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

"ESTUDO DO MAPA DE BETHE-PEIERLS"

Fernando Soares de Aguiar

Tese apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, para obtenção do Título de Doutor em Ciências - Física Básica

ORIENTADOR: *Prof. Dr. Sylvio Goulart Rosa Jr.*

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

SÃO CARLOS

1992

UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física e Química de São Carlos

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560 - São Carlos - SP
Brasil

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE FERNANDO SOARES DE AGUIAR APRESENTADA AO INSTITUTO DE FISICA E QUIMICA DE SAO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SAO PAULO, EM 08/07/1992

COMISSÃO JULGADORA:

Prof.Dr.Sylvio Goulart Rosa Junior

Prof.Dr.Roberto Nicolau Onody

Prof.Dr.José Fernando Fontanari

Prof.Dr.Mário José de Oliveira

Prof.Dr.Antonio Claudio Reis de Paiva

À memória de minha mãe Alice.

AGRADECIMENTOS

- A *Deus* por tudo de bom que Dele tenho recebido.
- Aos *meus pais* pelo amor, carinho e exemplo de vida. A eles minha eterna gratidão.
- À *minha esposa Zeila* e aos *nossos filhos Fábio, Emmanuelle, João Paulo e Daniel* pelo amor, carinho, compreensão e apoio que deles nunca me faltaram. A participação deles foi importantíssima na realização desta tese.
- Ao *Prof. Sylvio*, a quem aprendi a admirar e estimar, pela orientação competente, entusiasmo contagiante e amizade sempre presentes.
- Ao *Hidembergue* pelo seu incentivo e amizade.
- Ao *Bosco e Alexandre* pelas discussões e amizade. Com eles participei dos primeiros trabalhos de pesquisa no grupo do Prof. Sylvio.
- Aos *colegas do grupo Luiz Bernardes, Pedro Santoro e Paulo Facin* pelas discussões e companheirismo. Ao *Luiz Bernardes* de modo especial por ter compartilhado com ele a mesma sala de estudos durante alguns anos.
- Ao *Abraham e Zé Luiz* pela ajuda na parte computacional, discussões e amizade.
- Ao *Melquisedech* pelas discussões e amizade.
- Aos *colegas Camilo, Gerson, Jeremias, Maurício, Miled, Nagib, Newton, Otil, Paulo Mauriz, Roberto, Salviano e Wilson* pelo companheirismo.
- Aos *casais Antônio Carlos/Elisete, Cármino/Elza, Everardo/Dulce, Nacir/Regina, Nelson/Luzia e Rui/Neusa* pela amizade.
- Às *Secretárias Cecília e Irene* pelo apoio e amizade. À *Irene* ainda pelo trabalho de digitação desta tese.
- Ao *pessoal da Biblioteca Ana, Célia, Cibele, Cristina, Neusa e Mara* pelo apoio e amizade.
- Ao *Cláudio e Valdir* pelo apoio.
- Ao *Ítalo e Eduardo* pelo apoio e amizade.
- À *Dona Ivone* pelos momentos de descontração durante o cafezinho.
- À *CAPES* pelo apoio financeiro.
- Ao *Departamento de Física da U.A.* pela minha liberação para São Carlos.
- Aos *Professores e Funcionários do IFQSC* que de alguma maneira contribuíram para o sucesso deste trabalho.

RESUMO

Nesta tese estudamos o mapa de Bethe-Peierls (B.P.). Esse mapa racional é a transformação do grupo de renormalização do modelo de Potts na rede de Bethe. Ele é parametrizado pela temperatura, pelo campo magnético, pelo número de coordenação γ e pelo número de estados p do spin de Potts. Foram feitos cálculos para determinar as regiões no espaço de parâmetros onde existe caos. Para γ par não existe órbita periódica com período maior que dois. Para $\gamma = 3$ vários resultados analíticos são obtidos pois o mapa é de grau três. Uma transformação recém descoberta nos permite restringir p ao intervalo $p \in (1, 2)$. Para $p = 1$ o mapa de B.P. torna-se um mapa polinomial de grau γ. $p = 2$ é um ponto fixo da transformação. Novas famílias de vidros de spins de Mckay-Berker-Kirkpatrick são encontrados pela determinação do valor crítico $p_c(\gamma)[p_c(3) \simeq 1.51]$. Abaixo desse valor existe bastante frustração de modo que o mapa exibirá uma fase caótica a baixa temperatura. Mostra-se também que um entendimento completo desse mapa requer a extensão da temperatura a valores complexos.

Utilizando um método mais simples desenvolvido por Christiano e Goulart Rosa foi generalizada a relação de recorrência obtida por Thompson para a magnetização local do modelo de Ising na árvore de Cayley. Seguindo seu procedimento obtivemos o funcional da energia livre do modelo de Potts na aproximação de Bethe-Peierls em termos dos atratores do mapa de B.P. A partir desse funcional obtivemos as demais grandezas termodinâmicas.

Foi mostrada também a importância do sinal do campo superficial na ordem de transição de fase do modelo de Potts e na estabilidade das fases de baixas temperaturas.

ABSTRACT

In this thesis we study the Bethe-Peierls map. This rational map is the renormalization group transformation of the Potts model on the Bethe lattice. It is parametrized by the temperature, by the magnetic field, by the coordination number γ and by the number of state p of the Potts spin. Calculations were carried out to determine the regions in the parameters space where there is chaos. For even γ there is no periodic orbit with period greater than two. For $\gamma = 3$ several analitical results are obtained since the map is of degree three. A newly discovered transformation allows us to restrict p to the interval $p \in (1, 2)$. For $p = 1$ the B.P. map becomes a polinomial map of degree γ. $p = 2$ is a fixed point of the transformation. New families of Mckay-Berker-Kirkpatrick spin-glasses are found by determining the critical value $p_c(\gamma)[p_c(3) \simeq 1.51]$. Bellow this value there is enough frustration such that the map will disply a chaotic phase at low temperature. We also shown that a complete understanding of this map requires to extend the temperature to complex values.

By using a more simple method developed by Christiano e Goulart Rosa it was generalized the recurrence relation obtained by Thompson for the local magnetization of the Ising model on the Cayley tree. Following his procedure we obtained the funtional of the free energy in terms of the atracttors of the B.P. map. From this functional we obtained the others termodynamics functions.

It was showed also the importance of the boundary field on the phase transition order of the Potts model and on the stability of the phases at low temperatures.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

CAPÍTULO 2 - ESTUDO DO MAPA DE BETHE-PEIERLS

CAPÍTULO 3 - O CASO p = 1

CAPÍTULO 4 - PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS

CAPÍTULO 5 - O PROBLEMA DA PERCOLAÇÃO

CAPÍTULO 6 - CONCLUSÃO

ÍNDICE DE FIGURAS

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1. Motivação

Sistemas dinâmicos não lineares vêm despertando nas últimas décadas um interesse crescente entre pesquisadores dos mais diversos ramos da ciência.

A explosão desse interesse em dinâmica não linear tem sido atribuída principalmente à disponibilidade de computadores cada vez mais eficientes e velozes e ao reconhecimento da importância do caos determinístico. A dificuldade de obtenção de resultados analíticos fez com que os computadores passassem a desempenhar um papel crucial no progresso recente da ciência não linear. De fato alguns pesquisadores têm usado o termo "matemática experimental" para denominar pesquisas baseadas em métodos numéricos. Desse modo o matemático experimental usa o computador para simular soluções de equações não lineares obtendo assim uma maior percepção de seus comportamentos.

A descoberta de comportamentos caóticos em sistemas que não estão submetidos a qualquer tipo de forças aleatórias mas, ao contrário, são regidos por leis determinísticas marcou o surgimento de um novo paradigma que foi batizado de caos determinístico. O caos determinístico cuja existência já havia sido prevista no final do século passado pelo matemático francês Henri Poincaré em sistemas Hamiltonianos não recebeu a devida atenção dos cientistas da época. Setenta anos depois em 1963 o meteorologista E. N. Lorenz observou que mesmo um sistema simples de três equações diferenciais não lineares de primeira ordem pode levar a trajetórias completamente caóticas. Ele descobriu um dos primeiros exemplos de caos determinístico em sistemas dissipativos. Entre os físicos, o interesse pelo estudo de sistemas não lineares foi estimulado pela publicação em 1978 de um artigo de Feigenbaum [1] que analisou uma relação de recorrência unidimensional simples que havia sido proposta

como um modelo matemático de crescimento populacional por Verhulst no século passado. Feigenbaum estudou a chamada rota para o caos via bifurcação em que, variando o único parâmetro da equação, a população inicialmente se estabiliza em um valor determinado (ponto fixo), em seguida oscila entre dois valores (ciclo de período dois), quatro valores (ciclo de período quatro) e assim por diante até que para um valor finito do parâmetro o ciclo se torna de período infinito e a partir daí o crescimento populacional se torna irregular (caótico). Ele mostrou que esse cenário de duplicação de ciclos não é peculiar somente ao modelo utilizado mas é de fato "universal" e comum a uma grande variedade de sistemas físicos, químicos e biológicos. Essa descoberta desencadeou uma avalanche de atividades teóricas e experimentais nesse campo.

Outro sistema que tem atraído a atenção de físicos e matemáticos é o modelo de Potts [2]. Este interesse é devido às realizações experimentais do modelo em diferentes sistemas físicos e às suas relações com problemas de teoria de grafos. O modelo de Potts é uma generalização do modelo de Ising, e foi sugerido em 1951, por C. Domb. Em sua versão original o sistema é constituído de spins clássicos localizados nos sítios de uma rede com cada spin podendo se posicionar em p direções coplanares igualmente espaçadas especificadas pelos ângulos

$$\Theta_n = 2\pi n/p, \qquad n = 0, 1, \ldots, p-1. \tag{1.1}$$

Cada spin interage com seus vizinhos através de um acoplamento que depende somente do ângulo relativo entre eles. Esse modelo é mais conhecido na literatura como modelo $Z(p)$ numa alusão ao grupo de simetria ao qual o sistema pertence.

A versão mais simplificada analisada por Potts considera a interação de um par de spins da forma

$$J_{ij} = J\delta_{\lambda_i\lambda_j}, \tag{1.2}$$

onde $\delta_{\lambda_i\lambda_j}$ é o delta de Kronecker definido por

$$\delta_{\lambda_i\lambda_j} = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad \lambda_i = \lambda_j \\ 0 & \text{se} \quad \lambda_i \neq \lambda_j. \end{cases} \tag{1.3}$$

O sistema é ferromagnético se $J > 0$. Nesse caso o estado fundamental consiste de p configurações em que todos os spins estão no mesmo estado. Para $J < 0$ o sistema é antiferromagnético. O estado fundamental possui $p(p-1)$ configurações em que os dois spins apontam em direções distintas. Tal versão é conhecida como modelo de Potts padrão ou simplesmente modelo de Potts. É ela que tem sido mais explorada e que será considerada neste trabalho.

Os estudos de sistemas lineares e de transição de fases em modelos de Mecânica Estatística cresceram independentemente e a teoria do grupo de renormalização (G.R.) tem sido essencial para alguns dos mais importantes avanços na compreensão desses problemas. Um dos sucessos do G.R. foi transformar o estudo de problemas de transição de fases no estudo de mapeamentos. Esses mapas são relações de recorrência obtidas eliminando-se alguns graus de liberdade da função de partição. Tal procedimento permite relacionar diagramas de fases e comportamentos críticos a propriedades do mapa: um ponto fixo estável representa uma fase, um ponto fixo parabólico representa uma transição de fase, etc. Um caso especial é o estudo de transição de fases em modelos definidos em redes hierárquicas entre as quais as árvores de Cayley constituem uma subclasse. Para esse tipo de rede a aplicação do formalismo do grupo de renormalização no espaço real (G.R.E.R.) é simples e exato. Mckay et al (M.B.K.) [3] descobriram em 1982 a existência de órbitas periódicas e caóticas em mapas do G.R.E.R. de sistemas em redes hierárquicas. Eles consideram um sistema de spins de Ising com interações competitivas não aleatórias numa rede hierárquica bastante artificial. A relação de recorrência (mapa) unidimensional obtida para o acoplamento renormalizado depende de cinco parâmetros todos eles relacionados com fatores geométricos da rede. Variando o parâmetro que mede o grau de frustração do sistema e mantendo os outros quatro fixos observaram a rota para o caos de Feigenbaum interpretando o regime caótico como sendo

uma fase vidro de spin do sistema.

O tema central desta tese é o estudo do modelo de Potts ferromagnético ou antiferromagnético na árvore de Cayley. Diferentemente do modelo de McKay, Berker e Kirkpatrick esse sistema não possui interações competitivas além de ser definido na rede hierárquica mais simples e bastante conhecida. Igualmente ao sistema de M.B.K. o modelo é exatamente solúvel e a sua solução corresponde à aproximação de campo médio de Bethe-Peierls para redes de Bravais. Essa é um refinamento da aproximação de campo médio de Bragg-Williams e consiste em tratar de maneira exata as interações de um spin com seus primeiros vizinhos, substituindo os efeitos dos demais spins do sistema por um campo médio efetivo.

Denominamos de mapa de B.P. a transformação do grupo de renormalização do modelo de Potts de p-estados na rede de Bethe [4]. Esse mapa apresenta um comportamento caótico em certas regiões do espaço de parâmetros podendo ser considerado como o exemplo mais simples do vidro de spins proposto por M.B.K. Seu estudo é de grande importância na compreensão da aproximação de campo médio do modelo de Potts que, como mostrado neste trabalho, não havia atingido o mesmo grau de desenvolvimento alcançado para o caso do modelo de Ising.

Para fixar a notação e definir claramente o sistema fazemos a seguir uma breve apresentação da rede de Bethe e da Hamiltoniana de Potts. Após obter o mapa de B.P. fazemos também a apresentação do trabalho e uma eneumeração de seus resultados.

1.2. A rede de Bethe

De acordo com Essam e Fisher [5] o termo árvore é utilizado para denominar um grafo (conjunto de vértices e arestas) conexo que não contém circuitos fechados.

A árvore de Cayley é construída da seguinte maneira: parte-se de um ponto (vértice) central "O" e liga-se esse ponto a γ outros pontos formando-se a primeira camada $S = 1$ da árvore. As camadas subseqüentes são formadas iterativamente ligando-se a cada ponto

da última camada S, $\gamma - 1$ novos pontos formando-se uma nova camada externa $S + 1$. Os vértices da camada mais externa são denominados superficiais. Eles, diferentemente dos demais que possuem γ vizinhos, estão ligados a somente um outro vértice da camada S. A figura (1.1) mostra uma árvore de Cayley, construída da maneira acima descrita com três camadas ou gerações e com número de coordenação $\gamma = 3$.

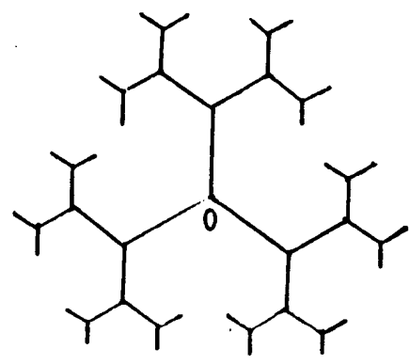


Fig. 1.1. Árvore de Cayley com 3 camadas e número de coordenação 3.

Uma peculiaridade da árvore de Cayley é que no limite termodinâmico, quando o número de camadas cresce indefinidamente, a razão entre o número de vértices superficiais e o número de vértices interiores não tende para zero, como acontece com as redes regulares. Isso implica numa participação importante dos spins superficiais nos cálculos das propriedades termodinâmicas dos modelos definidos nesse tipo de árvore. Para eliminar os efeitos de superfície costuma-se considerar somente propriedades locais dos spins que se encontram no interior da rede infinitivamente afastados da camada superficial. Os sítios infinitamente afastados da superfície são todos equivalentes por possuirem a mesma valência γ formando o que costuma-se denominar de rede de Bethe.

