



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

---

**MODELO DE ISING RECOZIDO EM ESTRUTURAS  
HIERÁRQUICAS: UMA ABORDAGEM VIA MATRIZES DE  
TRANSFERÊNCIA**

---

Vanessa Santos Teles da Silva

Salvador - BA, Brasil.

Fevereiro - 2014



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA  
INSTITUTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

---

**MODELO DE ISING RECOZIDO EM ESTRUTURAS  
HIERÁRQUICAS: UMA ABORDAGEM VIA MATRIZES DE  
TRANSFERÊNCIA**

---

Vanessa Santos Teles da Silva

Orientador: Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Salvador - BA, Brasil.

Fevereiro – 2014

**MODELO DE ISING RECOZIDO EM ESTRUTURAS HIERÁRQUICAS: UMA  
ABORDAGEM VIA MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA**

Vanessa Santos Teles da Silva

Dissertação apresentada ao Instituto de Física  
da Universidade Federal da Bahia como  
requisito parcial para a obtenção do título de  
Mestre em Física.

Orientador: Dr. Roberto Fernandes Silva  
Andrade

Dissertação aprovada por:

---

Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade

---

Dr. Thiago Albuquerque de Assis

---

Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas

Salvador - BA, Brasil.

Fevereiro – 2014

*Dedico esta obra à memória da minha avó  
Maria Nascimento dos Santos.*

# AGRADECIMENTOS

---

Agradeço a Deus pela vida e proteção.

Ao meu orientador, Roberto Fernandes Silva Andrade, pela confiança em mim depositada, por me direcionar em uma pesquisa tão rica e por ser um exemplo de professor.

À minha família, em especial aos meus pais Antonio Carlos e Edvanilda, por serem tão batalhadores, por todo o amor e dedicação a mim. O apoio deles foi essencial para completar mais uma etapa de minha vida.

Aos meus irmãos Wagner e Susan que sempre foram os meus motivadores.

A meu namorado Felipe pelas palavras de incentivo.

Aos amigos da sala de estudos Tércio, colega desde a graduação, Alexsandro Ricardo e Nilton pela cooperação com os estudos e pelos momentos de descontração.

Aos colegas do grupo de pesquisa Física Estatística e Sistemas Complexos (FESC), em especial Arthur, Naiara, Euler e Mayane pelo auxílio nos estudos e conselhos.

Às minhas amigas, em especial, Karina, Tamila, Gedália e Joice pela amizade sincera e companheirismo.

Aos professores, colegas e funcionários do Instituto de Física da UFBA, que direta ou indiretamente, tiveram participação neste projeto.

À diretora e toda equipe de professores do Colégio Estadual Professor Edilson Souto Freire (CEPESF) que também me apoiaram neste trabalho.

Ao grupo de voluntários do reflorestamento do Rio Imbassaí, em especial ao engenheiro Justino, à professora Sarah, aos estudantes do CEPESF e aos membros da Associação Ambientalista de Dias d'Ávila que me promoveram momentos de contentamento.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro.

# RESUMO

---

Modelos de spin desordenados foram geralmente investigados na abordagem *temperada*, o que corresponde a uma situação comum na física do estado sólido, onde o tempo de relaxamento das variáveis de desordem é muito maior do que o tempo de medição típico. Estudos recentes de transição de fase na presença de desordem para outros sistemas, como os cristais líquidos, têm chamado a atenção para a condição em que o tempo de relaxamento torna-se muito mais curto. Em tais casos, a abordagem recozida é bem justificada. O modelo de Maier-Saupe, que descreve a interação entre as moléculas de quadrupolo, tem sido usado com sucesso para um grande número de situações.

Neste trabalho, desenvolvemos um formalismo de matriz de transferência para investigar modelos de Ising recozidos em duas estruturas: a estrutura hierárquica do diamante e da rede apoloniana. A abordagem proposta acompanha os mesmos passos utilizados para a análise dos sistemas ordenados, o que equivale a derivar mapas de recorrência adequados para as variáveis termodinâmicas e magnéticas como função da geração da rede.

O formalismo pode incluir vários tipos de desordem, como diferentes interações ferro e anti-ferromagnéticas, ou o efeito de diluição analisados neste trabalho, onde os átomos magnéticos são substituídos por outros não-magnéticos. Uma vez que o tratamento do sistema é feito num *ensemble* "grande canônico", torna-se necessário introduzir o potencial químico, relacionado à concentração dos dois tipos diferentes de partículas. Neste *ensemble*, todos os possíveis estados das variáveis ligadas à descrição dos diferentes tipos de interação ou de partículas são levados em consideração no cálculo da função de partição apropriada.

Devido a isso, as matrizes de transferência têm *ranking* maior do que as obtidas para a versão do modelo ordenado. Para a rede hierárquica do diamante, os resultados indicam que a transição de fase persiste por uma vasta gama de valores do potencial químico. Para a rede apoloniana, o sistema se encontra sempre numa fase magneticamente ordenada, sem transição de fase para nenhum dos valores do potencial químico.

# ABSTRACT

---

Disordered spin models have been mainly investigated under the assumption that the system is quenched, which corresponds to a very usual condition in condensed matter physics, since the relaxation time of the system to an equilibrium condition is much larger than the time used to complete a set of experimental measurements. Recent experimental studies of phase transitions of other kinds of systems like the liquid crystals have called the attention to situation where the mentioned relaxation time can become much shorter. Under such conditions, a theoretical description based on annealed variables may be more adequate than the quoted quenched framework. For liquid crystals, a convenient microscopic description for the quadrupole interaction among molecules can be provided by the Maier-Saupe model, which can also be extended to describe disordered situations, be it in the quenched or in the annealed formulation

With this motivation, this work presents a transfer matrix framework to investigate a much simpler disordered Ising model in its annealed version in two hierarchical structures: the diamond hierarchical lattice and the Apollonian network. Like previous works on similar ordered or deterministically disordered models, the extended method follows similar steps that include the derivation of recurrence maps relating the thermodynamic and magnetic properties of the system in two successive generations of construction of the lattice.

The presented formalism is suitable for the description of several types of random disorder, e.g., ferromagnetic and anti-ferromagnetic interactions, dilution of magnetic degrees of freedom, and so on. The formalism requires the introduction of a “grand-canonical” ensemble, which depends on a chemical potential related to the concentration of two different types of particles or interactions. In such ensemble, all possible states of the variables related to particle or interaction type are included in the evaluation of the pertinent partition function.

The method leads to transfer matrices having larger rank than that for the corresponding uniform model. Our results for the diamond hierarchical lattice indicate that the ferro-paramagnetic phase transition observed for the uniform model persists for

until a critical value of the chemical potential, below which the system is observed in the paramagnetic phase only. For the Apollonian network, no phase transition is observed. The system is always found in a ferromagnetic phase.

# SUMÁRIO

---

Agradecimentos .....	iv
Resumo .....	v
Abstract .....	vi
Sumário .....	viii
Capítulo 1 .....	1
INTRODUÇÃO .....	1
1.1    Modelo de Ising .....	1
1.1.1    Modelo de Ising homogêneo, quase-periódico e desordenado. ....	3
1.2    Redes .....	4
1.2.1    Redes euclidianas .....	4
1.2.2    Redes hierárquicas do diamante .....	4
1.2.3    Redes apolonianas .....	6
1.3    Transição de fase .....	8
1.3.1    Aproximação de Migdal Kadanoff e Redes hierárquicas .....	10
1.3.2    Ausência de transição em redes apolonianas .....	12
1.4    Modelos desordenados temperados e recozidos .....	12
1.5    Objetivo da dissertação: Modelos recozidos na rede apoloniana e hierárquica usando o método das matrizes de transferência. ....	13
1.6    Matriz de transferência .....	14
1.7    Soluções de campo médio .....	16
Capítulo 2 .....	18
MODELOS .....	18
2.1    Modelos de Ising desordenados: desordem de interação, de campo externo e de diluição .....	18
2.2    Modelo de Maier Saupe para cristais líquidos .....	19
2.2.1    Adequação da formulação recozida .....	21
2.3    Versão recozida do modelo de Ising para um caso de desordem simples .....	22
Capítulo 3 .....	26
REDES COM INVARIÂNCIA DE ESCALA .....	26

3.1	Rede hierárquica do diamante .....	26
3.1.1	Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede hierárquica do diamante sem campo magnético ( $h=0$ ).....	27
3.1.2	Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede hierárquica do diamante com campo $h \neq 0$ .....	32
3.2	Rede apoloniana .....	34
3.2.1	Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede apoloniana sem campo magnético ( $h=0$ ).....	35
3.2.2	Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede apoloniana com campo magnético $h \neq 0$ .....	37
Capítulo 4	.....	40
Formulação do modelo de Ising recozido em termos de matriz de transferência .....		40
4.1	Caso unidimensional.....	40
4.2	Formulação na rede hierárquica incluindo os mapas para os elementos de matriz, para a energia livre, comprimento de correlação e magnetização.....	41
4.3	Formulação na rede apoloniana incluindo os mapas para os elementos de matriz, para a energia livre, comprimento de correlação e magnetização.....	44
Capítulo 5	.....	47
RESULTADOS	.....	47
5.1	Cadeia linear.....	47
5.2	Rede hierárquica do diamante .....	49
5.3	Rede apoloniana .....	58
CONCLUSÃO	.....	64
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	.....	67

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

---

O estudo de transições de fase para fenômenos magnéticos foi introduzido pelo físico francês Pierre Curie (1859-1906) em seu trabalho publicado em 1895 quando se descobriu a influência da temperatura em materiais magnéticos, conhecida como a lei de Curie [1].

No entanto, o fenômeno de transição de fase foi mais estudado microscopicamente a partir da solução do modelo de Ising pelo químico que adotou a nacionalidade estadunidense, Lars Onsager (1903-1976), em 1944 [1], na qual foi encontrada uma temperatura crítica bem definida para o calor específico. Atualmente o modelo de Ising é discutido praticamente em todos os livros didáticos modernos da mecânica estatística.

### 1.1 Modelo de Ising

O físico alemão Ernst Ising (1900–1998) seguiu as ideias de seu orientador, o físico alemão Wilhelm Lenz (1888-1957) [1], sobre a teoria microscópica do paramagnetismo e ferromagnetismo, e as apresentou na sua tese de doutorado em 1924, fazendo cálculos para este modelo. Uma vez que Lenz foi o orientador da tese, é preciso tomar cuidado sobre as origens das ideias da tese de Ising<sup>1</sup>. De fato, Ising afirmava que o modelo deveria ser chamado de modelo de Lenz-Ising, uma vez que o Dr. Wilhelm Lenz teve a ideia e propôs a ele realizar um exercício matemático para sua tese. No nosso trabalho, entretanto,

---

<sup>1</sup> Para maiores informações, leia o artigo Niss, M., History of Lenz-Ising Model 1920-1950, Arch. Hist. Exact Sci. 59: 267, 2005.

chamaremos o “modelo de Lenz-Ising” apenas de “modelo de Ising”, já que é assim que esse modelo é conhecido atualmente.

Desde 1940, houve muitos artigos científicos publicados sobre o modelo de Ising. Tem sido assim, um dos modelos mais estudados da física moderna [2, 3, 4, 5]. O estudo da transição de fase com este modelo teve grande relevância durante a última metade do século passado.

A principal razão para a onipresença do modelo de Ising na física moderna é que gera um equilíbrio entre a física não-realista e realista. Ou seja, a sua simplicidade torna-o passível de um tratamento matemático. O professor de Física chinês Kerson Huang (1928) considerou, em 1963 [1], o modelo de Ising como um exemplo não trivial de uma transição de fase no qual pode ser trabalhado matematicamente e a sua principal vantagem está no modelo de Ising bi-dimensional para um tratamento exato em mecânica estatística.

Para uma transição ferromagnética, podemos construir uma teoria microscópica considerando interações de curto alcance numa rede d-dimensional, utilizando o modelo de Ising homogêneo, definido pelo hamiltoniano de spin [6]

$$\mathcal{H} = -J_{ij} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i . \quad (1.1)$$

As variáveis  $\sigma_i$  podem assumir os valores  $\pm 1$ . O primeiro termo, cuja soma deve ser realizada sobre os pares de sítios vizinhos mais próximos, representa as energias de interação. Quando  $J_{ij} > 0$ , temos um estado ferromagneticamente ordenado e, quando  $J_{ij} < 0$ , temos um estado antiferromagnético. No caso mais simples, as energias de interação não dependem das variáveis  $\sigma_i$ , deste modo,  $J_{ij} = J$ . O campo magnético externo é indicado por  $h$ .

Mais adiante, no nosso trabalho, vamos utilizar o modelo de Ising incluindo vários tipos de desordem, como diferentes interações ferro e anti-ferromagnética, e o efeito de diluição, onde os átomos magnéticos são substituídos por outros não-magnéticos.

De acordo com a referência [6], para calcular a função de partição para o modelo de Ising, faz-se a soma dos pesos de *Boltzmann* sobre todas as configurações das variáveis de spin, cujo hamiltoniano é dado pela equação (1.1). Pode-se, obter assim, a energia livre magnética por sítio:

$$g = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N \right], \quad (1.2)$$

onde

$$Z_N = \sum_{\text{configurações}} \exp(-\beta \mathcal{H}). \quad (1.3)$$

$\beta = 1/k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann.

A solução do modelo de Ising unidimensional não apresenta nenhum tipo de transição. Mas, várias técnicas foram desenvolvidas para resolver o modelo de Ising em duas ou três dimensões (embora não foi obtido sucesso nesse último caso), incluindo a aproximação de campo médio, matrizes de transferência.

No nosso trabalho, utilizamos a técnica de matrizes de transferência, através da qual é possível determinar valores para as funções termodinâmicas e magnéticas com alto grau de precisão para modelos em redes hierárquicas e em redes apolonianas, sendo discutido mais adiante.

### 1.1.1 Modelo de Ising homogêneo, quase-periódico e desordenado.

Podemos também escrever o hamiltoniano do modelo de Ising de uma forma mais abrangente:

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i, \quad (1.4)$$

onde  $h_i$  é o campo que pode assumir os valores  $\pm h$ . A depender de como a energia de interação ( $J_{ij}$ ) se comporta, o hamiltoniano pode representar um caso homogêneo<sup>2</sup> [7], quando as interações são uniformes, desordenado [8], quando as interações admitem valores

---

<sup>2</sup> Quando  $J_{ij}$  assume um único valor.

aleatórios, ou quase-periódico [9], quando as interações são geradas por substituições binárias não uniformes.

## 1.2 Redes

Modelos de sistemas físicos na matéria condensada são geralmente definidos sobre substratos geométricos que garantem algum grau de simetria. Tal abordagem é sustentada pela observação da estrutura microscópica de um grande número de compostos que geralmente se ordenam segundo redes cristalográficas euclidianas. Além disto, é comum usar também redes que não são observadas fisicamente, mas que oferecem propriedades geométricas e matemáticas interessantes.

### 1.2.1 Redes euclidianas

Chamamos de rede euclidiana uma rede definida no espaço euclidiano.<sup>3</sup> A rede euclidiana se constitui de um número finito de pontos com certa relação de vizinhança entre eles. Chamamos os pontos de sítios e as relações de vizinhança são representadas por conexões entre os pontos.

Um cristal ideal descrito na rede euclidiana é constituído por uma repetição infinita de grupos idênticos de átomos [10] aos quais chamamos de base. As operações de translação e rotação são satisfeitas pelo conjunto de pontos pelos quais a base está associada. Isso equivale a dizer que dois conjuntos de pontos são considerados análogos se um puder ser transformado no outro após uma sequência de rotações e translações.

### 1.2.2 Redes hierárquicas do diamante

---

<sup>3</sup> Um conjunto de pontos no espaço euclidiano satisfaz às operações de translação e rotação.

Redes hierárquicas<sup>4</sup> são importantes no estudo de modelos de spins, pois apresentam invariância de escala. Modelos definidos nestas redes são passíveis de soluções exatas. Soluções para este modelo constituem aproximações para modelos definidos em redes quadradas.

Uma rede hierárquica resulta de um processo que consiste em agrupar alguns elementos um determinado número de vezes para originar a rede [21, 22]. Inicia-se com certas unidades agrupadas formando a estrutura da primeira geração, as quais são favoravelmente agrupadas para formar a segunda geração, e assim sucessivamente. Na figura 1.1, representamos as primeiras gerações da rede hierárquica do diamante. Começamos na geração zero com uma conexão entre os chamados sítios raiz. Na primeira geração, agrupamos quatro sítios, cujos sítios superior e inferior são os sítios raiz. A seguir, formamos a segunda geração, agrupando quatro conjuntos de sítios da primeira geração. Repetindo o processo  $n$  vezes, obtemos a  $n$ -ésima geração.

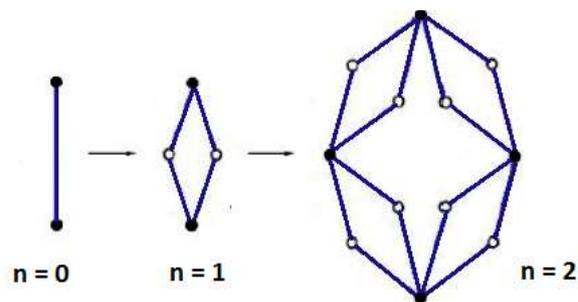


Figura 1.1: Primeiras gerações da rede hierárquica

É possível obter o número de sítios na  $n$ -ésima geração ( $N_n$ ) o número de arestas ( $L_n$ ) e a distância mínima entre os sítios extremos ( $M^n$ ):

$$\begin{aligned} N_n &= \frac{2 \cdot 4^n + 4}{3}, \\ L_n &= 4^n, \\ M^n &= 2^n, \end{aligned} \tag{1.5}$$

---

<sup>4</sup> Há vários trabalhos publicados sobre essas redes. Alguns exemplos podem ser encontrados nas referências [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20].

com  $\{n \in \mathbb{N}/n \geq 0\}$ .

Há uma extensa lista de resultados de modelos tratados pela mecânica estatística que foram obtidos para a rede hierárquica do diamante e outros variantes, envolvendo o cálculo de expoentes críticos, e outras grandezas que caracterizam transição de fase de primeira e segunda ordem [21].

### 1.2.3 Redes apolonianas

Essa rede tem sua origem na resolução do problema de preencher o espaço com esferas, estudado pela primeira vez por Apollonius de Perga<sup>5</sup> (Perga, 262 a.C. — 194 a.C.) [23].

Na versão bidimensional, temos a seguinte solução: três círculos tangentes originam uma região que deve ser preenchida por círculos menores que tangenciam os iniciais e assim sucessivamente. Na figura 1.2, ilustramos os círculos tangentes da resolução do problema de Apollonius.

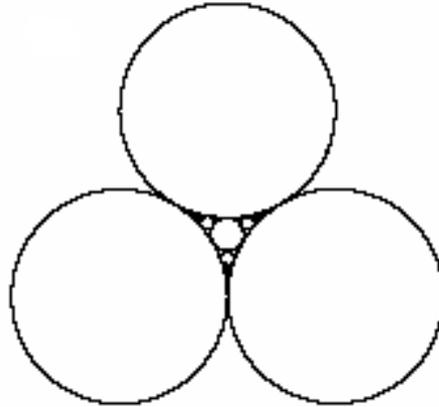


Figura 1.2: Círculos tangentes na solução da otimização de um plano por círculos.

