



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA**  
**INSTITUTO DE FÍSICA**  
Programa de Pós-Graduação em Física

Dissertação de Mestrado

**Aperiodicidade das Sequências de Substituição nos Modelos  
de Ising em Redes Hierárquicas**

Marco Antônio Silva Trindade

2003



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

INSTITUTO DE FÍSICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**Aperiodicidade das Sequências de Substituição nos Modelos  
de Ising em Redes Hierárquicas**

Marco Antônio Silva Trindade

**Orientador:** Professora Suani Tavares Rubim de Pinho

**Co-orientador:** Professor Thierry Corrêa Petit Lobão

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

Salvador - 2003

**Aperiodicidade das Seqüências de Substituição nos Modelos de Ising em  
Redes Hierárquicas**

Copyright 2003

by

Marco Antônio Silva Trindade

## Abstract

This work can be divided in two parts: the first one reports the investigation of aperiodic character of sequences generated by uniform and binary substitution rules; the second one analyses the Ising models on generalized diamond hierarchical lattices, with exchange interactions generated by binary uniform substitution rules. The aperiodic character of interactions is the link between the topics of this work. In the first part we set up the whole classification of periodic sequences generated by uniform binary substitution rules based on those rules. In the second part, using the Migdal-Kadanoff renormalization group method, we obtain the generic recursion relations for the Ising models on generalized diamond hierarchical lattices, with interactions based on aperiodic sequences generated by binary uniform rules. We rewrite the exact criterion of relevance of geometrical fluctuations for hierarchical lattices, previously introduced, just in terms of the parameters of substitution rules. We identify cases in which the critical behavior is governed by fixed points. We also present a detailed analysis of a particular case in order to obtain the values of the thermal critical exponents.



## Resumo

Este trabalho pode ser dividido em duas partes: a primeira refere-se à investigação do caráter aperiódico de seqüências geradas a partir de regras de substituição binárias e uniformes; a segunda diz respeito à análise do modelo de Ising na rede hierárquica generalizada do diamante com interações de troca estabelecidas por regras binárias uniformes de substituição. A natureza aperiódica das interações é justamente o elo entre os dois tópicos deste trabalho. Na primeira etapa, conseguimos uma classificação exhaustiva das seqüências periódicas geradas por regras binárias uniformes a partir das próprias regras de substituição. Na segunda etapa, com base no método do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff, obtivemos relações genéricas de recorrência para o modelo de Ising na rede hierárquica generalizada do diamante, com interações baseadas em seqüências aperiódicas geradas por regras binárias uniformes. Reescrevemos o critério exato de relevância das flutuações geométricas, previamente estabelecido, para as redes hierárquicas em termos apenas dos parâmetros da regra de substituição e identificamos casos relevantes, em que o comportamento crítico é regido por pontos fixos. Fizemos também uma análise detalhada para um caso particular, calculando os expoentes críticos térmicos.





# Agradecimentos

À professora Suani e ao professor Thierry pela orientação e dedicação.

Aos meus colegas do mestrado pela ajuda inestimável.

Aos funcionários do Instituto pelo constante apoio.

Ao CNPQ pelo financiamento.

“A humildade ou modéstia é o desejo de  
fazer o que agrada aos homens  
e evitar o que lhes desagrade.”

Espinosa

Dedico este trabalho à memória  
de minha mãe.



# Conteúdo

Lista de Figuras	vi
Lista de Tabelas	vii
Introdução	1
<b>1 CONCEITOS BÁSICOS</b>	<b>5</b>
1.1 MODELO DE ISING . . . . .	5
1.2 EXPOENTES CRÍTICOS . . . . .	8
1.3 TRANSFORMAÇÃO DE RENORMALIZAÇÃO . . . . .	12
1.3.1 ESQUEMA GERAL . . . . .	12
1.3.2 A TRANSFORMAÇÃO DE MIGDAL-KADANOFF . . . . .	17
1.4 REDES HIERÁRQUICAS . . . . .	20
1.4.1 GRAFOS . . . . .	20
1.5 MODELOS DE SPINS EM REDES HIERÁRQUICAS . . . . .	26
1.6 INTERAÇÕES APERIÓDICAS . . . . .	32
1.7 SEQÜÊNCIAS DE SUBSTITUIÇÃO . . . . .	35
<b>2 APERIODICIDADE DAS SEQÜÊNCIAS DE SUBSTITUIÇÃO</b>	<b>39</b>
2.1 CONCEITOS BÁSICOS . . . . .	40
2.2 RESULTADOS JÁ EXISTENTES . . . . .	45
2.2.1 QUASE - PERIODICIDADE . . . . .	46
2.2.2 PERIODICIDADE . . . . .	46
2.2.3 APERIODICIDADE . . . . .	48
2.3 NOVOS RESULTADOS . . . . .	49
2.4 SEQÜÊNCIAS DE SUBSTITUIÇÃO E MODELOS DE SPINS . . . . .	55
<b>3 MODELOS APERIÓDICOS DE ISING NA REDE HIERÁRQUICA DO DIAMANTE</b>	<b>58</b>
3.1 SITUANDO O PROBLEMA . . . . .	59

3.2	MODELO DE ISING NA REDE HIERÁRQUICA GENERALIZADA DO DIAMANTE . . . . .	67
3.3	VERSÃO SIMPLIFICADA DO CRITÉRIO EXATO DE RELEVÂNCIA .	73
3.4	NOVAS CLASSES DE UNIVERSALIDADE . . . . .	78
<b>4</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS</b>	<b>82</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>85</b>

# Lista de Figuras

1.1	Etapas de deslocamento e dizimação dos spins na rede quadrada. . . . .	18
1.2	As três primeiras gerações da rede gerada pelo grafo ponte de Wheatstone.	21
1.3	Ponte de Konisberg. . . . .	22
1.4	Um exemplo de grafo. . . . .	23
1.5	Grafo ponte de Wheatstone. . . . .	24
1.6	As duas primeiras gerações de uma rede que possui 4 conexões, cada uma com 3 ligações. . . . .	27
1.7	Processo de deslocamento e dizimação dos spins na rede hierárquica do diamante. . . . .	29
1.8	As três primeiras gerações da rede hierárquica do diamante. . . . .	30
1.9	As duas primeiras gerações da rede hierárquica do diamante, cujas ligações de cada conexão obedecem à regra de substituição de duplo-período. . . . .	38
3.1	Gráfico de $1/C_{2,\ell}$ versus módulo $\ell$ , para o modelo de Ising na RHGD, com $Q = 2$ . . . . .	74
3.2	Gráfico de $a_Q$ versus $Q$ para o modelo de Ising na RHGD. . . . .	74
3.3	Gráfico de $b_Q$ versus $Q$ , para o modelo de Ising na RHGD. . . . .	75
3.4	Gráfico do ponto fixo não trivial da diagonal $x^* = \tanh(\beta J)$ versus o módulo de $\ell$ , para o modelo de Ising na RHGD, com $Q = 2$ . . . . .	75
3.5	Gráfico das órbitas no espaço dos parâmetros $x_a = \tanh K_a$ versus $x_b = \tanh K_b$ , para o modelo de Ising na RHGD, com $Q = 2$ , $m = 4$ e $p = 4$ . Os pontos fixos estão representados por círculos. No gráfico interno, foi feita uma ampliação na região próxima aos pontos fixos fora da diagonal. . . . .	80

## Lista de Tabelas

- 3.1 Casos relevantes do modelo de Ising na RHGD para  $Q = 2$ , com parâmetros  $\ell$ ,  $m$  e  $p$  da regra de substituição, ponto fixo da diagonal  $x^*$ , coordenadas  $(x_a^*, x_b^*)$  dos pontos fixos fora da diagonal e segundo autovalor  $\Lambda_2$  associado à jacobiana do ponto fixo da diagonal. . . . . 76



# Introdução

Em Mecânica Estatística, a teoria de fenômenos críticos – que trata das propriedades de sistemas físicos próximos à temperatura crítica na transição de fase – sofreu um grande avanço, iniciado na década de sessenta, com o advento de experimentos mais precisos [1] na vizinhança da criticalidade (ponto onde ocorre a transição de fase). A partir de observações experimentais e das teorias clássicas observou-se que várias grandezas termodinâmicas, como calor específico, susceptibilidade magnética, etc., apresentam um comportamento bem peculiar nesta região, o qual pode ser caracterizado por uma coleção de expoentes críticos; sistemas físicos distintos com o mesmo conjunto de expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade.

Em 1971, Wilson [2] publicou um artigo revolucionando a teoria de fenômenos críticos com o método do grupo de renormalização, sendo agraciado com o prêmio Nobel de Física em 1982. Tal trabalho ratificou a relevância da técnica do grupo de renormalização em Física, que era, anteriormente, aplicada em outros contextos [3].

A transformação de renormalização promove uma mudança na escala do sistema através de uma redução no número de graus de liberdade. No início dos anos oitenta, motivados a construir redes sobre as quais a transformação de renormalização é exata,

diversos pesquisadores [4, 5] conceberam modelos de spins em redes que possuíam topologias distintas da de Bravais, denominadas por Griffiths e Kaufman [6] de hierárquicas, em 1982.

Paralelamente, um grupo de físicos experimentais [7] percebeu que alguns materiais, como a liga AlMn, quando submetidos à difração dos raios X, manifestam ordem orientacional de longo alcance e auto similaridade, porém não possuem simetria translacional, caracterizada pela periodicidade. Estruturas com tais características foram chamadas de quase-cristais. No ano de 1985, Merlin [8] construiu uma amostra formada por dois tipos de folhas, que podem ser geradas teoricamente pela seqüência de Fibonacci; uma seqüência de letras geradas por uma determinada regra de substituição. Simultaneamente, seqüências de substituição estavam sendo estudadas por matemáticos dentro, tanto do contexto da Análise Combinatória [9] quanto da Teoria de Sistemas Dinâmicos [10]. Na década de oitenta, tais idéias foram estendidas aos modelos de spins de modo que suas interações, geradas por regras de substituição, assumissem um caráter aperiódico [11].

Por outro lado, em 1968, a desordem passou a ser introduzida no modelo de Ising com motivação experimental, devido à presença de impurezas nos materiais magnéticos. McCoy e Wu [12] introduziram constantes de acoplamento aleatórias no modelo de Ising bidimensional, obtendo como resultado a eliminação da divergência do calor específico, observada no caso original (sem desordem). A partir daí, foi proposto um critério por Harris, [13] que tinha como objetivo determinar quando o comportamento termodinâmico do sistema é alterado pela presença da desordem.

Em 1993, Luck [14] propõe um critério heurístico, nos mesmos moldes do critério de desordem, para análise da relevância das flutuações geométricas devido à aperiodicidade

da rede. As interações aperiódicas geradas a partir de regras de substituição foram um paradigma deste critério. Em particular, no final da década de noventa, estende-se tal estudo às redes hierárquicas [15, 16], e é exatamente neste contexto que situa-se este trabalho.

Neste trabalho, obtemos uma classificação geral das seqüências de substituição quanto à periodicidade. Em posse deste resultado, estudamos o modelo de Ising na rede hierárquica generalizada do diamante com interações aperiódicas geradas por regras de substituição, através da transformalização de renormalização de Migdal-Kadanoff, chegando a expressões genéricas exatas para as relações de recorrência. Além disso, reescrevemos o critério exato para relevância das flutuações geométricas, previamente introduzido [16], apenas em termos dos parâmetros das regras de substituição. A partir do critério simplificado, foram identificados casos relevantes em que o comportamento crítico é governado por pontos fixos fora da diagonal.

O capítulo 1 possui um caráter didático. Nele, exibimos os conceitos básicos necessários à compreensão dos resultados obtidos nos capítulos posteriores. Temas como modelo de Ising, expoentes críticos, transformação de renormalização, redes hierárquicas e seqüências de substituição serão abordados.

No capítulo seguinte, apresentamos alguns resultados já existentes [17], [18] referentes às seqüências de substituição e novos resultados, por nós obtidos, que correspondem à classificação de regras binárias e uniformes quanto à periodicidade das seqüências geradas a partir destas, discutindo também a relevância deste estudo para os modelos de spins.

No capítulo 3, usando os novos resultados do capítulo 2, reestudamos o modelo de Ising na rede hierárquica generalizada do diamante (RHGD), com interações estabelecidas

por regras binárias uniformes de substituição que geram seqüências aperiódicas, através da técnica do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff, generalizando as relações de recorrência para uma rede com  $Q$  conexões. Fazendo  $Q = 2$ , recaímos nos resultados apresentados na referência [18]. Obtivemos um critério exato de relevância em termos apenas dos parâmetros  $\ell$ ,  $m$  e  $p$  das regras de substituição, apresentando casos relevantes em que o comportamento crítico é regido por pontos fixos fora da diagonal. Fizemos ainda uma análise detalhada para um caso particular em que  $Q = 2$ ,  $\ell = 5$ ,  $m = 4$  e  $p = 4$ , calculando os expoentes críticos térmicos  $\alpha$  e  $\nu$ .

Por último, no capítulo 4, retemos as conclusões e perspectivas referentes aos resultados da dissertação apresentados nos capítulos 2 e 3.

## Capítulo 1

# CONCEITOS BÁSICOS

Neste capítulo, introduzimos os elementos fundamentais ao desenvolvimento desta dissertação de acordo com o objetivo apresentado na introdução, qual seja, estudar a aperiodicidade do modelo de Ising na rede hierárquica do diamante com interações geradas por regras de substituição. O modelo de Ising é definido e, em seguida, é feita uma discussão a respeito de tópicos correlatos, como expoentes críticos, transformação de renormalização e redes hierárquicas. Posteriormente, introduzimos as sequências de substituição, contextualizando-as e exibindo sua relação com os conteúdos abordados anteriormente.

### 1.1 MODELO DE ISING

O modelo de Ising consiste em um modelo de spins, um dos mais simples, cujo estudo, numa rede bidimensional, revela informações acerca de um sistema físico na criticalidade, ou seja, na transição de fase. Formulado por Lenz, em 1920, e resolvido para uma dimensão por Ernest Ising [19], no ano de 1925, é atualmente um modelo *stan-*

*hard* na Mecânica Estatística. Aplica-se a uma larga faixa de problemas, sendo usado não apenas em sistemas magnéticos como também em sistemas de interesse mais amplo tais como redes neurais, membranas biológicas e até mesmo em fenômenos sociais [20].

Tal modelo descreve interações de curto alcance entre spins e pode ser definido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\sum_{(i,j)} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i , \quad (1.1)$$

em que  $S_i$  e  $S_j$  são variáveis aleatórias (spins) que podem assumir valores  $\pm 1$ , nos sítios  $i = 1, 2, 3, \dots, N$  de uma rede  $d$ -dimensional,  $J_{ij}$  são as interações de troca e a notação  $(i, j)$  denota que a soma deve ser realizada entre os primeiros vizinhos. Com respeito ao segundo termo,  $H$  corresponde a um campo magnético externo aplicado. Caso as constantes de interação  $J_{ij}$  sejam positivas, teremos um estado ferromagneticamente ordenado. Em outros contextos, as variáveis de spin podem assumir diferentes significados, como átomos do tipo  $A$  ou  $B$ , como um número de ocupação, que indica a presença ou ausência de uma molécula numa célula, etc; ratificando a extensão de aplicabilidade do modelo.

O primeiro termo, que representa uma interação entre os spins, está relacionado com uma fase ferromagnética do sistema. Em um paramagneto, a hamiltoniana contém unicamente o segundo termo da interação dos spins com o campo magnético, não apresentando magnetização espontânea.

A resolução do modelo de Ising implica escrever a função de partição canônica

$$Z_N = Z(T, V, N) = \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta\mathcal{H}) , \quad (1.2)$$

na qual a soma é efetuada sobre todas as configurações das variáveis de spin. Isto permite, obviamente, fazer a conexão com a Termodinâmica, obtendo grandezas termodinâmicas

como calor específico, energia livre, susceptibilidade, etc.

A solução do modelo de Ising unidimensional não produziu resultados satisfatórios para descrever a transição de fase ferro-paramagnética. O cálculo da expressão para a magnetização espontânea mostra que ela se anula para  $H = 0$ , indicando a inexistência de uma fase ferromagnética. A solução para uma rede quadrada foi realizada em 1944, por Lars Onsager [21]. Este foi o primeiro modelo bidimensional que predisse uma transição de fase, sendo exatamente solúvel. A solução do modelo de Ising tridimensional, na ausência de campo externo, constitui um problema em aberto.

Existe uma série de outros modelos de spins. Para o modelo de Potts, que é uma generalização do modelo de Ising, temos o hamiltoniano de  $q$  estados

$$\mathcal{H} = -q \sum_{(i,j)} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} , \quad (1.3)$$

em que  $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$  é a função delta de Kronecker (que tem valor zero se  $\sigma_i \neq \sigma_j$  e um, se  $\sigma_i = \sigma_j$ ) e a soma se dá sobre todos os pares de primeiros vizinhos na rede em consideração.

Outro modelo bastante conhecido é o de Heisenberg, com o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_{i=1}^N \vec{H} \cdot \vec{S}_i. \quad (1.4)$$

no qual  $J_{ij}$  são as interações de troca;  $\vec{S}_i$  e  $\vec{S}_j$  são os vetores de spin; e  $H$  é o campo magnético externo. A primeira soma deve ser realizada entre os vizinhos mais próximos.

Existe, também uma gama de métodos de resolução, como a matriz de transferência, aproximações de campo médio, grupo de renormalização, entre outros. Será utilizado neste trabalho o método do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff.

## 1.2 EXPOENTES CRÍTICOS

Expoentes críticos são expoentes que caracterizam a região crítica de um sistema físico. Estão associados ao comportamento na vizinhança do ponto crítico de grandezas físicas como calor específico, susceptibilidade, entropia, entre outras, em função da distância ao ponto crítico. Tais expoentes determinam classes de universalidade, ou seja, sistemas que possuam um mesmo conjunto de expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade.

O expoente crítico  $\alpha$  é definido a partir do calor específico em campo nulo:

$$C_H(T, H = 0) \equiv -T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right) = -T \left( \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial T^2} \right)_{H=0}, \quad (1.5)$$

sendo  $T$ ,  $S$  e  $\mathcal{F}$ , respectivamente, a temperatura, a entropia e a energia livre. Na criticalidade, o comportamento assintótico é

$$C_H \sim \begin{cases} A_+ |t|^{-\alpha}, & (t > 0) \\ A_- |t|^{-\alpha}, & (t < 0) \end{cases}, \quad (1.6)$$

em que  $t = \left( \frac{T-T_c}{T_c} \right)$  é a temperatura reduzida, que mede a distância ao ponto crítico, e o sinal  $\sim$  indica o comportamento na vizinhança do ponto crítico ( $T \rightarrow T_c$ ). O expoente  $\alpha$  possui o mesmo valor para um grande número de materiais, ressaltando o caráter universal do expoente. As amplitudes críticas  $A_+$  e  $A_-$  variam de acordo com a substância; entretanto a razão  $\frac{A_+}{A_-}$  é universal.

A magnetização espontânea é dada por

$$M_0 \equiv \lim_{H \rightarrow 0} M(t, H) \equiv - \lim_{H \rightarrow 0} \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H} \right)_T, \quad (1.7)$$



sendo possível definir o expoente crítico  $\beta$ :

$$M_0 \sim B(-t)^\beta, \quad (t < 0), \quad (1.8)$$

Para  $t > 0$ , a magnetização em campo nulo é zero.

A susceptibilidade magnética, que mede a resposta do parâmetro de ordem devido a mudanças no campo, corresponde a

$$\chi(T, H = 0) \equiv \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T = - \left( \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial H^2} \right)_T, \quad (1.9)$$

tendo o comportamento assintótico

$$\chi(t, H = 0) \sim \begin{cases} C_+ |t|^{-\gamma}, & (t > 0) \\ C_- |t|^{-\gamma}, & (t < 0) \end{cases}, \quad (1.10)$$

com o expoente crítico  $\gamma$ . Novamente,  $\gamma$  e  $\frac{C_+}{C_-}$  possuem um caráter universal.