1.3. O Modelo de Potts na Árvore de Cayley

O modelo de Potts com interações entre primeiros vizinhos, na árvore de Cayley, na ausência de um campo magnético externo, possui solução trivial [6]. Entretanto quando submetido a um campo magnético o modelo exibe, como uma conseqüência dos efeitos superficiais, uma transição de ordem contínua descoberta por Müller-Hartmann e Zittartz [7]. Essa transição é caracterizada pela existência na expressão da energia livre de um termo com dependência no campo cujo expoente varia continuamente com a temperatura. Por outro lado eliminando-se os efeitos de superfície, pode-se estudar as propriedades termodinâmicas locais na rede de Bethe que reproduzem os resultados de campo médio de Bethe-Peierls. Nesse caso o modelo apresenta uma transição de primeira ou segunda ordem dependendo do número de estados p e do sinal do campo superficial H_S [8].

Para descrever o sistema de spins de Potts com p-estados na árvore de Cayley aberta, na presença de um campo magnético externo, Christiano e Goulart Rosa [4] consideraram os spins dispostos na árvore de Cayley assimétrica fechada (A.C.A.F.). As interações com o spin "fantasma" simulam as interações com o campo externo (Fig. 1.2).

A Hamiltoniana do sistema de spins de Potts na ACAF é escrita na forma

$$\mathcal{H} = -pJ \sum_{<ij>} \delta_{\lambda_i \lambda_j} - pH \sum_i \delta_{\lambda_i \lambda_g} - pH_S \sum_S \delta_{\lambda_S \lambda_g} \tag{1.4}$$

onde o primeiro somatório é feito sobre todos os pares $< ij >$ de sítios vizinhos mais próximos, o segundo (terceiro) é sobre todos os sítios no (a) interior (superfície) da árvore e λ_g é o spin fantasma. Congelando-se o spin fantasma em qualquer um de seus p-estados recupera-se a Hamiltoniana para o mesmo sistema na árvore de Cayley aberta na presença de um campo magnético externo [4].

Utilizando-se a representação para as variáveis de Potts, como raízes da unidade [9]

$$\lambda_j = \omega^{K_j} \ , \ \omega = exp(2\pi i/p) \ , \ k_j = 0, 1, \ldots, p-1 \tag{1.5}$$

Podemos reescrever a Hamiltoniana (1.3.1) nessa representação como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<ij>} \sum_{r=0}^{p-1} \lambda_i^r \lambda_j^{p-r} - H \sum_i \sum_{r=0}^{p-1} \lambda_i^r \lambda_g^{p-r} - H_S \sum_S \sum_{r=0}^{p-1} \lambda_s^r \lambda_g^{p-r} \tag{1.6}$$

onde fizemos o uso da identidade

$$\delta_{\lambda_i \lambda_j} = p^{-1} \sum_{r=0}^{p-1} \lambda_i^r \lambda_j^{p-r} \tag{1.7}$$

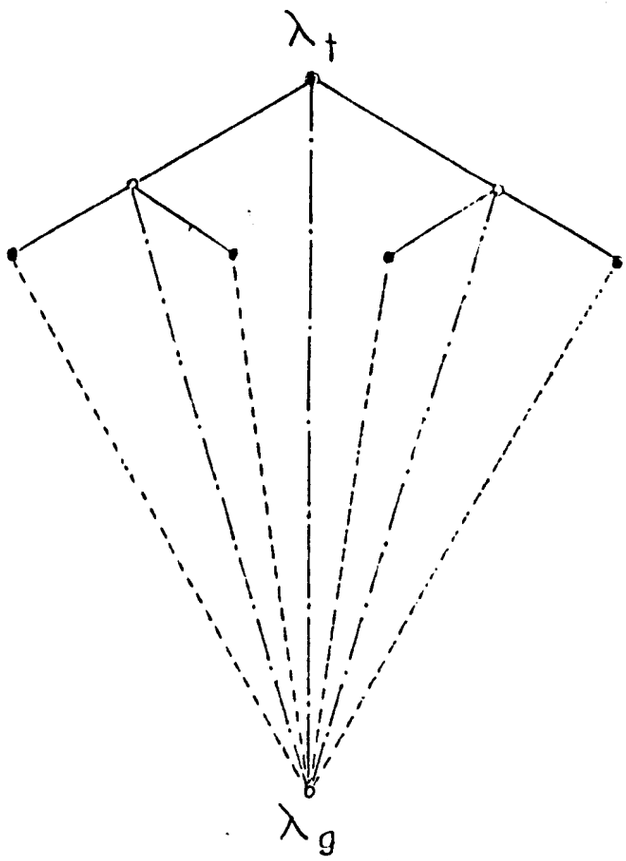


Fig. 1.2. Ramo da árvore de Cayley assimétrica fechada com número de coordenação $\gamma = 3$ e com duas camadas (gerações). O ramo com uma camada a mais é obtido substituindo cada ligação tracejada pelo aglomerado elementar (cut diamond). Esse aglomerado é formado por duas ligações sólidas representando o acoplamento J, duas ligações tracejadas representando o campo renormalizado H_n e pela ligação "traço-ponto" (o campo magnético externo) unindo o spin fantasma com o seu spin do topo. A árvore é formada ligando os sítios do topo de cada um dos três ramos a um sítio extra central.

A vantagem de definir o sistema na árvore fechada é o caráter hierárquico de seus ramos tornando possível a aplicação do formalismo do grupo de renormalização no espaço real de uma maneira simples e exata. Isso é feito pela introdução da função correlação do par $\langle \lambda_i^r \lambda_j^{p-r} \rangle$, também denominada de transmissividade térmica [10].

$$\langle \lambda_i^r \lambda_j^{p-r} \rangle \equiv t(J_{ij}) \equiv \left[1 - t^D(J_{ij})\right] / \left[1 + (p-1)t^D(J_{ij})\right] \quad . \tag{1.8}$$

onde

$$t^D(J_{ij}) \equiv exp(-p\beta J_{ij}) \tag{1.9}$$

1.4. O Mapa de Bethe-Peierls

A transmissividade térmica é a variável mais conveniente para a implementação do GRER devido às suas regras de composição simples [10]. Por exemplo, se três spins nos sítios i, j, k estão ligados em série através das constantes de acoplamento J_{ij}, J_{jk} a transmissividade equivalente $t(J_{eq})$ entre os spins externos é dada pelo produto $t(J_{ij})t(J_{jk})$. Se por outro lado existem dois spins nos sítios i e j ligados em paralelo pelos acoplamentos J_{ij} e K_{ij} a transmissividade dual equivalente $t^D(J_{eq})$ é o produto $t^D(J_{ij})t^D(K_{ij})$.

Aplicando-se agora essas regras de composição às transmissividades do aglomerado gerador do ramo da árvore (Fig. 1.3), obtém-se

$$X_{n+1} = B(X_n, t, H, p, \gamma) = \frac{1 - G(X_n, t, H, p, \gamma)}{1 + (p-1)G(X_n, t, H, p, \gamma)} \tag{1.10}$$

onde

$$G(X_n, t, H, p, \gamma) = e^{-\beta p H} \left[\frac{1 - tX_n}{1 + (p-1)tX_n}\right]^{\gamma - 1}, n = 0, 1, \ldots \tag{1.11}$$

e

$$X_n = \frac{1 - X_n^D}{1 + (p-1)X_n^D} \quad , \quad X_n^D = exp(-p\beta H_n) \quad , \quad X_0 = X_S. \tag{1.12}$$

Observamos que H_n é o campo efetivo (renormalizado) que atua sobre um spin na n-ésima camada contada a partir da superfície.

A relação de recorrência (1.10) foi denominada, por Christiano e Goulart Rosa, de mapa de Bethe-Peierls. É um mapa racional relacionando os campos efetivos que atuam em spins localizados em duas camadas consecutivas da árvore. Ele é parametrizado pela "temperatura reduzida" $t(J)$, pelo campo externo H, pelo número de coordenação γ (que determina seu grau) e pelo número de estados da variável de spin p.

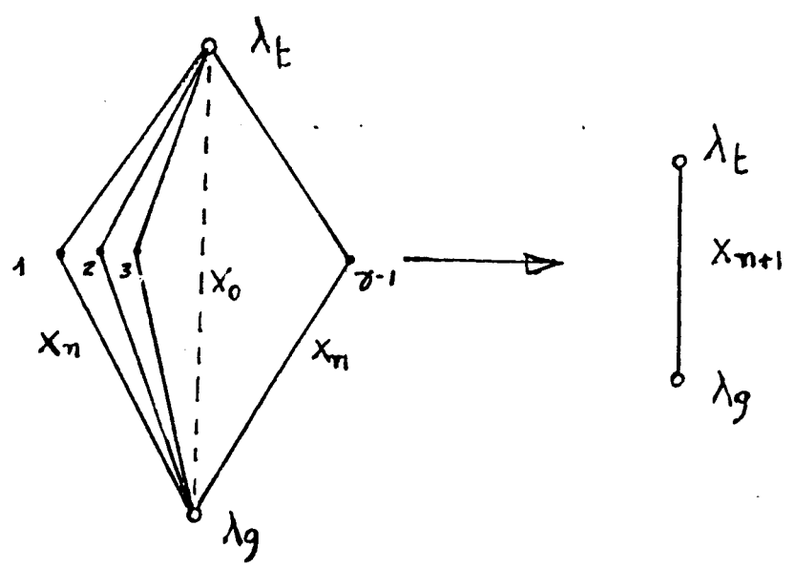


Fig. 1.3. Aglomerado elementar gerador do ramo da árvore de Cayley assimétrica fechada.

1.5. Resultados

Os principais resultados desta tese são:

(a) A descoberta de uma simetria do mapa de B.P.[11]. Como conseqüência dessa simetria mostra-se que o funcional da energia livre na aproximação de campo médio do modelo de Potts p-estados é mapeado, através de operações de dilatação e de inversão do campo magnético e do parâmetro de ordem, na energia livre do modelo $p' = (p/(p-1))$-estados. Esse mapeamento permite que o estudo desse funcional no intervalo $p\epsilon(1,2)$ forneça o comportamento termodinâmico do sistema para todo $p > 2$. O caso $p = 2$ corresponde ao ponto fixo da transformação de simetria e o comportamento do modelo de Ising já está bem estabelecido. A simetria não se aplica ao caso $p = 1$.

(b) Foi obtida uma expressão fechada e geral para o funcional da energia livre [12] na fase antiferromagnética que não temos conhecimento na literatura. Isso é conseguido definindo-se uma funções "hiperbólicas generalizadas" que permitem escrever o mapa de B.P. numa forma análoga ao do modelo de Ising. Utilizando-se os atratores do mapa escrito nessa forma e um formalismo simples desenvolvido por Christiano e Goulart Rosa [4] obtém-se uma expressão para a magnetização do modelo de Potts na rede de Bethe em termos desses atratores e então, seguindo o esquema de integração da magnetização usado por Thompson [13] para o modelo de Ising, chega-se diretamente à expressão para o funcional da energia livre para qualquer $p\epsilon(1,2)$. Queremos enfatizar que o procedimento de escrever o mapa de B.P. na forma dada pela eq. 4.9 limita a região de definição do mapa àquela parte do seu diagrama de bifurcação onde ele possui somente pontos fixos e ciclos duplos. Nessa região o sistema é fisicamente bem definido e livre das patologias que são introduzidas quando se estende o espaço de parâmetros do mapa de B.P.

(c) Para $J > 0$ mostramos também a importância do sinal do campo superficial H_S na determinação do ponto fixo do mapa [4] bem como na estabilidade da fase de baixa temperatura [8] : Baixando-se a temperatura com $H_S > 0$, um sistema com $p < 2 (p > 2)$ sofre uma transição de fase de segunda (primeira) ordem para uma fase

metaestável (estável). Para $H_S < 0$ ocorre uma transição de segunda (primeira) ordem se $p > 2(p > 2)$. Nesse caso o sistema também, apresenta uma entropia residual que é negativa para $p < 2$. O conceito de bacia atratora de um mapa é de fundamental importância na discussão deste item.

(d) A construção do diagrama de fases [14] no espaço de parâmetro $t - h$ para o caso $p = 1$, com $\gamma = 3$. Mostra-se que nesse caso o mapa de B.P. é topologicamente conjugado ao mapa logístico apresentando rota para o caos quando se considera o acoplamento antiferromagnético. Devido o tipo de rede e o caráter polinomial do mapa esse é o exemplo mais simples que se conhece de um vidro de spin do tipo Mckay, Berker e Kirkpatrick. A generalização para γ qualquer também foi considerada [15] mostrando-se sua conjugação com o mapa $X^{(\gamma-1)}+C$. Fazendo -se a identificação da transmissividade térmica t (na região de $t > 0$) com a probabilidade da ligação estar presente mostrou-se [14] a conexão do modelo de Potts para $p = 1$ com a teoria de campo médio da percolação de ligações. Foi calculado o parâmetro de ordem, sua susceptibilidade, a energia interna e o calor específico bem como os comportamentos assintóticos dessas grandezas no ponto crítico para-ferro.

(e) Foi mostrada a existência de um valor crítico $p_c \simeq 1.51$ para o número de estados da variável de Potts, acima do qual não é possível existir a fase caótica na região física. Tal valor é determinado numericamente utilizando-se o coeficiente de Liapunov como indicador do caos.

(f) Foi reobtido o mapa de Bragg-Williams (BW) como caso particular do mapa de Bethe Peierls no limite de γ infinito.

1.6. Apresentação do Trabalho

Esta tese está organizada da seguinte forma:

No capítulo 2 estuda-se o mapa determinando-se:

(a) Simetria do mapa

(b) Pontos críticos (máximo, mínimo e pontos de inflexão)

(c) Pontos fixos e estabilidades

(d) Diagramas de bifurcação com obtenção de alguns valores do parâmetro t onde ocorrem "transições"

(e) Mapa de BW (limite γ infinito)

No capítulo 3 o estudo realizado é aplicado ao caso particular $p = 1$. Mostra-se sua conjugação com o mapa logístico e a generalização para número de coordenação qualquer.

No capítulo 4 obtem-se o funcional da energia livre, discute-se os problemas de ordem de transição, estabilidade de fases, violações de convexidade e conseqüências das propriedades de simetria do mapa.

No capítulo 5 discute-se o problema da percolação que é obtido como o caso particular $p = 1$.

Finalmente no capítulo 6 apresenta-se as conclusões e trabalhos futuros.

Três apêndices fazem parte desta tese. No apêndice A mostra-se as definições e algumas propriedades das funções hiperbólicas generalizadas utilizadas no trabalho. No B obtém-se o funcional da energia livre utilizando-se o método de Baumgärtel [16]. Finalmente no C apresentamos alguns cálculos intermediários.

CAPÍTULO 2

ESTUDO DO MAPA DE BETHE-PEIERLS

2.1. Introdução

Neste capítulo fazemos um estudo numérico e analítico do mapa de Bethe-Peierls.

O mapa de B.P., como já foi dito no capítulo introdutório, é a transformação do grupo de renormalização no espaço real do modelo de Potts com p estados na árvore de Cayley. É um mapa racional uni-dimensional cujo espaço de parâmetros é formado pela temperatura reduzida t, pelo campo magnético externo H, pelo número de estados p que mede o grau de frustração presente e pelo número de coordenação γ. O número de coordenação é o único fator geométrico da rede hierárquica que aparece no mapa de B.P. e determina o seu grau.

A seguir apresentamos uma breve discussão dos diversos parâmetros.

Apesar da região física da temperatura reduzida estar restrita ao intervalo $-1/(p-1) < t < 1$, como pode ser visto das equações (1.8) e (1.9), estende-se seu domínio para qualquer t real a fim de se obter um entendimento mais abrangente do mapa.

O sinal do campo superficial H_s (condição inicial) tem influência no comportamento assintótico do mapa [8] sendo um fator determinante na ordem de transição de fase bem como na estabilidade da fase de baixa temperatura do sistema, como será discutido em detalhes no capítulo 4.

O parâmetro p tem uma relevância muito grande pois é de certa forma uma medida da frustração presente no sistema. Quanto maior for o valor de p, menor será a frustração presente no modelo. Aumentando-se o número de estados de variáveis de Potts eleva-se o número de possibilidades de configurações que satisfazem a condição de mínimo de energia.

O exemplo da fig. 2.1 ilustra esse fato.