Para definir a rede apoloniana imagina-se que os centros dos círculos tangentes da solução de Apollonius sejam ligados por retas. A rede resultante representa a interseção das

---

<sup>5</sup> Apollonius foi um matemático e astrônomo grego do século III A.C. que inovou no campo das cônicas.

linhas de ação que define a direção das forças de contato. As três primeiras gerações da rede apoloniana consideradas no nosso trabalho estão representadas conforme a figura 1.3.

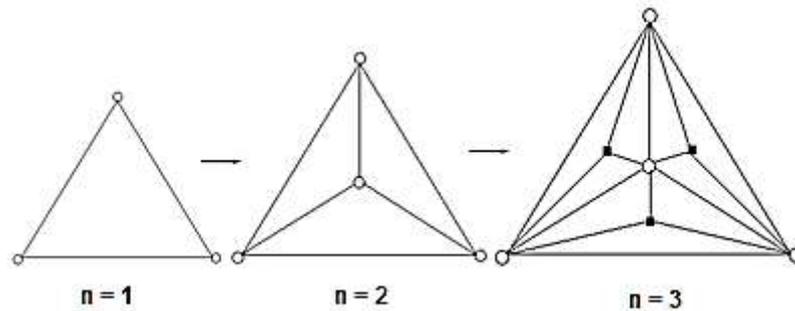


Figura 1.3: Primeiras gerações da rede apoloniana

De forma análoga à da rede hierárquica, podemos obter o número de sítios na  $n$ -ésima geração ( $N_n$ ), o número de arestas ( $L_n$ ) e a distância mínima entre os sítios extremos ( $M^n$ ):

$$\begin{aligned} N_n &= \frac{3^{n-1} + 5}{2}, \\ L_n &= \frac{3^n + 3}{2}, \\ M^n &= 1, \end{aligned} \tag{1.6}$$

com  $\{n \in \mathbb{N}/n > 0\}$ .

A cada geração da rede apoloniana [24], incorporamos sítios que correspondem ao centro de novos círculos adicionados no empacotamento de espaços vazios na geração anterior, como mostrado na figura 1.4. Vale ressaltar que existem sítios relativamente próximos que não interagem entre si.

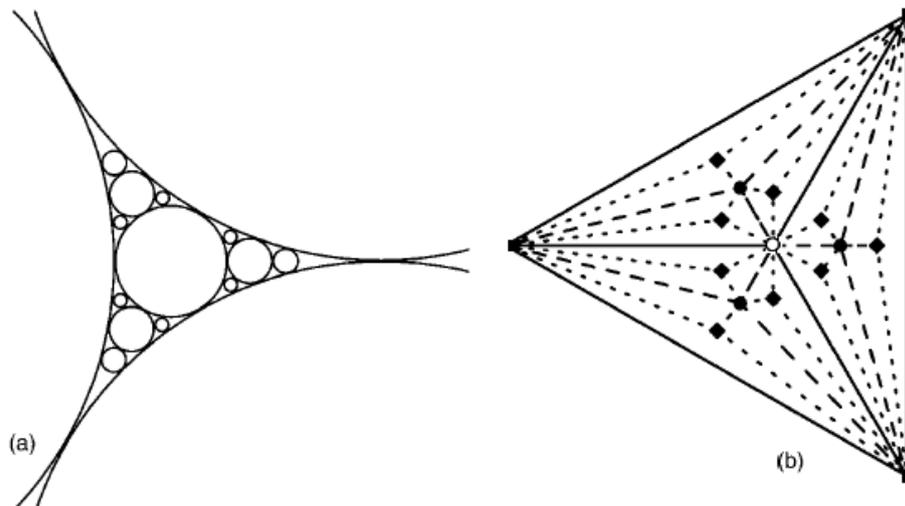


Figura 1.4: Quarta geração da rede apoloniana. Fonte: [24]. a) Círculos ideais que definem essa rede. b) Sítios representados por quadrados, círculo “sem preenchimento”, círculos “com preenchimento” e diamantes são introduzidos na primeira, segunda, terceira e quarta geração respectivamente.

A rede apoloniana é útil para a compreensão de modelos magnéticos em que as interações não são restritas por uma vizinhança organizada geometricamente, tais como o empacotamento de partículas magnéticas, no qual as forças de contato correspondem à rede.

No nosso trabalho, estudamos sistemas de spin na rede hierárquica do diamante e na rede apoloniana. Para esse estudo utilizamos o modelo de Ising e aplicamos o método das matrizes de transferência. Em seguida, apresentaremos os resultados que encontramos para as propriedades termodinâmicas e magnéticas.

### 1.3 Transição de fase

Em diversos sistemas tais como fluidos, ligas metálicas, materiais magnéticos, que é o caso do presente trabalho, ocorre o fenômeno da transição de fase. Os aspectos qualitativos de vários tipos de transição de fase têm sido estudados através das “Teorias clássicas das transições de fase” [6, 25, 26, 27, 28]. O termo clássico, referindo-nos às “Teorias clássicas das transições de fase”, não é no sentido de fazer oposição à Mecânica Quântica, mas simplesmente fazer alusão às teorias do físico holandês Johannes Diderik van der Waals

(1837-1923) para a transição líquido-gás, e dos físicos franceses Curie e Pierre Ernest Weiss (1865-1940) para sistemas magnéticos.

A transição de fase é caracterizada por um parâmetro de ordem que é uma quantidade termodinâmica mensurável que assume diferentes valores em cada fase e é usual para caracterizar a natureza de uma transição [29].

Por exemplo, para descrever a transição de fase líquido-vapor, um parâmetro de ordem adequado seria a densidade do meio. Na transição ferro-paramagnético, um parâmetro adequado seria a magnetização espontânea.

A partir da década de 60, com o desenvolvimento de técnicas para realizar experiências mais cuidadosas nas vizinhanças dos pontos críticos<sup>6</sup> [6], as teorias clássicas passaram a ser analisadas mais criteriosamente.

Verificou-se que diversas grandezas apresentam um comportamento característico na região crítica com divergências assintóticas que foram caracterizadas por expoentes críticos. Dessa forma, nas vizinhanças do ponto crítico, o sistema pode ser descrito por meio das leis de potência. Vejamos por exemplo, o caso do calor específico ( $c$ ). Temos o seguinte comportamento assintótico:

$$c \sim |1 - T/T_c|^{-\alpha}, \quad h = 0. \quad (1.7)$$

Da mesma forma, para a magnetização ( $m$ ) a susceptibilidade ( $\chi$ ) e a equação de estado para o campo magnético ( $h$ ) [29],

$$m \sim |1 - T/T_c|^\beta, \quad h = 0 \text{ e } T < T_c. \quad (1.8)$$

$$\chi \sim |1 - T/T_c|^{-\gamma}, \quad h = 0 \text{ e } T < T_c. \quad (1.9)$$

$$m \sim h^{1/\delta}, \quad T = T_c. \quad (1.10)$$

---

<sup>6</sup> Pontos a partir dos quais não se consegue fazer a distinção entre fases de um material.

Grandezas termodinâmicas análogas possuem um valor do expoente crítico bem definido.

No estudo de transição de fase, existem outras grandezas de natureza microscópica que são muito importantes. Uma delas é o comprimento de correlação ( $\xi$ ) que indica como variáveis microscópicas em diferentes posições estão correlacionadas. Ele pode ser analisado na transição de fase de segunda ordem<sup>7</sup>.

O comprimento de correlação ( $\xi$ ) do material é a medida das distâncias sobre as quais as correlações spin-spin (ou densidade-densidade) no sistema se estendem. Enquanto  $T$  está acima de  $T_c$ ,  $\xi$  é finito e significativamente acima de  $T_c$ ,  $\xi = 0$ . Porém quando  $T$  diminui e se aproxima de  $T_c$ ,  $\xi$  aumenta indefinidamente, finalmente divergindo em  $T = T_c$ . A singularidade resultante também é do tipo da lei de potência:

$$\xi = at^{-\nu} \quad (t > 0 \text{ e } h = 0). \quad (1.11)$$

em que  $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ .

A divergência de  $\xi$  em  $T = T_c$  é talvez a pista mais importante que nós temos para nosso geral entendimento do fenômeno crítico. No limite termodinâmico, quando  $\xi \rightarrow \infty$ , correlações se estendem sobre todo o sistema [30].

### 1.3.1 Aproximação de Migdal Kadanoff e Redes hierárquicas

Grupo de renormalização permite a investigação de mudanças nas propriedades de um sistema físico em escalas diferentes, bem como torna possível calcular os expoentes críticos de uma forma simples.

Uma transformação do grupo de renormalização para o caso de modelo de spin fundamenta-se na ideia de que próximo ao ponto crítico, se compararmos o comprimento de correlação ( $\xi$ ) com a distância entre os sítios, veremos que tem um valor muito grande.

---

<sup>7</sup> Quando a transição se dá na segunda derivada de alguma grandeza e é caracterizada pela existência de um ponto crítico.

Portanto, podemos fazer um reescalonamento mantendo as propriedades termodinâmicas invariantes. No entanto, na criticalidade, conforme discutimos na seção anterior, o comprimento de correlação diverge. Dessa forma, é necessário atingirmos um ponto fixo da transformação [29].

A aproximação de Migdal Kadanoff é uma das realizações mais simples do grupo de renormalização. Para um sistema unidimensional, essa aproximação fornece um ponto fixo estável em  $T = \infty$ , levando a conclusão de que não existe uma transição de fase em uma temperatura finita qualquer, e um ponto fixo instável em  $T = 0$ , o que indica que esse é o ponto em que ocorre a transição de fase. Esse resultado é o tipo de comportamento que se espera encontrar na dimensão 1, e é similar à situação a ser representada pelos gráficos no capítulo 5 de nosso trabalho para a cadeia linear.

Entretanto, se usarmos a aproximação de Migdal Kadanoff para dimensões maiores, a forma do hamiltoniano é alterada. Para uma rede quadrada, a aproximação de Migdal Kadanoff não fornece resultados exatos, no entanto, para as redes hierárquicas, que são objetos de estudo do nosso trabalho, esta aproximação se mostra exata, pois a forma do hamiltoniano é conservada [9]. Resultados dessa aproximação evidenciam a transição de fase para a rede hierárquica [31].

A rede hierárquica do diamante é um dos exemplos de redes hierárquicas que tem sido exhaustivamente usada para se obter resultados exatos no formalismo de grupo de renormalização (GR). Ela possui uma estrutura auto-similar, ou seja, as suas gerações resultam do agrupamento de alguns elementos certo número de vezes para garantir a invariância de escala. Conforme podemos ver na figura 1.1, agrupamos 4 unidades primitivas para formar a geração de ordem 1, e para formar a geração de ordem 2, agrupamos 4 unidades da geração 1. As gerações posteriores são formadas agrupando os elementos da mesma forma. Aplicando o GR no espaço real de Migdal Kadanoff ao modelo de Ising homogêneo na rede hierárquica do diamante [32], encontram-se soluções de ponto fixo instáveis, além de pontos fixos estáveis correspondentes a  $T=0$  e  $T=\infty$ . O ponto fixo instável está associado com a temperatura crítica  $T_c$  onde se observa uma transição de fase de segunda ordem. No entanto, para o caso específico da rede hierárquica com diluição, a transformação de Migdal Kadanoff não produz resultados exatos.

### 1.3.2 Ausência de transição em redes apolonianas

Conforme mencionamos, no contexto da aproximação de Migdal Kadanoff, a rede hierárquica apresenta transição de fase. Mais adiante mostraremos os resultados do nosso trabalho para transição de fase na rede hierárquica do diamante, embora tenham sido obtidos através de outro método, a técnica das matrizes de transferência. O mesmo método já foi utilizado para diversas versões do modelo de Ising e em diversas estruturas, incluindo a rede apoloniana. No caso específico dessa rede, até o momento, ainda não foi observada a transição de fase magnética para nenhum modelo. Um comportamento semelhante foi observado para os casos com desordem que apresentaremos neste trabalho.

## 1.4 Modelos desordenados temperados e recozidos

Em metalurgia, o processo de têmpera representa um resfriamento brusco introduzido nos aços no intuito de aumentar sua resistência. Esse processo é tão rápido, que o aço não atinge o seu equilíbrio termodinâmico durante o processo de resfriamento. No estudo de modelos desordenados temperados ou, em outras palavras, congelados (*quenched*), vamos nos referir a este modelo no caso de fixar as interações magnéticas entre spins com campo externo. O modelo temperado é mais adequado para se referir a substâncias no estado sólido, que demoram um tempo bem longo para atingirem o equilíbrio termodinâmico (tempo de relaxação tendendo ao infinito).

Dessa forma, a função de partição fica

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\beta \left[ \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sum_{i=1}^N \sigma_i \right]. \quad (1.12)$$

Assim, em sistemas com variáveis temperadas, consideramos uma configuração qualquer das variáveis aleatórias e calculamos a função de partição. Obtemos uma energia livre, a qual também será uma variável aleatória. Tiramos, em seguida, a média da energia

livre com respeito à distribuição de probabilidades associada à variável aleatória temperada [33].

Por outro lado, o recozimento é um procedimento térmico que tem por finalidade eliminar a dureza de um aço temperado. Nesse caso, o aço atinge o seu equilíbrio termodinâmico. No nosso trabalho, o caso recozido (*annealed*) se refere a materiais mais fluidos, tais como os cristais líquidos desordenados, os quais chegam à situação de equilíbrio termodinâmico rapidamente, já que o tempo de relaxação devido à desordem é curto.

Para fazer uma descrição do caso temperado, dentro da mecânica estatística, fazemos uma transformação do *ensemble* canônico para o *ensemble* grande canônico introduzindo uma soma sobre os valores diferentes associados aos graus de liberdade que caracterizam a desordem.

No caso em que a desordem está associada à diluição de sítios ocupados por íons magnéticos, vamos mostrar que a função de partição adequada é dada por

$$\mathcal{E}(T, h, N, \mu) = \sum_{N_+=0}^N e^{\beta\mu N_+} Z(T, h, N; N_+), \quad (1.13)$$

onde  $N_+$  indica o número de sítios ocupados por variáveis magnéticas nesse contexto “grande canônico” e  $\mu$  é o potencial químico. O valor de  $\langle N_+ \rangle$  pode ser obtido pela expressão

$$N_+ = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{E}, \quad (1.14)$$

de onde é possível eliminar a dependência sobre o potencial químico.

## **1.5 Objetivo da dissertação: Modelos recozidos na rede apoloniana e hierárquica usando o método das matrizes de transferência.**

Os modelos desordenados de spin têm sido tradicionalmente estudados na versão temperada, correspondendo à situação física usual na qual os tempos de relaxação são muito maiores do que o tempo de observação.

No entanto, estudos recentes de modelos de cristais líquidos, onde os tempos de relaxação podem ser muito menores, levaram à consideração do modelo de Maier-Saupe na versão recozida e à comparação entre resultados nas duas versões.

Os métodos utilizados no tratamento de modelos na versão recozida devem levar em conta variações estatísticas dos parâmetros do modelo (constantes de acoplamento, variáveis de ocupação de sítio, etc.) no cálculo da função de partição apropriada.

Além da determinação dos pesos de Boltzmann para cada configuração possível das variáveis do modelo, deve-se fazer também a soma sobre os diversos valores que os parâmetros podem assumir. Esses estudos foram feitos, em sua maioria, utilizando o método do campo médio.

Vamos introduzir neste trabalho o método das matrizes de transferência para o tratamento do modelo na versão recozida. Isso requer que façamos a definição de matrizes de transferência de ordem maior que no modelo homogêneo<sup>8</sup>.

A proposta de considerar o modelo de Ising diluído se deve ao fato de que este é mais simples do que o modelo de Maier-Saupe. Assim, fica mais fácil testar a viabilidade da extensão do método de “matrizes de transferência” no tratamento de modelos recozidos. Como já foi mencionado, utilizamos o mesmo método em duas redes com diferentes topologias: rede apoloniana e rede hierárquica do diamante para verificar a existência de comportamento crítico.

## 1.6 Matriz de transferência

---

<sup>8</sup> Vale destacar que esse método não foi utilizado anteriormente para o estudo deste modelo.

A técnica de matrizes de transferência tem sido utilizada para resolver uma grande variedade de modelos unidimensionais e bidimensionais com interações de primeiros vizinhos [34, 35, 36, 37]. A utilização desse método para obter a solução do modelo de Ising tem sido muito difundida com diversas variantes. Vamos inicialmente descrever como se desenvolve esse método para a cadeia linear, seguindo os passos descritos na referência [6]. Neste caso, o hamiltoniano de Ising pode ser escrito da forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (1.15)$$

A função canônica de partição é

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \beta \left[ J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} h \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]. \quad (1.16)$$

Podemos escrever

$$Z_N = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \prod_{i=1}^N T(\sigma_i \sigma_{i+1}), \quad (1.17)$$

onde  $T$  é uma matriz  $2 \times 2$ , indicada pelos valores das variáveis de spin  $\sigma_i = \pm 1$ , denominada matriz de transferência,

$$T = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta h) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta h) \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

A partir de (1.17), a função canônica de partição pode ser interpretada como o traço do produto de  $N$  matrizes de transferência idênticas,

$$Z_N = \text{Tr}(T)^N. \quad (1.19)$$

É possível fazer a diagonalização da matriz  $T$  por meio de uma transformação unitária, já que a matriz  $T$  é simétrica

$$UTU^{-1} = D \quad \text{com} \quad U^{-1} = U^\dagger.$$

Temos então

$$Z_N = \text{Tr}(T)^N = \text{Tr}(U^{-1}UTU^{-1}U)^N = \text{Tr}(U^{-1}DU)^N = \text{Tr}(D)^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N$$

Ou seja, a função canônica de partição pode ser escrita em termos dos autovalores da matriz de transferência.

Em resumo, podemos caracterizar o uso do método da matriz de transferência pela representação dos pesos de Boltzmann em uma forma matricial, a partir da qual a função de partição pode ser expressa em termos de seus autovalores. Desta forma, a energia livre ( $F$ )

$$F = -k_B T \ln Z_N \quad (1.20)$$

pode ser escrita em termos do maior autovalor da matriz de transferência.

A partir da função que representa a energia livre, podemos obter as propriedades termodinâmicas e magnéticas do sistema como, por exemplo, o calor específico, a magnetização, etc.

## 1.7 Soluções de campo médio

Nas aplicações do modelo de Ising podem ser introduzidas soluções de campo médio, que constituem um método de aproximação tradicional na mecânica estatística, usado para obter aproximações para quantidades como o valor esperado do campo. Neste caso, o efeito de interações de cada par de variáveis é substituído por uma aproximação onde apenas o efeito de uma das duas variáveis é levada em conta explicitamente. O efeito de segunda

variável é substituído por um campo médio produzido por todos os outros graus de liberdade do modelo.

Podemos observar a aplicação desse método na referência [38], na qual é analisado o diagrama de fase de um modelo para uma mistura binária de moléculas nemáticas<sup>9</sup> em uma rede de Bethe. E estuda-se uma investigação do campo médio através da analogia do modelo de campo médio de Maier-Saupe com uma distribuição recozida.