Temos também o expoente  $\delta$ , associado à isoterma crítica

$$H \sim |M(t = 0, H)|^\delta. \quad (1.11)$$

Definiremos ainda os expoentes críticos  $\nu$  e  $\eta$ . Para tal, considere a função de correlação de dois pontos, dada por:

$$G_c(\vec{r}) = \langle \Psi(\vec{r}) \Psi(\vec{0}) \rangle - \langle \Psi(\vec{r}) \rangle \langle \Psi(\vec{0}) \rangle, \quad (1.12)$$

sendo  $\Psi(\vec{r})$  o parâmetro de ordem do sistema e  $\vec{r}$  é a distância entre dois spins. Supondo que o sistema é invariante por translação, temos

$$\langle \Psi(\vec{r}) \rangle = \langle \Psi(\vec{0}) \rangle \equiv \bar{\Psi}. \quad (1.13)$$

Desta maneira

$$G_c(\vec{r}) = \langle \Psi(\vec{r}) \Psi(\vec{0}) \rangle - \bar{\Psi} \left[ \langle \Psi(\vec{r}) \rangle + \langle \Psi(\vec{0}) \rangle - \bar{\Psi} \right]. \quad (1.14)$$

Podemos reescrever (1.14) como:

$$G_c(\vec{r}) = \left\langle \left( \Psi(\vec{r}) - \bar{\Psi} \right) \left( \Psi(\vec{0}) - \bar{\Psi} \right) \right\rangle = \langle \delta\Psi(\vec{r}) \delta\Psi(\vec{0}) \rangle. \quad (1.15)$$

Perceba então que  $G_c(\vec{r})$  mede a correlação das flutuações  $\delta\Psi$  dos spins em relação ao seu valor médio. Fora da região crítica, sendo  $r = |\vec{r}|$ , temos, de acordo com dados experimentais que

$$G_c(\vec{r}) \sim \frac{\exp(-r/\xi)}{r^{d-2+\eta}}, \quad (1.16)$$

com

$$\xi = \begin{cases} F_+ |t|^{-\nu}, & (t > 0) \\ F_- |t|^{-\nu}, & (t < 0) \end{cases}, \quad (1.17)$$

definindo o expoente crítico  $\nu$ . A grandeza  $\xi$  é chamada de comprimento de correlação, e fornece a distância mínima a partir da qual se manifestam as propriedades macroscópicas, ou, dito de outra forma, a distância a partir da qual as flutuações do parâmetro de ordem em relação ao seu valor de equilíbrio estão descorrelacionadas. Para a região crítica

$$G_c(\vec{r}) = \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad (1.18)$$

em que  $\eta$  é o expoente crítico associado. Observe que na temperatura crítica  $\xi = \infty$ , de modo que a equação (1.16) se reduz à equação (1.18).

Vale ressaltar que estas relações, através das quais definimos os expoentes críticos, não valem apenas para ferromagnetos. O fato de que experimentalmente se observa o mesmo comportamento crítico para diversos sistemas extremamente diferentes, sugere que

tal comportamento deve depender pouco dos detalhes das interações microscópicas. Existem alguns poucos parâmetros, dos quais dependem os expoentes críticos [22]: a dimensionalidade espacial ‘ $d$ ’ do sistema, o número de componentes ‘ $n$ ’ do parâmetro de ordem, que possui relação com a simetria do sistema; e por último, o alcance das forças microscópicas de interação.

Os expoentes críticos também podem ser definidos, naturalmente, a partir da teoria de escala. A hipótese de escala consiste em supor a parte singular da energia livre por spin, como sendo uma função homogênea generalizada de  $H$  e  $t$ ,

$$g_s(t, H) = \lambda g_s(\lambda^a t, \lambda^b H), \quad (1.19)$$

sendo  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$  a temperatura reduzida,  $\lambda$  um parâmetro qualquer e  $a$  e  $b$  dois expoentes bem definidos. A teoria de escala também leva a algumas relações entre os expoentes críticos [1]:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (\text{lei de escala de Rushbrook}), \quad (1.20)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (\text{lei de escala de Windom}), \quad (1.21)$$

Fazendo uso do teorema de flutuação-dissipação [23, 24], podem-se obter mais duas relações:

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (\text{lei de escala de Fischer}), \quad (1.22)$$

$$2 - \alpha = d\nu \quad (\text{relação de hiperescala}). \quad (1.23)$$

Observe que a relação de hiperescala é a única em que a dimensionalidade do sistema aparece explicitamente. Mais adiante, obteremos esta relação via teoria do grupo de renormalização.

### 1.3 TRANSFORMAÇÃO DE RENORMALIZAÇÃO

A transformação de renormalização [25] é um dos métodos de resolução de modelos de spins, o qual fornece uma justificativa para a hipótese de escala, permitindo o cálculo dos expoentes críticos de uma forma bastante natural. Consiste em uma transformação que altera a escala do sistema, promovendo uma redução no número de graus de liberdade. Tal transformação baseia-se na idéia de que, na vizinhança da criticalidade, o comprimento de correlação  $\xi$  é muito grande, quando comparado com a distância entre os sítios da rede; sendo possível um reescalonamento no qual as propriedades termodinâmicas permaneçam invariantes. Na criticalidade, por sua vez, o comprimento de correlação é infinito, indicando que devemos atingir um ponto fixo da transformação.

#### 1.3.1 ESQUEMA GERAL

O esquema a seguir tem um caráter didático, sendo baseado na referência [25].

Considere um modelo inicial, descrito por um hamiltoniano reduzido  $\bar{\mathcal{H}} = \beta\mathcal{H}$ . Após a transformação de renormalização teremos um novo hamiltoniano reduzido:

$$\vec{\mathcal{H}}' \equiv \mathbf{R}\bar{\mathcal{H}}, \quad (1.24)$$

onde  $\mathbf{R}$  é o operador grupo de renormalização, que diminui o número de graus de liberdade do sistema mudando a escala dos comprimentos por um fator de escala  $b$ , tal que

$$N' = b^{-d}N. \quad (1.25)$$

Esta redução do número de graus de liberdade pode ser obtida por um processo de dizimação

de spins. Portanto a magnitude dos spins também pode ser alterada por um fator  $c$ :

$$\vec{S}'_{r'} = c^{-1} \vec{S}_r . \quad (1.26)$$

A transformação de renormalização deve preservar a função de partição, visto que a função de partição contém toda a informação termodinâmica do sistema. Então

$$Z_{N'}(\bar{\mathcal{H}}') = Z_N(\bar{\mathcal{H}}) . \quad (1.27)$$

A energia livre total também deve permanecer a mesma, já que é obtida através do cálculo da função de partição; entretanto a energia livre por spin deve aumentar (o número de graus de liberdade do sistema diminui). Logo

$$f(\bar{\mathcal{H}}') = b^d f(\bar{\mathcal{H}}) . \quad (1.28)$$

Podemos escrever o hamiltoniano reduzido do sistema como

$$\bar{\mathcal{H}} = \sum_{\alpha} \vec{\mu} \cdot \vec{f}(\vec{s}) , \quad (1.29)$$

em que  $\vec{\mu}$  pode ser considerado um vetor que caracteriza a posição do sistema em um espaço de parâmetros, estando associado aos valores dos termos de interação. Já  $\vec{f}$  está associado às variáveis de spins.

Aplica-se a transformação de renormalização  $\mathbf{R}$  ao vetor  $\vec{\mu}$ :

$$\vec{\mu}' = \mathbf{R} \vec{\mu} . \quad (1.30)$$

Na criticalidade atingiremos um ponto fixo, pois nela temos a invariância do comportamento físico do sistema, de acordo com observações experimentais:

$$\vec{\mu}' = \vec{\mu} = \vec{\mu}^* . \quad (1.31)$$

Um ponto próximo do ponto fixo  $\vec{\mu}^*$  pode ser escrito como

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu}. \quad (1.32)$$

No sistema renormalizado,

$$\vec{\mu}' = \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu}'. \quad (1.33)$$

Podemos relacionar os incrementos, em torno dos pontos fixos, dos sistemas original e renormalizado através de uma expansão em série de Taylor,

$$\delta\vec{\mu}' = J(\vec{\mu}^*) \delta\vec{\mu}. \quad (1.34)$$

Os autovalores  $\lambda_i$  da matriz  $J$  indicam a estabilidade do ponto fixo. Os autovetores correspondentes serão denotados por  $\vec{v}_i$ . Como a matriz  $J$  fornece a evolução do incremento  $\delta\vec{\mu}$ , seus autovalores devem ser funções de  $b$ :

$$\Lambda_i = \Lambda_i(b). \quad (1.35)$$

Pela propriedade associativa de semi-grupo das transformações de renormalização [23], podemos escrever os autovalores como

$$\Lambda_i(b) = b^{y_i}. \quad (1.36)$$

Veremos mais adiante, que os  $y_i$  estão associados aos expoentes críticos.

Para um hamiltoniano próximo ao ponto fixo, o incremento  $\delta\vec{\mu}$  pode ser expandido em termos dos autovetores de  $J$ :

$$\delta\vec{\mu} = \sum_i g_i \vec{v}_i. \quad (1.37)$$

Executando a renormalização:

$$\delta\vec{\mu}' = J(\vec{\mu}^*)\delta\vec{\mu} = \sum_i g'_i \vec{v}_i, \quad (1.38)$$

com  $g'_i = b^{y_i} g_i$ . Portanto

$$\vec{\mu}' = \vec{\mu}^* + \sum_i g'_i \vec{v}_i. \quad (1.39)$$

Dizemos que um campo escalar  $g_i$  é relevante se após iterações repetidas da transformação de renormalização, seu valor aumenta ao se afastar da região crítica. Caso contrário, ele é dito irrelevante.

Como as hamiltonianas  $\mathcal{H}$  e  $\mathcal{H}'$  correspondem aos campos  $\vec{\mu}$  e  $\vec{\mu}'$ , respectivamente no espaço dos parâmetros, podemos escrever a parte singular da energia livre por spin como

$$f_s(\vec{\mu}') = \frac{1}{b^d} f_s(\vec{\mu}). \quad (1.40)$$

Na criticalidade, podemos escrever  $\vec{\mu}$  e  $\vec{\mu}'$  em termos de  $g_i$  e  $g'_i$ :

$$f_s(g_1, g_2, g_3, \dots) \sim b^{-d} f_s(g'_1, g'_2, g'_3, \dots) \sim b^{-d} f_s(b^{y_1} g_1, b^{y_2} g_2, b^{y_3} g_3, \dots). \quad (1.41)$$

O objetivo final é construir uma relação entre a energia livre e os expoentes críticos para estabelecer uma conexão com a Termodinâmica. Visando ao estabelecimento de tal relação, necessitamos identificar os campos  $g_i$ . Fazendo  $g_1 = t$ ,  $g_2 = h$ , com  $h = \frac{\mathcal{H}}{KT}$  e assumindo que outros campos escalares são irrelevantes, temos

$$f_s(t, h, g_3, \dots) \sim b^{-d} f_s(b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3, \dots), \quad (1.42)$$

com  $g_i = 0$ , para  $i \geq 3$ .

Na vizinhança da criticalidade, o expoente crítico  $\alpha$  descreve como o calor específico em campo nulo varia com a temperatura,

$$C \sim \left( \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right) \Big|_{h=0} = f_{tt}(h=0) \sim t^{-\alpha} . \quad (1.43)$$

Se diferenciarmos duas vezes a equação (1.42) com relação à temperatura, temos

$$f_t(t, h) \sim b^{-d} b^{y_1} f_t(b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3, \dots) , \quad (1.44)$$

$$f_{tt}(t, h) \sim b^{-d+2y_1} f_{tt}(b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3, \dots) . \quad (1.45)$$

Fazendo  $h$  e  $g_i$  (para  $i \geq 3$ ) iguais a zero, ficaremos com

$$f_{tt}(t, 0) \sim b^{-d+2y_1} f_{tt}(b^{y_1} t, 0) . \quad (1.46)$$

Como  $b$  é arbitrário, podemos fazer  $b^{y_1} |t| = 1$  e, portanto,

$$b = |t|^{-1/y_1} . \quad (1.47)$$

Substituindo (1.47) na equação (1.46):

$$f_{tt}(t, 0) \sim |t|^{-\frac{1}{y_1}(-d+2y_1)} f_{tt}(\pm 1, 0) \sim |t|^{-2+d/y_1} f_{tt}(\pm 1, 0) . \quad (1.48)$$

Comparando a equação (1.48) com a equação (1.43), identificamos

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_1} . \quad (1.49)$$

Para a função de correlação, que depende do produto de dois spins, temos

$$G_c(\vec{r}, \vec{\mathcal{H}}) = c^{-2}(b) G_c(b^{-1}\vec{r}, \vec{\mathcal{H}}') . \quad (1.50)$$

em que  $c$  foi definido na equação (1.26). De forma análoga à energia livre, temos, próximo ao ponto fixo,

$$G_c(\vec{r}, t, h, g_3) \sim c^2(b) G_c(b^{-1}\vec{r}, b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3) . \quad (1.51)$$



Fazendo as variáveis irrelevantes iguais a zero, obtemos

$$G_c(\vec{r}, t) \sim c^2(b)G_c(b^{-1}\vec{r}, b^{y_1}t) . \quad (1.52)$$

Se fizermos  $b^{y_1} |t| = 1$ , ficamos com

$$G_c(\vec{r}, t) \sim c^2(|t|^{-1/y_1})G_c(|t|^{-1/y_1} \vec{r}, \pm 1) . \quad (1.53)$$

Devido às equações (1.16) e (1.17), podemos identificar  $\nu$  como sendo  $1/y_1$  na equação (1.49), e substituindo  $1/y_1$  na equação (1.49), temos

$$2 - \alpha = d\nu , \quad (1.54)$$

que é a relação de hiperescala.

Em suma, a transformação de renormalização, cuja idéia subjacente é a teoria de escala, consiste em uma ferramenta poderosa para analisar o comportamento de sistemas físicos na criticalidade. De forma análoga, pode-se obter as outras relações de escala [25].

### 1.3.2 A TRANSFORMAÇÃO DE MIGDAL-KADANOFF

A transformação de renormalização de Migdal-Kadanoff possui duas etapas: o deslocamento das ligações (ou “bond-moving”) e a dizimação dos spins, ilustrada na figura (1.1), para a rede quadrada.

Ela é exata em modelos unidimensionais, nos quais existe apenas a etapa de dizimação dos spins, porém trata-se de uma aproximação para sistemas de dimensões maiores, em que a forma do hamiltoniano é alterada. Numa rede de Bravais bidimensional, por exemplo, onde a transformação não é exata, temos de levar em conta interações entre primeiros, segundos vizinhos e quatro spins [22]. No caso das redes hierárquicas, que são nosso objeto

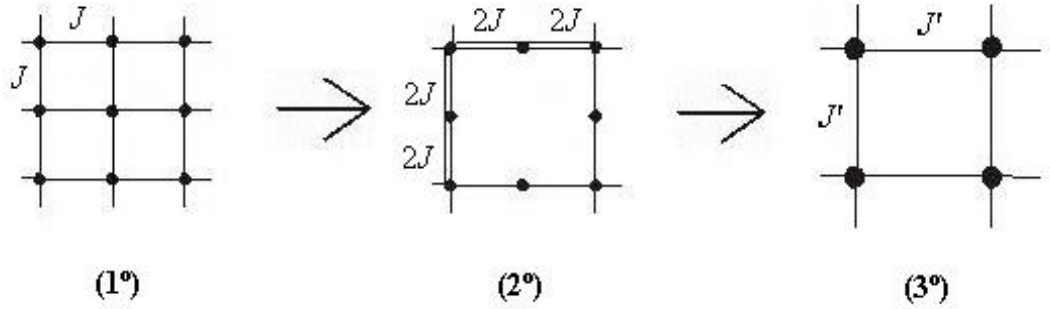


Figura 1.1: Etapas de deslocamento e dizimação dos spins na rede quadrada.

de estudo, a transformação é exata, uma vez que a forma do hamiltoniano é conservada. A título de ilustração, resolveremos o modelo de Ising unidimensional, em campo nulo e com um único tipo de interação. Neste caso, o hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} . \quad (1.55)$$

A função de partição é dada por

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(\beta J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}) . \quad (1.56)$$

Fazendo  $\beta J = K$ , temos

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \exp(K \sigma_i \sigma_{i+1}) . \quad (1.57)$$

Podemos reescrever este produtório como

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=2,4,\dots}^N \exp[K \sigma_i (\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})] . \quad (1.58)$$

Podemos, também, somar sobre os spins pares, realizando uma transformação no hamiltoniano, de modo a reduzir o número de graus de liberdade do sistema por um fator de escala

$b = 2$ :

$$Z' = \sum_{\sigma_1, \sigma_3} \prod_{i=2,4,\dots}^N \{\exp[K(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})] + \exp[-K(\sigma_{i-1} + \sigma_{i+1})]\}. \quad (1.59)$$

Se renumeramos os spins, fazendo  $\sigma_{i-1} = \sigma_i$ , temos

$$Z' = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \{\exp[K(\sigma_i + \sigma_{i+1})] + \exp[-K(\sigma_i + \sigma_{i+1})]\}. \quad (1.60)$$

Como a forma do hamiltoniano deve ser preservada, devemos ter

$$Z' = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \exp(K' \sigma_i \sigma_{i+1}) . \quad (1.61)$$

Para obtermos as relações de recorrência, devemos fazer  $\sigma_i = \sigma_{i+1}$  e  $\sigma_i = \sigma_{i-1}$ :

$$\begin{cases} \exp(K') = \exp(2K) + \exp(-2K) \\ \exp(-K') = 2 \end{cases} . \quad (1.62)$$

Subtraindo, e em seguida, somando as duas equações anteriores, temos

$$\begin{cases} 2 \cosh(K') = \exp(2K) + \exp(-2K) + 2 \\ 2 \sinh(K') = \exp(2K) + \exp(-2K) - 2. \end{cases} . \quad (1.63)$$

Dividindo  $\sinh(K')$  por  $\cosh(K')$ :

$$\tanh(K') = \frac{\cosh(2K) - 1}{\cosh(2K) + 1} = \tanh^2(K) . \quad (1.64)$$

Fazendo  $\tanh(K') = x'$  e  $\tanh(K) = x$ , obtemos

$$x' = x^2 . \quad (1.65)$$

Na criticalidade,  $x' = x = x^*$ , logo

$$x^*(x^* - 1) = 0 ; \quad (1.66)$$

conduzindo a  $x^* = 0$  ( $T \rightarrow \infty$ ) ou  $x^* = 1$  ( $T = 0$ ). A matriz jacobiana é dada por

$$J = \left( \frac{dx'}{dx} \Big|_{x=x^*} \right) = 2x^* , \quad (1.67)$$

com autovalores  $\lambda = 0$ , para  $x^* = 0$ , e  $\lambda = 2$ , para  $x^* = 1$ . Portanto o ponto de temperatura nula é instável e o ponto de temperatura infinita é estável. Em outras palavras, tal resultado indica a ocorrência de uma transição de fase em  $T = 0$ .

## 1.4 REDES HIERÁRQUICAS

Usualmente os modelos de spin são construídos em redes de Bravais – redes de dimensão euclidiana e invariantes por escala. Na década de oitenta, uma série de questionamentos foram levantados [4, 5, 6], vislumbrando a utilização de outras estruturas no estudo destes modelos:

Poderíamos construir os modelos de spin em outras redes invariantes por escala que não fossem caracterizadas por uma dimensão euclidiana?

Que exemplos apresentaríamos como redes invariantes por escala?

Qual seria a relação com os sistemas reais?

Haveria alguma vantagem neste tipo de análise?

A seguir, tentaremos responder estas questões exibindo conceitos pertinentes tais como os conceitos de grafos e de redes hierárquicas e, concomitantemente contextualizando historicamente o estudo apresentado.

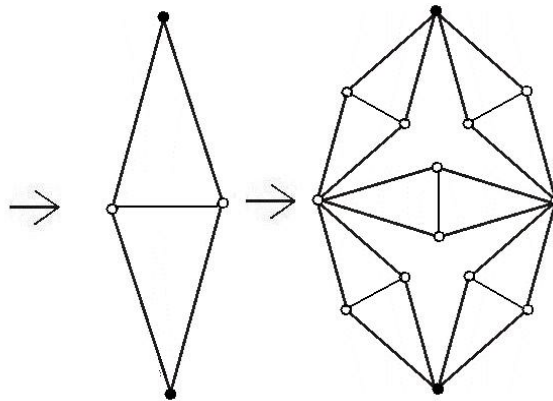


Figura 1.2: As três primeiras gerações da rede gerada pelo grafo ponte de Wheatstone.

### 1.4.1 GRAFOS

Rede é uma estrutura geométrica infinita construída a partir de um grafo. A título de exemplo considere o grafo denominado ponte de Wheatstone, ilustrado na figura (1.2). A construção de uma rede com base neste grafo é realizada partindo de uma ligação simples entre dois sítios. Tal ligação é substituída pelo grafo que possui cinco ligações. Cada uma destas é novamente substituída pelo grafo de Wheatstone. Se este processo for realizado infinitas vezes, teremos uma rede dita hierárquica, que possui dois sítios iniciais separados por uma infinidade dos grafos pontes de Wheatstone.

Como o processo de construção de uma rede é concebido a partir de uma estrutura básica denominada grafo, sobre a qual existe uma teoria bem estabelecida – a teoria dos grafos [26, 27, 28] – faremos então, uma pequena nota histórica, seguida de uma breve digressão a respeito dos elementos de tal teoria.