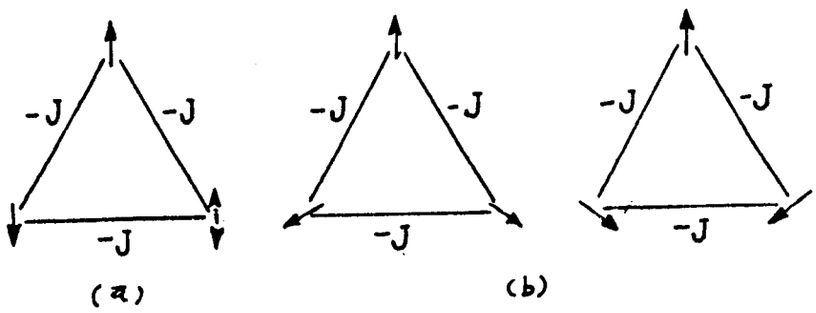


Fig. 2.1. Uma rede triangular de spins ilustrando a "frustração". Em (a), $p = 2$ (Ising) não existe arranjo que satisfaça todos os vículos microscópicos e dizemos que o spin no vértice inferior do lado direito do triângulo está frustrado. Em (b), para $p = 3$ existem as duas possibilidades de acomodação desse spin, mostradas na figura, e o sistema agora não possui mais frustração.

Devido a uma nova simetria que descobrimos para o modelo de Potts na árvore de Cayley[11] pode-se restringir o domínio do parâmetro p ao intervalo $p \in (1, 2)$. Como será mostrado na seção 2.2 isso é suficiente para se obter um conhecimento para todo p positivo diferente de 1. O caso $p = 2$ (Ising) corresponde ao ponto fixo da transformação e para o caso $p = 1$ a simetria não se aplica. O caso $p = 1$ será estudado à parte no capítulo 3. O intervalo $p \in (0, 1)$ é mapeado pela transformação no intervalo de p negativo. No intervalo $p \in (0, 1)$ o mapa apresenta singularidades. Esse problema não será tratado nesta tese constando de planos de pesquisa futuros.

A paridade do parâmetro γ desempenha um papel destacado no comportamento dinâmico do mapa de B.P. Para γ par ou infinito o mapa se torna um homeomorfismo e como tal não pode apresentar ciclos com período maior que dois [17] como acontece com o modelo de Ising sem campo. Contudo para γ impar e p diferente de dois o comportamento dinâmico do mapa se torna rico e seu estudo se faz bastante atrativo. No limite de γ infinito o mapa

de B.P. se transforma no mapa de Bragg-Williams (B.W.). Esse mapa é uma relação de recorrência correspondente à aproximação de ordem zero de campo médio (aproximação de B.W.) do modelo de Potts com p estados.

Neste trabalho grande parte dos resultados analíticos são alcançados para o caso particular em que o número de coordenação $\gamma = 3$. O comportamento dinâmico do mapa de B.P. com $\gamma = 3$ é característico para todos os valores de γ ímpares.

O mapa de B.P. é um dos mapas mais importantes em Mecânica Estatística pois contém todas as informações para a discussão do comportamento termodinâmico. Portanto o seu estudo é de grande valia para o conhecimento completo da teoria de campo médio do modelo de Potts.

2.2. Simetrias do Mapa de B.P.

Um dos resultados mais importantes extraído do estudo do mapa de B.P. foi a descoberta de uma nova simetria para o modelo de Potts que permite restringir drasticamente o domínio do parâmetro p. Essa simetria é verificada da seguinte maneira:

O mapa de B.P., como já foi visto, é dado por

$$X_{n+1} = B(X_n, t, H, p, \gamma) = \frac{1 - G(X_n, t, H, p, \gamma)}{1 + (p-1)G(X_n, t, H, p, \gamma)} \; . \tag{2.1}$$

onde

$$G(X_n, t, H, p, \gamma) = \exp(-\beta p H) \left[\frac{1 - tX_n}{1 + (p-1)tX_n} \right]^{\gamma - 1} \tag{2.2}$$

Aplicando-se as operações de dilatação e inversão ao campo magnético

$$H \rightarrow -(p' - 1)H' \tag{2.3}$$

e ao parâmtro de ordem

$$X_n \rightarrow -(p' - 1)X'_n \tag{2.4}$$

onde

$$p - 1 \rightarrow (p' - 1)^{-1} \tag{2.5}$$

obtém-se de (2.2) que

$$G(X_n, t, H, p, \gamma) = \exp(\beta p' H') \left[\frac{1 + (p' - 1)tX'_n}{1 - tX'_n}\right]^{\gamma - 1} = \left[G(X'_n, t, H', p', \gamma\right]^{-1} \tag{2.6}$$

Substituindo-se (2.6) em (2.1) vem que

$$\begin{aligned} B(X_n, t, H, p, \gamma) &= \frac{1 - \left[G(X'_n, t, H', p', \gamma\right]^{-1}}{1 + (p' - 1)\left[G(X'_n, t, H', p', \gamma\right]^{-1}} \\ &= -(p' - 1)\frac{1 - \left[G(X'_n, t, H', p', \gamma\right]}{1 + (p' - 1)\left[G(X'_n, t, H', p', \gamma\right]} \end{aligned} \tag{2.7}$$

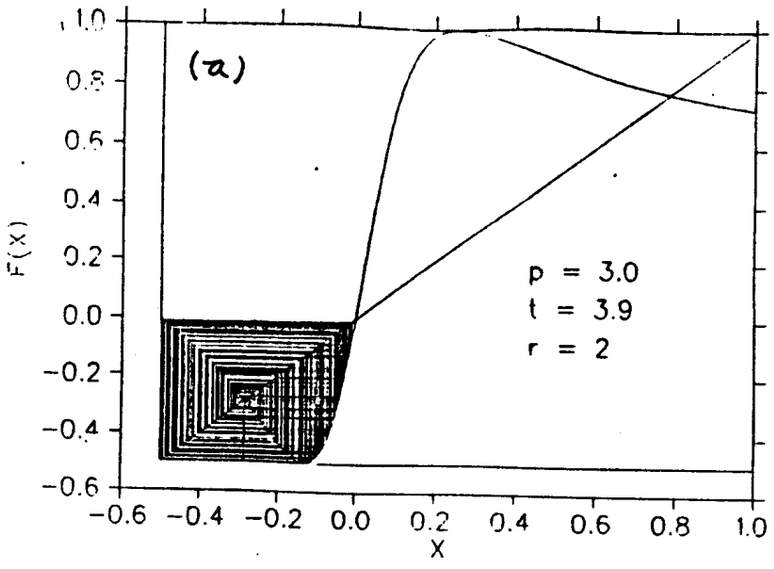
Portanto

$$B(X_n, t, H, p, \gamma) = -(p' - 1)B(X'_n, t, H', p', \gamma) \tag{2.8}$$

Essa relação mostra que escalando-se X_n, H e p conforme (2.3) - (2.5) as transformações de dilatação e inversão deixam o mapa de B.P. invariante.

Observemos que o fato de se escalar o campo magnético é uma conseqüência de se ter escrito o número de estado p como um pré-fator na Hamiltoniana. Isso foi feito de modo que todas as quantidades trasnformem da mesma maneira.

A relação (2.8) pode ser constatada observando-se, por exemplo, as figuras 2.2 e 2.3 para os valores de $p = 3$ e $p' = 3/2$.



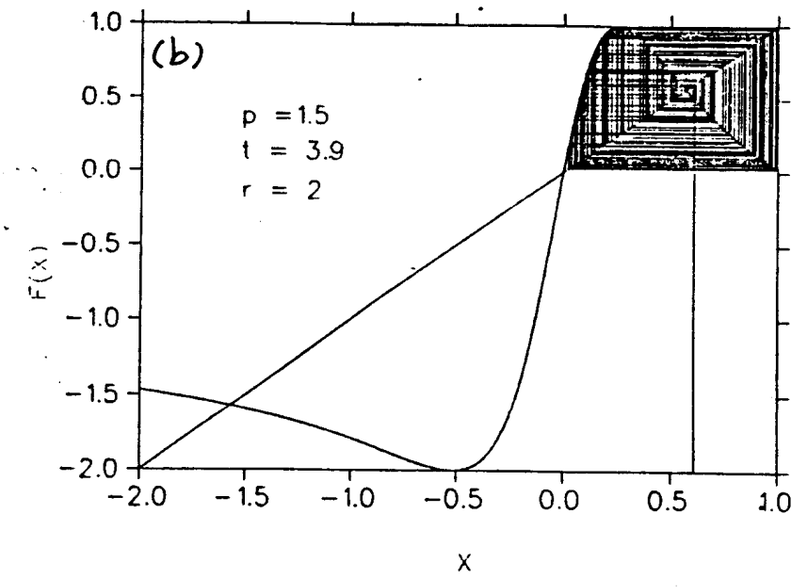
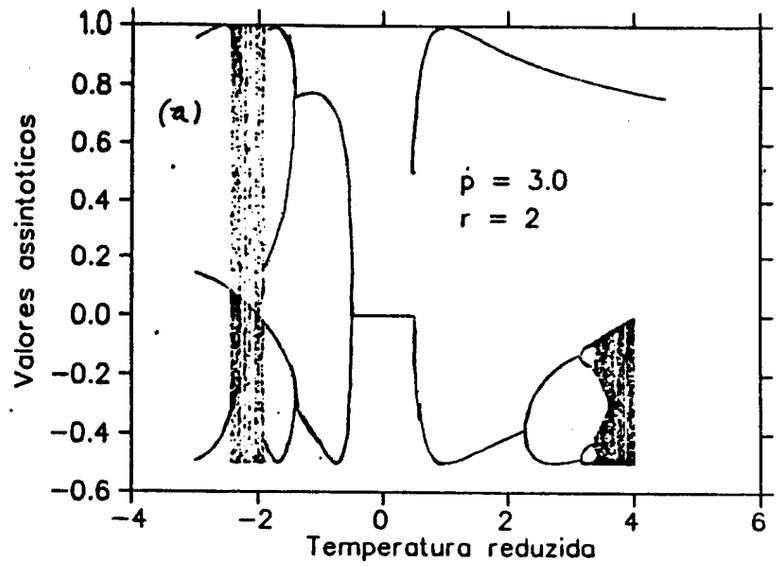


Fig. 2.2. Mapa de B.P. com $\gamma = 3$ mostrando o processo iterativo e onde a relação (2.8) pode ser constatada. Em (a) para $p = 3$ e em (b) para $p = 3/2$.



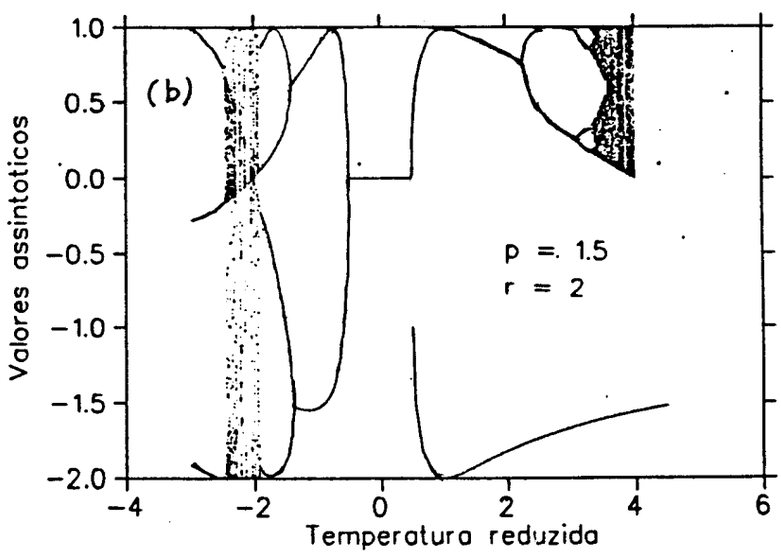


Fig. 2.3. Diagrama de bifurcação do mapa de B.P. que confirma a relação (2.8). Em (a) para $p = 3$ e em (b) para $p = 3/2$.

Uma outra simetria similar é obtida fixando-se X_n e em seu lugar transformando-se a temperatura reduzida.

$$t \rightarrow -(p' - 1)t'. \tag{2.9}$$

Substituindo-se então (2.3), (2.5) e (2.9) em (2.2) implica que

$$G(X_n, t, H, p, \gamma) = \exp(\beta p' H') \left[\frac{1 + (p' - 1)t' X_n}{1 - t' X_n}\right]^{\gamma - 1} = \left[G(X_n, t', H', p', \gamma\right]^{-1} \tag{2.10}$$

que de maneira análoga, quando substituída em (2.1), resulta em

$$B(X_n, t, H, p, \gamma) = -(p' - 1)B(X_n, t', H', p', \gamma) \tag{2.11}$$

As figuras 2.4 e 2.5 ilustram essa última simetria, quando comparadas com as figuras 2.2a e 2.3a respectivamente.

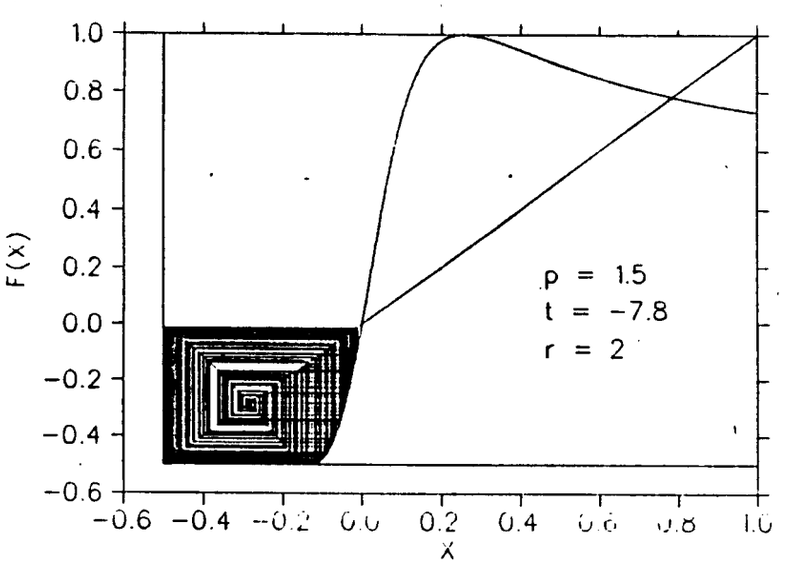


Fig. 2.4. Gráfico do mapa $F(X) = -(p-1)B(X)$ mostrando o processo iterativo e onde a relação (2.11) pode ser constatada.

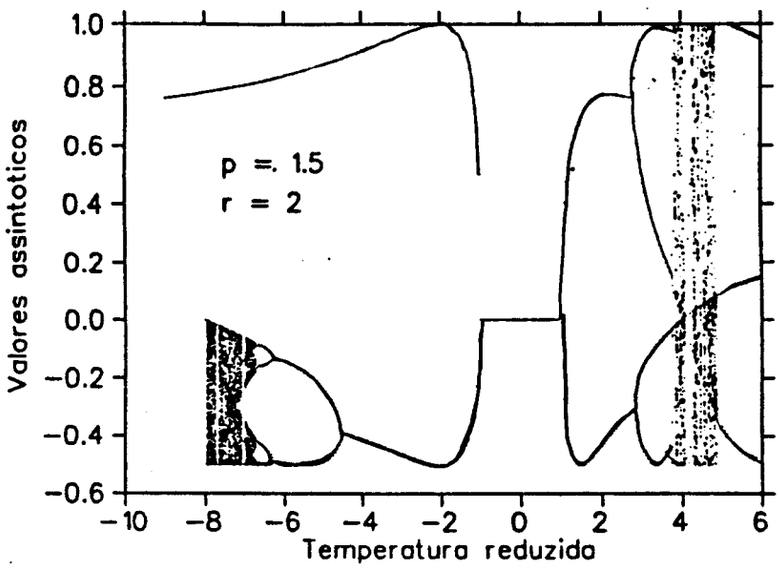


Fig. 2.5. Diagrama de bifurcação do mapa $F(X) = -(p-1)B(X)$ que comprova a relação (2.11).