No nosso trabalho, entretanto, conforme já comentamos, vamos seguir outra linha. Aplicaremos o modelo de Ising trabalhando com a técnica de matriz de transferência.

---

<sup>9</sup> Estado intermediário entre líquido e gasoso. Não apresenta organização entre as posições dos mesógenos, que exibem uma organização orientacional resultante [37].

## CAPÍTULO 2

### MODELOS

---

Neste capítulo trataremos de alguns modelos importantes da mecânica estatística que possuem relevância no nosso trabalho.

#### 2.1 Modelos de Ising desordenados: desordem de interação, de campo externo e de diluição.

Existem diversas maneiras de introduzir desordem em um modelo físico construído sobre as redes euclidianas ou hierárquicas. Entre as mais comuns, estão aquelas que levam a modelos com desordem de interação, de campo externo e de diluição. No caso de um modelo de Ising, consideremos um hamiltoniano representado da forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \tau_i \tau_j \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i,j} \tau_i \sigma_i. \quad (2.1)$$

Se fizermos uma comparação entre as equações (1.4) e (2.1), vemos que nesta última foi acrescido o parâmetro de desordem ( $\tau_i$ ). No caso de desordem de diluição,  $\tau_i$  assume dois valores possíveis (0,1) cujos significados são  $\tau_i = 1$ , sítio ocupado, ou  $\tau_i = 0$ , sítio desocupado. Por outro lado, se considerássemos um modelo de interações ferro e antiferromagnéticas,  $\tau_i$  assumiria os valores  $\pm 1$  de forma que  $\tau_i \tau_j > 0$  ou  $\tau_i \tau_j < 0$ , indicariam os dois tipos de interação. Na seção 2.3, faremos uma análise mais detalhada desse hamiltoniano e faremos uma passagem para o ensemble grande canônico, com a finalidade de estudar o caso recozido, mais apropriado para sistemas fluidos, tais como cristais líquidos. Neste trabalho, optamos pelo modelo de diluição que fisicamente significa que há presença de

átomos não magnéticos no sistema. É um modelo adequado para o estudo de misturas de substâncias magnéticas e não magnéticas.

## 2.2 Modelo de Maier Saupe para cristais líquidos

Atualmente se conhecem diversas substâncias que estão num estado intermediário da matéria, denominado mesofase. Uma das mesofases mais importantes é a líquido-cristalina, que caracteriza materiais denominados de cristais líquidos. Suas propriedades estão entre a de um líquido convencional, como a fluidez, e a de um cristal sólido, como birrefringência.



Cristais líquidos podem ser encontrados em diversas aplicações tecnológicas, como, por exemplo, displays eletrônicos utilizados em telas de televisão (LCD), painéis de dispositivos de calculadoras.

Podemos obter um cristal líquido durante a fusão de um material ou através da mistura de algumas substâncias [33, 39]. No primeiro caso, o cristal líquido é classificado como termotrópico e no segundo caso como liotrópico.

Figura 2.2: Moléculas de um cristal líquido na mesofase nemática.

Figura extraída do site: [http://en.wikipedia.org/wiki/Liquid\\_crystal#Maier.E2.80.93Saupe\\_mean\\_field\\_theory](http://en.wikipedia.org/wiki/Liquid_crystal#Maier.E2.80.93Saupe_mean_field_theory)

Um cristal líquido é encontrado mais abundantemente na mesofase nemática. Nesta, as moléculas não têm uma ordem posicional. As posições dos centros de massa se distribuem aleatoriamente, mas existe uma correlação de longo alcance entre as orientações dos eixos de simetria [33]. A maioria dos nemáticos é uniaxial, ou seja, tem um eixo que é mais longo com uma direção preferencial de ordenamento, podendo ser representados por elipsoides, conforme a figura 2.2. Podemos representar essas moléculas através de cilindros ou discos. Nesse caso elas indicam que a direção do eixo de simetria foi encurtada em relação às demais. Já os nemáticos com duas direções preferenciais de ordenamento são chamados de biaxiais.

Encontrar evidências experimentais de uma fase nemática biaxial tem motivado muitos pesquisadores. Isso se justifica, por exemplo, no contexto dos displays, pois se tivéssemos um display constituído de nemáticos na fase biaxial, o tempo de resposta seria

bem menor, uma vez que é mais rápido mudar a direção do eixo mais curto. A primeira vez que se teve evidência experimental de uma fase nemática biaxial foi em 1980 por Yu e pelo físico alemão Alfred Saupe (1925 - 2008) no contexto de um cristal líquido liotrópico [40].

As técnicas da mecânica estatística são as mais adequadas para se estudar os cristais líquidos nemáticos, uma vez que se envolve um grande número de corpos. Uma das principais linhas de estudo é a da área da teoria de campo molecular efetivo, cujo trabalho pioneiro foi o do físico alemão Wilhelm Maier (1913 - 1964) e seu orientando de doutorado Alfred Saupe, por volta de 1958 a 1960.

Alfred Saupe e Wilhelm Maier propuseram um modelo (modelo de Maier-Saupe) microscópico para a transição de fase de primeira ordem entre a fase líquida isotrópica (líquido convencional) e líquida nemática. O modelo de Maier-Saupe é baseado nas seguintes suposições [41]:

- Interação das moléculas dependente das forças de Van der Waals;
- Aproximação de campo médio;
- Configuração do centro de massa não ser afetada pela interação dependente da orientação.

Em resumo, a teoria de Maier e Saupe fundamenta-se em interações efetivas de longo alcance, embora não sejam as interações predominantes. Seus efeitos apresentam dependência explícita com a temperatura. Para exemplificar este modelo, tomamos uma rede com  $N$  sítios, em que cada sítio acomoda uma molécula na forma de um cilindro com orientação indicada pelo vetor unitário  $\vec{n}_i$ . Neste caso, o hamiltoniano do modelo é dado pela relação

$$\mathcal{H}_N = -\frac{J}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \sum_{\mu, \nu = x, y, z} S_i^{\mu\nu} S_j^{\mu\nu}, \quad (2.2)$$

onde  $J > 0$  está relacionado às energias de interação entre as partículas,  $N$  indica o número de sítios, e  $S_i^{\mu\nu}$  é um elemento de tensor de orientação de uma partícula  $i$  em relação a um dado referencial do laboratório. Já  $\mu, \nu = x, y, z$  indexam os eixos ortonormais do referencial do laboratório. O estudo desse modelo não é trivial. Informações mais detalhadas podem ser encontradas na tese de doutorado sobre “Modelos estatísticos para o ordenamento nemático biaxial”, de Eduardo do Carmo [33].

### 2.2.1 Adequação da formulação recozida

Visto que, nos modelos tratados no âmbito da mecânica estatística, a conexão com a termodinâmica se dá através da energia livre de Helmholtz, que é proporcional ao logaritmo da função de partição, o tratamento de modelos desordenados levanta a questão se devemos tomar a média da função de partição com respeito à distribuição de probabilidades e depois calcular o logaritmo, ou calcular o logaritmo de cada função de partição diferente para o sistema e em seguida tomar a média.

O que vai determinar a forma de tratar um sistema desordenado é a escala de tempo envolvida. Quando a escala de tempo é muito longa em relação às demais variáveis do sistema, a desordem é do tipo congelada ou fixa. Ou seja, as variáveis aleatórias, nessa situação, levam um tempo muito longo para entrar em equilíbrio térmico com as outras variáveis. E quando a escala de tempo é comparável às demais variáveis, a desordem é do tipo recozido ou móvel. Nesse caso, as variáveis aleatórias levam pouco tempo para chegar ao equilíbrio térmico. A desordem congelada é adequada para descrever uma rede cristalina, que não apresenta grande mobilidade, e a desordem recozida é adequada para o estudo de soluções, já que é grande a mobilidade das moléculas no estado líquido.

Para sistemas com variáveis aleatórias congeladas, escolhe-se uma configuração qualquer dessas variáveis aleatórias e calcula-se em seguida a função de partição obtendo a energia livre. Para completar o estudo desse sistema, calcula-se a média da energia livre em relação a distribuição de probabilidades. Por outro lado, para sistemas com variáveis do caso recozido, que possuem tempos de relaxação muito curtos, calcula-se primeiro a média da função de partição relacionada a todas as configurações das variáveis aleatórias, para em seguida calcular a energia livre.

No nosso trabalho, faremos inicialmente um estudo de um modelo mais simples que o modelo de Maier e Saupe, no contexto das variáveis aleatórias recozidas.

## 2.3 Versão recozida do modelo de Ising para um caso de desordem simples

Para exemplificar o caso de desordem mais simples possível, consideramos inicialmente o modelo de Ising com campo aleatório na cadeia linear. Como já foi indicado na equação (1.4), o hamiltoniano do sistema é escrito na forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i, \quad (2.3)$$

onde  $h_i$  é o campo que pode assumir os valores  $\pm h$ .

A função de partição no ensemble canônico para o caso congelado do hamiltoniano descrito acima é

$$Z(T, N, \{h_i\}) = \sum_{\{\sigma_i = \pm 1\}} \exp[-\beta \mathcal{H}(\{\sigma_i\}; \{h_i\})]. \quad (2.4)$$

Em termos das matrizes de transferência ( $M_{i,i+1}$ ),

$$Z(T, N, \{h_i\}) = \text{Tr} \prod_{i=1}^N M_{i,i+1}, \quad (2.5)$$

onde cada elemento da matriz de transferência fica

$$M_{i,i+1}\{h_i\} = \left\langle \sigma_i \left| \exp \beta \left( J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} (h_i \sigma_i + h_{i+1} \sigma_{i+1}) \right) \right| \sigma_{i+1} \right\rangle. \quad (2.6)$$

No caso congelado, o campo aleatório é mantido fixo no valor atribuído no início do cálculo. Já no caso recozido, consideramos as várias possibilidades de variação do campo.

Para descrever o caso recozido, ainda na cadeia linear, vamos fazer a passagem do ensemble canônico para o grande canônico. Para fazer essa passagem, vamos fazer as

seguintes considerações, baseadas nas definições das variáveis  $N_+$  e  $N_-$  que indicam o número de spins apontando na direção positiva e negativa do eixo de simetria. Com  $N = N_+ + N_-$ , temos que

$$\langle \sum_i h_i \rangle = h(N_+ - N_-) = h(2N_+ - N). \quad (2.7)$$

Para definir o estado termodinâmico do sistema é necessário fixar o valor de  $N_+$ , a partir do qual se obtém o valor médio do campo aleatório. É necessário também fazer a soma na função de partição sobre os possíveis valores assumidos pelos  $h_i$ , levando em conta a equação (2.7), ou seja, mantendo o valor de  $N_+$  fixo. Para fazer essa soma, introduzimos uma variável aleatória,  $\tau_i = \pm 1$ . Neste caso,  $h_i = \tau_i h = \pm h$ , de forma que

$$N_+ = \sum_{i=1}^N \tau_i, \quad (2.8)$$

e

$$\sum_i \tau_i = 2N_+ - N. \quad (2.9)$$

Assim, de  $Z(T, N; \{h_i\})$ , passamos a lidar com  $Z(T, h, N; \{\tau_i\})$  no caso recozido. Para eliminarmos as restrições sobre as variáveis  $\tau_i$ , expressas pelas equações (2.9), é necessário definir um ensemble grande canônico, no qual calculamos uma grande função de partição,  $\mathcal{E}$ , que é obtida através da soma sobre as funções de partição ( $Z$ ) para todos os valores possíveis de  $N_+$ . A realização desta soma é equivalente ao cálculo de  $Z$ , onde todos os valores de  $\tau_i$  são permitidos, sem necessidade de observar as restrições expressas pelas equações (2.8) e (2.9). Desta forma, obtemos

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(T, h, N, \mu) &= \sum_{N_+=0}^N e^{\beta\mu N_+} Z(T, h, N; N_+) \\
&= \sum_{N_+=0}^N \sum_{\{\tau_i\}=\pm 1} \sum_{\{\sigma_i\}=\pm 1} \exp \left[ \beta \left[ \mu N_+ + \sum_i J \sigma_i \sigma_{i+1} + \sum_i h \tau_i \sigma_i \right] \right] \\
&= \sum_{\{\tau_i\}=\pm 1} \sum_{\{\sigma_i\}=\pm 1} \exp \left[ \beta \left[ \frac{\mu}{2} \left( \sum_i \tau_i + N \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sum_i J \sigma_i \sigma_{i+1} + \sum_i h \tau_i \sigma_i \right] \right].
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Utilizando o formalismo de matrizes de transferência, podemos expressar

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \mathcal{E}(T, h, N, \mu) &= \sum_{\{\tau_i\}} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta\mu \frac{N}{2}} \exp \left[ \beta \left[ \sum_i J \sigma_i \sigma_{i+1} + \mu \frac{\tau_i + \tau_{i+1}}{4} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{h}{2} (\tau_i \sigma_i + \tau_{i+1} \sigma_{i+1}) \right] \right] = e^{\beta\mu \frac{N}{2}} \sum_{\{\tau_i\}} \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_i \langle \sigma_i \tau_i | \bar{M} | \sigma_{i+1} \tau_{i+1} \rangle,
\end{aligned} \tag{2.11}$$

onde  $\langle \sigma_i \tau_i | \bar{M} | \sigma_{i+1} \tau_{i+1} \rangle = \exp[\beta(J\sigma_i\sigma_{i+1} + \mu \frac{\tau_i + \tau_{i+1}}{4} + \frac{h}{2}(\sigma_i\tau_i + \sigma_{i+1}\tau_{i+1}))]$  representa um elemento da matriz de transferência na cadeia linear.

Para o modelo com desordem nas interações, o caso é similar,

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \tau_i \tau_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \tau_i \sigma_i, \tag{2.12}$$

onde  $\tau_i = \pm 1$  é a variável aleatória que descreve a desordem no sistema. Como já foi mencionado, podemos considerar um modelo de interações do tipo ferro e antiferromagnético ( $\tau_i\tau_{i+1} > 0$  ou  $\tau_i\tau_{i+1} < 0$ ), ou o caso com diluição ( $\tau_i = 1$ , sítio ocupado ou  $\tau_i = 0$ , sítio desocupado.). Em qualquer dos casos, teríamos

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(T, h, N, \mu) = e^{\beta\mu\frac{N}{2}} \sum_{\{\tau_i\}} \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[ \beta \sum_i \left[ J\tau_i\tau_{i+1}\sigma_i\sigma_{i+1} + \mu \frac{\tau_i + \tau_{i+1}}{4} \right. \right. \\ \left. \left. + h \frac{\tau_i\sigma_i + \tau_{i+1}\sigma_{i+1}}{2} \right] \right] = e^{\beta\mu\frac{N}{2}} \sum_{\{\tau_i\}} \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_i \langle \sigma_i\tau_i | \bar{M} | \sigma_{i+1}\tau_{i+1} \rangle, \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde

$$\langle \sigma_i\tau_i | \bar{M} | \sigma_{i+1}\tau_{i+1} \rangle = \exp \left[ J\tau_i\tau_{i+1}\sigma_i\sigma_{i+1} + \mu \frac{\tau_i + \tau_{i+1}}{4} + h \frac{\tau_i\sigma_i + \tau_{i+1}\sigma_{i+1}}{2} \right]. \quad (2.14)$$

Por outro lado, para o caso das redes hierárquicas que serão analisadas neste trabalho, é mais adequado escrevemos os elementos da matriz de transferência da forma

$$\langle \sigma_i\tau_i | \bar{M} | \sigma_j\tau_j \rangle = \exp \left[ J\tau_i\tau_j\sigma_i\sigma_j + \mu \frac{\tau_i + \tau_j}{4} + h \frac{\tau_i\sigma_i + \tau_j\sigma_j}{2} \right]. \quad (2.15)$$

Com efeito, tanto na rede hierárquica como na rede apoloniana, vamos colocar o campo magnético ( $h$ ) e o potencial químico ( $\mu$ ) apenas nos sítios centrais. Optamos por trabalhar no problema com diluição no nosso trabalho.

## CAPÍTULO 3

# REDES COM INVARIÂNCIA DE ESCALA

---

Esse capítulo é voltado para o estudo de dois tipos específicos de redes com invariância de escala: rede hierárquica do diamante e rede apoloniana.

### 3.1 Rede hierárquica do diamante

Redes hierárquicas são importantes no estudo de diversos modelos físicos no âmbito da mecânica estatística, como, por exemplo, modelos magnéticos, modelos de percolação, modelos de contato, propagação de doenças, etc. [21, 42]. A principal vantagem dessas redes é a sua invariância de escala, o que permite a caracterização, de maneira razoavelmente simples, de transições de fase mediante a determinação dos expoentes críticos. A rede hierárquica do diamante é uma das mais simples redes hierárquicas.

Uma rede hierárquica resulta do agrupamento de alguns elementos em certo número de vezes. Na figura 1.1, mostramos as primeiras gerações da rede hierárquica do diamante. Na primeira geração, agrupamos 4 unidades primitivas para formar a geração de ordem 1, depois formamos a geração de ordem 2, agrupando 4 unidades da mesma forma. Se repetirmos o processo  $n$  vezes, obtemos uma geração de ordem  $n$ . Já que no processo de iteração são sempre agrupados o mesmo número de sub-unidades ( $N_B$ ) para formar a geração seguinte, podemos afirmar que a rede hierárquica diamante é uma rede auto-similar e uniforme. Neste processo, observa-se que as redes de duas gerações sucessivas são idênticas, a menos de um fator de escala ( $b$ ), que mede o quanto as distâncias típicas na rede são modificadas na passagem de uma geração à seguinte. A maneira mais simples de identificar o valor de  $b$  é observar como a distância entre os sítios raiz aumenta neste processo.

O número de ligações relacionado ao menor caminho entre dois vértices quaisquer da rede hierárquica é chamado de distância química. A dimensão fractal é outra característica importante da rede hierárquica. Nesse sentido, o fator de escala ( $b$ ) é a distância entre os sítios raiz da primeira geração. A dimensão fractal ( $D$ ) desta rede é obtida de maneira imediata a partir da contagem do número de sub-unidades ( $N_B$ ) na geração  $n$  que é necessário para formar unidade na geração  $n+1$  e pelo valor de  $b$ , de forma que

$$D = \frac{\log(N_B)}{\log(b)}. \quad (3.1)$$

Como estamos interessados no estudo da rede hierárquica do diamante, observando a figura 1.1, podemos identificar o número de sub-unidades,  $N_B = 4$ , e o fator de escala,  $b = 2$ . Logo a rede hierárquica diamante tem dimensão:  $D = \frac{\log(4)}{\log(2)} = 2$ .

### 3.1.1 Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede hierárquica do diamante sem campo magnético ( $h=0$ )

Vamos agora detalhar o estudo do modelo de Ising na rede hierárquica do diamante com a utilização de matrizes de transferência. Para isto, consideramos inicialmente a ligação entre dois spins nos sítios raiz que constitui a geração  $g = 0$ , conforme a figura 3.1.