A teoria dos grafos começou com Euler, em 1736, ao resolver o problema das pontes de Königsberg (ver figura 1.3), que é semelhante a quebra-cabeças infantis, baseados

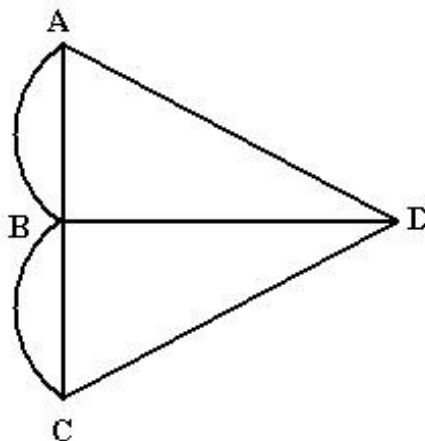


Figura 1.3: Ponte de Königsberg.

em um desenho cujas linhas devem ser percorridas sem que se tire o lápis do papel e sem passar duas vezes sobre a mesma linha. Neste problema, os pontos correspondiam às margens de um rio, entremeado por ilhas, e as linhas às pontes. Euler demonstrou que era impossível atravessar as sete pontes numa caminhada contínua sem cruzar o percurso num lugar qualquer. Em seguida, Kirchoff, no ano de 1847, iniciou o estudo de um grafo, chamado de árvore, relacionando-o com problemas de circuitos elétricos. Logo depois, em 1857, Cayley relacionou tal teoria com o estudo de isômeros dos hidrocarbonetos alifáticos, em Química Orgânica. Hamilton estudou problemas de caminhos em 1859, e Jordan, em 1869, formalizava a teoria das árvores. Em 1962, os grafos foram aplicados em problemas de pesquisa operacional com Ford e Fulkerson desenvolvendo a teoria dos fluxos em redes.

Do ponto de vista geométrico, um grafo pode ser descrito em um espaço euclidiano de  $n$  dimensões, como sendo um conjunto  $V$  de pontos e um conjunto  $A$  de curvas contínuas que não se interceptam, satisfazendo as condições a seguir:

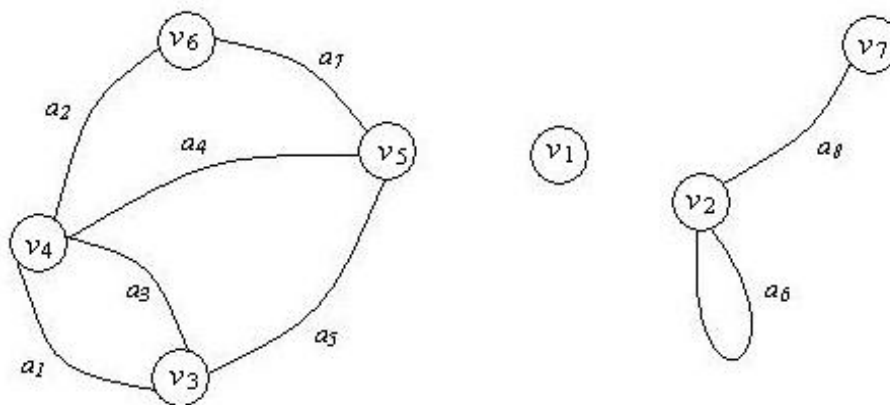


Figura 1.4: Um exemplo de grafo.

1. Toda curva fechada de  $A$  contém exatamente um ponto de  $V$ .
2. Toda curva aberta de  $A$  contém exatamente dois pontos de  $V$ .

O exemplo na figura (1.4) satisfaz tal definição para um espaço euclidiano de duas dimensões. Podemos também definir, algebricamente, um grafo abstrato. Utilizaremos o símbolo  $\&$  para denotar o produto não ordenado de dois conjuntos  $S_1$  e  $S_2$ . Para todo elemento  $s_1 \in S_1$  e  $s_2 \in S_2$ ,  $S_1 \& S_2$  conterá  $(s_1, s_2)$  e também  $(s_2, s_1)$ . Podemos ainda, de forma mais abreviada, escrever  $\{s_1, s_2\}$ .

Definimos, pois, um grafo abstrato, como sendo um conjunto não vazio  $V$ , um conjunto possivelmente vazio  $A$ , disjunto de  $V$ , e um mapeamento  $\phi$  de  $A$  em  $V \& V$ . Em

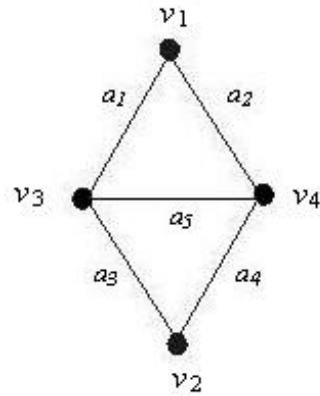


Figura 1.5: Grafo ponte de Wheatstone.

relação ao exemplo dado anteriormente:

$$V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7\}$$

$$A = \{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7, a_8\}$$

$$\phi : A \rightarrow V \& V,$$

$$a_1 \mapsto \{v_3, v_4\}$$

$$a_2 \mapsto \{v_4, v_6\}$$

$$a_3 \mapsto \{v_3, v_4\}$$

$$a_4 \mapsto \{v_4, v_5\}$$

$$a_5 \mapsto \{v_3, v_5\}$$

$$a_6 \mapsto \{v_2, v_2\}$$

$$a_7 \mapsto \{v_5, v_6\}$$

$$a_8 \mapsto \{v_2, v_7\}$$

(1.68)

No grafo que gera a ponte de Wheatstone (figura 1.5), por exemplo:



$$\begin{aligned}
V &= \{v_1, v_2, v_3, v_4\} \\
A &= \{a_1, a_2, a_3, a_4, a_5\} \\
\phi : A &\rightarrow V \& V \\
a_1 &\mapsto \{v_1, v_3\} \\
a_2 &\mapsto \{v_1, v_4\} \\
a_3 &\mapsto \{v_2, v_3\} \\
a_4 &\mapsto \{v_2, v_4\} \\
a_5 &\mapsto \{v_3, v_4\}
\end{aligned} \tag{1.69}$$

Outro conceito importante para o estudo dos grafos é noção de conexidade, que corresponde ao “estado de ligação” dos vértices de um grafo, ou seja, a possibilidade de se transitar de um vértice a outro. Temos, portanto:

1) grafos não conexos (ou desconexos): são grafos no qual existem minimamente um par de vértices que não está conectado por nenhuma cadeia. Entende-se por cadeia uma seqüência de curvas conectadas ordenadamente.

2) grafos conexos (ou simplesmente conexos, ou s-conexos): são grafos nos quais todo par de vértices é ligado por ao menos uma cadeia.

Enquanto a figura (1.4) é um exemplo de grafo desconexo, temos na figura (1.5) um grafo conexo.

Conhecida a conceituação básica dos grafos a partir dos quais as redes são construídas, retornemos às redes hierárquicas. Tais redes possuem uma série de propriedades topológicas, fundamentais ao estudo de modelos de spins em tais redes. Seguem, então, algumas definições:

1) Número de agregação, denotado por  $G$ , corresponde ao número das novas ligações geradas por cada ligação na geração anterior.

2) Dimensão intrínseca (ou fractal): é definida como

$$d_H = \frac{\ln G}{\ln b}, \quad (1.70)$$

onde  $b$  é o fator de escala.

3) Ramificação ( $Q$ ) é o número mínimo de ligações que se devem ‘cortar’ para separar-se os vértices de cada grafo.

4) Conectividade é a grandeza definida como

$$C = \frac{\ln Q}{\ln b}. \quad (1.71)$$

Por exemplo, na figura (1.6), temos uma rede hierárquica com  $G = 12$ ,  $b = 3$ ,  $d_H = \frac{\ln 12}{\ln 3} = 1 + \frac{\ln 4}{\ln 3}$ ,  $Q = 4$  e  $C = \frac{\ln 4}{\ln 3}$ .

## 1.5 MODELOS DE SPINS EM REDES HIERÁRQUICAS

Podemos considerar spins localizados nos sítios de uma determinada rede hierárquica; logo teremos modelos de spins em redes hierárquicas. No final dos anos setenta [25], observou-se que as técnicas do grupo de renormalização são exatas em muitas destas redes, ao contrário do que acontece com as redes de Bravais com dimensão maior do que 1, onde o resultado é aproximado. Poderíamos nos perguntar por que motivo as transformações de renormalização são exatas nestas redes.

Diversos fatores suscitam o estudo de modelos em tais redes. Alguns destes foram apresentados por Griffiths e Kaufman [6] no ano de 1982, sendo que eles exibem uma prova

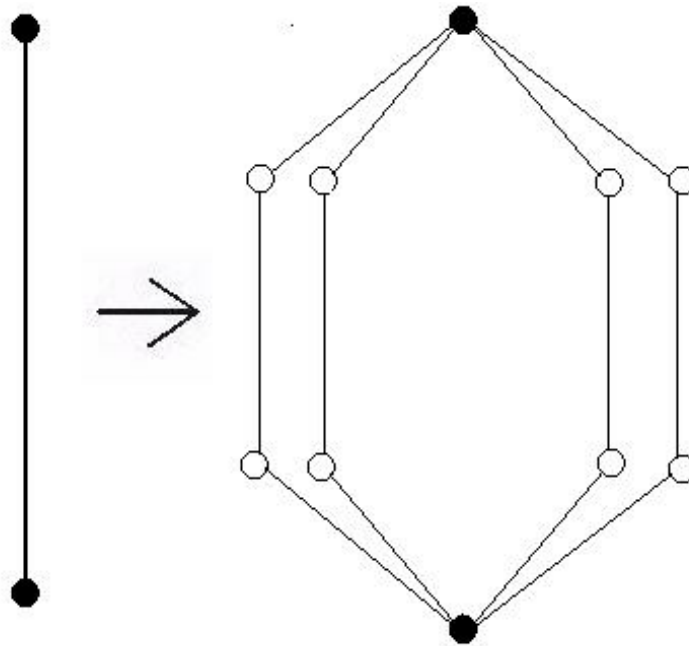


Figura 1.6: As duas primeiras gerações de uma rede que possui 4 conexões, cada uma com 3 ligações.

matemática rigorosa de que a energia livre possui um limite termodinâmico bem definido para uma grande classe de modelos de spins em redes hierárquicas, ou seja, eles mostram a existência e a finitude do limite termodinâmico da energia livre por unidade de spin ( $f$ ). Eles apresentam tal resultado em dois teoremas: no primeiro deles, Griffiths e Kaufman afirmam que se determinadas condições forem satisfeitas, então  $f = \lim_{n \rightarrow \infty} f_n$  existe e é finito. Já no segundo, eles mostram que:

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} b^{-n} \Psi_n ,$$

em que  $b$  é o fator de escala e  $\Psi_n$  é uma constante.

A técnica do grupo de renormalização, como já foi mencionado anteriormente, é um processo de renormalização no espaço real que pode ser dividido em duas etapas (ver

figura 1.7):

- 1) o deslocamento das ligações (ou “bond-moving”);
- 2) a dizimação dos spins.

Nas redes hierárquicas, o cálculo das relações de recorrência é exato, não havendo nenhuma perda de informação como pode se depreender da figura 1.7. O sistema renormalizado deve manter a forma do hamiltoniano e exibir a mesma função de partição de modo a garantir a preservação das funções termodinâmicas. O mesmo não pode ser dito das redes de Bravais bidimensionais (ver figura 1.1).

Gefen, Mandelbrot e Amon [4], em 1980, aplicaram técnicas do grupo de renormalização no modelo de Ising em diversas redes fractais. Vale lembrar que uma propriedade observada nestas redes fractais é a auto-similaridade (ou invariância de escala). Eles observaram que, ao contrário do que acontece com redes hipercúbicas  $d$ -dimensionais, onde as propriedades críticas dependem somente da dimensionalidade  $d$ , nas redes fractais, as propriedades críticas podem depender, além da dimensionalidade, de uma série de outros fatores topológicos tais como ramificação, conectividade, lacunaridade. Analisaram a curva de Koch, o triângulo e o tapete de Sierpinski, e em todos eles a transformação de renormalização é exata. Em 1984, Andrade e Salinas [29] estudaram, pelo método da matriz de transferência, o modelo de Ising na curva de Koch com  $d = \frac{\ln 4}{\ln 3}$ . Eles obtiveram resultados analíticos exatos para as funções termodinâmicas.

Os processos de deslocamento das ligações e de dizimação dos spins ocorrem no caminho inverso da construção da rede, como por exemplo, na rede hierárquica do diamante (ver figura 1.8). Faremos agora uma aplicação da técnica do grupo de renormalização de

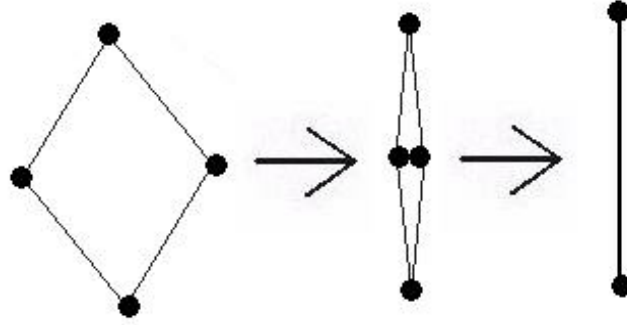


Figura 1.7: Processo de deslocamento e dizimação dos spins na rede hierárquica do diamante.

Migdal-Kadanoff no modelo de Ising em campo nulo na rede hierárquica do diamante (RHD) a fim de evidenciar o seu caráter exato. O hamiltoniano de Ising em campo nulo e com um único tipo de interação é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_j .$$

A função de partição é

$$Z = \sum_{\{i,j\}} \exp\left(K \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j\right) , \quad (1.72)$$

com  $\beta J = K$ . Podemos reescrever-la como

$$Z = \sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} \prod_{i,j} \exp(K \sigma_i \sigma_j) . \quad (1.73)$$

Realizando as somas sobre  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ :

$$Z = \sum_{\substack{\{\sigma_i, \sigma_j\} \\ i,j \neq 1,2}} \prod_{i,j} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} [\exp(K \sigma_i \sigma_1 + K \sigma_1 \sigma_j) \exp(K \sigma_i \sigma_2 + K \sigma_2 \sigma_j)] = 1 \quad (1.74)$$

$$= \sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} \prod_{i,j} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \{\exp[K \sigma_i (\sigma_1 + \sigma_2) + K \sigma_j (\sigma_1 + \sigma_2)]\} = \quad (1.75)$$

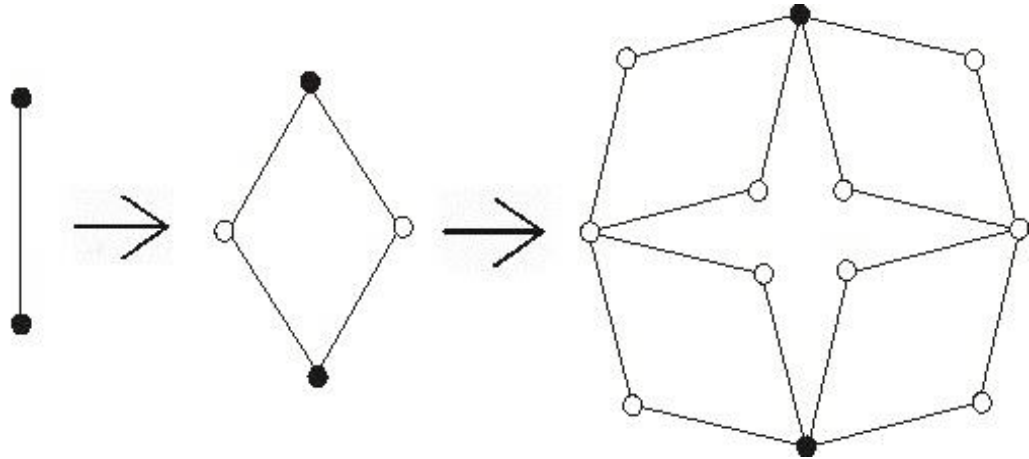


Figura 1.8: As três primeiras gerações da rede hierárquica do diamante.

$$= \sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} \prod_{i,j} \left[ \sum_{\sigma_1} \exp(K\sigma_i\sigma_1 + K\sigma_1\sigma_j) \right]^2 = \quad (1.76)$$

$$= \sum_{\{\sigma_i, \sigma_j\}} \prod_{i,j} [\exp(K\sigma_i + K\sigma_j) + \exp(-K\sigma_i - K\sigma_j)]^2 . \quad (1.77)$$

De forma análoga ao desenvolvimento da seção 1.3.2 (modelo de Ising na cadeia):

1) Com  $\sigma_i = \sigma_j$ , obtemos

$$\exp(K') = [\exp(2K) + \exp(-2K)]^2 ; \quad (1.78)$$

2) Com  $\sigma_i = -\sigma_j$ , obtemos

$$\exp(-K') = 2^2 . \quad (1.79)$$

Subtraindo e, em seguida, somando as equações (1.78) e (1.79), temos

$$\begin{cases} \sinh(K'/2) = \cosh(2K) - 1 \\ \cosh(K'/2) = \cosh(2K) + 1 \end{cases} . \quad (1.80)$$

Dividindo estas duas equações, obtemos

$$\tanh(K'/2) = \frac{\cosh(2K) - 1}{\cosh(2K) + 1} = \tanh^2(K) . \quad (1.81)$$

Logo

$$\tanh K' = \tanh\{2 \tanh^{-1}[\tanh^2(K)]\} . \quad (1.82)$$

Utilizando a relação trigonométrica  $\tanh 2\theta = 2 \tanh \theta / (1 + \tanh^2 \theta)$ , temos

$$\tanh(K') = \frac{2 \tanh^2(K)}{1 + \tanh^4(K)} . \quad (1.83)$$

Fazendo  $\tanh(K') = x'$  e  $\tanh(K) = x$ , ficamos com

$$x' = \frac{2x^2}{1 + x^4} . \quad (1.84)$$

O autovalor  $\lambda$  é dado por:

$$\lambda = \frac{dx'}{dx} = \frac{4x(1 - 2x^4)}{(1 + x^4)^2} . \quad (1.85)$$

Temos, então os seguintes pontos fixos:

$$x^* = 0 \text{ ( para } T \rightarrow \infty \text{ e } \lambda = 0)$$

$$x^* = 1 \text{ (para } T = 0 \text{ e } \lambda = 0)$$

$$x^* = 0.543689 \text{ ( para } T = T_c \text{ e } \lambda > 1)$$

Como  $\lambda > 1$ , o ponto fixo não trivial é instável. Podemos calcular o expoente crítico  $\nu$  através da relação:

$$\nu = \frac{1}{y_1} . \quad (1.86)$$

Pela equação (1.36)  $\lambda = b^{y_1}$ , logo

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda} = \frac{\ln 2}{\ln 1.6787} = 1.3381 .$$

Para o expoente crítico  $\alpha$ , utilizamos a equação (1.23), obtendo  $\alpha = -0.6762$ .

## 1.6 INTERAÇÕES APERIÓDICAS

A grande motivação para a introdução da desordem em modelos de spins advém da presença de impurezas em materiais magnéticos. McCoy e Wu [12], em 1968, introduziram aleatoriedade nas constantes de acoplamento associadas às interações verticais do modelo de Ising bidimensional, concluindo que a desordem acarreta a não divergência do calor específico.

Um critério heurístico, para determinar em que condições o comportamento termodinâmico do modelo ferromagnético de Ising é alterado pela presença da desordem, foi proposto em 1974, por Harris [13]. De acordo com Harris, como o comprimento de correlação é dado por  $\xi \sim |t|^{-\nu}$ , temos que a variação relativa sobre a temperatura reduzida  $t$ , devido à desordem introduzida nas interações de troca, é dada por

$$\frac{\delta t}{t} \sim |t|^{d\nu/2-1} , \quad (1.87)$$

em que  $d$  é a dimensionalidade do sistema. Se fizermos  $\frac{d\nu}{2} - 1 \equiv \phi$ , ficaremos com

$$\frac{\delta t}{t} \sim |t|^\phi . \quad (1.88)$$

Segundo o critério de Harris, a desordem é relevante se  $\phi > 0$ , pois neste caso, tal desordem deve causar uma variação significativa sobre a temperatura reduzida do sistema com relação ao modelo sem desordem. Se fizermos uso da relação (1.23), em que  $\alpha$  é o expoente crítico térmico do sistema sem desordem, temos:

$$\phi = \frac{\alpha}{2} . \quad (1.89)$$

Por conseguinte, a desordem é relevante se  $\alpha > 0$ . Em vez de considerar um modelo



desordenado, poderíamos conceber as interações entre os spins aperiódicas e determinar sob que condições as flutuações geométricas seriam relevantes.

A construção de estruturas com interações aperiódicas possui uma forte relação com o estudo dos quase-cristais. Estes, por sua vez, estão relacionados à observação, na década de 80, de certos materiais que não possuem simetria translacional, propriedade característica da periodicidade nos cristais, entretanto apresentam ordem orientacional de longo alcance e auto-similaridade quando submetidos à difração dos raios X. Um material com estas características é, por exemplo, a liga metálica AlMn.