Deve-se ressaltar que as relações (2.8) e (2.11) aplicam-se também para o caso de γ infinito. Nesse limite o mapa de B.P. é transformado no mapa de B.W. que é dado por

$$X_{n+1} = W(X_n, \beta, J, H, p) = \frac{1 - \exp\left[-\beta p(H + JX_n)\right]}{1 + (p-1)\exp\left[-\beta p(H + JX_n)\right]} \tag{2.12}$$

Aplicando-se as transformações (2.3), (2.4) e (2.5) ao mapa de B.W., obtem-se

$$\begin{aligned} X_{n+1} = W(X_n, \beta, J, H, p) &= \frac{1-\exp\left[-\beta p'(H'+JX'_n)\right]}{1+(p'-1)^{-1}\exp\left[-\beta p'(H'+JX'_n)\right]} \\ &= -(p'-1)\frac{1-\exp\left[-\beta p'(H'+JX'_n)\right]}{1+(p'-1)\exp\left[-\beta p'(H'+JX'_n)\right]} \end{aligned} \tag{2.13}$$

Portanto

$$W(X_n, \beta, J, H, p) = -(p' - 1)W(X_n', \beta, J, H', p') \tag{2.14}$$

Para obter-se a segunda relação entre os mapas de B.W. quando se transforma a temperatura reduzida procede-se como na determinação da expressão (2.11) substituindo entretanto a transformação (2.9) por

$$J \rightarrow -(p' - 1)J' \tag{2.15}$$

que resulta em

$$X_{n+1} = W(X_n, \beta, J, H, p) = \frac{1 - \exp\left[-\beta p'(H' + J'X_n)\right]}{1 + (p' - 1)^{-1} \exp\left[\beta p'(H' + J'X_n)\right]} \tag{2.16}$$

que naturalmente conduz a

$$W(X_n, \beta, J, H, p) = -(p' - 1)W(X_n, \beta, J', H', p') \tag{2.17}$$

Provadas essas simetrias daqui por diante podemos restringir os valores de p ao intervalo $p \in (1, 2)$. Para $p = 1$ os denominadores dos mapas de B.P. e B.W. se transformam na unidade. Esse caso será tratado separadamente no capítulo 3. Para $p = 2$ recupera-se as relações de recorrência de campo médio do modelo de Ising.

2.3. Análise do mapa

Nesta seção determina-se os pontos críticos, singularidades e valores assintóticos do mapa sem levar em consideração a sua dinâmica que será discutida nas seções 2.4 e 2.5.

A figura 2.6 mostra dois gráficos do mapa de B.P. para t positivo e negativo que servirão como referência nessa seção.

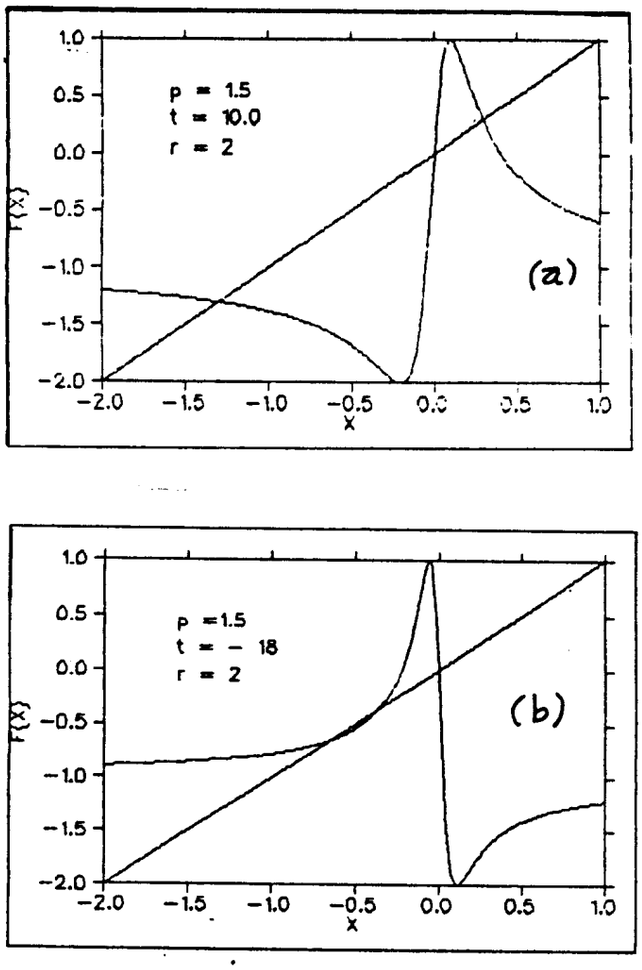


Fig. 2.6. Gráficos do mapa de B.P. com $\gamma = 3$, $p = 3/2$ e para valores de t positivo (a) e negativo (b).

2.3.1 Pontos Críticos

Derivando-se, em relação a X_n, a expressão (2.1) do mapa de B.P. obtem-se

$$X_n' = B'(X_n, t, H, p, \gamma) = \frac{(\gamma - 1)p^2 h^D t\{(1 - tX_n)[1 + (p-1)tX_n]\}^{\gamma-2}}{\{[1 + (p-1)tX_n]^{\gamma-1} + (p-1)h^D(1 - tX_n)^{\gamma-1}\}^2} \tag{2.18}$$

Analisando a expressão da derivada acima vê-se que ela se anula nos pontos

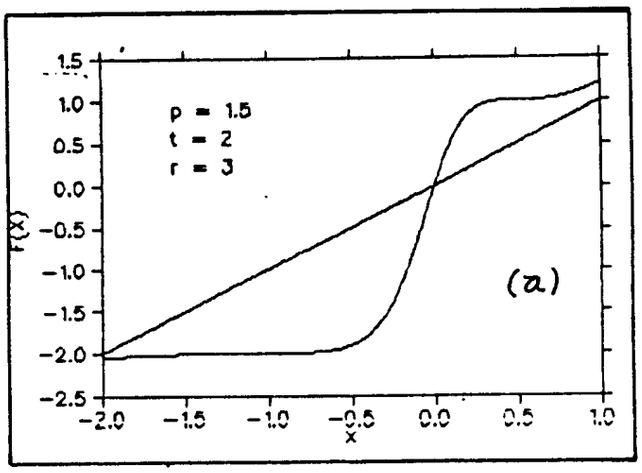
$$X_n^{(1)} = 1/t \tag{2.19}$$

$$X_n^{(2)} = 1/(p-1)t = -(p' - 1)X_n^{(1)} \tag{2.20}$$

Essa relação entre $X_n^{(1)}$ e $X_n^{(2)}$ é conseqüência da transformação (2.4).

Portanto o papel desempenhado por $X_n^{(1)}$ para p é o mesmo desempenhado por $X_n^{(2)}$ para $p' = p/(p-1)$. Tal observação pode ser constatada nas figuras 2.2 e 2.3.

A paridade do número de coordenação γ, como foi dito na seção 2.1, desempenha um papel importante no comportamento do mapa. Se γ for par a derivada $B'(X_n, t, H, p, \gamma)$, para valores diferentes de $X_n^{(1)}$ e $X_n^{(2)}$, será sempre positiva ou negativa dependendo do sinal de t. Assim, nesse caso, o mapa de B.P. é um homeomorfismo e portanto os pontos $X_n^{(1)}$ e $X_n^{(2)}$ são pontos de inflexão (veja figuras 2.7).



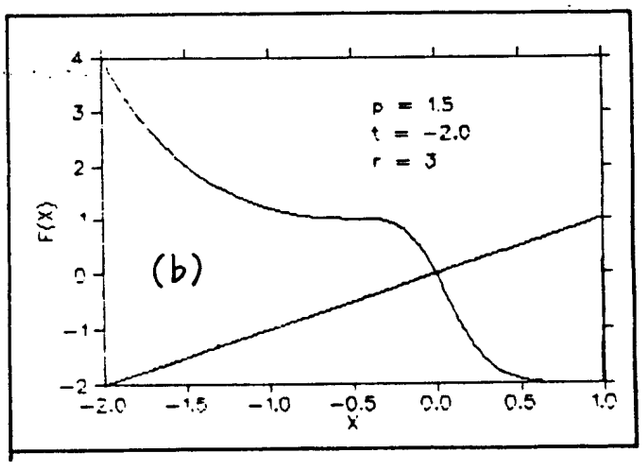


Fig. 2.7. Gráficos do mapa de B.P. para o caso de γ par para valores de t positivo em (a) e negativo em (b).

Para γ impar, o sinal da derivada $B'(X_n, t, H, p, \gamma)$ será determinada pelos sinais de t e do produto

$$P(X_n, t) = (1 - tX_n)[1 + (p-1)tX_n] \tag{2.21}$$

que aparece no numerador de (2.18). Devemos lembrar que h^D é sempre positivo.

Para $t > 0$, ($P(X_n, t)$ é positivo no intervalo $-1/(p-1)t < X_n < 1/t$ e negativo fora desse intervalo. Portanto $X_n^{(1)} = 1/t$ é um ponto de máximo e $X_n^{(2)} = -1/(p-1)t$ é um ponto de mínimo (figura 2.6a).

Para $t < 0$, $P(X_n, t)$ é negativo no intervalo $1/t < X_n < -1/(p-1)t$ e positivo fora desse intervalo. Novamente $X_n^{(1)} = 1/t$ é um ponto de máximo e $X_n^{(2)} = -1/(p-1)t$ é um ponto de mínimo (figura 2.6b).

Assim para qualquer t, $X_n^{(1)} = 1/t$ é sempre um ponto máximo e $X_n^{(2)} = -1/(p-1)t$ é sempre um ponto de mínimo.

A análise acima é válida para $p > 1$ que é o caso considerado nesse trabalho.

Os valores máximo e mínimo do mapa podem então ser facilmente calculados como sendo

$$B_{\max}(X_n, t, H, p, \gamma) = 1 \tag{2.22}$$

e

$$B_{\text{mín}}(X_n, t, H, p, \gamma) = -1/(p-1) \tag{2.23}$$

Deve-se observar que a derivada segunda

$$B''(X_n, t, H, \gamma, p) = \frac{(\gamma-1)h^D p^2 t^2 \{(1-tX_n)[1+(p-1)tX_n]\}^{\gamma-3}}{\{1+(p-1)tX_n]^{\gamma-1}+(p-1)h^D(1-tX_n)^{\gamma-1}\}^3}$$

$$\cdot\Big\{(\gamma-2)\{[1+(p-1)tX_n]^{\gamma-1} + (p-1)h^D(1-tX_n)^{\gamma-1}\}\{(p-1)(1-tX_n) - [1+(p-1)tX$$

$$-2(\gamma-1)(p-1)(1-tX_n)[1+(p-1)tX_n]\{[1+(p-1)tX_n]^{\gamma-2} - h^D(1-tX_n)^{\gamma-2}\}\Big\} \tag{2.24}$$

anula-se em $X_n = X_n^{(1)}$ e $X_n = X_n^{(2)}$ quando γ for maior que 3. Se $\gamma > 3$ for ímpar esses pontos são máximo e mínimo, respectivamente de ordem superior a 2. Isto é, são pontos de extremos não quadráticos.

Para $\gamma = 3$ a derivada segunda reduz-se a

$$B''(X_n) = \frac{2h^D p^2 t^2}{\{[1+(p-1)tX_n]^2+(p-1)h^D(1-tX_n)^2\}^3}$$

$$\cdot\Big\{\{[1+(p-1)tX_n]^2+(p-1)h^D(1-tX_n)^2\}\{(p-1)(1-tX_n)-[1+(p-1)tX_n]\}$$

$$-4(p-1)(1-tX_n)[1+(p-1)tX_n]\{1+(p-1)tX_n]-h^D(1-tX_n)\}\Big\} \tag{2.25}$$

Os valores dessa derivada calculados nos pontos críticos $X_n^{(1)}$ e $X_n^{(2)}$ são dados por

$$B''(X_n^{(1)}) = -2h^D t^2/p < 0 \tag{2.26}$$

e

$$B''(X_n^{(2)}) = 2(p-1)^2 t^2/h^D p > 0. \tag{2.27}$$

Lembrando outra vez que $h^D > 0$, os resultados acima confirmam que $X_n^{(1)}$ é um ponto de máximo e $X_n^{(2)}$ é um ponto de mínimo.

2.3.2 Singularidades

γ ímpar

Nesse caso o mapa é sempre contínuo pois a função $G(X_n, t, H, p, \gamma)$ é sempre positiva considerando-se que $p > 1$. Para $p < 1$ o denominador do mapa de B.P. pode se anular. Esse caso não será analisado aqui.

γ **par**

Agora mesmo para $p > 1$ o mapa possui singularidades nos pontos em que

$$1 + (p-1)G(X_n, t, H, p, \gamma) = 0 \tag{2.28}$$

Os pontos de singularidades são dados pela expressão

$$X_n = \frac{[h^D(p-1)]^{1/(\gamma-1)} + 1}{t\{[h^D(p-1)]^{1/(\gamma-1)} - (p-1)\}}. \tag{2.29}$$

Por exemplo no caso de

$$p = 2 \quad \text{e} \quad H = 0(h^D = 1)$$

Essas singularidades ocorrem no infinito

$$X_n = \pm\infty \tag{2.30}$$

2.3.3 Valores assintóticos

Outra vez devemos separar nossa análise para valores de γ pares e ímpares.

γ **ímpar**

Da expressão (2.2) verifica-se facilmente que

$$G(\pm\infty) = h^D \left(-\frac{1}{p-1}\right)^{\gamma-1} = h^D \left(\frac{1}{p-1}\right) \tag{2.31}$$

Substituindo-se então (2.31) na expressão (2.1) do mapa, obtemos que

$$B(\pm\infty) = \frac{(p-1)^{\gamma-1} - h^D}{(p-1)^{\gamma-1} + h^D(p-1)}. \tag{2.32}$$

Outra vez no caso particular de

$$p = 2 \qquad \text{e} \qquad H = 0(h^D = 1)$$

verifica-se que

$$B(\pm\infty) = 0 \tag{2.33}$$

No caso $\gamma = 3$, que será sempre considerado com mais detalhes porque é possível obter-se muitos resultados analíticos, mostra-se facilmente de (2.32) que na ausência de campo magnético ($h^D = 1$) os valores assintóticos são dados por

$$B(\pm\infty) = \frac{(p-2)}{(p-1)}. \tag{2.34}$$

Isso está ilustrado na figura 2.8.

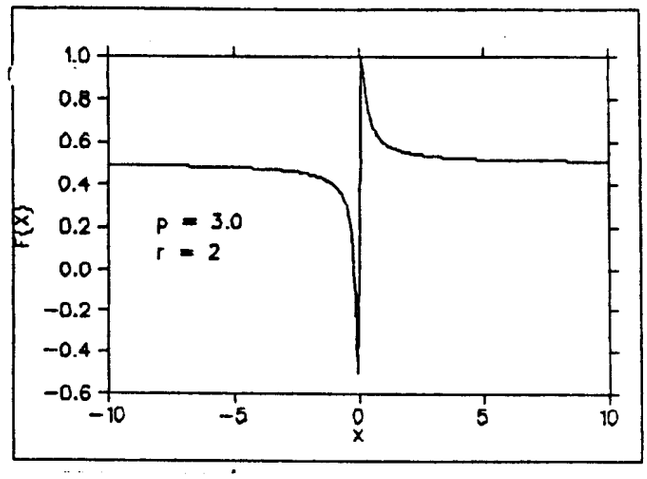


Fig. 2.8. Gráfico do mapa de B.P. com $\gamma = 3$, $p = 3.0$ mostrando o seu comportamento assintótico.

γ par

Para valores pares do número de coordenação a equação (2.31) fica escrita como

$$G(\pm\infty) = -h^D \left(\frac{1}{p-1}\right)^{\gamma-1} . \tag{2.35}$$

Nesse caso os valores assintóticos do mapa de B.P. são dados pela expressão

$$B(\pm\infty) = \frac{(p-1)^{\gamma-1} - h^D}{(p-1)^{\gamma-1} - h^D(p-1)} \tag{2.36}$$

Para o caso particular $p = 2$ e $H = 0(h^D = 1)$ essa expressão se reduz a

$$B(\pm\infty) = \pm\infty \tag{2.37}$$

como foi mencionado anteriormente na equação (2.30).