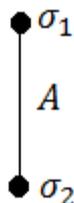


Figura 3.1: Dois spins sítios raiz para a formação da rede hierárquica

O Hamiltoniano de Ising para esta geração é:

$$\mathcal{H} = -J\sigma_1\sigma_2. \quad (3.2)$$

E as possibilidades de configuração ( $A_0$ ) podem ser arrumadas da forma

$$A_0 = \begin{bmatrix} (A_0)_{11} & (A_0)_{12} \\ (A_0)_{21} & (A_0)_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

com

$$(A_0)_{ij} = \langle \sigma_1^i | e^{\beta J \sigma_1^i \sigma_2^j} | \sigma_2^j \rangle. \quad (3.4)$$

Fazemos a identificação,  $\sigma_n^i = 1$ , se  $i = 1$  e  $\sigma_n^i = -1$ , se  $i = 2$ . Deste modo, temos que

$$\begin{aligned} (A_0)_{11} &= e^{\beta J} = a \\ (A_0)_{12} &= e^{-\beta J} = b \\ (A_0)_{21} &= e^{\beta J} = a \\ (A_0)_{22} &= e^{-\beta J} = b \end{aligned} \quad (3.5)$$

Na geração  $g = 1$ , definimos primeiro uma matriz que descreve as interações entre um spin no sítio raiz com dois spins intermediários.

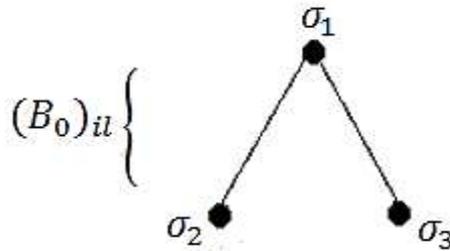


Figura 3.2: Sítio raiz com dois spins intermediários para a construção da geração 1 da rede hierárquica.

As possibilidades de configuração ficam

$$B_0 = \begin{bmatrix} (B_0)_{11} & (B_0)_{12} & (B_0)_{13} & (B_0)_{14} \\ (B_0)_{21} & (B_0)_{22} & (B_0)_{23} & (B_0)_{24} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

com

$$(B_0)_{il} = \left\langle \sigma_1^i \left| e^{\beta J \sigma_1^i (\sigma_2^j + \sigma_3^k)} \right| \sigma_2^j \sigma_3^k \right\rangle. \quad (3.7)$$

Observamos que na equação (3.7), o índice  $l$  no lado esquerdo está associado à combinação dos índices  $j$  e  $k$  no lado direito de acordo com  $l = 2(j - 1) + k$ , o que leva a

$$\begin{aligned} (j, k) &\rightarrow l \\ (1, 1) &\rightarrow 1 \\ (1, 2) &\rightarrow 2 \\ (2, 1) &\rightarrow 3 \\ (2, 2) &\rightarrow 4. \end{aligned}$$

Sabemos que para  $i = 1$   $\sigma_n^i = 1$  e para  $i = 2$ ,  $\sigma_n^i = -1$  (com  $n = 1, 2, 3$ ). Fazendo estas considerações e utilizando as relações 3.5, a matriz  $B_0$  fica explicitada da forma

$$B_0 = \begin{bmatrix} a^2 & ab & ab & b^2 \\ b^2 & ab & ab & a^2 \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Para completar o cálculo na geração  $g = 1$ , a matriz  $B_0$  deve ser multiplicada pela sua transposta que descreve a interação entre os dois sítios intermediários e o segundo sítio raiz,

$$A_1 = B_0 B_0^T \quad (3.9)$$

representada na figura 3.3.

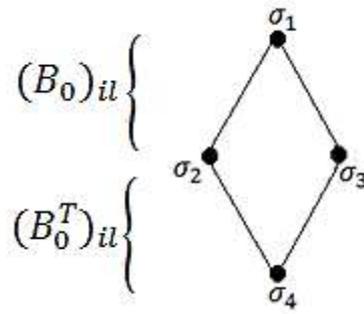


Figura 3.3: Primeira geração da rede hierárquica.

As possibilidades de configuração dessa ligação podem ser arrumadas da forma

$$A_1 = \begin{bmatrix} (A_1)_{11} & (A_1)_{12} \\ (A_1)_{21} & (A_1)_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.10)$$

onde

$$(A_1)_{11} = (A_1)_{22} = a_1 = a^4 + 2a^2b^2 + b^2 \text{ e } (A_1)_{12} = (A_1)_{21} = b_1 = 4a^2b^2.$$

Utilizando o mesmo critério da geração 1, na geração 2, temos

$$A_2 = B_1 B_1^T, \quad (3.11)$$

cuja representação fica conforme a figura 3.4.

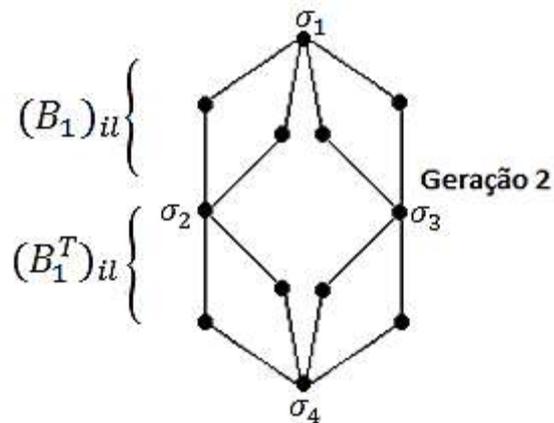


Figura 3.4: Segunda geração da rede hierárquica

É possível mostrar facilmente que as relações de recorrência entre elementos de matriz de quaisquer gerações sucessivas  $n$  e  $n + 1$  são dadas por

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= a_n^4 + 2a_n^2 b_n^2 + b_n^4 \\ b_{n+1} &= 4a_n^2 b_n^2. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Neste caso, os autovalores da matriz  $A_n$  da  $n$ -ésima geração são:

$$\begin{aligned} \eta_n &= a_n + b_n \\ \varepsilon_n &= a_n - b_n \end{aligned} \quad (3.13)$$

Como a energia livre de Helmholtz pode ser dada por

$$f_n = -\frac{T}{N_n} \ln(\eta_n + \varepsilon_n), \quad (3.14)$$

obtem-se no limite termodinâmico que

$$f_n = -\frac{T}{N_n} \ln \eta_n \left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_n}{\eta_n} \right) \right] \sim -\frac{T}{N_n} \ln(\eta_n). \quad (3.15)$$

A partir dos valores de  $A_n$  é possível também obter a dependência do comprimento de correlação com relação a temperatura

$$\xi_n = \frac{2^n}{\ln \left[ \frac{\eta_n}{\varepsilon_n} \right]}. \quad (3.16)$$

Conforme utilizaremos no nosso estudo, podemos simplificar a energia livre ainda mais, identificando como o logaritmo do maior elemento da matriz  $A_n$ . A energia livre é importante para estudar propriedades do sistema, tais como o calor específico, a entropia e a magnetização.

### 3.1.2 Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede hierárquica do diamante com campo $h \neq 0$

Analisaremos aqui um caso um pouco mais complexo. Vamos inserir a rede hierárquica diamante num campo magnético  $h \neq 0$ .

Inicialmente, consideremos a ligação entre dois spins sítios raiz, representado pela figura 3.1 e as equações (3.2) a (3.5). Mas para passar para a geração 1, aplicamos o campo magnético  $h$  nos sítios intermediários que são os sítios  $\sigma_2$  e  $\sigma_3$  da figura 3.2. Com efeito, uma vez que  $h$  está associado a cada sítio e não a uma interação, as contribuições de campo no cálculo da função de partição são tomadas apenas uma vez ao se executar as somas nos sítios intermediários ao longo de sucessivas gerações. Deve-se ressaltar que o sistema na geração  $g$  é formado pela agregação de um subconjunto de sítios pertencentes a 4 unidades da geração  $g-1$ . Alguns destes sites não desempenham qualquer papel na construção de geração  $g+1$ , e irão ser chamados de sítios internos na geração  $g$ . Os sítios que fazem parte da construção da nova estrutura na geração  $g+1$  são chamados de sítios externos da geração  $g$ . A estratégia para dar conta da ação de campo dentro do formalismo TM consiste em escrever  $M_0$  em uma situação sem campo livre e, à medida que avançamos da geração  $g-1$  para  $g$ , deixamos o campo agir apenas sobre os sítios externos de  $g-1$  que se tornam sites internos de geração  $g$ .

Conforme a equação (3.6), as possibilidades de configuração para a matriz que descreve as interações entre um spin no sítio raiz com dois spins intermediários ficam

$$B_0 = \begin{bmatrix} (B_0)_{11} & (B_0)_{12} & (B_0)_{13} & (B_0)_{14} \\ (B_0)_{21} & (B_0)_{22} & (B_0)_{23} & (B_0)_{24} \end{bmatrix}.$$

No entanto, para cada elemento de  $B_0$  temos

$$(B_0)_{il} = \left\langle \sigma_1^i \left| e^{\beta \{ J \sigma_1^i (\sigma_2^j + \sigma_3^k) + h (\sigma_2^j + \sigma_3^k) / 2 \}} \right| \sigma_2^j \sigma_3^k \right\rangle. \quad (3.17)$$

Lembrando que o índice  $l$  no lado esquerdo está associado à combinação dos índices  $j$  e  $k$  no lado direito de acordo com  $l = 2(j - 1) + k$ . Por exemplo,

$$(B_0)_{11} = \langle \sigma_1^1 | e^{\beta\{J\sigma_1^1(\sigma_2^1+\sigma_3^1)+h(\sigma_2^1+\sigma_3^1)/2\}} | \sigma_2^1 \sigma_3^1 \rangle. \quad (3.18)$$

Vamos substituir:  $\sigma_n^i = 1$ , se  $i = 1$  e  $\sigma_n^i = -1$ , se  $i = 2$  e utilizemos as condições dadas pela equação (3.5), assim

$$(B_0)_{11} = \langle \sigma_1^1 | e^{\beta\{2J+h\}} | \sigma_2^1 \sigma_3^1 \rangle = a^2 e^h. \quad (3.19)$$

Fazendo o mesmo procedimento para os outros elementos, a matriz  $B_0$  fica

$$B_0 = \begin{bmatrix} a^2 e^h & ab & ab & b^2 e^{-h} \\ b^2 e^h & ab & ab & a^2 e^{-h} \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

Sabemos que para completar o cálculo na geração  $g=1$ , a matriz  $B_0$  deve ser multiplicada pela sua transposta que descreve a interação entre os dois sítios intermediários e o segundo sítio raiz, conforme a equação (3.9).

Logo,

$$A_1 = \begin{bmatrix} a^4 e^{2h} + 2a^2 b^2 + b^4 e^{-2h} & a^2 b^2 (e^{2h} + e^{-2h} + 2) \\ a^2 b^2 (e^{2h} + e^{-2h} + 2) & a^4 e^{2h} + 2a^2 b^2 + b^4 e^{-2h} \end{bmatrix}. \quad (3.21)$$

De um modo mais simplificado, podemos escrever  $A_1$  da forma

$$A_1 = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ b_1 & d_1 \end{bmatrix}. \quad (3.22)$$

Vemos que  $A_1$  tem um elemento diferente a mais que  $A_0$ . Como  $A_1$  tem uma simetria mais baixa que  $A_0$ , para que escrevamos as relações de recorrência para os elementos de  $A_n$  em gerações subsequentes, temos que primeiro propor uma simetria mais baixa para  $A_0$  também,

$$A_0 = \begin{bmatrix} a & b \\ b & d \end{bmatrix}. \quad (3.23)$$

E como consequência

$$A_1 = \begin{bmatrix} a^4 e^{2h} + 2a^2 b^2 + b^4 e^{-2h} & a^2 b^2 e^{2h} + 2ab^2 d + b^2 d^2 e^{-2h} \\ a^2 b^2 e^{2h} + 2ab^2 d + b^2 d^2 e^{-2h} & b^4 e^{2h} + 2b^2 d^2 + d^4 e^{-2h} \end{bmatrix}. \quad (3.24)$$

É mantida, assim, a estrutura da forma simplificada de  $A_1$  da equação (3.21),

$$A_1 = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 \\ b_1 & d_1 \end{bmatrix}.$$

Finalmente, podemos escrever as relações de recorrência para os elementos de  $A_n$  em gerações subsequentes:

$$\begin{aligned} a_{n+1} &= a_n^4 e^{2h} + 2a_n^2 b_n^2 + b_n^4 e^{-2h}, \\ b_{n+1} &= a_n^2 b_n^2 e^{2h} + 2a_n b_n^2 d_n + b_n^2 d_n^2 e^{-2h}, \\ d_{n+1} &= b_n^4 e^{2h} + 2b_n^2 d_n^2 + d_n^4 e^{-2h}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Os dois autovalores da matriz podem ser escritos em termos destes três elementos da forma

$$\begin{aligned} \eta_n &= \frac{(a_n + d_n) + \sqrt{(a_n - d_n)^2 - 4a_n d_n + 4b_n^2}}{2}, \\ \varepsilon_n &= \frac{(a_n + d_n) - \sqrt{(a_n - d_n)^2 - 4a_n d_n + 4b_n^2}}{2}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Através desses autovalores se obtém a energia livre que é essencial para o estudo das propriedades termodinâmicas do sistema. Vemos que  $\eta_n$  é o maior autovalor e prevalecerá no limite termodinâmico, conforme a equação (3.15).

## 3.2 Rede apoloniana

Redes apolonianas são interessantes para o estudo de diversos modelos físicos, embora estejam matricialmente ligadas ao preenchimento de espaços granulares densos. Como no caso das redes hierárquicas, elas estão relacionadas a diversos modelos físicos e são invariantes por mudança de escala [23].

Apesar do problema do empacotamento apoloniano já ter sido tratado na antiguidade, o estudo de modelos físicos definidos sobre essas redes ainda é recente. Um dos primeiros trabalhos sobre a rede apoloniana foi publicado em 2005, quando um grupo de pesquisadores [43] estudou fenômenos ligados a modelos magnéticos e percolações nessas redes. Foi observado que tais redes satisfazem o efeito mundo pequeno, já que cada vértice possui uma pequena distância um do outro. Com base nesse trabalho, outros autores introduziram o estudo de redes apolonianas aleatórias e observaram que elas seguem leis de potência e têm uma pequena distância média.

Uma rede apoloniana pode ser definida também através da divisão do espaço em triângulos uniformes e confinados em toda rede. Estes correspondem a triângulos que são originados ligando-se por retas os centros círculos da solução do problema do empacotamento. Na figura 1.3, mostramos as três primeiras gerações da rede apoloniana. A cada geração da rede apoloniana, foram incorporados novos sítios que correspondem aos centros de cada círculo adicionado no empacotamento.

### **3.2.1 Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede apoloniana sem campo magnético ( $h=0$ )**

De forma semelhante à rede hierárquica do diamante, fizemos o estudo do modelo de Ising com a utilização de matrizes de transferência na rede apoloniana. Iniciamos com a ligação entre dois spins nos sítios raiz (figura 3.1) representada pela matriz  $A_0$  descrita pelas equações (3.3), (3.4) e (3.5)

$$A_0 = \begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix}. \quad (3.27)$$

Utilizando  $A_0$ , construímos a matriz intermediária  $B_1$ ,

$$\langle i|B_1|jk\rangle = \langle i|A_0|j\rangle\langle j|A_0^T|k\rangle\langle i|A_0|k\rangle. \quad (3.28)$$

Vejamos um exemplo,

$$\langle 1|B_1|12\rangle = \langle 1|A_0|1\rangle\langle 1|A_0^T|2\rangle\langle 1|A_0|2\rangle = ab^2. \quad (3.29)$$

Após fazer esse procedimento com todos os elementos de  $B_1$ , obtemos

$$\begin{aligned} B_1 &= \begin{bmatrix} \langle 1|B_1|11\rangle & \langle 1|B_1|12\rangle & \langle 1|B_1|21\rangle & \langle 1|B_1|22\rangle \\ \langle 2|B_1|11\rangle & \langle 2|B_1|12\rangle & \langle 2|B_1|21\rangle & \langle 2|B_1|22\rangle \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a^3 & ab^2 & ab^2 & ab^2 \\ ab^2 & ab^2 & ab^2 & a^3 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

A matriz  $B_1$  pode ser escrita de uma forma mais simplificada,

$$B_1 = \begin{bmatrix} c_1 & d_1 & d_1 & d_1 \\ d_1 & d_1 & d_1 & c_1 \end{bmatrix}. \quad (3.31)$$

E finalmente para descrever as possibilidades de configurações dos spins da geração 1 que é representada na figura 3.5.

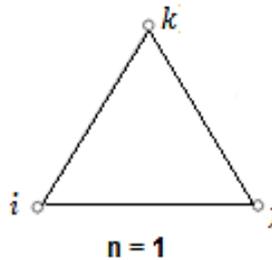


Figura 3.5: Geração 1 da rede apoloniana

Escrevemos a matriz  $A_1$  que é obtida fazendo-se a soma dos elementos de  $B_1$  sobre o índice  $k$ ,

$$A_1 = \begin{bmatrix} c_1 + d_1 & 2d_1 \\ 2d_1 & c_1 + d_1 \end{bmatrix}. \quad (3.32)$$

Para a geração 2 em diante, as matrizes  $A_n$  e  $B_n$  podem ser obtidas através das relações de recorrência,

$$\begin{aligned} \langle i|B_{n+1}|jl\rangle &= \sum_k \langle i|B_n|kl\rangle \langle kl|B_n^T|j\rangle \langle i|B_n|kj\rangle, \\ \langle i|A_{n+1}|j\rangle &= \sum_l \langle i|B_{n+1}|jl\rangle. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Para  $\{n \in \mathbb{N}/n \geq 1\}$ . Como resultado de (3.32), temos:

$$\begin{aligned} c_{n+1} &= c_n^3 + d_n^3 \\ d_{n+1} &= c_n d_n^2 + d_n^3, \end{aligned} \quad (3.34)$$

com  $c_n = a_n - \frac{b_n}{2}$  e  $d_n = \frac{b_n}{2}$ .

Os auto-valores na matriz  $A_n$  na  $n$ -ésima geração são

$$\begin{aligned} \eta_n &= a_n + b_n = c_n + 3d_n, \\ \varepsilon_n &= a_n - b_n = c_n - d_n, \end{aligned} \quad (3.35)$$

pelos quais se obtém a energia livre ( $f_n$ ). A seguir veremos o caso com o campo magnético,  $h$ , diferente de zero.

### 3.2.2 Aplicação das matrizes de transferência ao modelo de Ising na rede apoloniana com campo magnético $h \neq 0$

Para o caso com o campo magnético  $h \neq 0$ , até a primeira geração, utilizamos as relações da seção anterior (3.27 a 3.32), mas a partir da segunda geração, passamos a inserir o campo  $h$  nos sítios centrais, veja a figura 3.6 como ilustração.

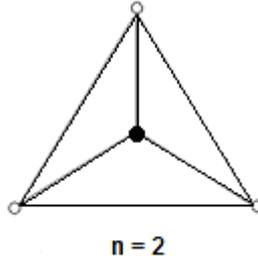


Figura 3.6: Geração 2 da rede apoloniana. O campo  $h$  é inserido no sítio central escuro.