Na tentativa de uma compreensão maior das estruturas que apresentam tais propriedades, foi proposto um modelo chamado de quase-cristal, que apresenta ordem de longo alcance e auto-similaridade presente nos cristais, porém com ordem translacional não mais periódica e sim, quase-periódica. Um exemplo bastante conhecido de rede quase-cristalina bidimensional são os azulejos de Penrose [18], estrutura formada por dois tipos de azulejo, que não possuem simetria translacional, contudo presença de ordem de longo alcance decagonal.

Em 1993, Luck [14] propõe uma generalização do critério de Harris para qualquer tipo de aperiodicidade em sistemas de spins, associando às estruturas aperiódicas um expoente denominado expoente de flutuação. Seguindo um raciocínio, de certa forma, análogo ao de Harris, Luck propõe que

$$\frac{\delta t}{t} \sim |t|^{d\nu(1-\omega)-1}, \quad (1.90)$$

onde  $\omega$  é o expoente de flutuação da rede aperiódica, tornando possível definir um expoente

de *cross-over*  $\phi$ :

$$\phi \equiv 1 + d\nu(\omega - 1) . \quad (1.91)$$

Substituindo (1.91) em (1.90), obtemos

$$\frac{\delta t}{t} \sim |t|^\phi . \quad (1.92)$$

Logo, se  $\phi > 0$ , as flutuações são relevantes; se  $\phi < 0$ , são irrelevantes; e para  $\phi = 0$ , temos o caso marginal. Reescrevendo este critério em termos de um valor limiar,  $\omega_c$ , para o expoente  $\omega$ :

$$\omega_c \equiv 1 - (d\nu)^{-1} . \quad (1.93)$$

Neste caso, as flutuações são relevantes se  $\omega > \omega_c$ ; irrelevantes, se  $\omega < \omega_c$  e, para  $\omega = \omega_c$ , recaímos no caso marginal, sobre o qual nada podemos afirmar. Se fizermos o expoente de flutuação  $\omega = \frac{1}{2}$ , recaímos no critério de Harris. Utilizando a relação de hiperescala, temos

$$\omega_c = \frac{1 - \alpha}{2 - \alpha} , \quad (1.94)$$

onde  $\alpha$  é o expoente crítico associado ao calor específico numa rede sem flutuações geométricas.

Um critério exato e compatível com o de Luck foi proposto em 1998, por Pinho, Haddad e Salinas [16], baseado unicamente em análise de estabilidade. No capítulo 4, um estudo mais detalhado sobre este critério será realizado.

Uma forma de introduzir estruturas aperiódicas nos modelos de spins é através de sequências de substituição. Na seção seguinte, tal tema é explorado de uma maneira bastante intuitiva, tomando como exemplo a sequência de Fibonacci.

## 1.7 SEQÜÊNCIAS DE SUBSTITUIÇÃO

Um dos casos mais estudados de redes quase periódicas é a cadeia de Fibonacci, que pode ser obtida a partir da seqüência de Fibonacci, definida a partir da regra de recorrência

$$f_k = f_{k-1} + f_{k-2} , \quad (1.95)$$

com  $f_0 = f_1 = 1$ , formando o conjunto  $F = \{0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, \dots\}$

Esta seqüência foi gerada tendo como motivação o questionamento do número de pares de coelhos que existirão após  $k$  gerações, supondo que os coelhos não morrem e cada par de coelhos adultos gera um par de coelhos jovens. Se representarmos cada par de coelhos adultos pela letra  $a$ , e cada par de coelhos jovens pela letra  $b$ , temos

$$b \rightarrow a \rightarrow ab \rightarrow aba \rightarrow abaab \rightarrow abaababa \rightarrow \dots . \quad (1.96)$$

As letras  $a$  e  $b$  também poderiam representar tipos de átomos em uma liga binária ou interações entre spins.

Podemos observar que o número de letras  $a$  a cada geração corresponde aos inteiros da seqüência de Fibonacci, e que se denominarmos  $N_a^{(k)}$ , o número total de letras  $a$  na  $k$ -ésima geração, e de  $N_b^{(k)}$ , o número de letras  $b$  na  $k$ -ésima geração, obtemos

$$\begin{cases} N_a^{(k)} = N_a^{(k-1)} + N_b^{(k-1)} \\ N_b^{(k)} = N_a^{(k-1)} \end{cases} . \quad (1.97)$$

Podemos reescrever (1.97) como

$$\begin{pmatrix} N_a^{(k)} \\ N_b^{(k)} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} N_a^{(k-1)} \\ N_b^{(k-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_a^{(k-1)} \\ N_b^{(k-1)} \end{pmatrix} , \quad (1.98)$$

em que  $\mathcal{M}$  é a matriz (dita de substituição) de Fibonacci. Genericamente, para regras binárias (duas letras), a matriz de substituição é dada por

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}, \quad (1.99)$$

onde  $m_{11}$  representa o número de letras  $a$  em  $\rho(a)$ ,  $m_{12}$ , o número de  $a$ 's em  $\rho(b)$ ,  $m_{21}$ , o número de  $b$ 's em  $\rho(a)$  e  $m_{22}$ , o número de  $b$ 's em  $\rho(b)$ .

Uma maneira de construir a cadeia de Fibonacci é através de sucessivas iterações de uma regra de substituição definida como

$$\rho : \begin{cases} a \mapsto ab \\ b \mapsto a \end{cases}. \quad (1.100)$$

como pode ser visto em (1.96). O maior e menor autovalores da matriz de substituição  $\mathcal{M}$  de Fibonacci são, respectivamente,  $\lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} = \tau$  e  $\lambda_2 = \frac{1-\sqrt{5}}{2} = -1/\tau$ , onde  $\tau$  é a razão áurea. A determinação da relevância da aperiodicidade em um sistema definido por um modelo de spins numa rede gerada por uma regra binária qualquer de substituição está diretamente relacionada com os autovalores da matriz de substituição; já que neste caso, o expoente de flutuação é definido como

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1}, \quad (1.101)$$

em que  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são, respectivamente, o maior e menor autovalores da matriz  $\mathcal{M}$  correspondente. Além disso, quando os autovalores da matriz de substituição são irracionais, a cadeia gerada a partir da regra de substituição é quase-cristalina, como é o caso, por exemplo, da cadeia de Fibonacci. Na seção 2.4 do capítulo 2, continuaremos esta análise.

Com a descoberta experimental de estruturas atômicas quase-cristalinas, diversas aplicações em Física foram encontradas para a seqüência de Fibonacci. Uma delas é o estudo do operador de Schrödinger discreto e unidimensional cujo potencial é obtido através da mesma [11]. O objetivo desta investigação é a determinação das propriedades físicas dos quase-cristais.

Muitas outras seqüências geradas por regras de substituição vêm sendo estudadas pelos matemáticos tanto sob a perspectiva da Análise Combinatória [9], como da Teoria de Sistemas Dinâmicos [10, 30, 31].

Uma regra que gera uma seqüência bastante conhecida, chamada de seqüência de duplo-período, é dada por:

$$\rho : \begin{cases} a \mapsto ab \\ b \mapsto aa \end{cases} . \quad (1.102)$$

Outra muito conhecida é a seqüência de Thue-Morse cuja regra de substituição é dada por:

$$\rho : \begin{cases} a \mapsto ab \\ b \mapsto ba \end{cases} . \quad (1.103)$$

Esta substituição foi amplamente estudada como regra definidora da dinâmica de um sistema quântico de dois níveis [30]. No caso dos modelos de spins, as constantes de troca serão determinadas pelas regras de substituição; por exemplo, o modelo de Ising na cadeia de Fibonacci é tal que os valores de  $J_a$  e  $J_b$  obedecem à ordem  $(J_a J_b J_a J_a J_b \dots)$  dada por (1.96). No caso do modelo de Ising na rede hierárquica do diamante, as interações de cada conexão devem obedecer a uma regra em que o número de letras de  $\rho(a)$  deve ser igual ao número de letras de  $\rho(b)$ , como por exemplo, a regra de duplo período (ver figura 1.9) ou a de Thue Morse.

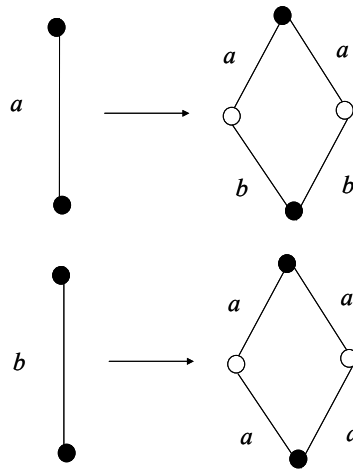


Figura 1.9: As duas primeiras gerações da rede hierárquica do diamante, cujas ligações de cada conexão obedecem à regra de substituição de duplo-período.

Com isso, podemos perceber a grande relevância do estudo das seqüências de substituição em Física. Mais especificamente, no nosso trabalho – modelos de spins – é de fundamental importância determinar se uma dada regra gera uma seqüência periódica, quase-periódica ou aperiódica, visto que, este caráter – periódico, quase periódico ou aperiódico – exercerá influência sobre as propriedades termodinâmicas do sistema. No próximo capítulo, estas questões serão tratadas de forma rigorosa, com uma série de definições e teoremas.

## Capítulo 2

# APERIODICIDADE DAS SEQÜÊNCIAS DE SUBSTITUIÇÃO

Neste capítulo, faremos um estudo rigoroso das seqüências de substituição, apresentando conceitos básicos e resultados já existentes, a partir dos quais serão construídos os novos resultados. Diversas questões relacionadas com tais seqüências vêm sendo estudadas sob o viés da teoria de sistemas dinâmicos [10] e da análise combinatória [9] como dito anteriormente; entretanto no nosso trabalho, o estudo é realizado segundo uma abordagem mais próxima da teoria dos autômatos finitos [32].

Apesar de utilizar conceitos elementares, a abordagem a ser apresentada produziu resultados de bastante interesse na Matemática e na Física, mediante uma observação por-menorizada das propriedades que estas seqüências possuem. Nas duas primeiras seções,

conceitos básicos e resultados preliminares serão apresentados. Na terceira seção, apresentaremos os novos resultados acerca da periodicidade das seqüências de substituição. Finalmente, na última seção, relacionaremos este estudo com os modelos de spins.

## 2.1 CONCEITOS BÁSICOS

Seguem então, uma série de definições e um teorema de fundamental importância quanto à quase periodicidade das seqüências de substituição.

**Definição 1** *Um conjunto  $\mathcal{A}$ , finito, cujos elementos,  $x_i$ , são letras, é denominado alfabeto.*

**Definição 2** *Sejam as letras  $x_1, \dots, x_k \in \mathcal{A}$  não necessariamente distintas, denomina-se bloco ou palavra finita de comprimento  $k$ , à justaposição destas letras  $x_1x_2\dots x_k$ .*

Denomina-se palavra infinita (à direita), à justaposição  $a_1a_2\dots a_k\dots$ , em que os  $a$ 's são elementos de  $\mathcal{A}$ . O conjunto formado por todas as palavras finitas sobre o alfabeto  $\mathcal{A}$ , e o formado por todas as palavras infinitas à direita de  $\mathcal{A}$  são denotados, respectivamente, por  $\mathcal{A}^*$  e  $\mathcal{A}^{\mathbb{N}}$ . O comprimento de uma palavra finita,  $W$ , que corresponde ao número de letras que a compõe, será notado por  $|W|$ . Por exemplo, considere  $W_1 = aab$  e  $W_2 = baba$ , então seus respectivos comprimentos valem  $|W_1| = 3$  e  $|W_2| = 4$ . Notaremos também por  $|W|_a$  e  $|W|_b$ , respectivamente, o número de  $a$ 's e  $b$ 's em  $W$ , ou seja,  $|W_1|_a = 2$  e  $|W_1|_b = 1$ .

**Definição 3** *Uma regra de substituição  $\rho$  é uma aplicação  $\rho$  de  $\mathcal{A}$  em  $\mathcal{A}^*$ , ou seja, uma aplicação que associa cada letra  $x_i$  de  $\mathcal{A}$  a uma palavra finita,  $\rho(x_i)$ :*

$$\begin{aligned} \rho : \mathcal{A} &\rightarrow \mathcal{A}^* \\ x_i &\mapsto \rho(x_i) \end{aligned} \quad . \quad (2.1)$$



Podemos estender qualquer substituição  $\rho$  a aplicações  $\rho : \mathcal{A}^* \rightarrow \mathcal{A}^*$  e  $\rho^{\mathbb{N}} : \mathcal{A}^{\mathbb{N}} \rightarrow \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$ , através da operação de concatenação, isto é, da junção de duas palavras finitas de maneira a formar uma só palavra:

$$\rho^*(x_1x_2\dots x_n) = \rho(x_1)\rho(x_2)\dots\rho(x_n), \text{ com } (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathcal{A}^*$$

$$\rho^{\mathbb{N}}(x_1x_2\dots) = \rho(x_1)\rho(x_2)\dots, \text{ com } (x_1x_2\dots) \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$$

Considere, por exemplo, a substituição de Thue-Morse, onde  $\mathcal{A} = \{a, b\}$ :

$$\begin{aligned} \rho : \mathcal{A} &\rightarrow \mathcal{A}^* \\ a &\mapsto ab \quad \cdot \\ b &\mapsto ba \end{aligned} \tag{2.2}$$

Se tomarmos a palavra finita  $ab$ , então  $\rho^*(ab) = \rho(a)\rho(b) = abba$ .

Para a substituição de Rudin Shapiro, onde  $\mathcal{A} = \{a, b, c, d\}$ :

$$\begin{aligned} \rho : \mathcal{A} &\rightarrow \mathcal{A}^* \\ a &\mapsto ac \\ b &\mapsto dc \quad \cdot \\ c &\mapsto ab \\ d &\mapsto db \end{aligned} \tag{2.3}$$

Analogamente, para a palavra  $abcd$ , temos:  $\rho^*(abcd) = \rho(a)\rho(b)\rho(c)\rho(d) = acdcabdb$ . Observe que  $(\mathcal{A}^*, \cdot)$  é um monóide, onde  $\cdot$  representa a justaposição das palavras, e portanto a notação de potência (por exemplo  $a^3 = aaa$ ) está bem definida.

**Definição 4** *Uma substituição  $\rho : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}^*$  é uniforme de módulo  $\ell$ , se, para qualquer  $x_i \in \mathcal{A}$ ,  $|\rho(x_i)| = \ell$ .*

**Definição 5** Uma substituição  $\rho : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}^*$  é binária se o alfabeto  $\mathcal{A}$  contém apenas dois elementos:  $\mathcal{A} = \{x_1, x_2\}$ , ou seja,  $\text{card}(\mathcal{A}) = 2$ .

A regra de Thue-Morse, por exemplo, é uniforme e binária; já a regra de Rudin-Shapiro é uniforme, mas não é binária. Um exemplo de substituição binária e não uniforme é a substituição de Fibonacci, apresentada no capítulo anterior:

$$\begin{aligned} \rho : \mathcal{A} &\rightarrow \mathcal{A}^* \\ a &\mapsto ab \quad \cdot \\ b &\mapsto a \end{aligned} \tag{2.4}$$

Outro exemplo mais genérico de substituição binária e uniforme é a regra dada por:

$$\begin{aligned} \rho : \mathcal{A} &\rightarrow \mathcal{A}^* \\ a &\mapsto a^m b^{\ell-m} \quad , \\ b &\mapsto b^p a^{\ell-p} \end{aligned} \tag{2.5}$$

em que  $m, p, \ell \in \mathbb{N}$ ,  $m \geq 1$ ,  $\ell > m$  e  $\ell \geq p$ .

**Definição 6** Uma substituição  $\rho$  é modular se  $\rho(x) = X$ , para todo  $x \in \mathcal{A}$ , sendo  $X$  uma palavra finita.

Notaremos por  $\rho(x_j) \big|_i$ , a letra que ocupa a  $i$ -ésima posição da substituição  $\rho$  aplicada a  $x_j$ .

**Definição 7** Uma substituição uniforme e binária é alternada se  $\rho(a) \big|_{2i} = \rho(b) \big|_{2i-1} = b$  e  $\rho(a) \big|_{2i-1} = \rho(b) \big|_{2i} = a$ , com  $i \in \mathbb{N}^*$ .

Se seu módulo for par,  $\rho(a) = abab\dots b$  e  $\rho(b) = baba\dots a$ ; caso seja ímpar,  $\rho(a) = abab\dots a$  e  $\rho(b) = baba\dots b$ .

**Definição 8** A matriz de substituição  $\mathcal{M}$  associada a uma substituição  $\rho : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}^*$  é uma matriz quadrada  $n \times n$ , em que  $n = \text{card}(\mathcal{A})$ , cujos elementos  $m_{ij}$  se referem ao número de ocorrências da letra  $x_i$  em  $\rho(x_j)$ , ou seja,  $m_{ij} = |\rho(x_j)|_{x_i}$ .

Na substituição de Thue-Morse,

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

com autovalores  $\lambda_1 = 2$  e  $\lambda_2 = 0$ .

Para a substituição de Rudin-Shapiro, a matriz de substituição é dada por

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

que possui autovalores  $\lambda_1 = 2$ ,  $\lambda_2 = -\lambda_3 = \sqrt{2}$  e  $\lambda_4 = 0$ .

Pode-se demonstrar que o processo iterativo dará origem a palavras infinitas se para uma dada letra, por exemplo a letra  $a$ , tivermos  $\rho(a) = aY$ , com  $|Y| \neq 0$ . Esta é uma condição necessária e suficiente para a existência de um ponto fixo da regra de substituição  $\rho$ . Daqui em diante consideraremos apenas regras de substituição que dão origem a palavras infinitas. Desta forma, definimos uma seqüência de substituição como um ponto fixo de uma substituição  $\rho$  em  $\mathcal{A}^{\mathbb{N}}$ .

**Definição 9** Uma seqüência de substituição é uma palavra infinita  $\chi \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$  dada por  $\chi = \lim_{k \rightarrow \infty} \rho^k(x_i)$ , em que  $x_i \in \mathcal{A}$ .

Dada uma seqüência de substituição  $\chi$ , notaremos a letra que ocupa a  $i$ -ésima posição desta seqüência por  $\chi \Big|_i$ , ou simplesmente,  $x_i$ .

**Definição 10** *Uma seqüência de substituição  $\chi = x_1x_2x_3\dots$  é periódica se existem  $r$  e  $t$  inteiros tais que  $x_k = x_{k+t}$ , para todo  $k > r$ .*

Denominamos radical à palavra finita  $R = x_1x_2\dots x_{r_0}$ , onde  $r_0$  é o menor valor de  $r$  para o qual vale a definição acima. Se  $r_0 = 0$ , a seqüência não possui radical. Para  $k \geq r_0$ , chamamos de período  $T$  de  $\chi$  todo bloco  $T = x_{k+1}\dots x_{k+t}$ , em que  $t$  é minimal na definição 10. Assim, a seqüência periódica possui a forma  $\chi = RTTTT\dots$ , caso possua radical, ou  $\chi = TTTT\dots$ , no caso sem radical. Caso a seqüência não seja periódica, ela é dita aperiódica. Um exemplo de regra que gera uma seqüência periódica é dada por

$$\rho : \begin{cases} a \mapsto aba \\ b \mapsto aba \end{cases} .$$

A substituição de Thue-Morse, dada por (2.2) é um exemplo de substituição que produz uma seqüência aperiódica.

**Definição 11** *Uma seqüência de substituição  $\chi$  é quase-periódica se para todo bloco  $Y$  que ocorre em  $\chi$ , existe um inteiro positivo  $j$ , dependendo de  $Y$ , tal que  $Y$  ocorre em todo sub-bloco de tamanho  $j$  contido em  $\chi$ .*

Noutros termos, em uma dada seqüência quase-periódica, qualquer bloco  $Y$  repete-se em intervalos de, no máximo,  $j - |Y|$  letras, sendo  $j$  dependente de  $Y$ .

**Definição 12** *Uma matriz de substituição  $\mathcal{M}$ , positiva, é primitiva se existe algum inteiro para o qual todos os elementos de  $\mathcal{M}^\ell$  sejam estritamente positivos.*

**Definição 13** *Seja a seqüência  $\chi \in \mathcal{A}^{\mathbb{N}}$ ,  $\chi = x_1x_2x_3\dots$ , onde  $x_j \in \mathcal{A}$ ; então a letra  $x_i \in \mathcal{A}$  é co-final em  $\chi$ , se, para qualquer  $j \in \mathbb{N}$ , existe um  $k > j$  tal que  $x_k = x_i$ .*

Por exemplo, para a seqüência de Thue-Morse:

$$a \rightarrow ab \rightarrow abba \rightarrow abbabaab \rightarrow abbabaabbaabba\dots, \quad (2.8)$$

as letras  $a$  e  $b$  são co-finais.