2.3.4 Pontos de Inflexão

Vamos estudar primeiro os pontos de inflexão quando γ for ímpar. Nesse caso eles são calculados com as seguintes condições:

$$B'(X_n, t, H, p, \gamma) \neq 0 \tag{2.38}$$

$$B''(X_n, t, H, p, \gamma) = 0 \tag{2.39}$$

Então da expressão (2.24) para a derivada segunda $B''(X_n, t, H, p, \gamma)$ e das condições (2.38) e (2.39) obtemos a seguinte equação cujas raízes são os pontos de inflexão do mapa.

$$\begin{aligned}
&(\gamma - 2)\left\{[1 + (p-1)tX_n]^{\gamma-1} + (p-1)h^D(1 - tX_n)^{\gamma-1}\right\}\{(p-1)(1 - tX_n) \\
&-[1 + (p-1)tX_n]\} - 2(\gamma - 1)(p-1)(1 - tX_n)[1 + (p-1)tX_n]\{[1 + (p-1)tX_n]^{\gamma-2} \\
&-h^D(1 - tX_n)^{\gamma-2}\} = 0
\end{aligned} \tag{2.40}$$

No modelo de Ising com campo externo nulo verifica-se facilmente que a origem $X_n = 0$ é um dos pontos de inflexão do mapa.

Para $\gamma = 3$ de (2.40) após desenvolver os binômios e agrupar os termos semelhantes obtemos a seguinte equação do terceiro grau que pode ser resolvida analiticamente:

$$\begin{aligned}
&2(p-1)^2[(p-1) + h^D]t_n^3X_n^3 + (p-1)(p-2)\{4(p-1)(1 - h^D) - 3[(p-1) + h^D]\}t^2X_n^2 \\
&-6(p-1)[(p-1) + h^D]tX_n + (p-2)[1 + (p-1)h^D] - 4(p-1)(1 - h^D) = 0
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Para $H = 0(h^D = 1)$ essa equação reduz a

$$2(p-1)^{2/3}X_n^3 - 3(p-1)(p-2)t^2X_n^2 - 6(p-1)tX_n = 0 \tag{2.42}$$

Para nos orientarmos na análise dos sinais das raízes da equação (2.42) utilizamos uma regra devido a Descartes. Tal regra afirma que o número de raízes positivas de uma equação polinomial $F(X) = 0$ com coeficientes reais é igual ao número de variações de sinais de $F(X)$, ou a esse número diminuído de um número par. O número de raízes negativas de $F(X) = 0$ é igual ao número de raízes positivas de $F(-X) = 0$. Quando um polinômio é escrito na ordem decrescente das potências da variável, o número de variações de sinal do mesmo é igual ao número de pares de termos sucessivos com sinais diferentes.

Aplicando-se a regra de Descartes à equação (2.42), com $1 < p < 2$, obtemos os seguintes resultados:

(a) Se $t > 0$ temos uma raíz positiva e duas ou nenhuma raízes negativas. Como o mapa de B.P. possui um mínimo à esquerda da origem (fig. 2.6a) e apresenta um comportamento assintótico finito concluímos que ele possui pelo menos um ponto de inflexão à esquerda da origem. Assim a alternativa correta é que existem duas raízes negativas implicando na ocorrência de dois pontos de inflexão à esquerda da origem como podemos ver na figura 2.6a.

(b) Para $t < 0$ temos duas ou nenhuma raízes positivas e uma negativa. O mapa agora possui um mínimo à direita da origem como mostra a fig. 2.6b, e apresenta um comportamento assintótico finito. Concluímos que ele possui pelo menos um ponto de inflexão à direita da origem. Portanto a alternativa correta é que existem duas raízes positivas ou em outras palavras que o mapa de B.P. tem dois pontos de inflexão à direita da origem como pode ser vista na figura 2.6b.

Resumindo: se $t > 0$ o mapa apresenta um ponto de inflexão positivo e dois negativos. Se, por outro lado, $t < 0$ temos agora dois pontos de inflexão postivos e um negativo.

No caso de $p = 2$, além da solução $X_n = 0$, a equação (2.42) admite duas raízes dadas por

$$X_n = \pm\sqrt{3}/t. \tag{2.43}$$

γ par

Nesse caso além dos pontos de inflexão obtidos como solução de (2.39) temos ainda os outros dois pontos $X_n^{(1)}$ e $X_n^{(2)}$ que foram determinados anteriormente (figura 2.7).

2.4 Pontos fixos e estabilidades

O ponto fixo X do mapa de B.P. é obtido da condição

$$X = X_{n+1} = X_n \tag{2.44}$$

Aplicando-se essa condição à expressão (2.1) do mapa encontra-se a seguinte equação

$$X = \frac{1 - G(X)}{1 + (p-1)G(X)} \tag{2.45}$$

que pode ainda ser reescrita na forma

$$G(X) = \frac{1 - X}{1 + (p-1)X} \tag{2.46}$$

Substituindo-se em (2.46) a expressão de $G(X)$ dada por (2.2) obtem-se que o ponto fixo X é solução da equação

$$h^D \left[\frac{1 - tX}{1 + (p-1)tX}\right]^{\gamma-1} = \frac{1 - X}{1 + p - 1)X} \tag{2.47}$$

Pode-se verificar facilmente que quando $H = 0(h^D = 1)$ o ponto $X = 0$ é sempre uma solução de (2.47) independentemente de t, p e γ. Essa solução corresponde à fase paramagnética do sistema. Se H for diferente de zero $X = 0$ não é mais um ponto fixo.

Variando a temperatura encontra-se a região de estabilidade do ponto fixo $X = 0$ da condição

$$|B'(X_n = 0)| < 1 \tag{2.48}$$

As temperaturas extremas no intervalo dessa região são calculadas de

$$B'(X_n = 0) = \pm 1 \tag{2.49}$$

A derivada do mapa de B.P. calculada nos pontos fixos do mapa pode ser escrita na forma

$$B'(X) = \frac{(\gamma - 1)t(1 - X)[1 + (p - 1)X]}{(1 - tX)[1 + (p - 1)tX]}, \tag{2.50}$$

conforme é mostrado no apêndice C. É importante ressaltar que a expressão (2.50) é válida mesmo para $H \neq 0$.

Usando-se a condição (2.49) na equação (2.50) resulta que

$$(\gamma - 1)t_{\pm} = \pm 1. \tag{2.51}$$

Portanto o ponto fixo $X = 0$ é estável (atrator) no intervalo

$$-1/(\gamma - 1) < t < 1/(\gamma - 1) \tag{2.52}$$

Quando o número de coordenação γ é igual a três a equação (2.47) pode ser calculada analiticamente pois nesse caso ela se torna uma equação do terceiro grau

$$(p-1)[(p-1)+h^D]t^2X^3+\{[h^D-(p-1)^2]t+2(p-1)(1-h^D)\}tX^2$$
$$+[(p-1)(h^D-2t)+(1-2ht)]X+(h^D-1)=0. \tag{2.53}$$

Voltando ao caso particular de $H=0(h^D=1)$ a equação (2.53) reduz-se a seguinte forma

$$(p-1)t^2X^3-(p-2)t^2X^2+(1-2t)X=0. \tag{2.54}$$

Além da solução $X=0$, como discutido anteriormente, os outros dois pontos fixos são dados por

$$X_{\pm}=\frac{(p-2)t\pm\sqrt{(p-2)^2t^2-4(p-1)(1-2t)}}{2(p-1)t} \tag{2.55}$$

É interessante observar-se que para $p=2$ as soluções fornecidas por (2.55) só são reais se

$$-4(1-2t)<0 \tag{2.56}$$

o que equivale a

$$t>1/2. \tag{2.57}$$

Isso significa dizer que para o modelo de Ising o ponto fixo não nulo só existe para $t>1/2$. Como se mostra no capítulo 4 isso corresponde a uma transição de fase na temperatura crítica $t=1/2$.

Para $p\neq 2$ o intervalo I onde os valores fornecidos por (2.55) são reais é calculado fazendo-se novamente o discriminante na equação (2.55) positivo

$$\Delta = (p-2)^2 t^2 - 4p - 1)(1 - 2t) > 0 \tag{2.58}$$

Resolvendo essa inequação obtem-se que

$$I = (-\infty, t^-_{\text{tang}}) U (t^+_{\text{tang}} \infty) \tag{2.59}$$

onde

$$t^{\pm}_{\text{tang}} = \frac{-4(p-1) \pm 2p\sqrt{p-1}}{(p-2)^2}, \tag{2.60}$$

são as raízes de

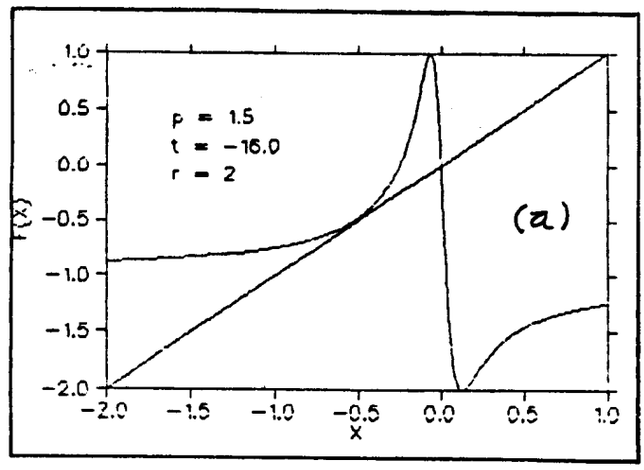
$$\Delta = 0 \tag{2.61}$$

As temperaturas reduzidas t^+_{tang} e t^-_{tang} correspondem aos valores onde ocorrem as bifurcações tangentes pois para esses valores de t,

$$X_+ = X_- \tag{2.62}$$

Nas bifurcações tangentes aparecem simultaneamente dois pontos fixos. Um deles é estável (atrator) enquanto o outro é instável (repulsor). Inicialmente esses pontos coincidem e a

seguir vão se separando como mostrado na figura 2.9.



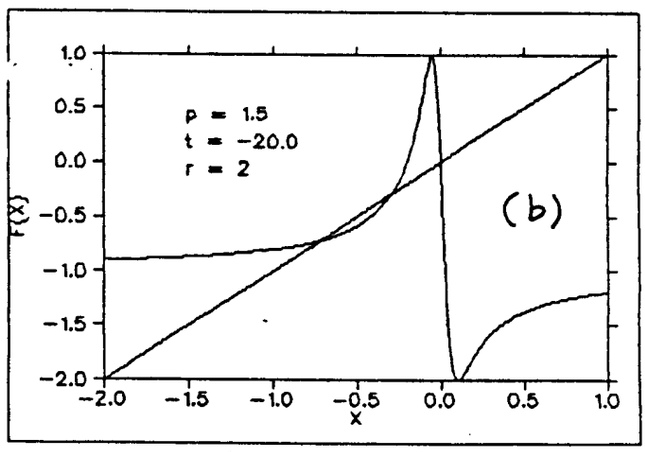


Fig. 2.9. Gráficos do mapa de B.P. mostrando a bifurcação tangente. Inicialmente aparecem simultaneamente dois pontos fixos que coincidem. (a). Em seguida esses pontos vão se separando (b).

Deve-se ressaltar que a temperatura reduzida t^{+}_{tang} é equivalente a temperatura Θ_2 obtida

por Peruggi [18].

O valor do ponto fixo na temperatura de bifurcação tangente é então, de acordo com (2.55) e (2.60),

$$X_{\pm} = \frac{(p-2)}{2(p-1)} \tag{2.63}$$

Vamos analisar agora os sinais das raízes $X_{\pm}$ dada pela expressão (2.55), com $1 < p < 2$. Para $p > 2$ há uma inversão no sinal das raízes.

Utilizando-se novamente a regra de Descartes obtem-se os seguintes resultados em relação aos sinais de $X_{\pm}$, que são resumidos na tabela I, abaixo.

Tabela I

Intervalo de p	Intervalo de t	# Raízes positivas	# Raízes negativas
$1 < p < 2$	$0 < t < 1/2$	zero	2 ou zero
$1 < p < 2$	$t < 1/2$	1	1
$1 < p < 2$	$t < 0$	zero	2 ou zero
$p > 2$	$0 < t < 1/2$	2 ou zero	zero
$p > 2$	$t > 1/2$	1	1
$p > 2$	$t < 0$	2 ou zero	zero

Com o auxílio da Tabela I e do diagrama de bifurcação da figura (2.10) podemos tirar as seguintes conclusões:

(a) Para $t^{-}_{\text{tang}} < t < t^{+}_{\text{tang}}$ $X = 0$ é o único ponto fixo existente. Fora desse intervalo além do ponto fixo $X = 0$ existem mais dois outros pontos fixos X_{+} e X_{-} cujos valores são fornecidos pela expressão (2.55).

(b) O ponto fixo $X = 0$ deixa de ser estável nas temperaturas $t_1^{+} = 1/2$ e $t_1^{-} = -1/2$ conforme a equação 2.52.

Vamos discutir agora a estabilidade dos pontos fixos X_+ e X_-. Ela é calculada da condição

$$|B'(X_n = X_\pm)| < 1 \tag{2.64}$$

Da mesma forma como foi feito anteriormente os valores extremos dessa região de temperatura são dados por

$$B'(X_n = X_\pm) = \pm 1 \tag{2.65}$$

É claro que o sinal positivo da condição (2.65) refere-se à bifurcação tangente pois nesse valor o gráfico do mapa tangencia a reta $y = x$. Então nesse caso a solução de (2.65) será a mesma que a fornecida por (2.60).

O outro extremo da região de estabilidade dos pontos fixos X_+ e X_- é então calculado da condição

$$B'(X_n = X_\pm) = -1 \tag{2.66}$$

Combinando as equações (2.50) com (2.66) e fazendo $\gamma = 3$ obtemos que nesse caso particular a outra extremidade da região de estabilidade é dada por

$$\frac{2t(1-X)[1+(p-1)X]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]} = -1 \tag{2.67}$$

A expressão (2.67) juntamente com a equação (2.47) que determina o ponto fixo, fornecem a linha crítica no espaço $H - t$ que separa a região de ponto fixo da região de cilco duplo.

2.5 Diagramas de Bifurcação

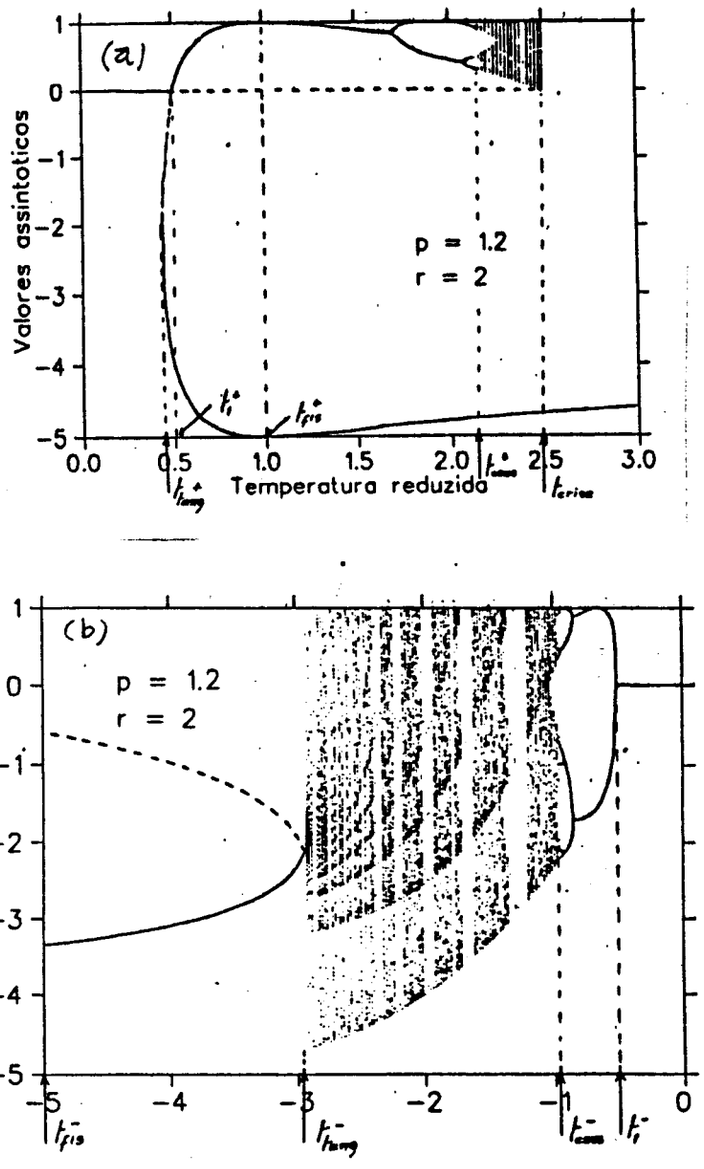


Fig. 2.10. Diagrama de bifurcação do mapa de B.P. destacando várias "temperaturas de transição", (a) $t > 0$ e (b) $t < 0$.