As relações passam a ser

$$\begin{aligned} \langle i|B_{n+1}|jl\rangle &= \sum_k \langle i|B_n|kl\rangle \langle kl|B_n^T|j\rangle \langle i|B_n|kj\rangle e^{h\sigma_k}, \\ \langle i|A_{n+1}|j\rangle &= \sum_l \langle i|B_{n+1}|jl\rangle. \end{aligned} \quad (3.36)$$

A partir de 3.36, obtemos a matriz  $B_2$ ,

$$B_2 = \begin{bmatrix} c_1^3 e^{\beta h} + d_1^3 e^{-\beta h} & c_1 d_1^2 e^{\beta h} + d_1^3 e^{-\beta h} & c_1 d_1^2 e^{\beta h} + d_1^3 e^{-\beta h} & d_1^3 e^{\beta h} + c_1 d_1^2 e^{-\beta h} \\ c_1 d_1^2 e^{\beta h} + d_1^3 e^{-\beta h} & d_1^3 e^{\beta h} + c_1 d_1^2 e^{-\beta h} & d_1^3 e^{\beta h} + c_1 d_1^2 e^{-\beta h} & d_1^3 e^{\beta h} + c_1^3 e^{-\beta h} \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

Podemos escrever  $B_2$  de uma forma mais simplificada,

$$B_2 = \begin{bmatrix} c_2 & d_2 & d_2 & g_2 \\ d_2 & g_2 & g_2 & m_2 \end{bmatrix}. \quad (3.38)$$

A estrutura de  $B_2$  é mais complexa que a de  $B_1$ , que é descrita pela equação (3.31). Dando prosseguimento aos cálculos, utilizando novamente a relação (3.36), obtemos a estrutura de  $B_3$ :

$$\begin{aligned}
B_3 &= \begin{bmatrix} c_2^3 e^{\beta h} + d_2^3 e^{-\beta h} & c_2 d_2^2 e^{\beta h} + d_2 g_2^2 e^{-\beta h} & c_2 d_2^2 e^{\beta h} + d_2 g_2^2 e^{-\beta h} & d_2^2 g_2 e^{\beta h} + g_2^2 m_2 e^{-\beta h} \\ c_2 d_2^2 e^{\beta h} + d_2 g_2^2 e^{-\beta h} & d_2^2 g_2 e^{\beta h} + g_2^2 m_2 e^{-\beta h} & d_2^2 g_2 e^{\beta h} + g_2^2 m_2 e^{-\beta h} & g_2^3 e^{\beta h} + m_2^3 e^{-\beta h} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} c_3 & d_3 & d_3 & g_3 \\ d_3 & g_3 & g_3 & m_3 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Dessa forma, podemos estabelecer

$$\begin{aligned}
c_{n+1} &= c_n^3 e^{\beta h} + d_n^3 e^{-\beta h}, \\
d_{n+1} &= c_n d_n^2 e^{\beta h} + d_n g_n^2 e^{-\beta h}, \\
g_{n+1} &= d_n^2 g_n e^{\beta h} + g_n^2 m_n e^{-\beta h}, \\
m_{n+1} &= g_n^3 e^{\beta h} + m_n^3 e^{-\beta h}.
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Inserindo o campo magnético  $h$ , nos sítios centrais, vemos que o número de relações de recorrência aumentou. A partir dessas relações, podemos obter a energia livre ( $f_n$ ).

## CAPÍTULO 4

# FORMULAÇÃO DO MODELO DE ISING RECOZIDO EM TERMOS DE MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

---

A questão é “como implementar o cálculo de um modelo aleatório temperado (recozido) com matrizes de transferência?”. Essa questão é essencial para o estudo de modelos recozidos nas redes hierárquicas.

Para responder a esse questionamento, desenvolvemos neste capítulo a formulação do modelo de Ising recozido em termos de matriz de transferência.

### 4.1 Caso unidimensional

Para o caso unidimensional, consideremos a ligação entre os spins dos dois sítios raiz, conforme a figura 3.1. Essa ligação entre esses dois primeiros sítios servirá de base para a formação da estrutura hierárquica e apoloniana.

Utilizemos a hamiltoniana de Ising (2.12) para o caso de diluição,

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \tau_i \tau_{i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \tau_i \sigma_i,$$

cujo parâmetro de desordem  $\tau_i$  pode ser igual a 0 (sítio desocupado) ou 1 (sítio ocupado), já que estudamos o caso com diluição.

Consideremos cada elemento dessa matriz, para a ligação entre dois sítios, representado por

$$\langle \sigma_i \tau_i | A_0 | \sigma_j \tau_j \rangle = \langle \sigma_i \tau_i | \bar{M} | \sigma_j \tau_j \rangle. \quad (4.1)$$

Veamos na tabela 4.1 como cada elemento dessa matriz está posicionado em relação ao número da linha ou coluna.

TABELA 4.1

Valor do par $(\sigma_i, \tau_i)$	Número da linha ou coluna
(1,1)	1
(-1,1)	2
(1,0)	3
(-1,0)	4

Tabela 4.1: Organização dos números das linhas e colunas para cada par  $(\sigma_i, \tau_i)$ 

Para o caso mais simples, a potencial químico ( $\mu$ ) e a campo ( $h$ ) nulos, a matriz  $A_0$  fica

$$A_0 = \begin{bmatrix} a & b & d & d \\ b & a & d & d \\ d & d & d & d \\ d & d & d & d \end{bmatrix}, \quad (4.2)$$

com  $a = e^{\beta J}$ ,  $b = e^{-\beta J}$ ,  $d = e^0$ . Como  $\sigma_i$  e  $\tau_i$  admitem 2 estados, o par  $(\sigma_i, \tau_i)$  admite 4 estados distintos, logo a matriz  $A_0$  tem ordem 4.

## 4.2 Formulação na rede hierárquica incluindo os mapas para os elementos de matriz, para a energia livre, comprimento de correlação e magnetização.

Para estabelecer os mapas na rede hierárquica, incluindo os campos  $h$  e  $\mu \neq 0$  nas gerações  $n \geq 1$ , é necessário utilizar a matriz  $A_0$  com simetria mais baixa do que a da seção anterior,

$$A_0 = \begin{bmatrix} a & b & d & d \\ b & \bar{f} & g & g \\ d & g & c & c \\ d & g & c & c \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

com  $a = \bar{f} = e^{\beta J}$ ,  $b = e^{-\beta J}$ ,  $c = d = g = e^0$ . A barra “ $\bar{\phantom{f}}$ ” sobre o “ $f$ ” serve para evitar que este seja confundido com a energia livre.

De modo similar ao feito no caso sem diluição, vamos definir uma matriz  $B_0$ , que descreve as interações entre o sítio raiz 1 e os sítios intermediários 2 e 3:

$$(B_0)_{ii} = \left\langle \sigma_1 \tau_1^i \left| \exp \beta [J \tau_1^i \sigma_1^i (\tau_2 \sigma_2^j + \tau_3 \sigma_3^k) + \mu \frac{\tau_2^j + \tau_3^k}{4} + h \frac{\tau_2^j \sigma_2^j + \tau_3^k \sigma_3^k}{2}] \right| \tau_2^j \sigma_2^j \tau_3^k \sigma_3^k \right\rangle. \quad (4.4)$$

Com:

$$\begin{aligned} \sigma_1^1 &= 1, & \sigma_1^2 &= -1, & \sigma_2^1 &= 1, & \sigma_2^2 &= -1, & \sigma_3^1 &= 1, & \sigma_3^2 &= -1. \\ \tau_1^1 &= 1, & \tau_1^2 &= 0, & \tau_2^1 &= 1, & \tau_2^2 &= 0, & \tau_3^1 &= 1, & \tau_3^2 &= 0. \end{aligned}$$

A matriz  $B_0$  tem 4 linhas e 16 colunas. Assim como fizemos no caso mais simples na seção 3, para completar o cálculo na geração  $g = 1$ , a matriz  $B_0$  deve ser multiplicada pela sua transposta que descreve a interação entre os dois sítios intermediários e o segundo sítio raiz (Veja a figura 3.3). De acordo com a equação (3.9),

$$A_1 = B_0 B_0^T.$$

Na segunda geração, utilizamos a equação (3.11),

$$A_2 = B_1 B_1^T.$$

Generalizando, obtemos as seguintes relações de recorrência entre os elementos da matriz  $A_n$  e  $A_{n+1}$ ,

$$\begin{aligned}
a_{n+1} &= e^{\beta h} \left( a_n^4 e^{\beta \mu} e^{\beta h} + 4a_n^2 d_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) + e^{-\beta h} \left( b_n^4 e^{\beta \mu} e^{-\beta h} + 4b_n^2 d_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) \\
&\quad + 2a_n^2 b_n^2 e^{\beta \mu} + 4d_n^4, \\
b_{n+1} &= e^{\beta h} \left( a_n^2 b_n^2 e^{\beta \mu} e^{\beta h} + 4a_n b_n d_n g_n e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) \\
&\quad + e^{-\beta h} \left( b_n^2 \bar{f}_n^2 e^{\beta \mu} e^{-\beta h} + 4b_n d_n \bar{f}_n g_n e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) \\
&\quad + 2(a_n b_n^2 \bar{f}_n e^{\beta \mu} + 2d_n^2 g_n^2), \\
c_{n+1} &= e^{\beta h} \left( d_n^4 e^{\beta \mu} e^{\beta h} + 4c_n^2 d_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) + e^{-\beta h} \left( g_n^4 e^{\beta \mu} e^{-\beta h} + 4c_n^2 g_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) \\
&\quad + 2d_n^2 g_n^2 e^{\beta \mu} + 4c_n^4, \\
d_{n+1} &= e^{\beta h} \left( a_n^2 d_n^2 e^{\beta \mu} e^{\beta h} + 4a_n c_n d_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) \\
&\quad + e^{-\beta h} \left( b_n^2 g_n^2 e^{\beta \mu} e^{-\beta h} + 4b_n c_n d_n g_n e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) + 2a_n b_n d_n g_n e^{\beta \mu} \\
&\quad + 4c_n^2 d_n^2, \\
\bar{f}_{n+1} &= e^{\beta h} \left( b_n^4 e^{\beta \mu} e^{\beta h} + 4b_n^2 g_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) + e^{-\beta h} \left( \bar{f}_n^4 e^{\beta \mu} e^{-\beta h} + 4\bar{f}_n^2 i_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) \\
&\quad + 2b_n^2 \bar{f}_n^2 e^{\beta \mu} + 4g_n^4, \\
g_{n+1} &= e^{\beta h} \left( b_n^2 d_n^2 e^{\beta \mu} e^{\beta h} + 4b_n c_n d_n g_n e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) \\
&\quad + e^{-\beta h} \left( \bar{f}_n^2 g_n^2 e^{\beta \mu} e^{-\beta h} + 4c_n \bar{f}_n g_n^2 e^{\frac{\beta \mu}{2}} \right) + 2b_n d_n \bar{f}_n g_n e^{\beta \mu} \\
&\quad + 4c_n^2 g_n^2.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Temos, assim, seis relações de recorrência para os elementos da matriz  $A_n$ . Por esse motivo, foi necessário considerar a quebra de simetria na matriz  $A_0$ , inserindo letras diferentes para elementos da matriz que são efetivamente diferentes. A partir dessas relações de recorrência, é possível obter a energia livre através da relação

$$f_n = -\frac{T}{N_n} \ln(a_n), \tag{4.6}$$

Derivando a energia livre ( $f_n$ ) em relação a temperatura, podemos obter a entropia e o calor específico. E derivando a energia livre em relação ao campo magnético, podemos obter a susceptibilidade magnética e a magnetização.

É interessante ressaltar que  $f_n$  não é a energia livre de Helmholtz. Para encontrarmos a energia livre de Helmholtz ( $\varphi$ ), devemos utilizar a transformada de Legendre [6], de forma que

$$\varphi = f_n + \mu \frac{N_+}{N} = f_n + \mu\rho, \quad (4.7)$$

com

$$\rho = \frac{N_+}{N}. \quad (4.8)$$

Mas não será necessário trabalharmos com essas duas últimas relações. Podemos obter os resultados necessários para o nosso trabalho utilizando simplesmente  $f_n$ .

### 4.3 Formulação na rede apoloniana incluindo os mapas para os elementos de matriz, para a energia livre, comprimento de correlação e magnetização

Vamos agora descrever os mapas na rede apoloniana, incluindo os campos  $h$  e  $\mu \neq 0$  nas gerações  $n \geq 1$ . Inicialmente, tomemos a matriz  $A_0$  da seção 4.2,

$$A_0 = \begin{bmatrix} a & b & d & d \\ b & a & d & d \\ d & d & d & d \\ d & d & d & d \end{bmatrix}. \quad (4.9)$$

Ainda com campo e potencial químico nulo, façamos a construção da matriz  $B_1$ ,

$$\langle i|B_1|jk\rangle = \langle i|A_0|j\rangle\langle j|A_0|k\rangle\langle i|A_0|k\rangle. \quad (4.10)$$

A matriz  $B_1$  passa a ser

$$B_1 = \begin{bmatrix} a^3 & ab^2 & ad^2 & ad^2 & ab^2 & ab^2 & bd^2 & bd^2 & ad^2 & bd^2 & d^3 & d^3 & ad^2 & bd^2 & d^3 & d^3 \\ ab^2 & ab^2 & bd^2 & bd^2 & ab^2 & a^3 & ad^2 & ad^2 & bd^2 & ad^2 & d^3 & d^3 & bd^2 & ad^2 & d^3 & d^3 \\ ad^2 & bd^2 & d^3 & d^3 & bd^2 & ad^2 & d^3 \\ ad^2 & bd^2 & d^3 & d^3 & bd^2 & ad^2 & d^3 \end{bmatrix}. \quad (4.11)$$

E a matriz  $A_1$  se reduz a

$$A_1 = \begin{bmatrix} a^3 + ab^2 + ad^2 + ad^2 & 2ab^2 + 2bd^2 & ad^2 + bd^2 + 2d^3 & ad^2 + bd^2 + 2d^3 \\ ab^2 + ab^2 + bd^2 + bd^2 & ab^2 + a^3 + 2ad^2 & bd^2 + ad^2 + 2d^3 & bd^2 + ad^2 + 2d^3 \\ ad^2 + bd^2 + 2d^3 & bd^2 + ad^2 + 2d^3 & 4d^3 & 4d^3 \\ ad^2 + bd^2 + 2d^3 & bd^2 + ad^2 + 2d^3 & 4d^3 & 4d^3 \end{bmatrix}. \quad (4.12)$$

Para simplificarmos nossos cálculos, vejamos que houve uma quebra de simetria em  $B_1$ .

Dessa forma,  $B_1$  pode ser representado como

$$B_1 = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & c_1 & b_1 & g_1 & d_1 & d_1 & c_1 & d_1 & \bar{e}_1 & \bar{e}_1 & c_1 & d_1 & \bar{e}_1 & \bar{e}_1 \\ b_1 & g_1 & d_1 & d_1 & g_1 & \bar{h}_1 & \bar{t}_1 & \bar{t}_1 & d_1 & \bar{t}_1 & \bar{J}_1 & \bar{J}_1 & d_1 & \bar{t}_1 & \bar{J}_1 & \bar{J}_1 \\ c_1 & d_1 & \bar{e}_1 & \bar{e}_1 & d_1 & \bar{t}_1 & \bar{J}_1 & \bar{J}_1 & \bar{e}_1 & \bar{J}_1 & \bar{f}_1 & \bar{f}_1 & \bar{e}_1 & \bar{J}_1 & \bar{f}_1 & \bar{f}_1 \\ c_1 & d_1 & \bar{e}_1 & \bar{e}_1 & d_1 & \bar{t}_1 & \bar{J}_1 & \bar{J}_1 & \bar{e}_1 & \bar{J}_1 & \bar{f}_1 & \bar{f}_1 & \bar{e}_1 & \bar{J}_1 & \bar{f}_1 & \bar{f}_1 \end{bmatrix}. \quad (4.13)$$

Com

$$\begin{aligned} a_1 &= \bar{h}_1 = a^3, \\ b_1 &= g_1 = ab^2, \\ c_1 &= \bar{t}_1 = ad^2, \\ d_1 &= bd^2, \\ \bar{e}_1 &= \bar{f}_1 = \bar{J}_1 = d^3. \end{aligned} \quad (4.14)$$

A partir da geração 2, vamos introduzir os campos  $h$  e  $\mu$  no sítio central, a exemplo do que foi feito no modelo com diluição na seção 3.2.2. Por isso, somos obrigados a trabalhar com a matriz  $B_1$  com uma estrutura mais ampla. As matrizes  $B_n$  podem ser obtidas por uma relação de recorrência,

$$\begin{aligned}\langle i|B_{n+1}|jl\rangle &= \sum_k \langle i|B_n|kl\rangle \langle kl|B_n^T|j\rangle \langle i|B_n|kj\rangle e^{\lambda_k \mu/2} e^{h\lambda_k \sigma_k}, \\ \langle i|A_{n+1}|j\rangle &= \sum_l \langle i|B_{n+1}|jl\rangle.\end{aligned}\tag{4.15}$$

Ressaltando que, devido à complexidade das relações de recorrência para os elementos da matriz  $A_n$  no caso da rede apoloniana, é mais conveniente trabalhar com os elementos da matriz  $B_n$ . Calculando-se os  $\langle i|B_{n+1}|jl\rangle$ , encontra-se

$$\begin{aligned}a_{n+1} &= a_n^3 e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + b_n^3 e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2c_n^3, \\ b_{n+1} &= a_n b_n^2 e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + b_n g_n^2 e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2c_n d_n^2, \\ c_{n+1} &= a_n c_n^2 e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + b_n d_n^2 e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2c_n \bar{e}_n^2, \\ d_{n+1} &= b_n c_n d_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + d_n g_n \bar{t}_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2d_n \bar{e}_n \bar{t}_n, \\ e_{n+1} &= c_n^2 \bar{e}_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + d_n^2 \bar{t}_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2\bar{e}_n^2 \bar{f}_n, \\ f_{n+1} &= \bar{e}_n^3 e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + \bar{t}_n^3 e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2\bar{f}_n^3, \\ g_{n+1} &= b_n^2 g_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + g_n^2 \bar{h}_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2d_n^2 \bar{t}_n, \\ \bar{h}_{n+1} &= g_n^3 e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + \bar{h}_n^3 e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2\bar{t}_n^3, \\ \bar{t}_{n+1} &= d_n^2 g_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + \bar{h}_n \bar{t}_n^2 e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2\bar{t}_n \bar{t}_n^2, \\ \bar{t}_{n+1} &= d_n^2 \bar{e}_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}+h)} + \bar{t}_n^2 \bar{t}_n e^{\beta(\frac{\mu}{2}-h)} + 2\bar{f}_n \bar{t}_n^2.\end{aligned}\tag{4.16}$$

Totalizando, assim, em dez relações de recorrência para os elementos da matriz  $B_n$  subsequentes. A partir dessas relações de recorrência, podemos obter propriedades importantes tais como a energia livre, entropia, calor específico, susceptibilidade magnética e magnetização. Nesse caso, definimos a energia livre associada ao ensemble grande canônico

$$f_n = -\frac{T}{N_n} \log a_n.\tag{4.17}$$

Vale ressaltar que  $a_n$  é o maior elemento de  $B_n$ .