O teorema a seguir permite identificar se uma regra de substituição irá gerar uma seqüência quase-periódica através de sua matriz de substituição, e constitui um importante resultado para este estudo, pois é essencial para demonstração de alguns teoremas que iremos enunciar.

**Teorema 1** *Considere uma substituição uniforme  $\rho$  que gera uma seqüência de substituição  $\chi$ . Se a matriz de substituição associada  $M$  é primitiva, então a seqüência  $\chi$  é quase-periódica.*

A demonstração deste teorema e sua generalização para regras de substituição não - uniformes podem ser encontradas nas referências [32] e [30], respectivamente.

## 2.2 RESULTADOS JÁ EXISTENTES

Enunciaremos nesta seção – para substituições binárias e uniformes – um conjunto de teoremas, já propostos e demonstrados na referência [17], que permitem uma classificação

das seqüências quanto à quase-periodicidade. A forma geral é dada por:

$$\begin{aligned} \rho : \mathcal{A} &\rightarrow \mathcal{A} \\ a &\mapsto aY \quad , \\ b &\mapsto W \end{aligned} \tag{2.9}$$

em que  $|Y| = \ell - 1$ ,  $|W| = \ell$  e  $\ell > 1$ , de acordo com o comentário, imediatamente anterior à definição 9, relativo à existência do ponto fixo. Além disso também serão apresentados teoremas que fornecem resultados parciais acerca da sua periodicidade ou da não-periodicidade. Demonstraremos apenas os teoremas essenciais ao entendimento dos novos resultados.

### 2.2.1 QUASE - PERIODICIDADE

**Lema 1** *Substituições do tipo (2.9), em que  $|W|_a = 0$ , não são quase-periódicas.*

**Lema 2** *Substituições do tipo (2.9), em que  $|W|_a > 0$ , são quase-periódicas.*

Com isso, dada qualquer regra que possui a forma da substituição (2.9), podemos determinar se a seqüência gerada a partir desta é quase-periódica ou não, visto que abarcamos todas as possibilidades. Uma generalização do lema 2 para substituições binárias não uniformes, cujos autovalores são números irracionais, pode ser encontrada na referência [17].

### 2.2.2 PERIODICIDADE

Para os casos de período simples (formado por uma só letra), temos:

**Teorema 2** *Se uma das duas letras do alfabeto  $\mathcal{A} = \{a, b\}$  não é co-final em  $\chi$ , então a*

seqüência é periódica, com período  $T$ , tal que  $|T| = 1$ , e temos apenas dois tipos:

1)  $\chi = aaaa\dots$ , se a letra  $b$  não é co-final em  $\chi$

2)  $\chi = abbb\dots$ , se a letra  $a$  não é co-final em  $\chi$

**Prova.** Suponha que a letra  $b$  não é co-final em  $\chi$ . Como a seqüência  $\chi$  é infinita, então a letra  $a$  é co-final em  $\chi$ . Se  $b \in Y$ , como  $\rho(a) = aY$ , a letra  $b$  é co-final em  $\chi$ , o que representa uma contradição; logo  $b \notin Y$ . Então, como  $\chi = \lim_{k \rightarrow \infty} \rho^k(a)$ , temos que  $\chi = aaaa\dots$ . Suponha agora que a letra  $a$  não é co-final em  $\chi$ . Então, analogamente a letra  $b$  é co-final em  $\chi$ . Se a letra  $a \in W$ , então ela é co-final, visto que  $\rho(b) = W$ , resultando em uma contradição; logo  $a \notin W$ . Se a letra  $a \in Y$ , como  $\rho(a) = aY$ ,  $\rho^2(a) = aY\rho(Y)$  e assim por diante, então a letra  $a$  é co-final, resultando novamente em uma contradição; logo  $a \notin Y$ . Portanto temos que  $\chi = abbb\dots$ . ■

Outros resultados acerca da periodicidade são:

**Teorema 3** *Considere  $\chi$  uma seqüência de substituição periódica; então a primeira letra  $a$  é co-final em  $\chi$  se, e somente se,  $\chi$  não possui radical.*

O lema a seguir será generalizado na próxima seção.

**Lema 3** *Seja uma substituição  $\rho$  que gera uma seqüência de substituição  $\chi$  em que ambas as letras são co-finais. Se  $\rho$  é modular, então  $\chi$  é periódica sem radical e o comprimento do período,  $t = |T|$ , é igual ou menor do que  $\ell$ . Inversamente, se  $\chi$  é periódica sem radical, e tal que  $t = \ell$ , então  $\rho$  é modular.*

**Prova.** Como  $\rho(a) = W$  e  $\rho(b) = W$ , teremos  $\rho^2(a) = \rho(W) = W\dots W$ , com  $|\rho^2(a)| = |\rho(W)| = \ell^2 \geq t$ . Então, já que  $\chi = \lim_{k \rightarrow \infty} \rho^k(a)$ , podemos concluir, por indução,

que  $\chi = WWW\dots$ , com  $t \leq \ell$ . Inversamente, supondo  $\chi$  periódica, sem radical, e com  $t = \ell$ , teremos  $\rho(a) = T$ . Como  $\rho^2(a) = \rho(T) = T\dots T$  e visto que ambas as letras são co-finais em  $\chi$ , temos também  $\rho(b) = T$ . Logo, a substituição é modular. ■

**Lema 4** *Se o módulo  $\ell$  de uma substituição  $\rho$  alternada é ímpar, então a seqüência de substituição é periódica, com período  $T = ab$ .*

**Prova.** Como a substituição alternada é ímpar,  $\rho(a) = abab\dots a$  e  $\rho(b) = baba\dots b$ .

Realizando a operação de concatenação, teremos:  $\rho^2(a) = \rho(a)\rho(b)\dots\rho(a) = ab\dots aba\dots b\dots ab\dots a$ .

Por indução finita, temos para algum  $k$ ,  $\rho^k(a) = TT\dots TT$ , onde  $T = ab$ . Logo, a seqüência de substituição é periódica com período  $T = ab$ . ■

### 2.2.3 APERIODICIDADE

Quanto à aperiodicidade, temos dois teoremas:

**Teorema 4** *As seqüências associadas com substituições do tipo (2.9), em que  $W = b^\ell$ , isto é,  $|W|_a = 0$ , são aperiódicas.*

O teorema a seguir será fundamental na demonstração do resultado que introduziremos na próxima seção.

**Teorema 5** *As seqüências associadas com substituições do tipo (2.9) tais que  $Y = Xb$  e  $W = Za$ , em que  $X$  e  $Z \in \mathcal{A}^*$ , são aperiódicas.*

**Prova.** Como o alfabeto  $\mathcal{A}$  é finito e a seqüência  $\chi$  é infinita, alguma letra é co-final em  $\chi$ . Se esta letra é  $a$ , a letra  $b$  também é co-final em  $\chi$ , pois  $a \mapsto aXb$ . Analogamente, se



esta for  $b$ , a letra  $a$  também é co-final em  $\chi$ , pois  $b \mapsto Za$ . Logo, ambas as letras são co-finais em  $\chi$ . Supondo que a seqüência  $\chi$  é periódica, pelo teorema 3, a seqüência possui a forma  $\chi = TTT\dots$ , onde  $T$  é o período. Já que a substituição é uniforme, de comprimento  $\ell$ , a última letra do período  $T$  na  $k$ -ésima iteração deve ser semelhante à última letra, depois de  $\ell$  períodos  $T$ , gerados a partir do período  $T$ , na  $(k + 1)$ -ésima iteração. Entretanto, para esta classe de substituições,  $\rho(a) = aXb$  e  $\rho(b) = Za$ . Logo, temos uma contradição e a seqüência é aperiódica. ■

## 2.3 NOVOS RESULTADOS

Nesta seção, apresentaremos novos resultados, que permitem identificar se uma determinada regra de substituição binária uniforme vai gerar uma seqüência periódica ou aperiódica, ou seja, conseguimos classificar os casos em que teremos seqüências periódicas, fechando um problema proposto na referência [17]. Vale ressaltar que neste trabalho, a análise da periodicidade das seqüências é realizada a partir das regras de substituição, diferentemente do que acontece na referência [17], onde tal análise é baseada nas seqüências.

Inicialmente, demonstraremos um lema que será útil para a demonstração do teorema fundamental do nosso trabalho.

**Lema 5** *Seja  $\rho$  uma regra de substituição binária uniforme, de módulo  $\ell$ , que gera uma seqüência  $\chi$ . Então  $b \notin Y$  se, e somente se,  $\chi = aaaaa\dots$ . Outrossim, temos que  $a \notin Y$  e  $a \notin W$  se, e somente se,  $\chi = abbbb\dots$ .*

**Prova.** Suponha que a letra  $b \notin Y$ , então  $b \notin \rho(a)$ . Suponha também que  $b \notin \rho^k(a)$ , para um dado  $k$ ; logo  $\rho^k(a) = a^{(\ell^k)}$ . Daí, segue que  $\rho(\rho^k(a)) = (\rho(a))^{\ell^k}$ . Como

a letra  $b \notin \rho(a)$ , então  $b \notin \rho^{k+1}(a)$ ; por indução  $b \notin \chi$ , ou seja,  $\chi = aaa\dots$ . Por outro lado, se  $\chi = aaa\dots$ , então  $b \notin Y$ , pois caso contrário,  $b$  estaria entre as  $\ell$  primeiras letras de  $\chi$ , que é um absurdo.

Se  $a \notin Y$  e  $a \notin W$ , suponha que exista um  $i > 1$  tal que  $\chi \underset{i}{|} = a$ , então  $i > \ell$ , pois  $a \notin Y$ . Se  $i < 2\ell + 1$ , então  $\chi \underset{i}{|} = a \in \rho(b)$ , que consiste em uma contradição pois  $a \notin W$ ; logo  $i > 2\ell + 1$ . Repetindo o raciocínio para  $i < 3\ell + 1$ , e assim por diante, concluiremos que não existe um tal  $i$ ; portanto  $\chi = abb\dots$ . Por outro lado, se  $\chi = abb\dots$ , então obviamente  $a \notin Y$ . Se  $a \in W$ , como a letra  $b$  é co-final, a letra  $a$  seria co-final, que representa uma contradição. Logo  $a \notin W$ . ■

Finalmente, apresentaremos a seguir, o teorema fundamental do nosso estudo, que permite uma classificação das seqüências binárias uniformes quanto à periodicidade. Chamaremos de regras triviais àquelas que obedecem às condições estabelecidas no lema 5.

**Teorema 6** *Considere uma regra de substituição  $\rho$ , binária uniforme, de módulo  $\ell$ , dada por (2.9); se a seqüência de substituição  $\chi = \lim_{n \rightarrow \infty} \rho^n(a)$  é periódica, então existem apenas três tipos possíveis para uma tal regra:*

1) Substituições triviais:

i) com  $a \notin Y$  e  $a \notin W$ ; portanto  $\chi = abb\dots$ .

ii) com  $b \notin Y$ ; portanto  $\chi = aaa\dots$ .

2) Substituições modulares:

$\rho(a) = \rho(b) = W$ ; portanto  $\chi = WWW\dots W\dots$ .

3) Substituições alternadas de módulo ímpar:

$Y \underset{2i-1}{|} = b = W \underset{2i-1}{|}$  e  $Y \underset{2i}{|} = a = W \underset{2i}{|}$ ; portanto  $\chi = abab\dots ab\dots$ .

**Prova.** Supondo a seqüência periódica, com período  $T$ , tal que  $|T| = t$  e  $|\rho(a)| = |\rho(b)| = \ell$ , temos duas situações a serem analisadas:

$$(a) \ t = 1;$$

$$(b) \ t \neq 1.$$

Na situação (a), em que  $t = 1$ , temos que  $T = a$  ou  $T = b$ . Supondo  $T = a$ , a letra  $a$  é co-final em  $\chi$ . Pelo teorema 3, a seqüência  $\chi$  não tem radical; portanto  $\chi = aaa\dots$ . Logo, pelo lema 5,  $b \notin Y$ . Supondo  $T = b$ , a letra  $a$  não é co-final, logo  $a \notin W$ , pois  $b$  é co-final. Se a letra  $a \in Y$ , então  $a \in \rho(Y)$  e, por indução,  $a$  é co-final; donde  $a \notin Y$ . Logo, pelo lema 5,  $\chi = abb\dots$ . Em ambos os casos  $T = b$  ou  $T = a$ , seguem as regras do tipo (1i) e (1ii), respectivamente.

Na situação (b), temos dois casos possíveis:

$$\begin{cases} mdc(\ell, t) \neq 1 \\ mdc(\ell, t) = 1 \end{cases} .$$

Para o caso em que  $mdc(\ell, t) \neq 1$ , podemos escrever  $\ell s = m = tr$ , para determinados  $s$  e  $r$ , em que  $m = mmc(\ell, t)$ , e conseqüentemente  $m < \ell t$ .

Notemos que para qualquer  $x_i$  na seqüência  $\chi$

$$\rho(x_i) = x_{(i-1)\ell+1}\dots x_{i\ell} . \quad (2.10)$$

Então

$$\rho(x_{i+s}) = x_{(i+s-1)\ell+1}\dots x_{(i+s)\ell} = x_{(i-1)\ell+\ell s+1}\dots x_{i\ell+\ell s} . \quad (2.11)$$

Como  $\ell s = rt$ , (2.11) tem a forma

$$\rho(x_{i+s}) = x_{(i-1)\ell+1+rt}\dots x_{i\ell+rt} . \quad (2.12)$$

Já que  $t$  é o período:

$$\rho(x_{i+s}) = x_{(i-1)\ell+1} \cdots x_{i\ell} . \quad (2.13)$$

Comparando (2.10) com (2.13), obtemos

$$\rho(x_{i+s}) = \rho(x_i) , \quad (2.14)$$

para qualquer  $i$ .

Se, para algum  $i$ ,  $x_{i+s} \neq x_i$ , segue que  $\rho(a) = \rho(b)$ , e portanto a regra de substituição é modular, recaindo no tipo 2.

Se, caso contrário, para todo  $i$ ,  $x_{i+s} = x_i$ , como a seqüência é periódica e  $t$  é minimal, então  $t$  é divisor de  $s$ ; daí para algum  $k > 1$ ,  $s = kt$  e portanto  $\ell kt = m$ , que representa uma contradição pois  $m < \ell t$ .

No caso em que  $\text{mdc}(\ell, t) = 1$ , suponha inicialmente  $\ell < t$ . Como  $\text{mdc}(\ell, t) = 1$ ,  $\ell$  é gerador de  $\mathbb{Z}_t$ , dito de outra forma, para qualquer  $k'$  tal que  $1 \leq k' \leq t$ , existem  $s$  e  $r'$ , tais que  $\ell s = k' + tr'$ . Assim, dados  $j$ ,  $1 \leq j \leq \ell$  e  $k'$ ,  $1 \leq k' \leq t$ , existem  $s$  e  $r'$  tais que  $j + \ell s = j + k' + tr'$ . Se fizermos uma mudança de variáveis:

$$k = j + k' \quad \text{e} \quad r = r', \quad \text{para } j + k' \leq t ;$$

$$k = j + k' - t \quad \text{e} \quad r = r' + 1, \quad \text{para } j + k' > t,$$

teremos que dados  $j$  e  $k$  ( $1 \leq j \leq \ell$  e  $1 \leq k \leq t$ ), existem  $s$  e  $r$ , tais que

$$j + \ell s = k + tr . \quad (2.15)$$

Observe, que para qualquer  $x_i \in \chi$ , existem apropriados  $j$  e  $s$ , com  $1 \leq j \leq \ell$ , tais que  $x_i = x_{j+\ell s}$ , como também existem apropriados  $k$  e  $r$ , com  $1 \leq k \leq t$ , tais que  $x_i = x_{k+tr}$ .

Logo, da igualdade (2.15), temos que, para qualquer posição  $k$  do período  $T$ , com  $1 \leq k \leq t$ , existe ao longo da seqüência  $\chi$ , um bloco  $x_{1+s\ell} \dots x_{\ell+s\ell}$  no qual a  $k$ -ésima letra do período ocupa a posição  $x_{j+\ell s}$  do bloco, para um  $j$  fixado, porém arbitrário. Podemos então afirmar que todas as posições do período  $T$  ocupam todas as posições do bloco  $x_{1+s\ell} \dots x_{\ell+s\ell}$ , bastando para tanto variar  $s$ .

Supondo agora  $\ell > t$ ,  $t$  é um gerador de  $\mathbb{Z}_\ell$ , ou seja, para qualquer  $j'$  tal que  $1 \leq j' \leq \ell$ , existem  $r$  e  $s'$ , tais que,  $rt = j' + \ell s'$ . Utilizando um raciocínio análogo ao anterior, podemos obter o mesmo resultado: dados  $j$  e  $k$ , com  $1 \leq j \leq \ell$  e  $1 \leq k \leq t$ , existem  $r$  e  $s$ , tais que  $j + \ell s = k + rt$ . E o raciocínio segue analogamente ao caso anterior.

Do que acabamos de desenvolver, seguem os seguintes fatos:

Fato I: Para qualquer  $i$ , temos que  $\rho(a) \Big|_i \neq \rho(b) \Big|_i$ . Pois se a letra que ocupa a  $i$ -ésima posição de  $\rho(a)$  for igual a letra que ocupa a  $i$ -ésima posição de  $\rho(b)$ , teremos um período formado por um único tipo de letra, já que todas as letras do período ocupam todas as posições do bloco.

Fato II: Existe ao menos um sub-bloco formado por duas letras iguais,  $yy$ , em  $\rho(a)$ , donde existe ao menos um sub-bloco da forma  $ww$  em  $\rho(b)$ , com  $y \neq w$ , pelo fato I. Pois se não existisse um bloco  $yy$  em  $\rho(a)$ , então  $\rho(a)$  seria a palavra alternada  $ababa\dots$ , isto é  $\rho(a) \Big|_i \neq \rho(a) \Big|_{i+1}$ ; o mesmo acontecendo com  $\rho(b)$ , pelo fato I. Sendo assim, se essa substituição for de módulo ímpar, recairemos no tipo 3; se for de módulo par, ela produzirá uma seqüência aperiódica, pelo teorema 5.

Suponha agora que existam as tais duas letras repetidas em  $\rho(a)$  (analogamente em  $\rho(b)$ ). Usando o mesmo argumento de que todas as posições do período  $T$  ocupam todas

as posições do bloco, já que as duas letras são iguais nas mesmas posições de  $\rho(a)$  e de  $\rho(b)$ , forçosamente todas as letras do período  $T$  serão iguais de modo que  $|T| = 1$ , recaindo no caso (1ii).

Portanto está demonstrado que os casos 1, 2 e 3 são os únicos casos possíveis de substituições que geram seqüências periódicas. ■

Como exemplo do caso em que,  $mdc(\ell, t) = 1$ , suponha uma regra, com módulo  $\ell = 3$ , que gera uma seqüência periódica, em que  $t = 4$ . Considere o primeiro bloco, de comprimento  $\ell = 3$ , gerado pela letra  $a$ . Suponha também que a terceira letra deste bloco é  $a$ . Temos então

$$\rho(a) = ay_2a .$$

Como todas as posições do bloco ocupam todas as posições do período, a terceira posição do bloco ocupará a terceira, segunda, primeira e quarta posições do período para o primeiro, segundo, terceiro e quarto blocos, respectivamente. Então se a terceira letra de  $\rho(b)$  também for  $a$ , teremos um período simples.

Agora, suponha que não temos letras geminadas em  $\rho(a)$ . Para que não tenhamos período simples, em cada posição do bloco as letras de  $\rho(a)$  e  $\rho(b)$  devem ser distintas. Se isso acontecer, temos uma regra alternada de módulo ímpar:

$$\rho(a) = aba \text{ e } \rho(b) = bab , \tag{2.16}$$

que gera uma seqüência periódica. Supondo que temos letras geminadas, por exemplo,  $y_2 = a$ , ficaremos com

$$\rho(a) = aaa . \tag{2.17}$$

Novamente, como todas as posições do bloco ocupam todas as posições do período, as quatro posições do período terão a mesma letra  $a$ , e portanto a seqüência será periódica com período simples  $T = aaa\dots$ . Logo, se esta seqüência for periódica, ela será gerada por uma regra que produz seqüências de período simples, ou por uma regra alternada de módulo ímpar.

## 2.4 SEQÜÊNCIAS DE SUBSTITUIÇÃO E MODELOS DE SPINS

Se considerarmos modelos de spins numa cadeia, cujos termos de interação são gerados a partir de uma regra de substituição, podemos relacionar as flutuações geométricas (associadas ao módulo da substituição)  $\Delta N^{(k)}$ , após  $k$  substituições, através da expressão

$$\Delta N^{(k)} = [N^{(k)}]^\omega, \quad (2.18)$$

em que  $\omega$  é o expoente de flutuação, definido numa cadeia binária como  $\omega = \ln |\lambda_2| / \ln \lambda_1$ , com  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  correspondendo ao maior e menor autovalores da matriz de substituição, respectivamente. Neste caso, as flutuações são irrelevantes quando  $|\lambda_2| < 1$  (estruturas denominadas Pisot), relevantes quando  $|\lambda_2| > 1$  (estruturas não-Pisot), e no caso marginal  $|\lambda_2| = 1$ , nada se pode afirmar. Como a flutuação nas interações de troca dependem da flutuação  $\Delta N$ , a expressão (2.18) traduz o critério de Luck nestes casos.

