch-stoer algorithm. *Phys. Rev. E*, 65(6):066116, Jun 2002.