## CAPÍTULO 5

### RESULTADOS

---

#### 5.1 Cadeia linear

Neste capítulo discutiremos as propriedades termodinâmicas e magnéticas do modelo de Ising com diluição, na versão recozida, nas duas redes apresentadas nos capítulos anteriores. Os resultados serão ilustrados por gráficos que mostram a dependência destas grandezas em função da temperatura. Os dados desses gráficos foram obtidos por interação numérica dos mapas obtidos. Para tal, foram desenvolvidos diversos programas em linguagem Fortran. Para a rede apoloniana, vamos concentrar a discussão sobre o comportamento do calor específico, da entropia e da magnetização em função da temperatura e em função do potencial químico. Para a rede hierárquica do diamante, além destas, vamos mostrar o comportamento do calor específico, do comprimento de correlação, da magnetização e da suscetibilidade em função da temperatura, bem como da temperatura crítica em função do potencial químico. Destacaremos também o cálculo dos expoentes críticos obtidos para caracterizar a transição de fase na rede hierárquica do diamante.

Primeiramente, no intuito de termos uma referência para discussão dos resultados acima indicados, vamos tratar um modelo com resultados já conhecidos na literatura que é o modelo de Ising com diluição na cadeia linear. A dependência do calor específico com relação à temperatura, para diversos valores do potencial químico ( $\mu$ ), é obtida de forma exata e está representada na figura 5.1.

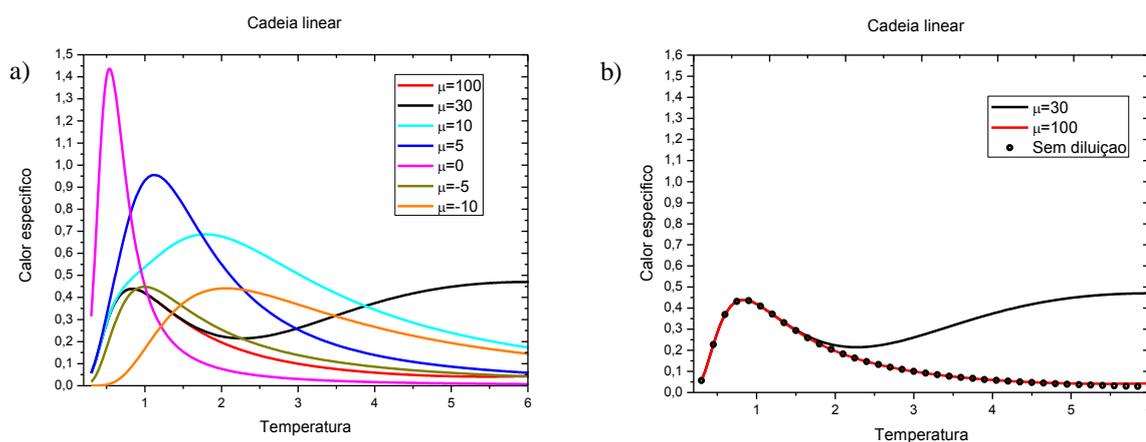


Figura 5.1: a) Calor específico em função da temperatura para a cadeia linear para diferentes valores de  $\mu$ .  
 b) À medida que  $\mu$  aumenta, os resultados convergem para o modelo sem diluição.

Aqui, como em todos os demais resultados apresentados neste trabalho, consideramos as constantes de interação no Hamiltoniano 2.1, o valor  $J = 1$ . Vemos que, no intervalo de temperaturas analisadas (de  $T = 0.3 K$  até  $T = 6 K$ ), o calor específico apresenta o comportamento típico de um pico de Schottky, com um máximo suave, para todos os valores de  $\mu$  investigados, com exceção de  $\mu = 30$  que tem um duplo máximo. À medida que a temperatura aumenta, o calor específico cresce até determinada temperatura, mas a partir dessa temperatura, a tendência é que o calor específico diminua, embora isso não foi verificado para  $\mu = 30$ . Conforme foi discutido na seção 1.6, para que houvesse uma transição de fase no gráfico do calor específico em função da temperatura, deveria haver um ponto de divergência ou descontinuidade. Contudo, observando o gráfico da figura 5.1, podemos notar que não há transição de fase para este caso, já que o comportamento nos topos das curvas é suave, indicando que este modelo apresenta características paramagnéticas para todo intervalo  $T > 0$ ,  $\forall \mu$ . Com efeito, o cálculo da magnetização ( $m$ ) a campo magnético nulo ( $h = 0$ ) mostra que esta se anula identicamente independentemente do valor de  $\mu$ . A figura 5.1 também ilustra que, à medida que o valor de  $\mu$  aumenta, os resultados convergem para os obtidos para o modelo sem diluição. No caso de  $\mu = 30$ , nota-se a presença de um duplo máximo.

É importante ressaltar que o calor específico que estamos estudando se trata do calor específico a  $\mu$  constante,  $c = c_\mu$ , pois é tomado a partir da segunda derivada da equação (4.17), ou seja, para o calor específico da  $n$ -ésima geração,

$$c_n = - \left( \frac{\partial^2 f_n}{\partial T^2} \right)_\mu. \quad (5.1)$$

À semelhança do caso de gases, onde é possível definir o calor específico a volume constante ( $c_v$ ) ou a pressão constante ( $c_p$ ), também aqui pode ser calculado o calor específico a concentração constante ( $c_\phi$ ). No entanto, todos os resultados que serão discutidos se referem a ( $c_\mu$ ) que, para simplificar a notação, será simplesmente indicado por  $c$  [44].

## 5.2 Rede hierárquica do diamante

Os resultados para a rede hierárquica do diamante têm natureza bastante distinta. Como é sabido, no caso sem diluição, o comportamento do modelo indica uma transição de fase do tipo ferro-paramagnética. Embora esta transição seja distinta daquela observada para o modelo de Ising em duas dimensões, ela tem sido bastante útil no estudo de modelos mais complexos cuja solução na rede quadrada não é obtida de maneira analítica, como é o caso deste estudo. Nosso interesse inicial é obter as condições sobre os valores de  $\mu$  para os quais a transição ainda se faz presente. Como mostrado na figura 5.1 para a cadeia linear, a condição sem diluição é recuperada no limite  $\mu \rightarrow \infty$ , de forma que, ao se diminuir seu valor, pode-se chegar a uma região onde vai existir apenas o estado paramagnético.

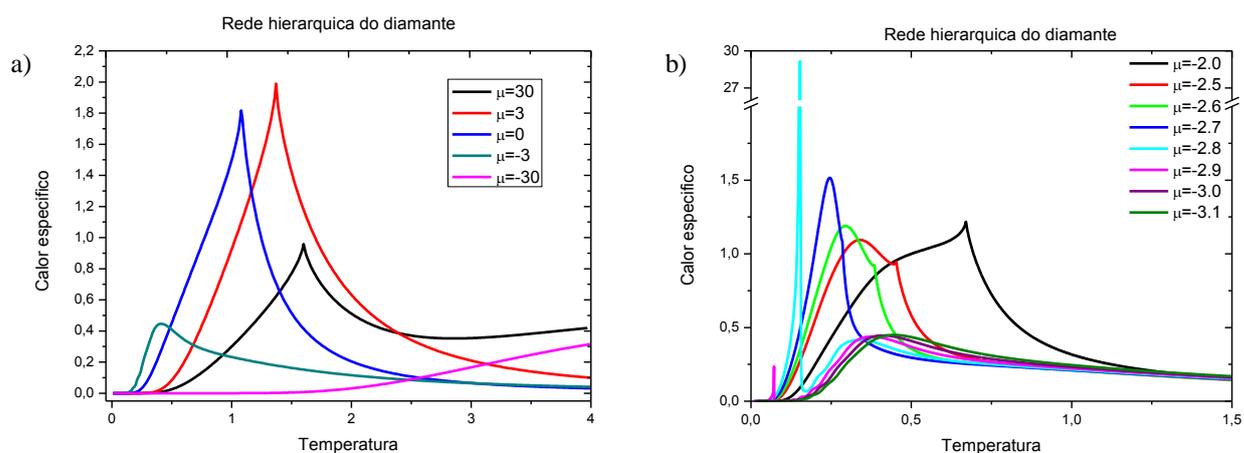


Figura 5.2: a) Calor específico em função da temperatura para a rede hierárquica do diamante. b) Nota-se o aparecimento de picos duplos na curva do calor específico para alguns valores de  $\mu$ .

Com efeito, observemos na figura 5.2 a que, para  $\mu = 30$ , o calor específico é caracterizado por uma não analiticidade (descontinuidade na sua derivada) relacionada à transição ferro-paramagnética. Tal comportamento é mantido para dois outros valores de  $\mu < 30$ . Contudo, tal comportamento crítico deixa de ser observado para  $\mu = -3$  e  $\mu = -30$ . Nestes casos, a curva do calor específico volta a apresentar um perfil tipo Schottky, característico de modelos sem transição de fase.

Para encontrar o valor crítico  $\mu_c$  tal que, para  $\mu < \mu_c$ , o qual o sistema não exiba transição de fase, fizemos uma investigação detalhada, obtendo individualmente o valor da temperatura crítica correspondente a cada valor de  $\mu$ , através de interações numéricas, até determinar com precisão de 2 dígitos, o valor  $\mu_c = -2,998$ . A obtenção de tal tipo de resultado de maneira bastante rápida é, claramente, uma das vantagens das redes hierárquicas. A síntese de nossos resultados está ilustrada na figura 5.3.

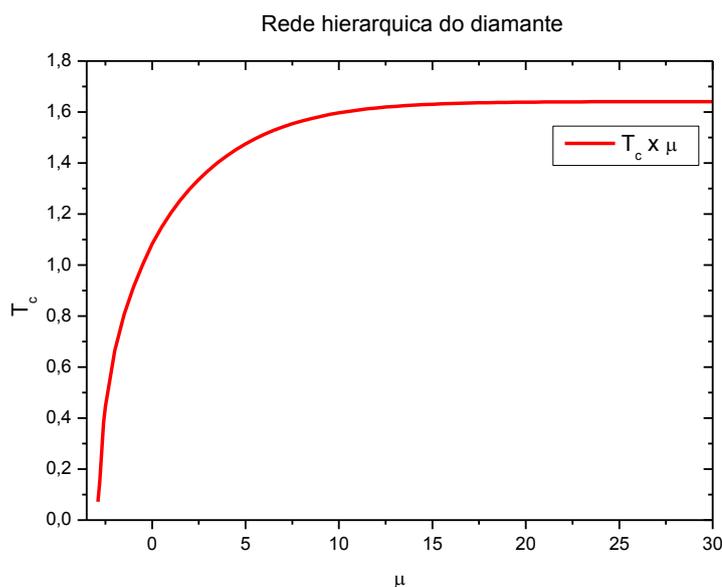


Figura 5.3: Temperatura crítica,  $T_c$ , em função do potencial químico,  $\mu$ , para a rede hierárquica.

Os resultados mostram que à medida que o valor do potencial químico aumenta o valor de  $T_c$  também aumenta até chegar ao valor de  $T_c$  do modelo sem diluição,  $T_c = 1,641K$ . Quando  $\mu$  diminui e  $\mu \rightarrow \mu_c$ , o valor de  $T_c \rightarrow 0$ .

Na figura 5.2 b, observamos o aparecimento de duplos picos no calor específico à medida que  $\mu \rightarrow \mu_{c+}$ . Este segundo pico tem um máximo suave, com a característica de um pico Schottky. Começando com a curva para  $\mu = -2$ , nota-se que o pico Schottky emerge em  $T < T_c$ . À medida que  $\mu$  diminui,  $T_c$  decresce (como já ilustrado na figura 5.2) juntamente com o valor de  $T$  que marca o pico Schottky. Como  $T_c$  se move para a esquerda mais rapidamente do que o segundo máximo, os picos se superpõem, dificultando inclusive a identificação de  $T_c$ , como é o caso de  $\mu = -2,7$ . Finalmente, para  $\mu = -2,8$  e  $-2,9$  o valor de  $T_c$  já está abaixo da posição do pico Schottky. Para  $\mu = -3 < \mu_c$ , a curva para  $c$  é caracterizada apenas por um pico Schottky.

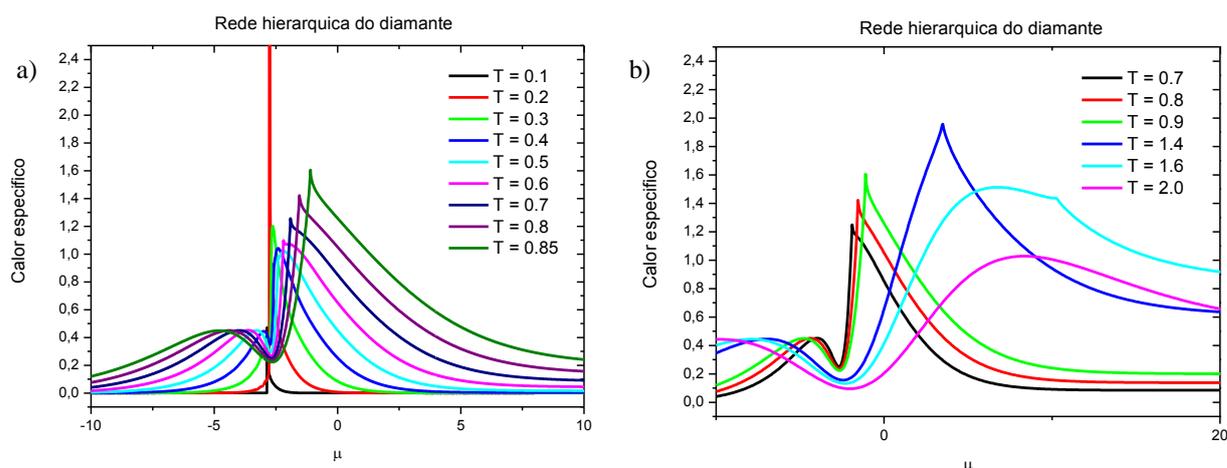


Figura 5.4: a) Calor específico em função do potencial químico,  $\mu$ , para a rede hierárquica do diamante. b) Foram incluídas curvas para o calor específico para valores maiores da temperatura.

Outra maneira de se tratar os resultados ilustrados na figura 5.2 consiste em investigar como o calor específico depende do potencial químico. Os resultados para o valor de  $c$  (a  $T$  constante) em função de  $\mu$  estão mostrados na figura 5.4. Encontramos aqui um padrão com duplo pico que é similar para todos os valores de  $T$ . Aumentando-se o valor de  $\mu$  a partir do limite  $\mu \rightarrow -\infty$ , verifica-se que o calor específico se mantém constante até um determinado valor. A partir deste valor que depende de  $T$ ,  $c$  passa a se modificar, apresentando também uma estrutura de duplos picos, voltando a se estabilizar em um valor constante à medida que  $\mu \rightarrow \infty$ . A independência de  $c$  com relação a  $\mu$  nos limites  $\pm\infty$  pode ser facilmente explicável em termos dos estados com a densidade de sítios ocupados por graus de liberdade magnéticos ( $\phi$ ), respectivamente  $\phi = 0$  ( $-\infty$ ) e  $\phi = 1$  ( $+\infty$ ). No entanto, a característica dos duplos picos está relacionada com o comportamento do sistema e depende de  $T$ . Para  $T > 1,64K$ , que corresponde ao valor de  $T_c$  quando  $\mu \rightarrow \infty$ , os dois picos são suaves. No entanto, para  $T < 1,64K$ , nota-se que um dos picos é a cúspide característica da transição evidenciada na figura 5.2.

Em seguida, investigamos também a relação entre o comprimento de correlação<sup>10</sup> ( $\xi$ ) e a temperatura. A figura 5.5 traz o resultado para  $\xi \times T$  para diversos valores de  $\mu$ . Uma vez que  $\xi$  apresenta um comportamento divergente em  $T_c$ , torna-se mais adequado traçar o seu valor em escala logarítmica. Os resultados mostram claramente que, para  $\mu=0, 3$ , e  $30$ ,  $\xi$  diverge nos correspondentes valores de  $T_c$ , como pode ser verificado com os picos das curvas do calor específico em função de  $T$  na figura 5.2.

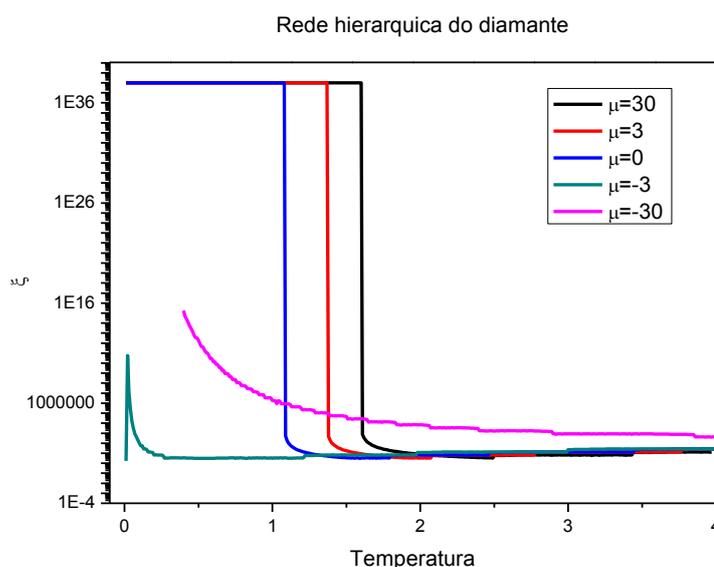


Figura 5.5: Comprimento de correlação ( $\xi$ ) em função da temperatura para a rede hierárquica do diamante.

Dessa forma, no gráfico do comprimento de correlação em função da temperatura para a rede hierárquica do diamante, também pode ser observada uma descontinuidade no comprimento de correlação para alguns valores da temperatura. Esse resultado está de acordo com o esperado, discutido na seção 1.3, ou seja, acima da temperatura crítica ( $T_c$ ), o comprimento de correlação ( $\xi$ ) é finito e bem acima da temperatura crítica o comprimento de correlação é nulo. À medida que a temperatura ( $T$ ) diminui e se aproxima da temperatura crítica, o comprimento de correlação aumenta indefinidamente e diverge em  $T = T_c$ . Para os

<sup>10</sup> O comprimento de correlação indica que spins separados a uma distância  $\gg \xi$  não estão correlacionados.

valores  $\mu = -3$  e  $-30$ , o comportamento de  $\xi$  é distinto, sendo caracterizado por uma divergência em  $T \approx 0$ .

Finalmente analisamos também a relação entre a magnetização ( $m$ ) e a temperatura para diferentes valores de  $\mu$ , obtendo os resultados apresentados na figura 5.6.