Para as substituições binárias uniformes (2.9), de módulo  $\ell$ , com  $Y$  contendo  $m-1$   $a$ 's ( $|Y|_a = m-1$ ) e  $W$  contendo  $p$   $b$ 's ( $|W|_b = p$ ), a matriz de substituição associada é

dada por

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} m & \ell - p \\ \ell - m & p \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

que possui autovalores  $\lambda_1 = \ell$  e  $\lambda_2 = m + p - \ell$ . Note que, nestas circunstâncias ( $m - 1$   $a$ 's em  $Y$  e  $p$   $b$ 's em  $W$ ), a substituição (2.9) possui uma forma ainda mais geral do que a (2.5); no entanto sua matriz de substituição é a mesma. Como ocorre relevância quando  $|\lambda_2| = |m + p - \ell| > 1$ , temos que

$$m + p \begin{cases} > \ell + 1, & \text{quando } m + p > \ell \\ < \ell - 1, & \text{quando } m + p < \ell \end{cases}. \quad (2.20)$$

Como casos particulares, é possível identificar o caso homogêneo ( $J_a = J_b$ ), em que  $\lambda_2 = 0$ , correspondendo às seqüências de período simples (tipo 1), no qual não existe portanto flutuações; e as substituições modulares (tipo 2), em que também  $\lambda_2 = 0$ , sendo as flutuações geométricas mais uma vez irrelevantes. Já nas substituições alternadas de módulo ímpar (tipo 3), temos  $\lambda_2 = 1$ , que corresponde ao caso marginal. Tais casos são compatíveis com o teorema 6 que propusemos e demonstramos na seção 2.3, sendo que o teorema nos dá informação sobre a irrelevância mesmo quando  $\lambda_2 = 1$  (alternada de módulo ímpar). É importante salientar que todas as substituições que apresentam a mesma matriz  $\mathcal{M}$  das substituições contempladas no teorema 6 também correspondem a casos irrelevantes.

No caso das redes hierárquicas, em particular da rede hierárquica do diamante, o teorema 6 é também importante por tratar de regras uniformes que não alteram a topologia da rede. Discutiremos, no capítulo 3, o critério exato de relevância [16], segundo o qual as flutuações geométricas dependem, não só das regras de substituição, como também de características topológicas da rede em questão e, é claro, dos parâmetros do modelo de spins.



Apresentaremos no nosso trabalho uma simplificação deste critério para o modelo de Ising na rede hierárquica generalizada do diamante, nos mesmos moldes do que foi apresentado para o modelo de Ising na cadeia, conforme a relação (2.20).

Infere-se desta análise que a aperiodicidade é uma condição necessária, porém não suficiente para a relevância das flutuações geométricas. Consequentemente, uma identificação *a priori* da periodicidade das sequências de substituição, partindo das regras de substituição, realizada no teorema 6 para regras binárias uniformes é de extrema importância para o estudo dos modelos de spins. Mais genericamente, tal estudo pode ser de grande utilidade para qualquer sistema físico construído numa rede cujas ligações sejam descritas de acordo com regras determinísticas de substituição.

## Capítulo 3

# MODELOS APERIÓDICOS DE ISING NA REDE

# HIERÁRQUICA DO DIAMANTE

Neste capítulo, estudaremos o comportamento crítico do modelo de Ising na rede hierárquica do diamante, lançando mão dos resultados obtidos no capítulo 2. Numa primeira seção, mostraremos os resultados existentes na literatura. Na seção seguinte, apresentaremos o modelo de Ising, na rede hierárquica generalizada do diamante, com  $Q$  conexões e  $\ell$  ligações por conexão, cujas interações são regidas por regras de substituição binárias uniformes. Faremos o cálculo das relações de recorrência, através da transformação de Migdal Kadanoff, e chegaremos a uma expressão genérica para obtenção dos pontos fixos. Na terceira seção, um critério exato para relevância das flutuações geométricas, em termos apenas dos parâmetros das regras de substituição, será proposto. Por último, na quarta

seção, exibiremos casos, para  $Q = 2$ , nos quais as flutuações geométricas são relevantes e, cujos comportamentos críticos são regidos por pontos fixos, com análise detalhada para um exemplo de módulo  $\ell = 5$ .

### 3.1 SITUANDO O PROBLEMA

Em 1997, Pinho, Haddad e Salinas [15] introduziram aperiodicidade em redes hierárquicas através de regras determinísticas de substituição; até onde temos informação, este foi o primeiro estudo de interações aperiódicas em redes hierárquicas. Eles estudaram o comportamento crítico do modelo de Ising na rede hierárquica generalizada do diamante ( $Q = 2$  conexões), com interações aperiódicas regidas pelas regras de duplo período,  $(a, b) \rightarrow (ab, a^2)$ , e triplo período,  $(a, b) \rightarrow (ab^2, a^3)$ , aplicadas em cada conexão da rede.

Para a regra de duplo período, partindo da letra  $a$ , após sucessivas aplicações da regra de substituição, temos a seqüência

$$a \rightarrow ab \rightarrow abaa \rightarrow abaaabab \rightarrow \dots$$

A matriz de substituição associada é dada por

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

com autovalores  $\lambda_1 = 2$  e  $\lambda_2 = -1$ . Como o expoente de flutuação é definido por

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1},$$

em que  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  correspondem, respectivamente, ao maior e menor autovalores da matriz de substituição, teremos para a regra de duplo período,  $\omega = 0$ .

Neste caso, o modelo de Ising é dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j .$$

com variáveis de spin  $\sigma_i = \pm 1$ , que, neste contexto, são concebidos nos sítios da rede hierárquica do diamante, com  $Q = 2$  conexões e  $\ell = 2$  ligações por conexão. O termo de interação  $J_{ij}$  poderá assumir valores  $J_a$  ou  $J_b$ , de acordo com a regra de duplo período.

Aplicando a transformação de renormalização, obtém-se as relações de recorrência:

$$x'_a = \frac{2x_a x_b}{1 + x_a^2 x_b^2} \quad \text{e} \quad x'_b = \frac{2x_a^2}{1 + x_a^4} , \quad (3.2)$$

com três pontos fixos na diagonal ( $x_a^* = x_b^*$ ): dois pontos fixos triviais  $x^* = 0$  e  $x^* = 1$ , e um ponto fixo instável não trivial  $x^* = 0.543689\dots$ . Fazendo a linearização em torno dos pontos fixos não triviais, temos

$$\begin{pmatrix} \Delta x'_a \\ \Delta x'_b \end{pmatrix} = C \mathcal{M}^T \begin{pmatrix} \Delta x_a \\ \Delta x_b \end{pmatrix} , \quad (3.3)$$

em que  $\mathcal{M}^T$  é a transposta da matriz de substituição e o fator  $C$  é dado por:

$$C = \frac{1 - x^*}{x^*} = 0.839286\dots . \quad (3.4)$$

Diagonalizando a matriz  $\mathcal{M}$ , temos os autovalores  $\Lambda_1 = C\lambda_1 = 1.678578\dots$  e  $\Lambda_2 = C\lambda_2 = -C = -0.839286\dots$ . Neste caso, as flutuações geométricas são irrelevantes, e portanto, o comportamento crítico permanece inalterado com respeito ao caso homogêneo (em que  $J_a = J_b$ ).

Para a regra de triplo período, a matriz de substituição é dada por

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} , \quad (3.5)$$

com autovalores  $\lambda_1 = 3$  e  $\lambda_2 = -2$ . O expoente de flutuação vale  $\omega = \ln 2 / \ln 3 = 0.630929$ .

As relações de recorrência são dadas por

$$x'_a = \frac{2x_a x_b^2}{1 + x_a^2 x_b^4} \quad \text{e} \quad x'_b = \frac{2x_a^3}{1 + x_a^6} . \quad (3.6)$$

O ponto fixo não trivial é dado por  $x_a^* = x_b^* = 0.786151\dots$ . A linearização em torno do ponto fixo não trivial fornece

$$C = \frac{2(x^*)^2[1 - (x^*)^6]}{[1 + (x^*)^6]^2} = 0.618033 . \quad (3.7)$$

A diagonalização da forma linear (3.3) para este valor de  $C$  nos dá  $\Lambda_1 = C\lambda_1 = 1.854101\dots$  e  $\Lambda_2 = C\lambda_2 = -1.236067\dots$ . Neste caso, as flutuações geométricas são relevantes pois  $|\Lambda_2| > 1$  e o comportamento crítico do sistema é alterado com relação ao caso homogêneo.

Em 1998, Pinho, Haddad e Salinas [16] introduziram aperiodicidade no modelo de Ising, através da substituição de Rudin-Shapiro  $(a, b, c, d) \rightarrow (ac, bd, ab, db)$ . A matriz de substituição associada é dada pela expressão (2.7), com autovalores  $\lambda_1 = 2$ ,  $\lambda_2 = -\lambda_3 = \sqrt{2}$  e  $\lambda_4 = 0$ . As relações de recorrência são

$$x'_a = \frac{2x_a x_c}{1 + x_a^2 x_c^2}, \quad x'_b = \frac{2x_d x_c}{1 + x_d^2 x_c^2}, \quad x'_c = \frac{2x_a x_b}{1 + x_a^2 x_b^2}, \quad x'_d = \frac{2x_d x_b}{1 + x_d^2 x_b^2} . \quad (3.8)$$

Novamente, ao longo da diagonal, temos dois pontos fixos triviais  $x^* = 0$  e  $x^* = 1$ ; e um ponto fixo não trivial  $x^* = 0.543683$ . Linearizando em torno do ponto fixo não trivial, temos

$$\Delta x' = C \mathcal{M}_{RS}^T \Delta x . \quad (3.9)$$

com o mesmo fator  $C$  anterior, e autovalores  $\Lambda_1 = C\lambda_1 = 2C = 1.678573\dots$ ,  $\Lambda_{2,3} = C\lambda_{2,3} = \pm 1.186930\dots$ , e  $\Lambda_4 = C\lambda_4 = 0$ . Neste caso, como na substituição de triplo período, temos relevância das flutuações geométricas.

Após a análise anterior, foi proposto [16] um critério exato para a relevância das flutuações geométricas, compatível com o critério de Luck, apresentado na seção 1.6, para o modelo de Ising na rede hierárquica generalizada do diamante com  $Q$  conexões e  $\ell$  ligações por conexão ( $Q > 1$  e  $\ell > 1$ ), em que as interações são geradas por regras de substituição num alfabeto binário. Com a diagonalização da forma linear (3.3), temos dois autovalores,

$$\Lambda_1 = C(x^*)\lambda_1 \text{ e } \Lambda_2 = C(x^*)\lambda_2 , \quad (3.10)$$

em que  $\lambda_1$  e  $\lambda_2$  são os autovalores da matriz de substituição. O autovalor  $\Lambda_1$  sempre possui o módulo maior que a unidade. Então é necessária a análise do segundo autovalor. Se  $|\Lambda_2| < 1$ , temos um ponto de sela hiperbólico, com as trajetórias se aproximando dele ao longo da direção não uniforme; dessa forma, as flutuações geométricas não alteram o comportamento crítico. Entretanto, se  $|\Lambda_2| > 1$ , temos um nó instável, com as trajetórias se afastando do ponto fixo em todas as direções, inclusive na direção não uniforme. Neste caso, as flutuações geométricas mudam a classe de universalidade do sistema, produzindo expoentes críticos com valores distintos do caso homogêneo, ou seja, com apenas um tipo de interação. Portanto, o critério exato diz que as flutuações geométricas são relevantes se

$$|\Lambda_2| > 1 . \quad (3.11)$$

Visto que  $|\Lambda_2| = |\lambda_2 C_\ell| = |\lambda_2| \Lambda_1 / \lambda_1$ , temos

$$\ln (|\Lambda_2|) = \ln (|\lambda_2|) + \ln(\Lambda_1) - \ln(\lambda_1) > 0 . \quad (3.12)$$

O expoente de flutuação é dado por  $\omega \equiv \ln |\lambda_2| / \ln \lambda_1$ . Então podemos reescrever a desigualdade (3.12):

$$\omega > 1 - \frac{\ln \Lambda_1}{\ln \lambda_1} . \quad (3.13)$$

De (1.36), temos que  $\Lambda_1 = b^{y_1} = \lambda_1^{y_1}$ , em que  $b$  é o fator de escala e  $y_1 = 1/\nu$ , se utilizarmos a relação de hiperescala  $2 - \alpha = d/y_1$ , a desigualdade (3.13) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\omega > \omega_c^H, \quad (3.14)$$

em que  $\omega_c^H = 1 - d_H/(2 - \alpha)$ . Quando  $d_H = d = 1$ , a desigualdade (3.14) corresponde ao critério de Luck no caso unidimensional. Se definirmos o expoente de flutuação para redes hierárquicas como

$$\omega' \equiv \ln(Q|\lambda_2|)/\ln(Q\lambda_1), \quad (3.15)$$

podemos reescrever o critério (3.14):

$$\omega' > \frac{1 - \alpha}{2 - \alpha}. \quad (3.16)$$

Esta condição de relevância é análoga à de Luck, sendo portanto compatível com ela. Na seção (3.3), reescreveremos o critério de relevância, de uma forma mais simples, em termos apenas dos parâmetros das regras de substituição.

Uma generalização do critério acima foi proposta por Magalhães, Salinas e Tsallis [33] que estudaram o comportamento crítico do modelo de Potts, dado pelo hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -q \sum_{(i,j)} J_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \quad (3.17)$$

onde  $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$  para todos os sítios da rede, e a soma  $(i, j)$  se refere aos primeiros vizinhos. O modelo foi concebido na rede hierárquica do diamante com interações ferromagnéticas geradas pela regra  $(a, b) \rightarrow (a^m b^{\ell-m}, a^{\ell-p} b^p)$ . Seguindo um raciocínio análogo ao da referência [16], ou seja, baseado em análise de estabilidade, o critério afirma que

teremos relevância das flutuações geométricas se:

$$|\Lambda_2(q)| = |\ell - m - p| C(q) > 1 , \quad (3.18)$$

em que, agora  $C = C(q)$ . Após algumas substituições, chega-se à desigualdade:

$$\omega > 1 - \frac{D}{2 - \alpha_u(q)} , \quad (3.19)$$

onde  $D$  é a dimensão fractal da rede e  $\alpha_u(q)$  é o expoente crítico térmico associado ao modelo homogêneo.

Os efeitos das flutuações geométricas, associadas às interações de troca aperiódicas do modelo de Potts, foram também investigadas por Haddad, Pinho e Salinas [35], em 2000, na rede hierárquica generalizada do diamante. Para interações de troca geradas a partir da regra de duplo período  $(a, b) \rightarrow (ab, a^2)$ , com  $Q = 2$ , as relações de recorrência fornecem um ponto fixo não trivial e as flutuações geométricas podem ser relevantes a depender do valor de  $q$ . Para  $q > 4 + 2\sqrt{2}$  as flutuações geométricas são relevantes – o comportamento muda em relação ao caso homogêneo – o que não acontece para a mesma regra no modelo de Ising ( $q = 2$ ), como foi visto na referência [16]. Já para a regra  $(a, b) \rightarrow (ab^2, a^3)$ , com  $Q = 2$ , as flutuações geométricas são relevantes para qualquer  $q > 2$  e dão origem a um novo comportamento crítico associado a um ciclo-dois no espaço dos parâmetros. Usando argumentos de escala, os autores calcularam o expoente crítico  $\alpha$ , associado ao calor específico, obtendo valores distintos do caso homogêneo.

Andrade [36] estudou, pelo método da matriz de transferência, o comportamento crítico do modelo de Ising com campo uniforme  $h$ , dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i , \quad (3.20)$$



em que as interações  $J_{ij}$  são geradas pela regra de substituição  $(a, b) \rightarrow (ab^{\ell-1}, a^\ell)$ , tendo obtido os expoentes térmicos e magnéticos para  $(\ell = 2 \text{ e } Q = 2)$  e para  $(\ell = 3 \text{ e } Q = 3)$ . Neste último, as flutuações geométricas são relevantes.

Para este mesmo modelo, cujas flutuações são relevantes, Andrade mostra também [37] que oscilações de período log, em temperatura reduzida, estão presentes para todas as funções termodinâmicas próximo ao ponto crítico. A natureza das oscilações muda descontinuamente em  $T_c$ . Para  $T > T_c$ , elas são puramente senoidais, e quando  $T < T_c$ , é observado um segundo harmônico para a frequência fundamental. Esse surgimento das oscilações de período log geralmente é atribuído à invariância de escala discreta.

Também em presença de um campo magnético externo, Gosh, Haddad e Salinas [38] estudaram o comportamento crítico do modelo de Ising, com interações aperiódicas, nas redes hierárquicas. As interações aperiódicas foram geradas pelas regras de duplo-período e triplo-período. Inicialmente, consideraram a regra de substituição de duplo-período  $(a, b) \rightarrow (ab, a^2)$ . Para o modelo de Ising, na rede hierárquica do diamante com  $Q = \ell = 2$ , a linearização das relações de recorrência, em torno do ponto fixo uniforme não trivial, produziu os autovalores térmicos  $\Lambda_1 = 2C = 1.67857\dots$  e  $\Lambda_2 = 0.839286\dots$  e autovalores magnéticos  $\Lambda_3 = 3.678572\dots$ ,  $\Lambda_4 = -2$ ,  $\Lambda_5 = -0.839286\dots$  e  $\Lambda_6 = 0$ . Portanto a introdução do campo não altera o comportamento crítico do sistema. Já para a regra de triplo período  $(a, b) \rightarrow (ab^2, a^3)$ , sabemos que, quando  $h = 0$ , as flutuações geométricas são relevantes, com um comportamento crítico governado por um atrator de ciclo dois. Em campo não nulo, a linearização das segundas iterações das relações de recorrência conduziu aos autovalores térmicos  $\Lambda_1 = 3.255710\dots$ ,  $\Lambda_2 = 0.311746\dots$  e autovalores magnéticos

$\Lambda_3 = 34.384598$ ,  $\Lambda_4 = 15.008653\dots$ ,  $\Lambda_5 = 0.267660\dots$  e  $\Lambda_6 = 0$ , indicando a irrelevância do campo externo aplicado.

O papel da relevância das flutuações geométricas na magnetização local de modelos ferromagnéticos de Ising foi estudado por Nogueira, Andrade e Coutinho [39]. Os dois modelos analisados possuíam interações aperiódicas definidas pela regra binária  $(a, b) \rightarrow (ab^{\ell-1}, a^\ell)$ : o modelo 1, com  $Q = \ell = 2$  e o modelo 2, com  $Q = \ell = 3$ . Quando as flutuações geométricas são relevantes, ou seja, no modelo 2, a magnetização local exibe uma mudança de simetria, quando comparada com o sistema homogêneo. No modelo 1, esta simetria permanece inalterada.

Haddad e Salinas [40] estudaram o comportamento crítico do modelo de polímeros na rede hierárquica do diamante, com interações definidas pelas regras de substituição de duplo período ( $a \rightarrow ab, b \rightarrow a^2$ ) e de triplo período ( $a \rightarrow ab^2, b \rightarrow a^3$ ), obtendo, para flutuações geométricas relevantes, um ciclo-dois de caráter hiperbólico, como no modelo de Potts. No entanto, as relações de recorrência possuem uma forma bem mais simples.

Em 2002, Andrade e Pinho [41] analisaram o modelo de Ising na rede hierárquica do diamante com interações aperiódicas  $(J_a, J_b, J_c, J_d)$  definidas pela regra de substituição de Rudin-Shapiro, através das técnicas do grupo de renormalização e da matriz de transferência. Como se trata de um caso relevante, passaram a procurar outras estruturas invariantes, encontrando sete ciclos-dois, com três autovalores instáveis  $|\Lambda| > 1$  e um super estável  $\Lambda_4 = 0$ . Encontraram também um ponto fixo não crítico com coordenadas  $(x_A, x_B, x_C, x_D) = (0.34764, 0.79965, 0.96810, 0.51609)$  e autovalores  $\Lambda_1 = 1.79506$ ,  $\Lambda_2 = 1.3877$ ,  $\Lambda_3 = -0.82863\dots$  e  $\Lambda_4 = 0$ . Concluíram ainda que o ponto fixo, cujas coor-

denadas são  $(x_A, x_B, x_C, x_D) = (0.96810, 0.51609, 0.79965, 0.34764)$ , rege o comportamento crítico a partir da análise dos autovalores  $\Lambda_1 = 1.58655, \Lambda_2 = -0.99955, \Lambda_3 = 0.601187$  e  $\Lambda_4 = 0$ . Em seguida, através do método da matriz de transferência, obtiveram resultados numéricos para os expoentes críticos  $\alpha$  e  $\nu$  concordando com aqueles que também foram obtidos pelo método do grupo de renormalização. Os expoentes magnéticos, obtidos pelo método da matriz de transferência, assumem valores diferentes; entretanto, a relação de Rushbrook é sempre satisfeita.