Os diagramas de bifurcação representam os atratores do mapa em função da temperatura reduzida.

A figura 2.10 mostra os diagramas de bifurcação do mapa de B.P. onde destacamos algumas temperaturas para posteriores referências. Os diagramas são para o caso $\gamma = 3$ e $p = 1.2$. Deve-se ressaltar que eles apresentam as mesmas características para qualquer valor de γ ímpar. O fato de considerar-se $\gamma = 3$ é devido à possibilidade de realizar-se cálculos anáticos nessa situação.

Nesta seção será discutido o significado de várias temperaturas reduzidas. Será mostrado como obtê-las numericamente e, quando possível, como calcular seus valores analiticamente. Discute-se ainda a existência de um valor crítico de p acima do qual não existe a possiblidade de comportamento caótico na região física.

2.5.1 Região Física

Como foi mencionado na introdução deste capítulo a região física para a temperatura reduzida está limitada pelos valores

$$t^-_{\text{fis}} = -1/(p-1) \tag{2.68}$$

$$t^+_{\text{fis}} = 1. \tag{2.69}$$

As temperaturas reduzidas t^+_{fis} e t^-_{fis} correspondem à temperatura $T = 0$ para acoplamento ferromagnético e antiferromagnético respectivamente. A temperatura reduzida $t = 0$ corresponde nos dois casos a $T = \infty$. Assim a região ferromagnética está definida no intervalo $t \in (0, 1]$ e a região antiferromagnética no intervalo $t \in [-1/(p-1), 0)$.

2.5.2 Cálculo das Temperaturas t_1^+ e t_1^-

A temperatura t_1^+ corresponde ao valor onde o ponto fixo repulsor X_+ proveniente da bifurcação tangente colide com o ponto fixo $X = 0$. Nesse instante os pontos fixos $X = 0$ e

X_+ invertem seus papéis, isto é; $X = 0$ passa a ser um repulsor enquanto X_+ passa ser um atrator. O valor de t_1^+ já foi determinado na seção 2.4 como sendo

$$t_1^+ = 1/(\gamma - 1) \tag{2.70}$$

A temperatura t_1^- corresponde ao valor onde o ponto fixo $X = 0$ perde sua estabilidade e em seu lugar surge o ciclo duplo como um novo atrator. Seu valor também já foi calculado na seção 2.4 como sendo

$$t_1^- = -1/(\gamma - 1). \tag{2.71}$$

É interessante observar-se que a região de estabilidade do ponto fixo $X = 0$, $-1/(\gamma - 1) < t < 1/(\gamma - 1)$, vai se tornando cada vez menor à medida que o número de coordenação γ cresce. Isso não é válido entretanto para o limite γ infinito porque nesse caso a temperatura reduzida t perde seu significado como parâmetro. Nesse limite o mapa de *B.W.* é parametrizado por β, como pode ser visto na eq. 2.12.

Deve-se mencionar ainda que existe um valor de p_{c_2}, para cada valor de γ, à partir do qual o ciclo duplo só existe fora da região física. Tal valor de p é calculado da condição que o surgimento desse ciclo se dê exatamente na temperatura extrema da região antiferromagnética t_{fis}^- correspondente a $T = 0$, isto é:

$$t_1^- = t_{\text{fis}}^- \tag{2.72}$$

Igualando-se (2.68) e (2.71) obtemos o seguinte resultado

$$-1/(\gamma - 1) = -1/(p_{c_2} - 1)$$

que resulta em

$$p_{c_2} = \gamma. \tag{2.73}$$

Isso significa, por exemplo, que para $\gamma = 3$ qualquer sistema com o número de estados maior ou igual a três não apresenta o ciclo duplo na região física. É claro que para cada γ também pode-se obter um valor crítico p_{c_n} à partir do qual o ciclo de período n se localiza fora da região física.

2.5.3 Bifurcação Tangente

As temperaturas reduzidas correspondentes às bifurcações tangentes já foram também determinadas na seção 2.4 da condição $X_+ = X_-$. Seus valores são dados por

$$t^+_{\text{tang}} = \frac{-4(p-1) + 2p\sqrt{p-1}}{(p-2)^2} \tag{2.74}$$

e

$$t^-_{\text{tang}} = \frac{-4(p-1) - 2p\sqrt{p-1}}{(p-2)^2}, \tag{2.75}$$

para $\gamma = 3$. Essas temperaturas estão mostradas na fig. 2.10.

Para γ qualquer as temperaturas t^+_{tang} e t^-_{tang} são determinadas da condição

$$B'(X_\pm) = \frac{(\gamma-1)(1-X)[1+(p-1)X]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]} = 1.$$

juntamente com a expressão (2.47) que determina o ponto fixo.

2.5.4 Caos

A temperatura t^{+}_{caos} t^{-}_{caos} corresponde ao valor do parâmetro t onde aparece, pela primeira vez, um regime aperiódico (caótico). Na região de t positivo o valor t^{+}_{caos} sempre surge fora da região de interesse físico, isto é: para $t^{+}_{caos} > 1$ Entretanto para t negativo (acoplamento antiferromagnético) a temperatura de caos t^{-}_{caos} pode estar dentro da região física no caso em que $1 < p < 2$.

A figura 2.11 mostra um gráfico da temperatura t^{-}_{caos} versus o número de coordenação γ para o caso $p = 1.1$. Tal gráfico foi construído considerando-se t_{caos} como sendo a temperatura para a qual o coeficiente de Liapunov se torna postivo pela primeira vez, quando se varia o parâmetro t no sentido das duplicações de períodos.

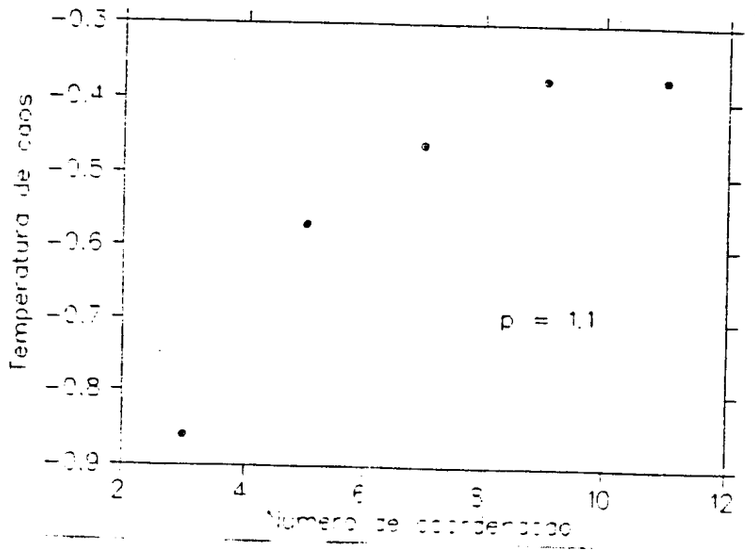


Fig. 2.11. Temperatura de Caos.

2.5.5 Crise

Uma colisão entre um atrator caótico e um ponto fixo ou órbita periódica instáveis foi definida por Grebogi et al [19] com o nome de "crise". Existem dois tipos de crise; a crise da fronteira e a crise interior. A primeira leva a destruição súbita do atrator caótico e de sua bacia de atração como ocorre em t_{crise}, enquanto o segundo tipo de crise causa uma súbita

alteração no tamanho do atrator caótico como mostrado na fig. 2.12.

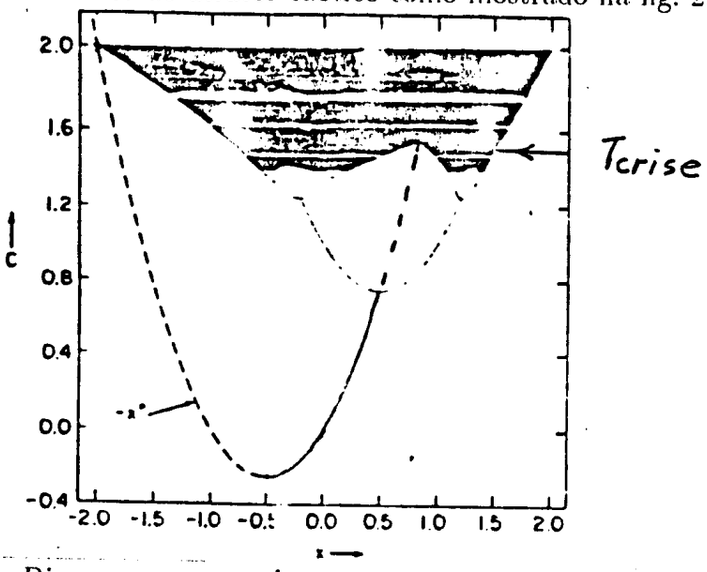


Fig. 2.12. Diagrama mostrando a temperatura de crise interior no mapa logístico.

A temperatura reduzida no ponto de crise de fronteira, t^{+}_{crise} figura 2.10, é calculada da condição que o máximo (mínimo) é atraído para o ponto fixo instável $X = 0$ após duas iteradas, isto é:

$$B^2(1/t) = B(1) = 0, \qquad 1 < p < 2 \tag{2.76}$$

ou

$$B^2[-1/(p-1)t] = B[-1/(p-1)] = 0, \qquad p > 2. \tag{2.77}$$

Aplicando-se a condição (2.76) ao mapa de B.P. obtém-se que

$$\left[\frac{1-t}{1+(p-1)t}\right]^{\gamma-1} = 1 \tag{2.78}$$

que implica em

$$\frac{1-t}{1+(p-1)t} = \pm 1, \tag{2.79}$$

para γ ímpar.

A solução não trivial de (2.79) é obtida quando se considera o sinal negativo nessa equação:

$$t = -2/(p-2), \qquad 1 < p < 2 \tag{2.80}$$

Para $p > 2$ a condição (2.77) fornece

$$\left[\frac{(p-1)+t}{(p-1)(1-t)}\right]^{\gamma-1} = 1 \tag{2.81}$$

que implica para γ ímpar

$$\frac{(p-1)+t}{(p-1)(1-t)} = \pm 1 \tag{2.82}$$

Novamente aqui a solução não trivial corresponde ao sinal negativo sendo dada por

$$t = 2(p-1)/(p-2), \qquad p > 2 \tag{2.83}$$

É interessante observar-se que a expressão (2.83) pode ser igualmente determinada aplicando-se a transformação $(p-1) \rightarrow (p'-1)^{-1}$ à expressão (2.80). Deve-se ainda ressaltar que as expressões (2.80) e (2.83) são válidas para qualquer γ ímpar.

2.5.6 Maior valor de $1 < p < 2$ para existência de caos na região física da temperatura

Como será mostrado no capítulo 3 o diagrama do modelo de Potts $p = 1$ apresenta uma região caótica para acoplamento antiferromagnético ($J < 0$) dentro da região física que nesse caso é todo o intervalo negativo de t. Sabe-se também que o modelo de Ising ($p = 2$) só apresenta ciclo duplo correspondente a fase antiferromagnética desse sistema. Assim deve existir um valor intermediário de p, que denomina-se de p_c, acima do qual não é possível a existência da fase caótica na região física. Tal valor, $p_c \simeq 1.51$, é obtido numericamente igualando-se a temperatura t^-_{caos}, à temperatura extrema t^-_{fis}.

A figura 2.13 mostra o gráfico de t^-_{caos} (linha tracejada) e t^-_{fis} (linha pontilhada) versus o número de estados p.

A curva correspondente a t^-_{caos} é obtida numericamente conforme descrito na seção 2.5.4 e a curva de t^-_{fis} pela expressão (2.68).

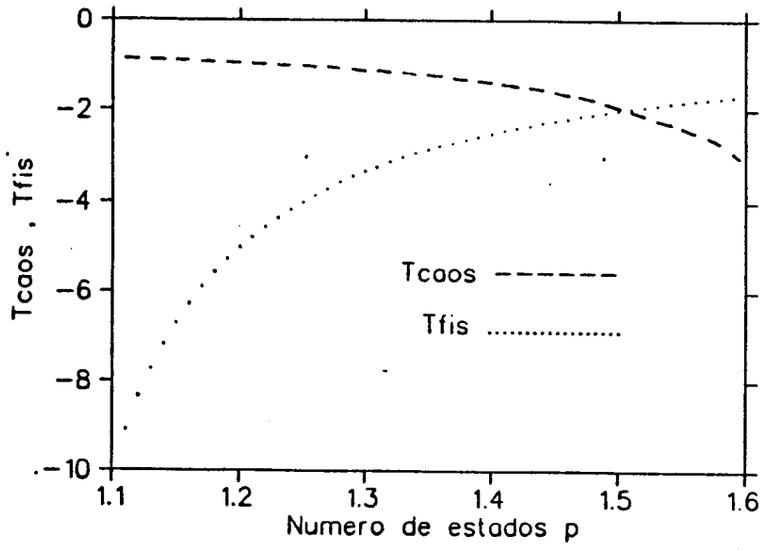


Fig. 2.13. *p Crítico.*

2.6 Mapa de Bragg-Williams (Limite de γ infinito

O mapa de Bragg-Williams é uma relação de recorrência correspondente à aproximação

de ordem zero de campo médio (aproximação de Bragg-Williams) do modelo de Potts com p-estados. Ele pode ser obtido à partir do mapa de B.P. quando considera-se o limite do número de coordenação γ tendendo para o infinito, tendo-se o cuidado de escalar a consntate de acoplamento, da seguinte forma

$$J \rightarrow J/\gamma$$

Escalando-se convenientemente a constante de acoplamento J a expressão (2.2) pode ser escrita com o auxílio de (1.5) e (1.6) da seguinte forma

$$G(X_n, t, H, p, \gamma) = \exp(-\beta p H) \left\{ \frac{1 - X_n + [(p-1) + X_n] \exp(-\beta p J/r)}{1 + (p-1)X_n + (p-1)(1 - X_n) \exp(-\beta p J/r)} \right\}^r \tag{2.84}$$

onde $r = (\gamma - 1)$.

Expandindo a exponencial existente em (2.88) mantendo o termo de ordem $1/r$ e tomando-se o limite de r tendendo para o infinito obtem-se que

$$\begin{aligned} \lim_{\gamma \rightarrow \infty} G(X_n, t, H, p, \gamma) &= \exp(-\beta p H) . \frac{\lim_{r \rightarrow \infty} \left\{1 - \frac{[\beta J(p-1) + X_n]}{r}\right\}^r}{\lim_{r \rightarrow \infty} \left\{1 - \frac{\beta J(p-1)(1 - X_n)}{r}\right\}^r} \\ &= \exp(-\beta p H) . \frac{\exp\{+\beta J[(p-1) + X_n]\}}{\exp[-\beta J(p-1)(1 - X_n)]} \end{aligned} \tag{2.85}$$

$$= \exp[-\beta p(H + J X_n)].$$

Então da equação (2.1) do mapa de B.P. e, tendo em conta (2.2), podemos escrever que

$$X_{n+1} = \lim_{\gamma \to \infty} B(X_n, t, H, p, \gamma)$$

$$= \frac{1 - \lim_{\gamma \to \infty} G(X_n, t, H, p, \gamma)}{1 + (p-1) \lim_{\gamma \to \infty} G(X_n, t, H, p, \gamma)} \tag{2.86}$$

$$= \frac{1 - \exp[-\beta p(H + JX_n)]}{1 + (p-1)\exp[-\beta p(H + JX_n)]}$$

A expressão (2.86) é o mapa de B.W. É interessante observar-se que o resultado bem conhecido da condição de autoconsistência para o modelo de Ising é recuperado fazendo-se $p = 2$ em (2.86), isto é:

$$X_{n+1} = \frac{1 - \exp[2\beta(H + JX_n)]}{1 + \exp[-2\beta(H + JX_n)]}$$

$$= \tanh[\beta(H + JX_n)] \tag{2.87}$$

Portanto podemos identificar X como a magnetização do modelo de Ising na aproximação de B.W.