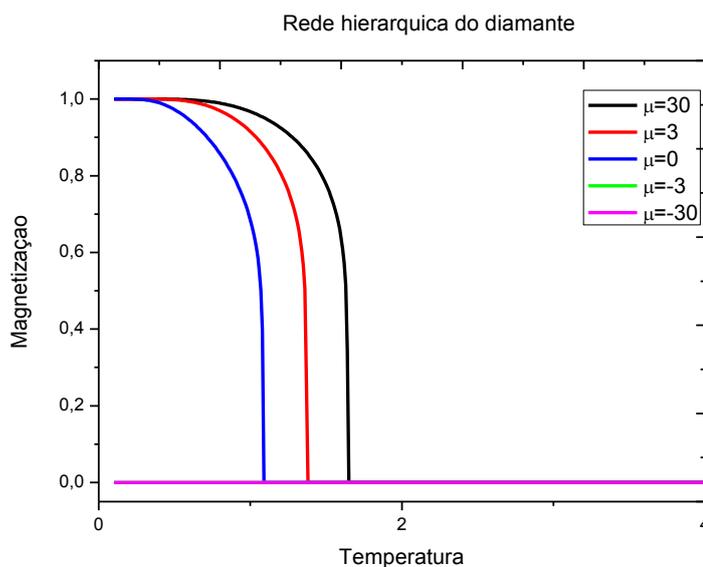


Figura 5.6: Magnetização em função da temperatura para a rede hierárquica do diamante

Os resultados corroboram aqueles apresentados para  $c$  e  $\xi$ . Para valores de  $\mu > \mu_c$ , a magnetização é não nula para  $T < T_c$ , indo a zero de maneira contínua em  $T_c$ . Nota-se novamente a concordância entre os valores de  $T$  onde  $m \rightarrow 0$  com aqueles obtidos para o pico de  $c$  e a divergência de  $\xi$ . Esta concordância atesta a confiabilidade do método de matrizes de transferência aqui desenvolvido. Nos dois casos em que  $\mu < \mu_c$ , a existência de apenas uma fase paramagnética é confirmada pelo valor de  $m$  identicamente nulo para todos os valores de  $T$ , conforme indicado pela curva horizontal em cor magenta na figura 5.6.

Estudamos também o comportamento da susceptibilidade ( $\chi$ ), em função da temperatura. O resultado está mostrado na figura 5.7, evidenciando a presença da divergência nos valores de  $T_c$  nos casos em que  $\mu > \mu_c$ .

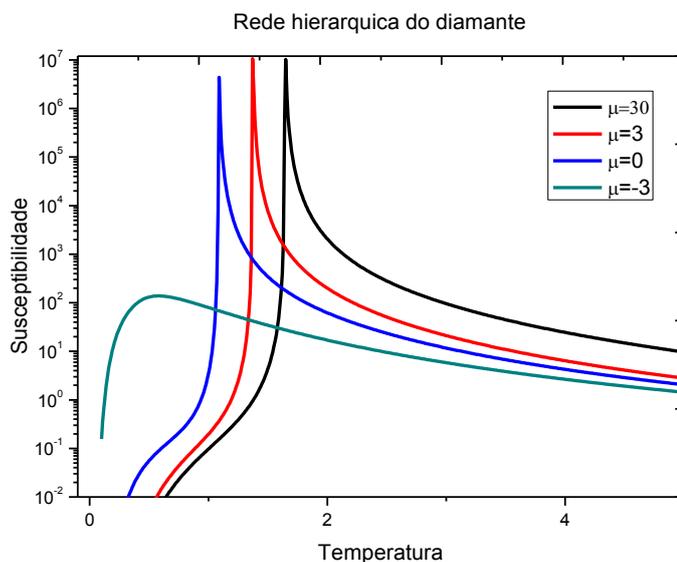


Figura 5.7: Susceptibilidade em função da temperatura para a rede hierárquica do diamante

O método das matrizes de transferência aqui adotado permite caracterizar o comportamento crítico do modelo diluído através da determinação de diversos expoentes críticos nas vizinhanças de  $T_c$ . Para tal, obtemos primeiramente a dependência das grandezas termodinâmicas e magnéticas em função da temperatura reduzida,  $t = \frac{T-T_c}{T_c} = t_r$ . Isto pode ser feito de maneira numérica, com grande precisão.

Com base na discussão na seção 1.3, fizemos a determinação dos expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , relacionados respectivamente às grandezas  $c$ ,  $\xi$ ,  $m$  e  $\chi$ . Uma vez obtida a dependência numérica em função de  $t_r$ , linearizamos os gráficos traçando ambas as grandezas em escala logarítmica. Os expoentes então são obtidos pela determinação numérica da inclinação da curva linearizada.

Vamos ilustrar, a título de exemplo, o cálculo do expoente crítico  $\alpha$  (eq.1.5) na figura 5.8.

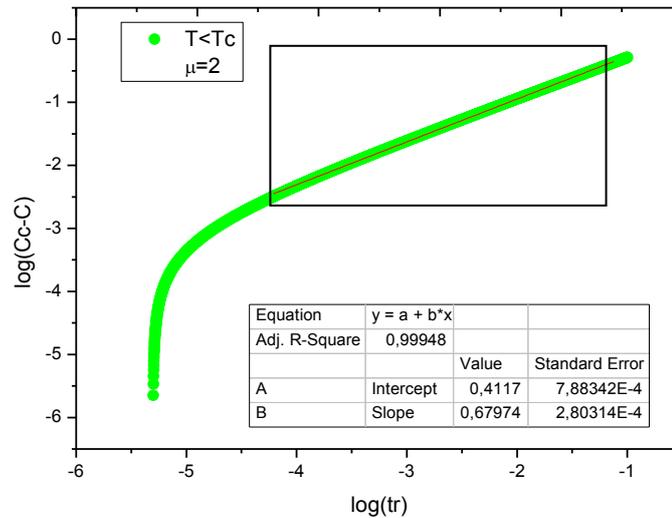


Figura 5.8: logaritmo da diferença entre o calor específico ( $c$ ) e o calor específico crítico ( $c_c$ ) em função do logaritmo da temperatura reduzida ( $t_r$ ) para rede hierárquica.

Neste caso, trabalhamos com o logaritmo de  $c_c - c$  em função do logaritmo de  $t_r$ , uma vez que o comportamento crítico de  $c$  não é caracterizado por uma divergência e sim por uma cúspide com valor máximo  $c_c$  em  $T=T_c$ . A dependência em lei de potência fica evidenciada por um comportamento linear para valores de  $t_r$  no intervalo  $10^{-4}$ - $10^{-1}$ . Para valores de  $t_r < 10^{-4}$  notamos um desvio do comportamento linear, que se deve a imprecisões numéricas no cálculo de  $c_c$ . Apesar disto, é possível se estimar o valor de  $\alpha$  com grande precisão em um intervalo significativo de valores de  $t_r$ . O mesmo procedimento pode ser adotado para as grandezas  $\xi$ ,  $m$  e  $\chi$ , sendo ainda simplificado pelo fato que nestes casos não há o custo adicional de calcular um valor similar a  $c_c$ .

Os valores obtidos para os expoentes críticos para diferentes valores de  $\mu > \mu_c$  estão listados nas tabelas 5.1 e 5.2. A primeira contém os valores de  $\alpha$  e  $\nu$ , e a segunda os valores de  $\beta$  e  $\gamma$ :

TABELA 5.1

J=1	$\alpha$		$\nu$
$\mu$	T < T <sub>c</sub>	T > T <sub>c</sub>	T > T <sub>c</sub>
-2,0	- 0,62221	- 0,73224	1,13546

-1,0	- 0,64498	- 0,73117	1,14005
0	- 0,67098	- 0,71889	1,16751
1,0	- 0,67190	- 0,72439	1,18677
2,0	- 0,67974	- 0,71116	1,18745
30	- 0,68504	- 0,69292	1,22998

Tabela 5.1: Valores dos expoentes críticos  $\alpha$  e  $\nu$  para diferentes valores do potencial químico,  $\mu$ .

TABELA 5.2

J=1	$\beta$	$\gamma$	
$\mu$	$T < T_c$	$T < T_c$	$T > T_c$
-2,0	0,16287	2,35404	2,33851
-1,0	0,16281	2,35416	2,33815
0	0,16258	2,35395	2,33786
1,0	0,16239	2,35403	2,33884
2,0	0,16235	2,35372	2,33910
30	0,16184	2,35488	2,33766

Tabela 5.2: Valores dos expoentes críticos  $\beta$  e  $\gamma$  para diferentes valores do potencial químico,  $\mu$ .

Os resultados na tabela 5.1 indicam que os valores de  $\alpha$  e  $\nu$  apresentam uma razoável dependência com relação ao potencial químico ( $\mu$ ). Na tabela 5.2, os resultados sugerem que os expoentes  $\beta$  também apresentam uma razoável dependência em relação a  $\mu$ , no entanto os valores de  $\gamma$  se mantêm independentes dos valores de  $\mu$ . Convém ressaltar que o cálculo independente dos expoentes deveria levar à verificação da igualdade de Rushbrooke  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ . No estudo levado a cabo, este valor é reproduzido com grande exatidão para grandes valores de  $\mu$ , como pode ser verificado a partir dos dados nas Tabelas 5.1 e 5.2. No entanto, quando os valores de  $\mu$  se aproximam de -3, onde a transição de fase deixa de existir, a região onde há invariância de escala perto de  $T_c$  tem seu tamanho reduzido, o que leva a imprecisão

no cálculo dos expoentes críticos. Neste regime a comprovação da igualdade de Rushbrooke é objeto de erros de aferição dos expoentes.

### 5.3 Rede apoloniana

Vamos agora discutir resultados para a rede apoloniana, que apresentam características bem diferentes daquelas da rede hierárquica do diamante, conforme podemos conferir nas figuras 5.9 a 5.11.

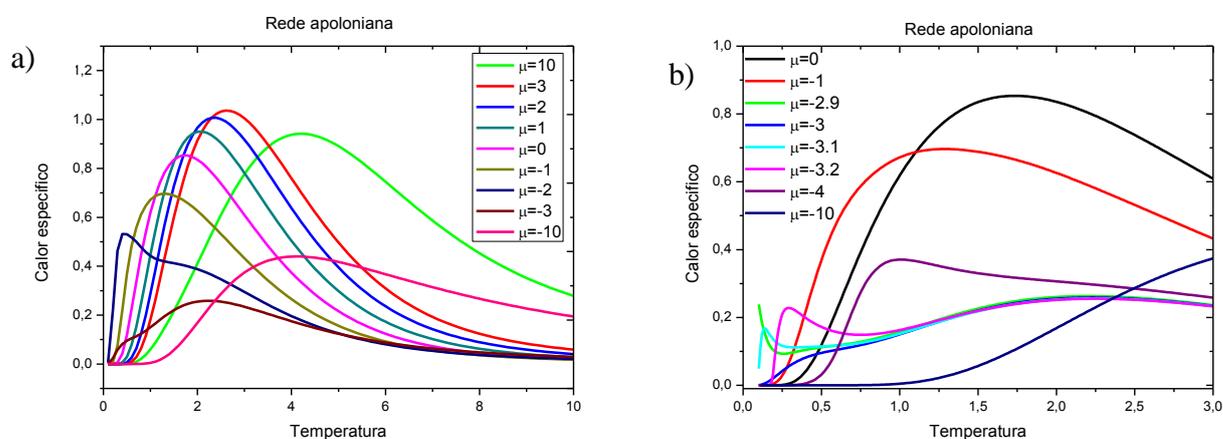


Figura 5.9: a) Calor específico em função da temperatura para a rede apoloniana. b) Duplos picos aparecem na curva do calor específico para alguns valores de  $\mu$ .

Conforme foi discutido na seção 3.2, a rede apoloniana é interessante para simular modelos físicos ligados a preenchimentos granulares. O estudo de modelos definidos sobre essa rede é razoavelmente recente. Uma das questões relacionadas ao comportamento crítico diz respeito à ausência de transições de fase para modelos magnéticos definidos sobre ela. Todos os resultados obtidos até então indicam que o ordenamento ferromagnético ocorre para todos os valores de  $T$ , sem qualquer comportamento crítico seja nas grandezas termodinâmicas ou magnéticas. Seria natural supor que, em presença de diluição, o modelo de Ising na rede apoloniana pudesse apresentar uma transição de fase do tipo ferro-paramagnética, semelhante ao caso da rede hierárquica. No entanto, como pode ser observado

na figura 5.9, o comportamento de  $c$  segue o padrão de um perfil Schottky, com máximos suaves para qualquer valor de  $\mu$ .

No entanto, é perceptível a existência de um comportamento anômalo para baixas temperaturas quando  $\mu \approx -3$ , conforme detalhado na figura 5.9b. Esta anomalia se manifesta através de duplos picos no valor de  $c$ , de maneira similar ao que foi observado no caso da rede hierárquica. A diferença com relação ao caso anterior é que ambos os picos têm máximos suaves, não estando nenhum dos dois ligados a uma transição de fase. No entanto, de forma bastante similar, a posição de um dos picos se aproxima bastante de  $T=0$  quando  $\mu \approx -2.9$ . Dado o fato que os pesos de Boltzmann divergem quando  $T \rightarrow 0$ , estamos impossibilitados de analisar o comportamento exato dentro dos programas de cálculo numéricos que desenvolvemos neste trabalho. Um cálculo analítico para esta situação é possível, e esperamos poder desenvolvê-lo em breve.

Os resultados para a dependência do valor de  $c$  (a  $T$  constante) em função de  $\mu$  estão mostrados na figura 5.10.

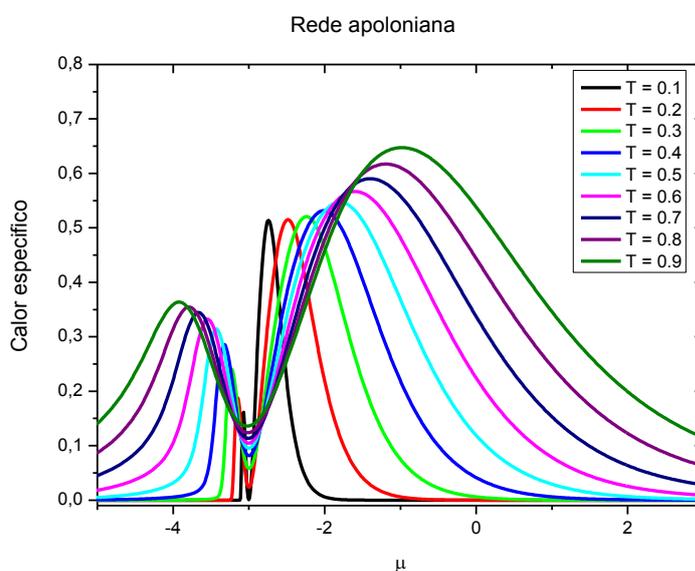


Figura 5.10: Calor específico em função do potencial químico para a rede apoloniana.

Esses resultados também indicam a existência da anomalia de pico duplo em  $c$  ao longo do eixo  $\mu$ . Com efeito, encontramos aqui um padrão com duplo pico para todos os valores de

$T < 1.0$ . O formato dos picos se torna mais abrupto à medida que  $T$  diminui. Apesar disto, não é possível detectar a clara formação de uma cúspide como as observadas na figura 5.4 para a rede hierárquica. A independência de  $c$  nos limites  $\mu \rightarrow \pm\infty$  é devida às mesmas razões indicadas na seção anterior. No entanto, a forma dos duplos picos está relacionada com a estrutura da rede apoloniana.

Nossa investigação revelou também que o comportamento da entropia ( $s$ ) no limite  $T \rightarrow 0$  depende fortemente de  $\mu$ , conforme indicado na figura 5.11.

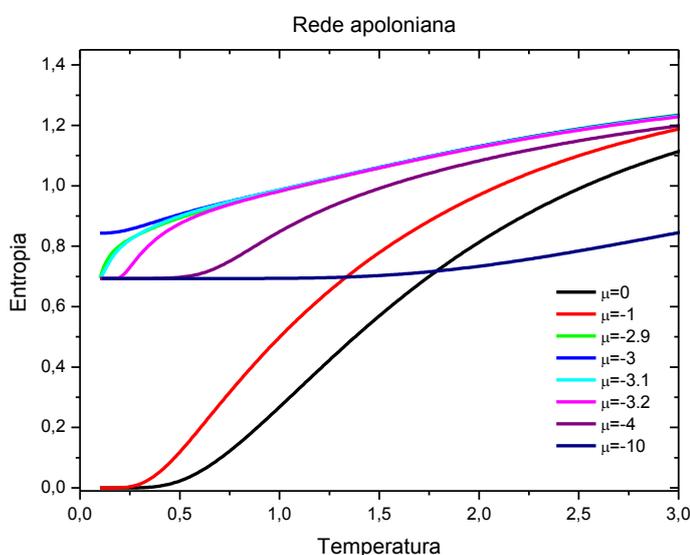


Figura 5.11: Entropia em função da temperatura para a rede apoloniana.

Três comportamentos distintos são revelados de acordo com as condições  $\mu > -3$ ,  $\mu = -3$ ,  $\mu < -3$ . No primeiro caso,  $s \rightarrow 0$  revela que o estado fundamental do sistema é não degenerado. Nas duas outras situações isto não é observado, o que é revelado pela presença de entropia residual no limite  $T \rightarrow 0$ . Quando  $\mu = -3$ ,  $s \rightarrow 0.8432\dots$ , e quando  $\mu < -3$ ,  $s \rightarrow 0.69315\dots \approx \ln(2)$ . Apesar de reportarmos um resultado numérico, o que não permite precisar o valor real da entropia no limite  $T \rightarrow 0$ , a concordância dos resultados obtidos para diferentes valores de  $\mu$  permite uma explicação plausível. O valor de  $s$  revela uma degenerescência de estados fundamentais que pode estar relacionado com as diferentes maneiras de ocupar os sítios da rede com íons magnéticos ou não. Para baixos valores de  $\mu$ , a fração de sítios ocupados  $\phi = N_+/N$  no limite

$T \rightarrow 0$  é bastante pequena, o que impede um alinhamento dos spins na ausência de campo externo.

Convém mencionar ainda que, no caso da rede hierárquica do diamante, os nossos métodos numéricos não conseguiram detectar indicações de existência de entropia residual para qualquer valor de  $\mu$ . No entanto, conforme já enfatizado, uma afirmação categórica sobre sua presença ou ausência no caso da rede hierárquica requer o cálculo analítico mais preciso, que não está incluído nos objetivos deste trabalho.

Voltando à análise da rede apoloniana, a explicação para o comportamento da entropia em  $T = 0$  pode ser corroborada pela dependência da magnetização em relação à temperatura para diferentes valores de  $\mu$ , conforme indicado na figura 5.12.

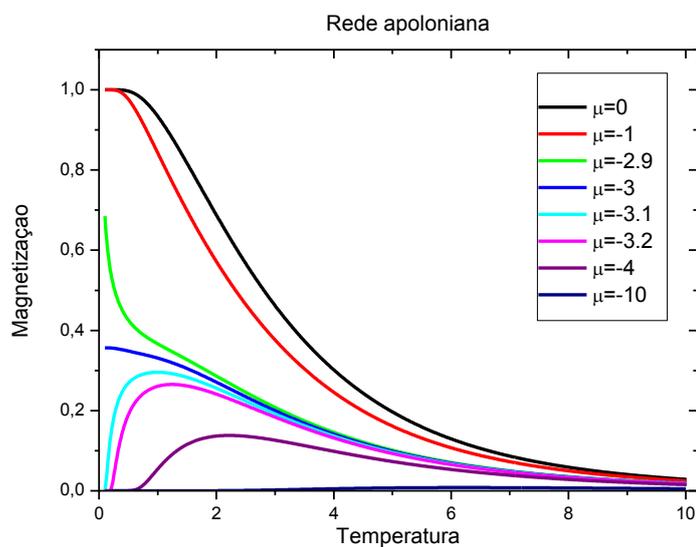


Figura 5.12: Magnetização em função da temperatura para a rede apoloniana.