Encerramos aqui a revisão das principais referências sobre o tema, que serão úteis ao nosso estudo na próxima seção.

## 3.2 MODELO DE ISING NA REDE HIERÁRQUICA GENERALIZADA DO DIAMANTE

Nesta seção, apresentaremos o modelo ferromagnético de Ising, na rede hierárquica generalizada do diamante (RHGD), com um número  $Q$  de conexões, e  $\ell$  ligações por conexão, cujas interações são geradas pela regra binária uniforme, de módulo  $\ell$ , dada por (2.9):

$$\rho : \begin{cases} a \mapsto aY \\ b \mapsto W \end{cases}, \quad (3.21)$$

com  $Y$  contendo  $m - 1$   $a$ 's ( $|Y|_a = m - 1$ ) e  $W$  contendo  $p$   $b$ 's ( $|W|_b = p$ ), independentemente da ordem dos  $a$ 's e  $b$ 's, excetuando as regras dos tipos 1, 2 e 3, previstas pelo teorema 6, cujo comportamento corresponderia a casos irrelevantes. Chamamos atenção que esta análise considera todos os modelos aperiódicos de Ising na RHGD, cujas interações obedecem às seqüências de substituição geradas a partir de regras binárias uniformes. Ela

é portanto mais genérica do que aquela feita na referência [18] baseada nas regras (2.5). Estamos supondo que a primeira interação seja do tipo  $J_a$ . Aplicaremos a transformação de renormalização de Migdal-Kadanoff de modo a obter relações de recorrência genéricas, para qualquer  $Q$ , a partir das quais serão apresentadas expressões para os conjuntos invariantes. Estes resultados serão especificados para  $Q = 2$ .

Sendo  $\mathbf{R}$  o operador de renormalização, que transforma o Hamiltoniano reduzido de Ising  $\bar{\mathcal{H}} \equiv -\beta\mathcal{H}$ , onde  $\beta = 1/KT$ , temos

$$\bar{\mathcal{H}}' = \mathbf{R}\bar{\mathcal{H}}. \quad (3.22)$$

A transformação de renormalização é feita com base na regra de deflação, que corresponde ao inverso da regra (2.9):

$$\begin{cases} aY \rightarrow a' \\ W \rightarrow b' \end{cases}. \quad (3.23)$$

Para o cálculo função de partição, é necessário calcular o somatório

$$\sum_{\sigma_I, \sigma_{II}} \exp(\bar{\mathcal{H}}') = \sum_{\sigma_I, \sigma_{II}} \exp[(K'_a \sigma_I \sigma_{II})] = \quad (3.24)$$

$$\sum_{\sigma_I, \sigma_{II}} \left\{ \sum_{\sigma_1, \sigma_i, \sigma_j, \sigma_{\ell-1}} [K_a \sigma_I \sigma_1 + (m-1-\delta_{ik})K_a \sigma_i \sigma_{i+1} + \right. \quad (3.25)$$

$$\left. + (\ell-m+2\delta_{jk})K_b \sigma_j \sigma_{j+1} + K_f \sigma_{\ell-1} \sigma_{II}] \right\}^Q$$

onde  $i$  e  $j$  correspondem, respectivamente, aos sítios cujas interações são do tipo  $a$  ou  $b$ ,  $f$  pode ser  $a$  ou  $b$  a depender da regra e  $\delta_{ik}$  (ou  $\delta_{jk}$ ) corresponde ao delta de Kronecker. Se  $f = a$ , devemos ter  $i, j = k$ ; se  $f = b$ , devemos ter  $i, j \neq k$ . Para a interação do tipo  $J_b$ ,

temos

$$\sum_{\sigma_I, \sigma_{II}} \exp(\bar{\mathcal{H}}') = \sum_{\sigma_I, \sigma_{II}} \exp[(K'_b \sigma_I \sigma_{II})] = \quad (3.26)$$

$$\sum_{\sigma_I, \sigma_{II}} \left\{ \sum_{\sigma_1, \sigma_i, \sigma_j, \sigma_{\ell-1}} [K_b \sigma_I \sigma_1 + (p-1 - \delta_{jk}) K_b \sigma_j \sigma_{j+1} + \right. \quad (3.27)$$

$$\left. + (\ell - p + 2\delta_{ik}) K_a \sigma_i \sigma_{i+1} + K_f \sigma_{\ell-1} \sigma_{II}] \right\}^Q$$

em que novamente,  $i$  e  $j$  correspondem, respectivamente, aos sítios cujas interações são do tipo  $a$  ou  $b$ ,  $f$  pode ser  $a$  ou  $b$  a depender da regra e  $\delta_{jk}$  (ou  $\delta_{ik}$ ), corresponde ao delta de Kronecker. Se  $f = a$ , devemos ter  $i, j = k$  e se  $f = b$ , devemos ter  $i, j \neq k$ . Ao dizimar os spins, podemos obter as relações de recorrência entre o sistema original e o transformado [18]:

$$\begin{cases} \tanh(K'_a/Q) = [\tanh(K_a)]^m [\tanh(K_b)]^{\ell-m} \\ \tanh(K'_b/Q) = [\tanh(K_b)]^p [\tanh(K_a)]^{\ell-p} \end{cases}, \quad (3.28)$$

para quaisquer  $m, p, \ell$  e  $Q \in \mathbb{N}$ ,  $m \geq 1$ ,  $\ell > 1$  e  $Q > 1$ . Se fizermos a seguinte mudança de variáveis:

$$\begin{cases} x_a = \tanh(K_a) \\ x_b = \tanh(K_b) \end{cases}, \quad (3.29)$$

ficaremos com

$$\begin{cases} x'_a = \tanh[Q \tanh^{-1}(x_a^m x_b^{\ell-m})] \\ x'_b = \tanh[Q \tanh^{-1}(x_a^{\ell-p} x_b^p)] \end{cases}. \quad (3.30)$$

No caso em que  $Q = 2$ , utilizando a identidade trigonométrica

$$\tanh(2\theta) = 2 \tanh \theta / (1 + \tanh^2(\theta)), \quad (3.31)$$

as expressões dadas por (3.30) podem ser simplificadas (ver na referência [18]):

$$\begin{cases} x'_a = 2x_a^m x_b^{\ell-m} / (1 + x_a^{2m} x_b^{2(\ell-m)}) \\ x'_b = 2x_a^{\ell-p} x_b^p / (1 + x_a^{2(\ell-p)} x_b^{2p}) \end{cases} . \quad (3.32)$$

Entretanto nosso objetivo é obter relações de recorrência genéricas (para  $Q$  qualquer) em termos de  $x_a$  e  $x_b$  sem envolver funções trigonométricas, o que tornaria as expressões mais simples como a (3.32). Para isso, considere

$$\begin{cases} \theta = \tanh^{-1}(x_a^m x_b^{\ell-m}) \\ \varphi = \tanh^{-1}(x_a^{\ell-p} x_b^p) \end{cases} . \quad (3.33)$$

Substituindo (3.33) em (3.30), obtemos

$$\begin{cases} x'_a = \tanh(Q\theta) \\ x'_b = \tanh(Q\varphi) \end{cases} . \quad (3.34)$$

Mas  $\sinh \alpha = (e^\alpha - e^{-\alpha})/2$  e  $\cosh \alpha = (e^\alpha + e^{-\alpha})/2$ , logo

$$\begin{cases} \tanh(Q\theta) = \frac{\sinh(Q\theta)}{\cosh(Q\theta)} = \frac{1}{1 + e^{-2Q\theta}} - \frac{1}{1 + e^{2Q\theta}} \\ \tanh(Q\varphi) = \frac{\sinh(Q\varphi)}{\cosh(Q\varphi)} = \frac{1}{1 + e^{-2Q\varphi}} - \frac{1}{1 + e^{2Q\varphi}} \end{cases} . \quad (3.35)$$

Como  $e^{2\alpha} = (1 + \tanh \alpha)/(1 - \tanh \alpha)$ , temos

$$\begin{cases} \tanh(Q\theta) = \frac{(1 + \tanh \theta)^Q - (1 - \tanh \theta)^Q}{(1 + \tanh \theta)^Q + (1 - \tanh \theta)^Q} \\ \tanh(Q\varphi) = \frac{(1 + \tanh \varphi)^Q - (1 - \tanh \varphi)^Q}{(1 + \tanh \varphi)^Q + (1 - \tanh \varphi)^Q} \end{cases} . \quad (3.36)$$

Substituindo (3.33) na expressão (3.36), conseguiremos relacionar  $x'_a$  e  $x'_b$  em termos de  $x_a$  e  $x_b$ , com o uso de funções polinomiais, e não mais trigonométricas, como em (3.30):

$$\begin{cases} x'_a = \frac{(1 + x_a^m x_b^{\ell-m})^Q - (1 - x_a^m x_b^{\ell-m})^Q}{(1 + x_a^m x_b^{\ell-m})^Q + (1 - x_a^m x_b^{\ell-m})^Q} \\ x'_b = \frac{(1 + x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q - (1 - x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q}{(1 + x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q + (1 - x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q} \end{cases} . \quad (3.37)$$

Se fizermos  $Q = 2$  em (3.37), recaímos em (3.32). Fazendo  $x_a = x_b = x^*$  para a obtenção da expressão que permite calcular os pontos fixos da diagonal, temos

$$[1 + (x^*)^\ell]^Q (x^* - 1) + [1 - (x^*)^\ell]^Q (x^* + 1) = 0. \quad (3.38)$$

Quando  $Q = 2$ , (3.38) resulta em

$$(x^*)^{2\ell} - 2(x^*)^{\ell-1} + 1 = 0, \quad (3.39)$$

anteriormente obtido na referência [18]. Para a análise de estabilidade, é necessário calcular a matriz jacobiana:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial x'_a(x_a^*, x_b^*)}{\partial x_a} & \frac{\partial x'_a(x_a^*, x_b^*)}{\partial x_b} \\ \frac{\partial x'_b(x_a^*, x_b^*)}{\partial x_a} & \frac{\partial x'_b(x_a^*, x_b^*)}{\partial x_b} \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

Temos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial x'_a}{\partial x_a} &= \frac{4mQ x_a^{m-1} x_b^{\ell-m} (1 + x_a^m x_b^{\ell-m})^{Q-1} (1 - x_a^m x_b^{\ell-m})^{Q-1}}{\left[ (1 + x_a^m x_b^{\ell-m})^Q + (1 - x_a^m x_b^{\ell-m})^Q \right]^2}, \\ \frac{\partial x'_a}{\partial x_b} &= \frac{4(\ell - m)Q x_a^m x_b^{\ell-m-1} (1 + x_a^m x_b^{\ell-m})^{Q-1} (1 - x_a^m x_b^{\ell-m})^{Q-1}}{\left[ (1 + x_a^m x_b^{\ell-m})^Q + (1 - x_a^m x_b^{\ell-m})^Q \right]^2}, \\ \frac{\partial x'_b}{\partial x_a} &= \frac{4(\ell - p)Q x_a^{\ell-p-1} x_b^p (1 + x_a^{\ell-p} x_b^p)^{Q-1} (1 - x_a^{\ell-p} x_b^p)^{Q-1}}{\left[ (1 + x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q + (1 - x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q \right]^2}, \\ \frac{\partial x'_b}{\partial x_b} &= \frac{4pQ x_a^{\ell-p} x_b^{p-1} (1 + x_a^{\ell-p} x_b^p)^{Q-1} (1 - x_a^{\ell-p} x_b^p)^{Q-1}}{\left[ (1 + x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q + (1 - x_a^{\ell-p} x_b^p)^Q \right]^2}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Se  $x_a^* = x_b^* = x^*$ , ficaremos com

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial x'_a}{\partial x_a} \right|_{x^*} &= \frac{4Q (x^*)^{\ell-1} [1 + (x^*)^\ell]^{Q-1} [1 - (x^*)^\ell]^{Q-1}}{\{[1 + (x^*)^\ell]^Q + [1 - (x^*)^\ell]^Q\}^2} \cdot m, \\
\left. \frac{\partial x'_a}{\partial x_b} \right|_{x^*} &= \frac{4Q (x^*)^{\ell-1} [1 + (x^*)^\ell]^{Q-1} [1 - (x^*)^\ell]^{Q-1}}{\{[1 + (x^*)^\ell]^Q + [1 - (x^*)^\ell]^Q\}^2} \cdot (\ell - m), \\
\left. \frac{\partial x'_b}{\partial x_a} \right|_{x^*} &= \frac{4Q (x^*)^{\ell-1} [1 + (x^*)^\ell]^{Q-1} [1 - (x^*)^\ell]^{Q-1}}{\{[1 + (x^*)^\ell]^Q + [1 - (x^*)^\ell]^Q\}^2} \cdot (\ell - p), \\
\left. \frac{\partial x'_b}{\partial x_b} \right|_{x^*} &= \frac{4Q (x^*)^{\ell-1} [1 + (x^*)^\ell]^{Q-1} [1 - (x^*)^\ell]^{Q-1}}{\{[1 + (x^*)^\ell]^Q + [1 - (x^*)^\ell]^Q\}^2} \cdot p.
\end{aligned} \tag{3.42}$$

Então a matriz jacobiana pode ser escrita como

$$\mathcal{J} = C_{Q,\ell} \mathcal{M}^T, \tag{3.43}$$

em que:

$$C_{Q,\ell} = \frac{4Q (x^*)^{\ell-1} [1 + (x^*)^\ell]^{Q-1} [1 - (x^*)^\ell]^{Q-1}}{\{[1 + (x^*)^\ell]^Q + [1 - (x^*)^\ell]^Q\}^2}, \tag{3.44}$$

e  $\mathcal{M}^T$  é a transposta da matriz de substituição, dada por

$$\mathcal{M}^T = \begin{pmatrix} m & \ell - m \\ \ell - p & p \end{pmatrix}. \tag{3.45}$$

Caso  $Q = 2$ , temos que  $C_{2,\ell}$  recai no valor anteriormente obtido na referência [18]

$$C_{2,\ell} = \frac{1 - (x^*)^{2\ell}}{1 + (x^*)^{2\ell}}. \tag{3.46}$$

Temos, também, a forma linear:

$$\begin{pmatrix} \Delta x'_a \\ \Delta x'_b \end{pmatrix} = \mathcal{J} \begin{pmatrix} \Delta x_a \\ \Delta x_b \end{pmatrix} = C_{Q,\ell} \mathcal{M}^T \begin{pmatrix} \Delta x_a \\ \Delta x_b \end{pmatrix}. \tag{3.47}$$

em que  $\Delta x_a = x_a - x_a^*$ ,  $\Delta x_b = x_b - x_b^*$ ,  $\Delta x'_a = x'_a - x_a^*$  e  $\Delta x'_b = x'_b - x_b^*$ .



Na próxima seção, reescreveremos o critério exato de relevância para qualquer valor de  $Q$ , utilizando a (3.44). De posse deste critério, retornaremos a esta análise, para alguns casos relevantes, visando a identificação de novas classes de universalidade.

### 3.3 VERSÃO SIMPLIFICADA DO CRITÉRIO EXATO DE RELEVÂNCIA

O critério de relevância para as redes hierárquicas, discutido na seção 3.1, afirma que as flutuações geométricas são relevantes se

$$|\Lambda_2| = C_{Q,\ell} |\lambda_2| > 1 . \quad (3.48)$$

Substituindo a equação (3.44) em (3.48), e utilizando que  $\lambda_2 = m + p - \ell$ , temos:

$$|\Lambda_2| = \frac{4Q(x^*)^{\ell-1} [1 + (x^*)^\ell]^{Q-1} [1 - (x^*)^\ell]^{Q-1}}{\{[1 + (x^*)^\ell]^Q + [1 - (x^*)^\ell]^Q\}^2} |m + p - \ell| > 1 . \quad (3.49)$$

Para obter as condições necessárias e suficientes de relevância das flutuações geométricas numa forma mais simples, observamos graficamente (ver exemplo para  $Q = 2$ , na figura 3.1) que  $1/C_{Q,\ell}$ , para qualquer  $Q$ , é bem ajustada por uma função afim:

$$\frac{1}{C_{Q,\ell}} = a_Q \ell + b_Q . \quad (3.50)$$

O comportamento de  $a_Q$  e  $b_Q$  com relação a  $Q$  pode ser observada nas figuras (3.2) e (3.3).

Temos duas situações a serem estudadas:

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \ m + p > \ell \\ (2) \ m + p < \ell \end{array} \right. \quad (3.51)$$

Na situação (1),  $|\lambda_2| = m + p - \ell$ . Se substituirmos a equação (3.50) em (3.48), obteremos

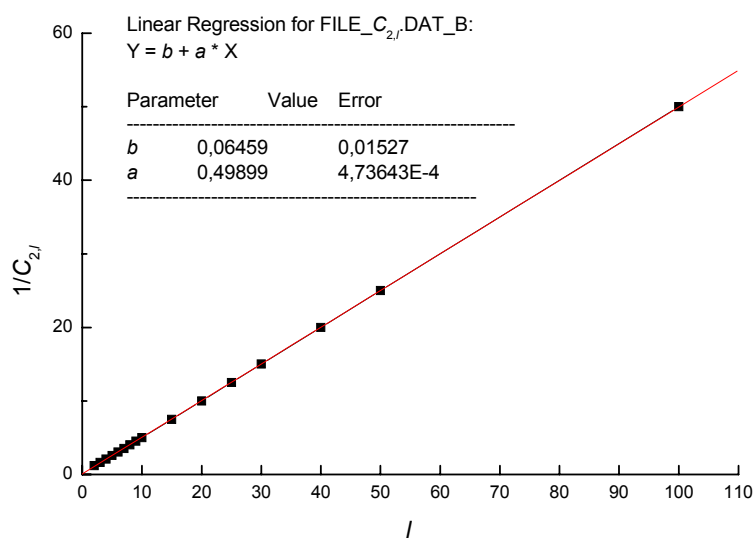


Figura 3.1: Gráfico de  $1/C_{2,\ell}$  versus módulo  $\ell$ , para o modelo de Ising na RHGD, com  $Q = 2$ .

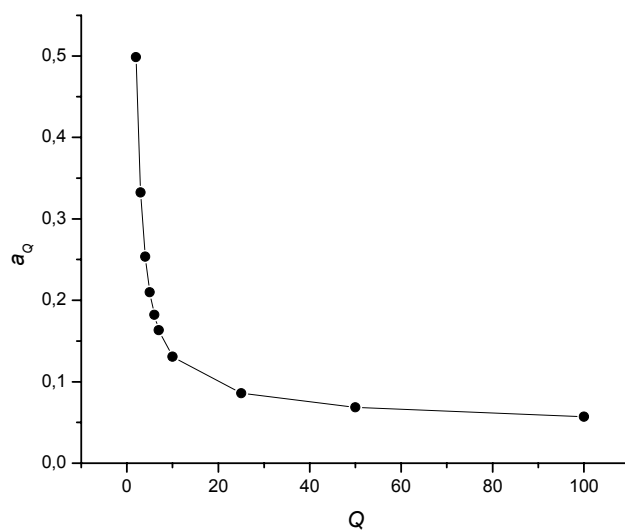


Figura 3.2: Gráfico de  $a_Q$  versus  $Q$  para o modelo de Ising na RHGD.

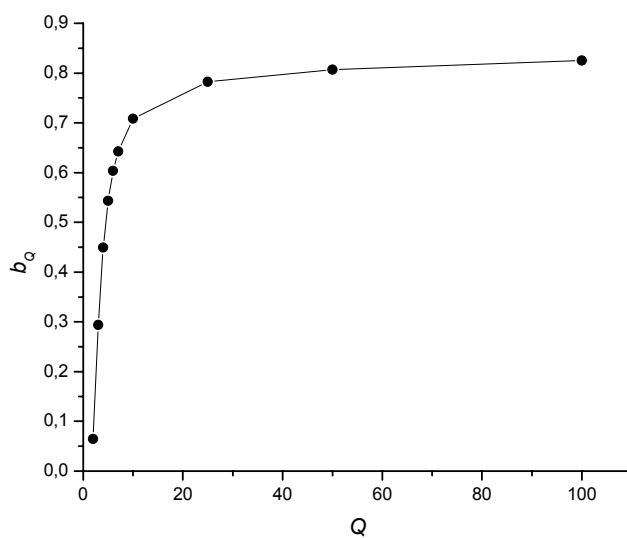


Figura 3.3: Gráfico de  $b_Q$  versus  $Q$ , para o modelo de Ising na RHGD.