Como anteriormente os pontos fixos do mapa são obtidos fazendo-se na expressão (2.86) $X_{n+1} = X_n = X$. Reescrevendo essa equação obtemos que

$$\exp[-\beta p(H + JX)] = \frac{1 - X}{1 + (p-1)X} \tag{2.88}$$

ou ainda

$$\beta p(H + JX) = \ln\left[\frac{1 + (p-1)X}{1 - X}\right] \tag{2.89}$$

Para campo externo nulo a equação (2.89) se torna

$$\beta p J X = \ell n \left[\frac{1 - X}{1 + (p-1)X} \right] \tag{2.90}$$

que admite a solução $X = 0$ corresponde à fase paramagnética do sistema. Podem existir ainda duas outras soluções que serão consideradas no capítulo 4 onde discute-se o problema da estabilidade das fases do ponto de vista termodinâmico.

As temperaturas onde o ponto fixo $X = 0$ deixa de ser um atrator são obtidas da condição

$$\left(\frac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n} \right)_{X_n=0} = \pm 1 \tag{2.91}$$

Derivando-se (2.86) em relação a X_n, com $H = 0$, obtém-se

$$\left(\frac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n} \right) = \frac{\beta p^2 J \exp(-\beta p J X_n)}{[1 + (p-1)\exp(-\beta p J X_n)]^2} \tag{2.92}$$

Utilizando-se a condição (2.91) obtém-se

$$\beta J = \pm 1 \tag{2.93}$$

ou

$$\beta |J| = 1 \tag{2.94}$$

As expressões (2.90) e (2.94) são análogas às obtidas por Wu [20] para o modelo de Ising.

CAPÍTULO 3

O CASO p = 1

3.1. Introdução

O mapa de B.P. para o caso particular p = 1 torna-se polinomial de grau $\gamma - 1$. Seu estudo é de grande importância por duas razões. Em primeiro lugar porque o modelo de Potts ferromagnético no limite $p = 1$ está intimamente relacionado ao problema de percolação [21]. A outra razão é a sua conjugação analítica com o mapa logístico [14] $X^2 + C$, quando o número de coordenação γ é igual a três.

A conjugação do mapa de B.P. com o mapa logístico permite que se obtenham muitas informações sobre o modelo de Potts 1-estado, extraídas do mapa logístico. Esse último é sem dúvida o mapa mais explorado no estudo de sistemas não lineares e cujo comportamento dinâmico já está bem estabelecido.

Neste capítulo fazemos uma aplicação do estudo feito no capítulo anterior ao caso particular $p = 1$. Será mostrada a conjugação analítica do mapa de B.P. com o mapa logístico e a generalização para γ qualquer com o mapa $X^{\gamma-1} + C$ [15]. A conexão com o problema de percolação será feita no capítulo 5.

3.2. Análise do mapa

Fazendo-se $p = 1$ na expressão (1.9) do mapa de B.P. obtém-se o seguinte mapa polinomial:

$$\begin{aligned} X_{n+1} = B(X_n, t, H, \gamma) &= 1 - h^D (1 - tX_n)^{\gamma-1} \\ &= 1 - (1 - h)(1 - tX_n)^{\gamma-1} \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde

$$h = 1 - h^D, \qquad t = 1 - t^D \qquad \text{e} \qquad X_n = 1 - X_n^D \tag{3.2}$$

Por causa de sua importância e pelas referências que faremos adiante reescrevemos aqui a relação de recorrência (3.1) que para o caso particular $\gamma = 3$ se torna

$$X_{n+1} = h + 2(1-h)tX_n - (1-h)t^2X_n^2 \tag{3.3}$$

3.3. Pontos críticos

Calculando-se as duas primeiras derivadas do mapa (3.1) em relação a X_n obtém-se

$$B'(X_n, t, H, \gamma) = (\gamma - 1)\, h^D t\, (1 - tX_n)^{\gamma-2} \tag{3.4}$$

e

$$B''(X_n, t, H, \gamma) = (\gamma - 1)(\gamma - 2)\, h^D t^2 (1 - tX_n)^{\gamma-3} \tag{3.5}$$

Da análise das expressões (3.4) e (3.5) pode-se concluir que o ponto $X_n = 1/t$ é um máximo quadrático quando $\gamma = 3$ e um máximo de ordem superior quando γ for ímpar e maior que 3. Para γ par o ponto $X_n = 1/t$ é um ponto de inflexão e o mapa torna-se um homeoformismo. Nesse caso o mapa apresenta no máximo ciclos de período dois. A figura 3.1 mostra os

gráficos do mapa de B.P. para $\gamma = 3$ em (a) e $\gamma = 4$ em (b).

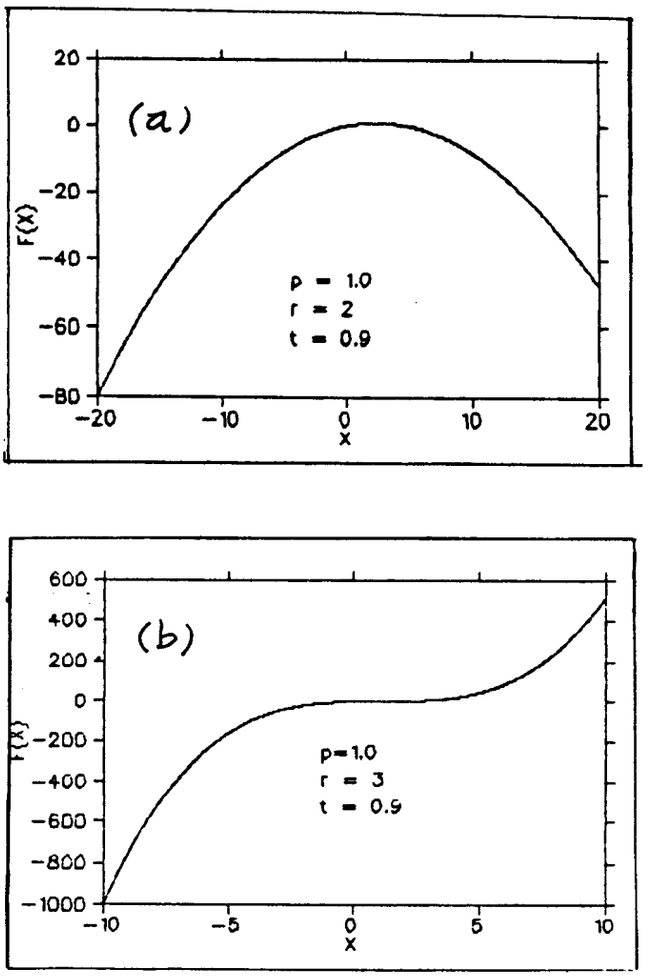


Fig. 3.1. *Mapa de B.P. para o caso particular $p = 1$ com $\gamma = 3$ em (a) e $\gamma = 4$ em (b).*

3.4. Pontos fixos

Os pontos fixos X do mapa são calculados da condição

$$X_{n+1} = X_n = X \tag{3.6}$$

aplicada à equação (3.1), isto é

$$X = 1 - (1-h)(1-tX)^{\gamma-1} \tag{3.7}$$

Como já foi mostrado no capítulo anterior $X = 0$ é sempre um ponto fixo do mapa de B.P. quando $H = 0$ ($h = 0$) para quaisquer valores dos parâmetros γ, t e p. Isso pode ser facilmente verificado na equação (3.7). Mostramos igualmente que tal ponto fixo é um atrator no intervalo

$$-1/(\gamma-1) < t < 1/(\gamma-1) \tag{3.8}$$

No caso $\gamma = 3$ as soluções de (3.7) são dadas por

$$X_{\pm} = \frac{[2t(1-h)-1] \pm \sqrt{1+4t(t-1)(1-h)}}{2t^2(1-h)} \tag{3.9}$$

A equação (2.50) da derivada do mapa calculada no ponto fixo é dada por

$$B'(X) = \frac{2t(1-X)}{(1-tX)}. \tag{3.10}$$

Para $\gamma = 3$ a equação (3.7) pode ser reescrita como:

$$\frac{1-X}{1-tX} = (1-h)(1-tX) \tag{3.11}$$

que substituída em (3.10) fornece a expressão da derivada do mapa com $p = 1$ e $\gamma = 3$ no ponto fixo:

$$B'(X) = 2t(1-h)(1-tX) \tag{3.12}$$

Com pequenas manipulações algébricas a expressão (3.9) dos pontos fixos pode ser escrita da seguinte forma:

$$2t(1-h)(1-tX_{\pm}) = 1 \mp \sqrt{1+4t(t-1)(1-h)} \tag{3.13}$$

Comparando-se (3.13) com (3.12) chega-se finalmente a seguinte expressão para a derivada do mapa calculada nos pontos fixos $X_{\pm}$

$$B'(X_{\pm}) = 1 \mp \sqrt{1+4t(t-1)(1-h)} \tag{3.14}$$

Nessa forma torna-se simples a análise da estabilidade dos pontos fixos $X_{\pm}$. Observa-se facilmente que o ponto fixo X_- é sempre instável (repulsor) pois $|B'(X_-)|$ é sempre maior que a unidade para qualquer temperatura. Por outro lado a estabilidade do ponto fixo X_+ ocorre num intervalo finito de temperatura, como mostramos a seguir.

Da condição de estabilidade

$$|B'(X_+)| < 1 \tag{3.15}$$

podemos determinar os limites desse intervalo de temperatura:

$$B'(X_+) = 1 \tag{3.16}$$

$$B'(X_+) = -1 \tag{3.17}$$

A igualdade (3.16) fornece a equação

$$1 + 4t\,(t-1)\,(1-h) = 0 \quad , \tag{3.18}$$

enquanto o outro limite é determinado por:

$$4t\,(t-1)\,(1-h) = 3 \quad . \tag{3.19}$$

Deve-se ressaltar neste instante que as relações (3.18) e (3.19) serão reobitidas na próxima seção quando se fizer a conjugação analítica do mapa de B.P. com o mapa logístico.

3.5. Conjungação com o mapa logístico $X^2 + C$

A relação de conjugação é geralmente de grande utilidade no estudo de sistemas dinâmicos. Dois sistemas descritos pelos mapas $R(Z)$ e $S(Z)$ são analiticamente conjugados se existe uma transformação de Möbius [22] $M(Z)$ (mapa racional bijetivo) tal que

$$R(Z) = MoSoM^{-1}(Z) \quad , \tag{3.20}$$

onde o significa a operação de composição. Uma propriedade da conjugação dos mapas $R(Z)$ e $S(Z)$ é que suas n-éssimas composições são também analiticamente conjugadas, isto é:

$$R^n = MoS^n oM^{-1}(Z) \tag{3.21}$$

onde R^n significa a composição de R n vezes, isto é

$$R^n \equiv \frac{RoRo\ldots oR}{n\text{vezes}} \tag{3.22}$$

A conjugação analítica implica que qualquer propriedade topológica do sistema descrito pelo mapa R pode ser obtida da propriedade correspondente de S através da aplicação da transformação M.

Aplicando-se agora a seguinte transformação linear de Möbius

$$M(X) = aX + b \tag{3.23}$$

à expressão (3.3) do mapa de B.P. obtém-se que

$$\begin{aligned} L(X) &= MoBoM^{-1}(X) \\ &= -\tfrac{(1-h)t^2}{a}X^2 + 2(1-h)t\left(1+\tfrac{tb}{a}\right)X \\ &+ah + b - 2(1-h)tb - \tfrac{(1-h)t^2b^2}{a} \end{aligned} \tag{3.24}$$

Igualando-se os coeficientes do polinômio (3.24) aos do mapa logístico $X^2 + C$ chega-se às seguintes relações:

$$-\frac{(1-h)t^2}{a} = 1 \tag{3.25}$$

$$1 + \frac{bt}{a} = 0 \tag{3.26}$$

$$ah + b - 2(1-h)tb - \frac{(1-h)t^2b^2}{a} = C \tag{3.27}$$

Das duas primeiras tira-se imediatamente que

$$a = -(1-h)t^2 \tag{3.28}$$

e

$$b = (1-h)t \tag{3.29}$$

Substituindo-se os valores de a e b na expressão (3.28) obtém-se

$$C = t(1-t)(1-h) \tag{3.30}$$

A expressão (3.30) permite a determinação do diagrama de fase do sistema descrito pelo mapa de B.P. O conhecimento dos valores críticos C_{2^n}, do parâmetro C onde as órbitas do mapa logístico tornam-se indiferentes determina as linhas de transição no espaço de parâmetros $h - t$. Assim por exemplo substituindo-se em (3.30) os valores bem conhecidos $C = 1/4$ e $C = -3/4$ do cardioide principal do conjunto de Mandelbrot [23] onde o ponto fixo é marginalmente estável obtém-se as expressões:

$$t(1-t)(1-h) = 1/4 \tag{3.31}$$

e

$$t(1-t)(1-h) = -3/4 \tag{3.32}$$

que são idênticas as expressões (3.18) e (3.19) da seção anterior e correspondem às linhas de transição atrator finito /superatrator infinito e ponto fixo atrator/ciclo duplo.

Considerando-se agora o valor $C = -2$ da extremidade da antena do Mandelbrot, determina-se a equação:

$$t(1-t)(1-h) = -2 \tag{3.33}$$

que representa a linha de transição caos/atrator infinito.

A figura (3.2) mostra esquematicamente o diagrama de fase traçado com o auxílio do conjunto de Mandelbrot.

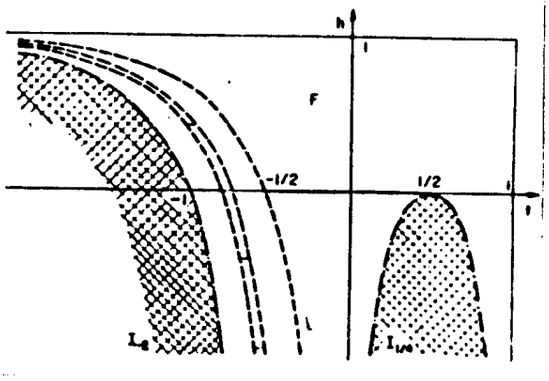


Fig. 3.2. Nas regiões $I_{1/4}$ e I_{-2} o sistema é termodinamicamente mal definido. Suas fronteiras (linhas pontilahdas-tracejadas) são obtidas fazendo $C = 1/4$, $C = -2$ na equação 3.30. Na região denotada por F o ponto fixo estável é X_+. O ponto fixo paramagnético $X = 0$ é estável na região $h_1 = 0$, $t \in (-1/2, 1/2)$. Na primeira faixa (da direita para a esquerda) o sistema é um ciclo de período 2. A faixa intermediária representa a sucessão de ciclos de período 2^n. A última faixa é a caótica.

A conjugação do mapa de B.P. para $p = 1$ e γ qualquer com o mapa de Mandelbrot $X^{\gamma-1} + C$ é feita de maneira análoga a anterior pela transformação de Möbius

$$M = ax + b, \tag{3.34}$$

Nesse caso temos que

$$a = (-1)^{\gamma-2}\left[(1-h)t^{\gamma-1}\right]^{1/(\gamma-2)}. \tag{3.35}$$

$$b = at^{-1}, \tag{3.36}$$

de modo que a constante C do mapa de Mandelbrot é dada por

$$C = a + b = (-1)^{\gamma-1}(1-t)\left[(1-h)t\right]^{1/(\gamma-2)} \tag{3.37}$$

Para determinar os valores críticos $C_{1,2}$ e $C_{1,\infty}$ no caso de $\gamma \neq 3$ fazemos uso das expressões que fornecem os valores limites de estabilidade do ponto fixo do mapa de B.P., isto é, $h = 0$, $t = \pm 1/(\gamma - 1)$.