O primeiro aspecto a ser observado é que  $m$  não se torna identicamente nula a partir de um valor de temperatura bem determinado. O comportamento das curvas para  $\mu = 0$  e  $\mu = -1$  é similar ao que foi observado para o modelo de Ising sem diluição (valor de  $\mu$  grande) na rede apoloniana:  $m(T=0)=1$ , e  $m \rightarrow 0$  exponencialmente quando  $T \rightarrow \infty$ . A curva para  $\mu = -2.9$  também sugere o mesmo tipo de comportamento, embora para o menor valor

de  $T$  ( $\approx 0.1$ ) para o qual foi possível obter numericamente o valor de  $m$  se verifica que  $m(T=0.1) \approx 0.7$ .

A figura 5.12 sugere que, na curva de  $\mu = -3$ ,  $m(T \rightarrow 0)$  converge para um valor 0.35663..., ao passo que, para  $\mu < -3$ ,  $m(T \rightarrow 0) = 0$ .

De novo é conveniente ressaltar que todos os cálculos realizados e os resultados aqui reportados dizem respeito ao comportamento das grandezas termodinâmicas e magnéticas quando o potencial químico permanece constante, e não para a densidade de componentes magnéticos constantes. Esta corresponde à situação física mais comum, quando se tem uma amostra com uma dada concentração fixa de constituintes magnéticos e não magnéticos. O cálculo para as grandezas nesta situação requer a determinação de  $N_+ = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log \mathcal{E}}{\partial \mu}$  ou  $\phi = -\partial f / \partial \mu$ , o que depende também da temperatura. Neste caso, o cálculo das grandezas aqui discutidas requer a determinação prévia do valor de  $\mu$  para um dado valor de  $\phi$  e de  $T$ . Embora este cálculo possa revelar comportamentos distintos daqueles aqui apresentados, não está incluído nos objetivos deste trabalho estender os resultados para esta situação.

O modelo de Ising com diluição é equivalente ao modelo com concentração de impurezas inertes. Nesse caso, as impurezas são os sítios que não dão contribuição energética, ou seja, sítios desocupados. Desta forma, no gráfico 5.1 b, podemos dizer que à medida que  $\mu$  aumenta, os resultados convergem para o modelo sem impureza.

A concentração de impurezas foi objeto de estudo de vários trabalhos, como podemos ver nas referências [44] e [45]. No trabalho [44], foi analisada uma cadeia linear de Ising de spin  $\frac{1}{2}$  e interações de primeiros vizinhos nos casos congelado e recozido.<sup>11</sup> Para ambos os casos, não foram observados pontos de não-analiticidade, mas é interessante notar que a área sob a curva  $\mu \times T$  é maior no caso recozido, o que demonstra que o calor específico é dominado por uma entropia de desordem composicional. Nossos resultados também demonstraram que no limite  $T \rightarrow 0$ , a entropia depende fortemente de  $\mu$ , conforme ilustramos na figura 5.11.

Em [45] foi feita uma comparação do modelo de impurezas inertes com o modelo de Blume-Capel que é representado pelo hamiltoniano de spin ( $s=1$ ) de primeiros vizinhos:

---

<sup>11</sup> Sistemas com componentes magnéticos diluídos são casos particulares nesse trabalho.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle 1,2 \rangle} S^z(1)S^z(2) - h \sum_1 S^z(1) + \Delta \sum_1 [S^z(1)]^2 \quad (5.2)$$

em que cada sítio de impureza é identificado com  $|S^z = 0\rangle$  e  $\Delta$  é equivalente ao potencial químico,  $\mu$ , do nosso trabalho. Em [45] também houve um estudo do diagrama de fase a  $h = 0$ , do modelo de Ising de spin  $\frac{1}{2}$  diluído de primeiros vizinhos na rede cúbica de face centrada. Uma das principais características que aparece nesse diagrama é que a temperatura crítica e bem definida decresce com o aumento da concentração da impureza. É interessante notar que encontramos uma relação de proporção desse tipo na figura 5.3, embora tenha se tratado de outro tipo de rede.

## CONCLUSÃO

---

Os principais resultados dessa dissertação foram obtidos através do método das matrizes de transferência para o modelo de Ising recozido na estrutura hierárquica do diamante e na estrutura apoloniana. A abordagem que fizemos possibilitou obter resultados para as propriedades termodinâmicas e magnéticas através da iteração de relações de recorrência dependentes da geração da rede.

Nossa motivação original foi compreender melhor a transição de fase isotrópica-nemática nos cristais líquidos desordenados e recozidos, descritos microscopicamente pelo modelo de Maier Saupe. No entanto, seria muito complexo implementar diretamente no modelo de Maier Saupe o tratamento de modelos recozidos por meio de matrizes de transferência.

Por este motivo, estudamos o modelo de Ising recozido, mais simples do que o modelo de Maier Saupe, em que o tempo de relaxamento das variáveis de desordem é muito mais curto do que o tempo de medição típico. No nosso formalismo, trabalhamos com o efeito de diluição, onde átomos magnéticos são substituídos por outros não magnéticos.

Desta forma, a utilização de matrizes de transferência para o tratamento do modelo de Ising com diluição na versão recozida em redes hierárquicas foi introduzida neste trabalho. Isto demandou que fizéssemos a definição das matrizes de transferência de ordem maior que no modelo homogêneo.

Obtivemos a dependência das grandezas termodinâmicas e magnéticas em função da temperatura ( $T$ ) e do potencial químico ( $\mu$ ) para a rede hierárquica do diamante e para a rede apoloniana. Os dados foram obtidos através dos mapas das relações de recorrência.

Para a rede hierárquica, os resultados para o calor específico ( $c$ ) em função da temperatura para diferentes valores do potencial químico indicaram a existência de transição de fase ferro-paramagnética para  $\mu \gg -2,998 = \mu_c$ . Para demais valores do potencial químico, a curva do calor específico apresenta um perfil tipo Schottky. Analisamos o comportamento da temperatura crítica ( $T_c$ ) em função do potencial químico, e os resultados

mostraram que  $T_c = 1,641 \text{ K}$  quando  $\mu \rightarrow \infty$ , o que coincide com o valor obtido para o modelo sem diluição e quando  $\mu \rightarrow \mu_c$ ,  $T_c \rightarrow 0$ .

Averiguamos também a relação entre o comprimento de correlação ( $\xi$ ) e a temperatura. Para  $\mu > \mu_c$ , os resultados mostraram que acima da temperatura crítica, o comprimento de correlação é finito. Quando a temperatura diminui e se aproxima da temperatura crítica, o comprimento de correlação aumenta indefinidamente e se diverge na temperatura crítica. Este resultado está em concordância com o que existe na literatura.

Mais um resultado de nosso interesse foi obtido através da relação entre a magnetização ( $m$ ) e a temperatura para diferentes valores do potencial químico. Para  $\mu > \mu_c$ , a magnetização é diferente de zero para os valores de  $T < T_c$ , e a partir da temperatura crítica a magnetização vai a zero. Esses resultados estão condizentes com os apresentados para o calor específico e o comprimento de correlação.

Finalizando o estudo da rede hierárquica, obtemos os expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\nu$ ,  $\beta$  e  $\gamma$ , relacionados às grandezas  $c$ ,  $\zeta$ ,  $m$  e susceptibilidade ( $\chi$ ) respectivamente. Os resultados indicaram que os valores de  $\alpha$ ,  $\nu$  e  $\beta$  apresentam uma pequena dependência com relação ao potencial químico, entretanto para os valores de  $\gamma$  não observamos dependência em relação aos valores do potencial químico.

Mais outro aspecto motivador do nosso trabalho foi o estudo da rede apoloniana, pois além dessa rede ser adequada para simular modelos físicos ligados ao empacotamento granular, o estudo sobre essa rede ainda é recente.

Os resultados para a rede apoloniana apresentaram propriedades bem diferentes do que os da rede hierárquica. Todos os resultados do modelo de Ising com e sem diluição, até o momento, demonstraram a inexistência de transições de fase de forma que o ordenamento ferromagnético ocorre para todos os valores da temperatura, embora encontramos um comportamento anômalo algumas vezes, como, por exemplo, a presença de picos duplos para o calor específico.

Analisando a dependência da magnetização em relação a temperatura para diferentes valores do potencial químico, notamos que a magnetização não se anula a partir de um valor da temperatura bem determinado, como no caso da rede hierárquica. Na rede apoloniana,  $m \rightarrow 0$  exponencialmente quando  $T \rightarrow \infty$ .

Por fim, há ainda alguns estudos que podem ser desenvolvidos. Não incluímos nesse trabalho a densidade de componentes magnéticos constantes, o que implicaria determinarmos

o número de sítios ocupados ( $N_+$ ) ou a densidade de sítios ocupados por graus de liberdade magnéticos ( $\phi$ ), mas a extensão dos resultados para estes cálculos pode ser feito num trabalho adiante. É importante salientar que não desenvolvemos um cálculo numérico em  $T=0$ , devido à divergência dos pesos de Boltzmann quando  $T \rightarrow 0$ , mas pretendemos desenvolver um cálculo analítico para esta situação em breve. É interessante também darmos continuidade ao estudo de como se comportam as grandezas termodinâmicas e magnéticas de modelos definidos na rede apoloniana, que até o momento não apresentaram transição de fase.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- [1] NISS, M. “History of Lenz-Ising Model 1920-1950: From Ferromagnetic to Cooperative Phenomena”. *Arch. Hist. Exact Sci.* 59: 267-318, 2005.
- [2] MCCOY, B. M.; WU, T. T. “The Two-Dimensional Ising Model”. Harvard University Press, Cambridge Massachusetts, 1973. ISBN 0-674-91440-6.
- [3] KINDERMANN, R.; SNELL J. L. “Markov Random Fields and Their Applications”. American Mathematical Society, 1980. ISBN -8218-3381-2.
- [4] BRUSH, S. G. “History of the Lenz-Ising Model”. *Reviews of Modern Physics*, American Physical Society, vol. 39, pp 883–893, 1967. DOI: 10.1103/RevModPhys.39.883.
- [5] STEPANOV, I. A. “Exact Solutions of the One-Dimensional, Two-Dimensional, and Three-Dimensional Ising Models”. – *Nano Science and Nano Technology: An Indian Journal*. Vol. 6. No 3. 118 – 122, 2012. The paper is on the Journal’s website with a free access.
- [6] SALINAS, S. R. A. *Introdução à Física Estatística*, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008.
- [7] FARIA, M. S. “Efeitos da Aperiodicidade no comportamento crítico de modelos magnéticos na rede de Bethe”. *Dissertação de Mestrado*, Florianópolis, 2006.
- [8] BRAGA, G. A.; ARAUJO JR., F. F. “Caracterização da fase desordenada do modelo de Ising d-dimensional via desigualdades de correlação”. *Matemática Universitária* nº32: 9-37, 2002.
- [9] TRINDADE, M. A., “Aperiodicidade das sequências de substituição nos modelos de Ising em redes hierárquicas”. *Dissertação de mestrado*, Salvador, 2003.
- [10] KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado Sólido*. Traduzido por: Biasi, R. S., LTC, Rio de Janeiro, 2006.
- [11] SALINAS, S. R.; WRESZINSKI, W. F. “Critical Behavior of a Class of Noncommutative aperiodic Models on Hierarchical Lattices”. *Physica. A* , v. 297, p. 434-440, 2001.
- [12] MUZY, P. T.; SALINAS, S. R. “Ferromagnetic Potts Model on a Hierarchical Lattice with Random Layered Interactions”. *INT. J. MOD. PHYS. B*, v. 13, p. 397-409, 1999.

- [13] MAGALHÃES, A. C. N.; SALINAS, S. R.; TSALLIS, C. T. “Aperiodic Interactions on Hierarchical Lattices: An Exact Criterion for the Potts Ferromagnet Criticality”. *Journal of Physics. A, Mathematical and General* , v. 31, p. L567-L573, 1998.
- [14] PINHO, S. T. R.; HADDAD, T. A. S.; SALINAS, S. R. “Critical Behavior of the Ising Model on a Hierarchical Lattice with Aperiodic Interactions”. *Physica. A* , v. 257, p. 515-520, 1998.
- [15] ANDRADE, R. F. S.; HERRMANN, H. J. “Exact evaluation of the cutting path length in a percolation model on a hierarchical network”. *Physical Review. E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics (Print)* , v. 87, p. 042113, 2013.
- [16] ANDRADE, R. F. S.; CASON, D. “Ising model with long range correlated disorder on hierarchical lattices”. *Physical Review. B, Condensed Matter and Materials Physics* , v. 81, p. 014204, 2010.
- [17] ANDRADE, R. F. S.; SANTOS, D. O. C.; NOGUEIRA JR, E. “Transfer matrix approach to the disordered Ising model on hierarchical lattices”. *Physical Review B - Solid State, Estados Unidos*, v. 73, p. 174202, 2006.
- [18] ANDRADE, R. F. S.; ALMEIDA, A. C. “Aperiodic magnetic models on the Wheatstone hierarchical lattice”. *Physica. A* , Amsterdam, v. 357, p. 181-186, 2005.
- [19] ANDRADE, R. F. S.; PINHO, S. T. R. “Ising model on diamond hierarchical lattice with aperiodic Rudin-Shapiro interactions: Renormalization Group and Transfer Matrix analyses”. *European Physical Journal B* , v.34, p. 343-350, 2003.
- [20] ANDRADE, R. F. S.; ALMEIDA, A. C. “Estudo do modelo de Potts aperiódico em uma rede hierárquica por matrizes de transferência”. In: Tania Tomé. (Org.). *Tendências da Física Estatística no Brasil*. : Editora Livraria da Física, v. 1, p. 54-57, 2003.
- [21] NETO, G. C. “Modelo de Ising em redes fractais”. *Dissertação de mestrado, Recife*, 1999.
- [22] GRIFFITHS, R. B.; KAUFMAN, M. “Spin systems on hierarchical lattices. Introduction and thermodynamic limit”. *Phys. Rev. B*, 26 (9):5022, 1982.
- [23] CARDOSO, A. L. “Estudo de um modelo Tight-Binding na rede Apoloniana”. *Dissertação de mestrado, Salvador*, 2007.
- [24] ANDRADE, R. F. S.; HERRMANN, H. J. “Magnetic models on Apollonian networks”. *Phys. Rev. E*, 71, 056131, 2005.
- [25] TSAI, S. H.; SALINAS, S. R. “Fourth-order cumulants to characterize the phase transitions of a spin-1 Ising model”. *Brazilian Journal of Physics* , v. 28, p. 58, 1998.
- [26] FREITAS, L. C.; SALINAS, S. R. “High-temperature entropy of an ionic model for the phase transition in  $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ”. *Brazilian Journal of Physics* , v. 7, p. 341, 1977.

- [27] PLASCAK, J. A. ; SALINAS, S. R. “Compressible dimer model for the phase transition in  $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ”. *Chemical Physics Letters* , v. 83, n.3, p. 545-548, 1981.
- [28] CARVALHO, A. V. D.; SALINAS, S. R. “Theory of the phase transition in the quasi-one-dimensional hydrogenbonded ferroelectric crystal  $\text{PbHPO}_4$ ”. *Journal of the Physical Society of Japan* , v. 44, n.1, p. 238-243, 1978.
- [29] LESSA, J. C., “Estudo de propriedades críticas de sistemas de spin de Ising desordenados”, Tese de doutorado, Rio de Janeiro, 2006.
- [30] PATHRIA, R. K. *A Modern Course in Statistical Physics, Second Edition*, Publisher Butterworth Heinemann, 1996.
- [31] TSALLIS, C.; MAGALHÃES, A. C. N. “Pure and random Potts-like models: real-space renormalization-group approach”, *Phys. Rep.* 268 (1996) 305-430, Elsevier Science, 1996.
- [32] PINHO, S. T. R. “Modelo de Ising em redes aperiódicas e criticalidade auto-organizada”, Tese de doutorado, São Paulo, 1998.
- [33] CARMO, E. “Modelos estatísticos para o ordenamento nemático biaxial”, Tese de doutorado, São Paulo, 2011.
- [34] ANDRADE, R. F. S.; SALINAS, S. R. “Transfer -Matrix Solution of the Ising-Model on the Koch Curve”. *Journal of Physics. A, Mathematical and General* , v. 17, n.8, p. 1665-1670, 1984.
- [35] ANDRADE, R. F. S.; PINHO, S. T. R. “Critical exponents for the long-range Ising chain using a transfer matrix approach”. *European Physical Journal B* , v. 50, p. 33-37, 2006.
- [36] ANDRADE, R. F. S.; PINHO, S. T. R. “Tsallis scaling and the long range Ising chain: a transfer matrix approach”. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids and Related Interdisciplinary Topics* , Estados Unidos, v. 71, n.026126, p. 026126, 2005.
- [37] ANDRADE, R. F. S.; SALINAS, S. R. “Transfer Matrix Solution Of The Ising Model On The Koch Curve”. *Journal of Physics. A, Mathematical and General* , v. 17, n.1, p. 1665-1671, 1984.
- [38] CARMO, E.; VIEIRA, A. P.; SALINAS, S. R.. “Phase diagram of a model for a binary mixture of nematic molecules on a Bethe lattice”. *Phys. Rev. E* 83, 011701, 2011.
- [39] FIGUEIREDO NETO, A. M ; SALINAS, S. R. A. “The Physics of Lyotropic Liquid Crystals: Phase Transitions and Structural Properties”. 1. ed. Oxford: Oxford Science Publications, 304p, 2005.
- [40] MAIER, W.; SAUPE, A. “Eine einfache molekulare theorie des nematischen kristallinflüssigen zustandes”, *Z. Naturforsch*, 13, 564-566, 1958.

- [41] ANDRIENKO, D. "Introduction to liquid crystals". Academich press, Bad Marienberg, 2006.
- [42] ANDRADE, R. F. S.; NOGUEIRA JR, E.; COUTINHO, S. G. "Multifractal properties of aperiodic Ising model on hierarchical lattices: the role of the geometric fluctuations". European Journal of Physics, v. B 23, p.373-382, 2001.
- [43] ANDRADE, J. S.; JR. HERRMANN, H. J.; ANDRADE, R. F. S.; DA SILVA, L. R. "Apollonian Networks: Simultaneously Scale-Free, Small World, Euclidean, Space Filling, and with Matching Graphs". Phys. Rev. Letters 94: 018702, 2005.
- [44] MENEZES, L. C.; OBERMAIR, G. M. "Ising chain with two random components in zero field" Rev. Brasileira de Física, v. 6, n. 3, 1976;
- [45] WORTIS, M. "Tricritical Behavior in the dilute Ising ferromagnet" Phys. Rev. Letters 47A: n.6, 1974;