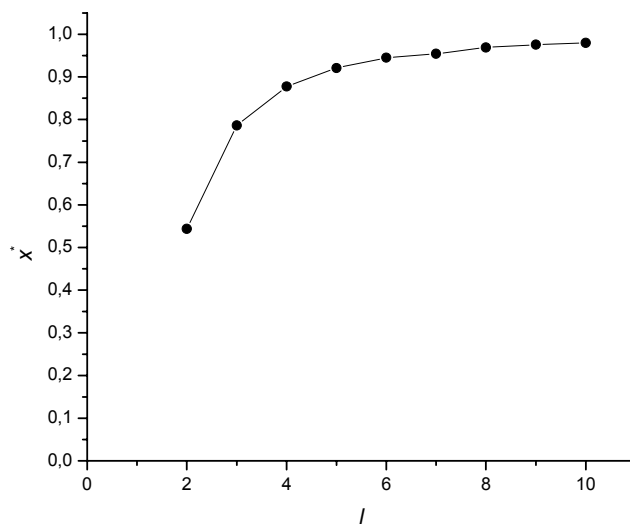


Figura 3.4: Gráfico do ponto fixo não trivial da diagonal  $x^* = \tanh(\beta J)$  versus o módulo de  $l$ , para o modelo de Ising na RHGD, com  $Q = 2$ .

$\ell$	$m$	$p$	$x^*$	$(x_a^*, x_b^*)$	$\Lambda_2$
2	-	-	-	-	-
3	1	0	0.7861	-	-1.236310
3	2	3	0.7861	(0.929807,0.786151),(0.960004,0.920064)	-1.236310
4	1	0	0.8776	-	-1.438026
4	3	4	0.8776	-	-1.438026
5	1	0	0.9210	-	-1.557557
5	1	1	0.9210	-	-1.168167
5	2	0	0.9210	-	-1.168167
5	3	5	0.9210	-	1.168167
5	4	4	0.9210	(0.980683,0.886801),(0.886801,0.980683)	1.168167
5	4	5	0.9210	-	1.557557
6	1	0	0.9449	-	-1.635912
6	1	1	0.9449	-	-1.308730
6	2	0	0.9449	-	-1.308730
6	4	6	0.9449	-	-1.308730
6	5	5	0.9449	-	-1.308730
6	5	6	0.9449	-	1.635912
7	1	0	0.9594	-	-1.693529
7	1	1	0.9594	-	-1.411274
7	1	2	0.9594	-	-1.129019
7	2	0	0.9594	-	-1.411274
7	2	1	0.9594	-	-1.129019
7	3	0	0.9594	-	-1.129019
7	4	7	0.9594	(0.959459,0.959462),(0.999984,0.999872)	1.129019
7	5	6	0.9594	-	1.129019
7	5	7	0.9594	-	1.411274
7	6	5	0.9594	-	1.129019
7	6	6	0.9594	-	1.411274
7	6	7	0.9594	-	1.693529

Tabela 3.1: Casos relevantes do modelo de Ising na RHGD para  $Q = 2$ , com parâmetros  $\ell$ ,  $m$  e  $p$  da regra de substituição, ponto fixo da diagonal  $x^*$ , coordenadas  $(x_a^*, x_b^*)$  dos pontos fixos fora da diagonal e segundo autovalor  $\Lambda_2$  associado à jacobiana do ponto fixo da diagonal.

a desigualdade

$$\frac{1}{a_Q \ell + b_Q} (m + p + \ell) > 1 . \quad (3.52)$$

Como queremos uma análise a partir dos parâmetros  $m$  e  $p$ , podemos reescrever a desigualdade (3.52) como

$$m + p > (a_Q + 1)\ell + b_Q . \quad (3.53)$$

Na situação (2),  $|\lambda_2| = -(m + p - \ell)$ . Neste caso:

$$-\frac{1}{a_Q \ell + b_Q} (m + p - \ell) > 1 . \quad (3.54)$$

Analogamente, reescreveremos a desigualdade (3.54):

$$m + p < (1 - a_Q)\ell - b_Q . \quad (3.55)$$

Resumindo, as condições necessárias e suficientes para a relevância da aperiodicidade podem ser apresentadas da seguinte forma:

$$m + p \begin{cases} > (a_Q + 1)\ell + b_Q, & \text{se } m + p > \ell \\ < (1 - a_Q)\ell - b_Q, & \text{se } m + p < \ell \end{cases} . \quad (3.56)$$

Este critério corresponde a uma simplificação do critério de relevância para o modelo de Ising na RHGD. No caso particular para  $Q = 2$ , temos, utilizando (3.56):

$$m + p \begin{cases} > (a_2 + 1)\ell + b_2 > 3\ell/2, & \text{se } m + p > \ell \\ < (1 - a_2)\ell - b_2 < \ell/2, & \text{se } m + p < \ell \end{cases} . \quad (3.57)$$

em que  $a_2 = 0.4985$  e  $b_2 = 0.06459$  (ver figura 3.1). Ainda para  $Q = 2$ , construímos o gráfico do ponto fixo uniforme  $x^*$  versus o módulo  $\ell$  (ver figura 3.4), e observamos que o valor para o ponto fixo uniforme  $x^*$  é limitado inferiormente por  $1/2$ . Na tabela (3.1),

apresentamos todos os casos relevantes para  $Q = 2$ , obtidos a partir de (3.57), com  $\ell$  variando, por exemplo, de 2 a 7.

Fixamos nossa atenção nos casos que apresentam pontos fixos fora da diagonal, o que só ocorre para  $\ell$  ímpar e  $m + p > 3\ell/2$ , como podemos observar na tabela 3.1. Quando  $\ell > 10$ , observamos que o ponto fixo uniforme se aproxima do ponto fixo de temperatura nula, não tendo sentido físico sua análise.

### 3.4 NOVAS CLASSES DE UNIVERSALIDADE

Vejamos aqui um destes casos relevantes da tabela (3.1), em que o comportamento crítico do sistema é regido por pontos fixos não triviais fora da diagonal, e não por ciclos-dois, como os que foram apresentados na seção 3.1. Faremos a análise de estabilidade e obteremos os expoentes críticos térmicos  $\alpha$  e  $\nu$ .

Considere, por exemplo, a regra de substituição genérica (3.21), com  $m = 4$  e  $p = 4$ , apresentada na tabela 3.1. Neste caso a matriz de substituição é dada por

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

cujos autovalores são  $\lambda_1 = 5$  e  $\lambda_2 = 3$ . Se considerarmos os termos de interação do modelo de Ising na RHGD, com  $Q = 2$ , de acordo com a regra de substituição (2.9), para os valores de  $m$  e  $p$  especificados acima, e fizermos uso das relações de recorrência (3.37), temos

$$\begin{cases} x'_a = 2x_a^4 x_b / (1 + x_a^8 x_b^2) \\ x'_b = 2x_a x_b^4 / (1 + x_a^2 x_b^8) \end{cases}. \quad (3.59)$$

cujos pontos fixos fora da diagonal são  $(x_a^* = 0.980683, x_b^* = 0.886802)$  e

$(x_a^* = 0.886802, x_b^* = 0.980683)$ , apresentados na tabela 3.1. Para o cálculo dos pontos fixos na diagonal, podemos utilizar a equação (3.39), resultando na equação

$$(x^*)^{10} - 2(x^*)^4 + 1 = 0. \quad (3.60)$$

que resolvida numericamente fornece  $x_a^* = x_b^* = 0.921073$ . Nesse caso, a matriz jacobiana é dada por

$$J = \begin{pmatrix} \frac{8(x^*)^4[1 - (x^*)^{10}]}{[1 + (x^*)^{10}]^2} & \frac{2(x^*)^4[1 - (x^*)^{10}]}{[1 + (x^*)^{10}]^2} \\ \frac{2(x^*)^4[1 - (x^*)^{10}]}{[1 + (x^*)^{10}]^2} & \frac{8(x^*)^4[1 - (x^*)^{10}]}{[1 + (x^*)^{10}]^2} \end{pmatrix}. \quad (3.61)$$

Se fizermos  $C = 2(x^*)^4[1 - (x^*)^{10}]/[1 + (x^*)^{10}]^2$ , ficaremos com

$$J = CM^T = C \begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix}. \quad (3.62)$$

com autovalores  $\Lambda_1 = 5C = 1.9469465$  e  $\Lambda_2 = 3C = 1.1681679$ . Observe que o ponto fixo da diagonal é instável e temos os autovetores

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (3.63)$$

para  $\Lambda_1$  e  $\Lambda_2$ , respectivamente. Como  $|\Lambda_2| = 1.1681679 > 1$ , temos que este é um caso em que as flutuações geométricas são relevantes.

Para os pontos fixos fora da diagonal, a matriz jacobiana será dada por

$$J = \begin{pmatrix} \frac{8(x_a^*)^3 x_b^* [1 - (x_a^*)^8 (x_b^*)^2]}{[1 + (x_a^*)^8 (x_b^*)^2]^2} & \frac{2(x_a^*)^4 [1 - (x_a^*)^8 (x_b^*)^2]}{[1 + (x_a^*)^8 (x_b^*)^2]^2} \\ \frac{2(x_b^*)^4 [1 - (x_a^*)^8 (x_b^*)^2]}{[1 + (x_a^*)^2 (x_b^*)^8]^2} & \frac{8x_a^* (x_b^*)^3 [1 - (x_a^*)^2 (x_b^*)^8]}{[1 + (x_a^*)^2 (x_b^*)^8]^2} \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Para ambos os pontos fixos fora da diagonal, temos os autovalores  $\Lambda_1 = 1.927538$  e  $\Lambda_2 = 0.7034737$ . Estes pontos são instáveis, e correspondem a pontos de sela hiperbóli-

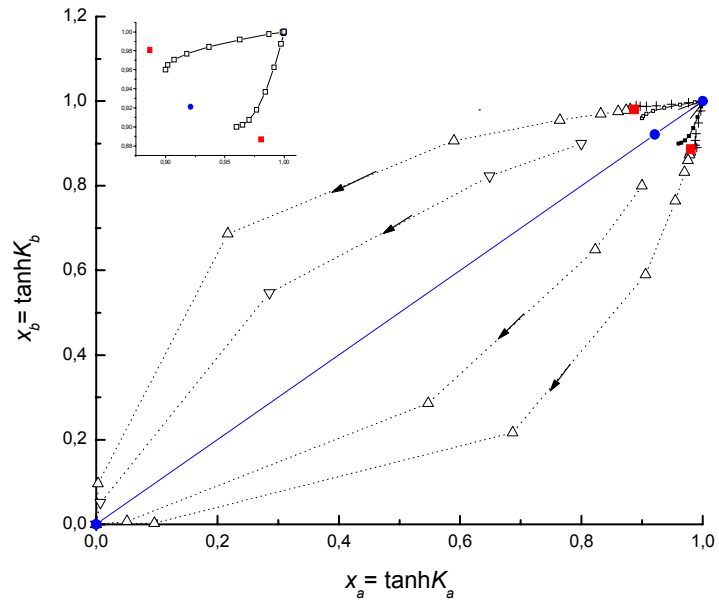


Figura 3.5: Gráfico das órbitas no espaço dos parâmetros  $x_a = \tanh K_a$  versus  $x_b = \tanh K_b$ , para o modelo de Ising na RHGD, com  $Q = 2$ ,  $m = 4$  e  $p = 4$ . Os pontos fixos estão representados por círculos. No gráfico interno, foi feita uma ampliação na região próxima aos pontos fixos fora da diagonal.

cos, como pode ser observado na figura (3.5). Neste caso, temos os autovetores

$$\begin{pmatrix} 0.1888983 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} -2.4701347 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

para o primeiro ponto fixo, e

$$\begin{pmatrix} 5.2938606 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} 0.3649456 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

para o segundo ponto fixo.

Utilizando a equação (1.49) e a relação de hiperscala (1.23), podemos calcular os



expoentes críticos térmicos  $\alpha$  e  $\nu$  através das expressões

$$\alpha = 2 - \frac{\ln 10}{\ln \Lambda} \quad \text{e} \quad \nu = \frac{\ln 5}{\ln \Lambda}, \quad (3.67)$$

em que  $\Lambda$  é o maior autovalor associado ao ponto fixo que rege o comportamento crítico do sistema. Então, temos para o caso homogêneo,  $\alpha = -1.4560$  e  $\nu = 2.4156$ , pois  $\Lambda = 1.946946$ ; no caso não puro  $\alpha = -1.5087$  e  $\nu = 2.455$ , pois  $\Lambda = 1.927538$ . Note que os expoentes críticos do caso homogêneo diferem do caso não homogêneo, já que as flutuações geométricas são relevantes, ou seja, o comportamento crítico do sistema muda com a introdução da aperiodicidade.

## Capítulo 4

# CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Apresentamos neste trabalho, numa primeira etapa, uma classificação de regras de substituição binárias uniformes quanto à periodicidade das seqüências por elas geradas. Mostramos que existem apenas três tipos de regras de substituição binárias uniformes que geram seqüências de substituição periódicas, quais sejam as regras modulares, as regras alternadas e as que geram seqüências de período 1, através de um rigoroso resultado matemático de classificação. Para a demonstração deste, utilizamos resultados já existentes na literatura [17], e algumas propriedades de números primos. Este é um resultado bastante interessante, pois permite identificar a periodicidade da seqüência em termos apenas dos parâmetros da regra que lhe dá origem. Com isso, nos modelos de spins, cujas interações são regidas por regras de substituição, é possível retirar *a priori* todas as regras que geram seqüências periódicas; visto que estas não alteram o comportamento crítico do modelo em

relação ao sistema homogêneo. Para modelos de spins em redes hierárquicas, este teorema também é de grande relevância, pois neste caso, as interações entre os spins devem estar de acordo com regras uniformes devido à topologia destas redes. Nosso estudo se restringiu às regras binárias uniformes; uma extensão natural seria a generalização deste teorema para um número qualquer de letras e para regras não uniformes. Para as regras não uniformes, uma generalização será, provavelmente, mais complexa, pois esta é uma condição utilizada na demonstração do teorema 6.

Em uma segunda etapa, estudamos o modelo de Ising na rede hierárquica do diamante, com interações aperiódicas geradas por regras de substituição binárias e uniformes. Na referência [18], são apresentados, para este modelo, com  $Q = 2$  conexões, relações de recorrência, expressões para o cálculo dos pontos fixos e uma análise de estabilidade a partir da matriz jacobiana. Aqui, generalizamos estes resultados para uma rede com  $Q$  conexões e  $\ell$  ligações por conexão, para quaisquer valores de  $Q$  e  $\ell$ . Especificamos estas expressões para  $Q = 2$ , recaindo nos resultados da referência [18]. Em seguida, reescrevemos o critério exato de relevância proposto por Pinho, Haddad e Salinas [16], com uma relação afim, em termos apenas dos parâmetros da regra de substituição, exibindo uma tabela com os casos relevantes para  $Q = 2$ . Observamos que temos casos relevantes apenas quando  $\ell$  é ímpar e  $m + p > 3\ell/2$ . Por último, estudamos, via método do grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff, um caso relevante para  $Q = 2$  e  $\ell = 5$ , em que o comportamento crítico é regido por pontos fixos, e não por ciclos-dois, como os resultados já existentes [35, 42]. Fizemos uma análise detalhada para este caso, calculando os expoentes críticos térmicos  $\alpha$  e  $\nu$ . Com relação a esta etapa, uma possível extensão seria a obtenção das expressões generalizadas

para outros modelos, como o de Potts e de polímeros, com interações geradas por quaisquer regras de substituição. Esta análise também poderia ser enriquecida com a introdução de um campo magnético no modelo de Ising e a consequente obtenção dos expoentes críticos térmicos. Desta forma, comparações com resultados obtidos através do método das matrizes de transferência para o modelo de Ising na presença de campo. Portanto, este trabalho pode servir como ponto de partida para muitos outros.

# Bibliografia

- [1] STANLEY HE, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press, New York (1971).
- [2] WILSON KG, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [3] BROWN LM, *Renormalization. From Lorentz to Landau*, Springer-Verlag, New York (1993).
- [4] GEFEN Y, MANDELBROT BB e AMMON A, *Phys. Rev. Lett.* **45** 11 (1980).
- [5] GEFEN Y, AHARONY A e MANDELBROT BB, *J. Phys. A : Math. Gen.* **16**, 1267 (1983).
- [6] KAUFMAN M e GRIFFITHS , *Phys. Rev. B* **24**, 496 (1981).
- [7] SHECHTMAN, BLECH I, GRATIAS D e CAHN JW, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [8] MERLIN R, BAJEMA K, CLARKE R, JUANG FY e BHATTACHARYA, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 1768 (1985).

- [9] LOTHAIRE M, *Combinatory on Words in Encyclopedia of Mathematics and its applications*, Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts (1983).
- [10] QUEFFÉLEC M, *Substitutional Dynamical Systems – Spectral Analysis*, Lectures Notes in Mathematics, Springer, Berlin (1987).
- [11] GRIMM U e BAAKE M, *Aperiodic Ising Models em The Mathematics of long-range aperiodic order*, editado por R. V. Moody, Kluwer Academic Publisher, Amsterdam (1997).
- [12] MCCOY BM e WU, *Phys. Rev. B* **33**, 549 (1968).
- [13] HARRIS AB, *J. Phys. C* **7**, 1671 (1974).
- [14] LUCK JM, *Europhys. Lett.* **24**, 359 (1993)
- [15] PINHO STR, HADDAD TAS e SALINAS SR, *Braz. J. Phys.* **27**, 567 (1997).
- [16] PINHO STR, HADDAD TAS e SALINAS SR, *Physica A* **257**, 515 (1998).
- [17] PINHO STR e PETIT LOBÃO TC, *Braz. J. Phys.* **30**, 772 (2000).
- [18] PINHO STR, *Modelo de Ising em Redes Aperiódicas e Criticalidade Auto-organizada*. Tese de Doutorado, IFUSP, São Paulo (1998).
- [19] ISING E, *Zeitschiriftf. Physik* **31**, 253 (1925).
- [20] BERNARDES AT, FLORÊNCIO J e DICKMAN R (editores), *Ising Centennial Colloquium*, *Braz. J. Phys.* **30**, 4 (2000)
- [21] ONSAGER L, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).

- [22] SALINAS SRA, *Introdução à Física Estatística*, Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo (1997).
- [23] MA SK, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Addison-Wesley Publishing Company, San Diego (1976).
- [24] GOLDENFELD N, *Lectures on phase transitions and renormalization group*, Addison-Wesley Publishing Company, Illinois (1992).
- [25] YEOMANS JM, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford University Press, New York (1992).
- [26] RABUSKE MA, *Introdução à Teoria dos Grafos*, Editora da UFSC, Florianópolis (1992).
- [27] WILSON RJ, *Introduction to Graph Theory*, Addison-Wesley Publishing Company, England (1972).
- [28] NETTO POBN, *Teoria e modelos de grafos*, Editora Edgard Blücher Ltda, São Paulo (1979).
- [29] ANDRADE RFS e SALINAS SR, *J. Phys. A : Math. Gen.* **17**, 1665 (1984).
- [30] LÓVON OBR, *Medida de Correlação Quântica com Potenciais de Substituição de Thue-Morse*. Dissertação de Mestrado, Instituto de Matemática da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos (1997).
- [31] LIMA MVA, *Espectro Singular Contínuo para o Operador de Schrödinger Discreto*

- com Potencial de Substituição de Fibonacci*. Dissertação de Mestrado, Instituto de Matemática da Universidade Federal de São Carlos, São Carlos (1997).
- [32] COBHAM A, *Math Systems* **6**, 164 (1972).
- [33] MAGALHÃES ACN, SALINAS SR e TSALLIS C, *J. Physica A : Math. Gen.* **31**, 1567 (1998).
- [34] HADDAD TAS, *Comportamento Crítico Universal em Ferromagnetos de Potts com Interações Aperiódicas*. Dissertação de Mestrado, IFUSP, São Paulo (1999).
- [35] HADDAD TAS, PINHO STR e SALINAS SR, *Phys. Rev. E* **161**, 3330 (2000).
- [36] ANDRADE RFS, *Phys. Rev. E* **59**, 150 (1999).
- [37] ANDRADE RFS, *Phys. Rev. E* **61**, 6 (2000).
- [38] GHOSH A, HADDAD TAS e SALINAS SR, *Intern. J. Mod. Phys. B* **14**, 14 (2000).
- [39] NOGUEIRA E, ANDRADE RFS e COUTINHO S, *Eur. Phys. J. B* **23**, 373 (2001).
- [40] HADDAD TAS e SALINAS SR, *Physica A* **308**, 98 (2002).
- [41] ANDRADE RFS e PINHO STR, Break of universality for an Ising model with aperiodic Rudin-Shapiro interactions, manuscrito submetido ao *Eur. Phys. J. B* (2003).
- [42] HADDAD TAS, PINHO STR e SALINAS SR, *Braz. J. Phys.* **30**, 772 (2000).