Substituindo esses valores em (3.37) obtemos

$$C_{1,\infty} = (-1)^{\gamma-1}(\gamma-2)(\gamma-1)^{-(\gamma-1)/(\gamma-2)}, \tag{3.38}$$

obtido com $t = 1/(\gamma - 1)$ e

$$C_{1,2} = (-1)^{1/(\gamma-2)}\gamma(\gamma-1)^{-(\gamma-1)/(\gamma-2)}, \tag{3.39}$$

obtido com $t = -1/(\gamma - 1)$.

Para $\gamma = 3$ as expressões (3.38) e (3.39) recuperam os resultados já bem conhecidos, $C = 1/4$ e $C = -3/4$, respectivamente.

É interessante observar de (3.39) que para γ par o parâmetro C não pode ser real o que significa dizer que não existe ciclo duplo nesse caso.

As linhas de transição ponto fixo/atrator infinito e ponto fixo/ciclo duplo podem ser calculadas agora da condição

$$B'(X) = \pm 1 \tag{3.40}$$

que com o auxílio da equação (2.50), para $p = 1$, torna-se

$$\frac{(\gamma - 1)t(1 - X)}{(1 - tX)} = \pm 1 \tag{3.41}$$

Considerando-se primeiramente o sinal positivo no segundo membro da equação (3.41) e resolvendo-a em relação a X, obtém-se que

$$X = -\frac{1 - (\gamma - 1)t}{(\gamma - 2)t} \tag{3.42}$$

Substituindo-se esse valor na expressão (3.7) do ponto fixo temos que

$$-\frac{1 - (\gamma - 1)t}{(\gamma - 2)t} = 1 - (1 - h)\left[1 + \frac{1 - (\gamma - 1)t}{(\gamma - 2)}\right]^{\gamma - 1}. \tag{3.43}$$

Após uma manipulação algébrica simples essa equação de linha de transição pode ser escrita como

$$h = 1 - \frac{1}{(\gamma - 1)^{(\gamma - 1)}t}\left(\frac{\gamma - 2}{1 - t}\right)^{\gamma - 2}. \tag{3.44}$$

Essa expressão corresponde a linha de transição ponto fixo/superatrator infinito. Para $\gamma = 3$ ela se reduz a

$$h = 1 - \frac{1}{4t(1-t)} \tag{3.45}$$

que é idêntica a expressão (3.31) já obtida para essa situação.

A linha de transição ponto fixo/ciclo duplo é obtida de modo semelhante porém agora considerando-se o sinal negativo na equação (3.41). Um procedimento idêntico nos fornece a expressão

$$h = 1 + \frac{1}{(\gamma-1)^{(\gamma-1)}t}\left(\frac{\gamma}{1-t}\right)^{\gamma-2}. \tag{3.46}$$

Para $\gamma = 3$ esta se reduz a equação

$$h = 1 + \frac{3}{4t(1-t)} \tag{3.47}$$

que se identifica com a expressão (3.32).

O fato do mapa de B.P. para $p = 1$, ser analiticamente conjugado ao mapa $X^{\gamma-1} + C$ significa que ele apresenta toda a riqueza desse último, incluindo a fase caótica que de acordo com a interpretação dada por MBK, para essa região, constitui a fase vidro de spins do sistema. Assim devido ao tipo de rede e ao caráter polinomial do mapa, o modelo de Potts com $p = 1$ na árvore de Cayley é o exemplo mais simples de um vidro spins MBK.

CAPÍTULO 4

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS LOCAIS

4.1. Introdução

Neste capítulo calcula-se as propriedades termodinâmicas do modelo de Potts com p estados na rede de Bethe. Discute-se o problema da ordem de transição do modelo, a estabilidade das fases, as violações de convexidade e a conseqüência de uma das propriedades de simetria que foram mostradas no capítulo 2.

4.2. Funções Termodinâmicas

Caso ferromagnético $J > 0$.

O funcional da energia livre é calculado generalizando-se o esquema proposto por Thompson [24], para o modelo de Ising, onde ele obtém esse funcional por integração da magnetização. Por outro lado, é feita uma simplificação do esquema de Thompson, utilizando-se um formalismo simples e elegante desenvolvido por Christiano e Goulart Rosa [4] para a obtenção do parâmetro de ordem e consequentemente da magnetização.

4.2.1. Magnetização

De acordo com Christiano e Goulart Rosa o parâmetro de ordem m pode ser determinado calculando-se a correlação (transmissividade térmica) entre o spin central λ_0 da árvore de Cayley assimétrica fechada e o spin fantasma λ_g, que simula o campo magnético externo. Lembrando que a árvore fechada, é formada por γ ramos fechados como mostra a figura 4.1a, a correlação entre o spin central λ_0 e o spin fantasma λ_g pode ser calculado facilmente

da seguinte maneira:

Numa primeira etapa usando as regras de composição das correlações para obtenção do mapa de B.P. podemos decimar todos os spin do interior dos ramos reduzindo a árvore fechada no aglomerado da fig. 4.1b. Compondo mais uma vez as $(\gamma - 1)$ correlações t com as $(\gamma - 1)$ correlações X_n obtém-se o aglomerado da fig. 4.1c. Finalmente compomos o aglomerado da fig. 4.2a para a obtenção da correlação $< \lambda_0 \lambda_g > \equiv m$ que é dada por

$$m^D = (tX_N)^D X_{N+1}^D \tag{4.1}$$

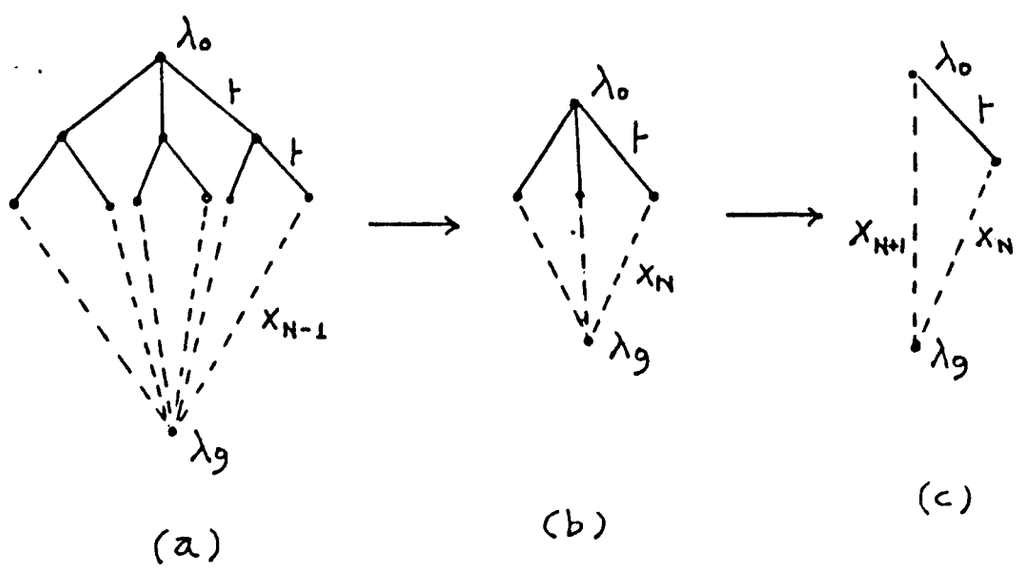


Fig. 4.1. Processo de decimação dos spins interiores dos ramos da árvore de Cayley fechada.

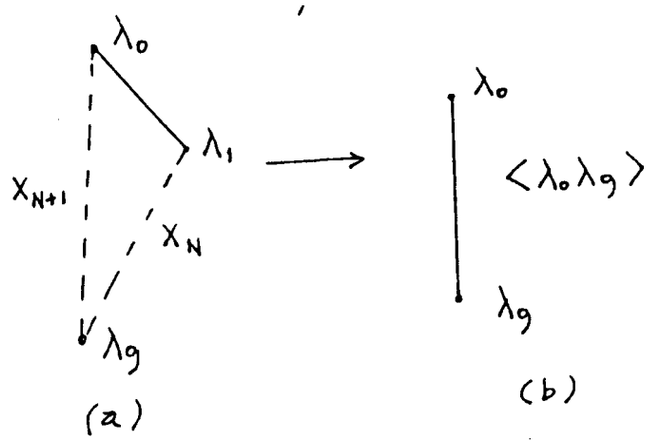


Fig. 4.2. Processo de obtenção da correlação $< \lambda_0 \lambda_g >$.

No limite $N \to \infty$, $X \equiv X_{N+1} = X_N$. Então a expressão (4.1) pode ser escrita na forma

$$m^D = (tX)^D X^D, \tag{4.2}$$

ou em termos das transmissividades, da seguinte maneira

$$m = \frac{(1+t)X + (p-2)tX^2}{1 + (p-1)tX^2} \tag{4.3}$$

É interessante neste momento escrever o mapa de B.P. de uma maneira que se mostrará de grande utilidade para analogias com os resultados obtidos por Thompson para o modelo de Ising.

A expressão (1.9) do mapa de B.P. pode ser escrita na forma

$$\exp(-\beta p H) \left[\frac{1 - tX_n}{1 + (p-1)tX_n} \right]^{\gamma - 1} = \frac{1 - X_{n+1}}{1 + (p-1)X_{n+1}} \tag{4.4}$$

Aplicando-se o logarítmo aos dois membros da equação (4.4) obtém-se que

$$\frac{1}{p}\ell n\left[\frac{1+(p-1)X_{n+1}}{1-X_{n+1}}\right] = B + (\gamma-1)\frac{1}{p}\ell n\frac{1+(p-1)tX_n}{1-tX_n} \tag{4.5}$$

onde $B = \beta H$. Deve-se ressaltar que o logarítmo restringe o domínio de variação de X_{n+1} de modo a tornar o seu argumento sempre positivo. Além disso o outro logarítmo restringe o domínio de X_n ao intervalo $-1/(p-1)t < X_n < 1/t$. Essa última restrição equivale a considerar o mapa de B.P. somente entre seus valores extremos o que o torna uma função monótona e portanto de comportamento dinâmico semelhante ao caso tangente hiperbólica.

Definimos agora, em analogia com a tangente hiperbólica, uma função $tanh_p\Theta$ que denominamos de tangente hiperbólica generalizada de ordem p

$$tanh_p\Theta = \frac{1-e^{-p\Theta}}{1+(p-1)e^{-p\Theta}} \tag{4.6}$$

De (4.6) podemos definir a sua função inversa como sendo

$$arctanh_p\Theta = \frac{1}{p}\ell n\left[\frac{1+(p-1)\Theta}{1-\Theta}\right]. \tag{4.7}$$

Aplicando agora as definições (4.6) e (4.7) em (4.5) obtém-se o mapa de B.P. na forma

$$arctanh_pX_{n+1} = B + (\gamma-1)arctanh_ptX_n \tag{4.8}$$

ou

$$X_{n+1} = tanh_p[B + (\gamma-1)arctanh_ptX_n], \tag{4.9}$$

onde agora a transmissividade $t \equiv (1 - e^{-p\beta J})/[1 + (p-1)e^{-p\beta J}]$ é a tangente hiperbólica generalizada de ordem p, de βJ.

A expressão (4.9) generaliza a relação de recorrência obtida por Thompson.

Vamos agora, usando a eq. (4.9), reescrever a eq. (4.3) para o parâmetro de ordem m, em uma forma conveniente que será utilizada posteriormente.

A equação que fornece os pontos fixos do mapa de B.P. é dada por

$$X = tanh_p[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX]. \tag{4.10}$$

A expressão (4.3) para o parâmetro de ordem pode ser escrita na forma

$$m = \frac{X + tX + (p-2)X.tX}{1 + (p-1)X.tX} \tag{4.11}$$

Substituindo-se agora (4.10) em (4.11) e tendo-se em conta que

$$tX \equiv tanh_p[arctanh_p tX], \tag{4.12}$$

obtém-se

$$m = \frac{tanh_p\Theta tanh_p\Phi + (p-2)tanh_p\Theta tanh_p\Phi}{1 + (p-1)tanh_p\Theta tanh_p\Phi} \tag{4.13}$$

onde

$$\Theta \equiv B + (\gamma - 1)arctanh_p tX \tag{4.14}$$

e

$$\Phi \equiv arctanh_p TX. \tag{4.15}$$

Porém como pode ser visto no apêndice A, o segundo membro de (4.13) corresponde à expressão para a $tanh_p(\Theta + \Phi)$. Assim podemos escrever a eq. (4.13) para o parâmetro de ordem como

$$m = tanh_p[B + \gamma arctanh_p tX], \tag{4.16}$$

que novamente reproduz o resultado de Thompson para $p = 2$.

4.2.2. Energia Livre

A Hamiltoniana do modelo de Potts com p estados na presença de um campo magnético externo H aplicado na direção "0" é dada por

$$\mathcal{H} = -pJ \sum_{<ij>} \delta_{\lambda_i \lambda_j} - pH \sum_{i=1}^{N} \delta_{\lambda_i,0} \tag{4.17}$$

onde o primeiro somatório é feito sobre todos os pares $< ij >$ de sítios vizinhos mais próximos enquanto o segundo é sobre todos os sítios da rede. O fator p na Hamiltoniana foi usado para ficar coerente com a expressão (1.4) do capítulo 1.

A função de partição do sistema será então fornecida pela expressão

$$Z_N(\beta, B) = \sum_{\{\lambda\}} [\exp(-\beta E_{Potts}\{\lambda\})][\exp(pB \sum_{i=1}^{N} \delta_{\lambda_i,0}] \tag{4.18}$$

onde

$$E_{Potts} = -pJ \sum_{<ij>} \delta_{\lambda_i,\lambda_j} \tag{4.19}$$

e

$$B = \beta H. \tag{4.20}$$

A energia livre por spin $\psi(\beta, B)$ no limite termodinâmico é dada por

$$-\beta\psi(\beta, B) = \lim_{N \to \infty} N^{-1} \ell n Z_n(\beta, B). \tag{4.21}$$

Da expressão (4.21) da energia livre todas as propriedades termodinâmicas podem ser calculadas. A magnetização por exemplo é dada por

$$M(\beta, B) = \frac{\partial}{\partial B}[-\beta\psi(\beta, B)] \tag{4.22}$$

Porém a magnetização M está relacionada com o parâmetro de ordem da seguinte maneira [20]:

$$M(\beta, B) = 1 + (p-1)m. \tag{4.23}$$

Conhecendo-se então o parâmetro de ordem a magnetização é determinada facilmente através da expressão (4.23) acima. Por outro lado o conhecimento da magnetização permite a determinação completa da energia livre como mostra Thompson.

Pelo teorema fundamental do cálculo diferencial e integral tem-se que a menos de uma função $\Phi(\beta)$ que

$$-\beta\psi(\beta, B) = \int M(\beta, B)dB. \tag{4.24}$$

Essa função $\Phi(\beta)$ é determinada seguindo-se o esquema proposto por Thompson. Define-se primeiramente as quantidades auxiliares análogas a (4.18) e (4.21) como

$$Q_N(\beta, B) = \sum_{\{\lambda\}}[\exp(-\beta E_{Potts}\{\lambda\}]\{\exp[pB\sum_{i=1}^{N}(\delta_{\lambda_i,0} - 1)] \tag{4.25}$$

e

$$-\beta\varphi(\beta, B) = \lim_{N \to \infty} \ell n Q_N(\beta, B). \tag{4.26}$$

De (4.18) e (4.25) pode-se escrever que

$$Q_N(\beta, B) = e^{-NpB} Z_N(\beta, B) \tag{4.27}$$

Tomando-se o logarítmo nos dois membros de (4.27), considerando-se o limite termodinâmico e utilizando-se as expressões (4.21) e (4.26) podemos escrever

$$-\beta\varphi(\beta, B) = -pB - \beta\psi(\beta, B), \tag{4.28}$$

ou ainda, derivando-se (4.28) em relação a B, obtém-se que

$$\frac{\partial}{\partial B}[-\beta\varphi(\beta, B)] = M(\beta, B) - p. \tag{4.29}$$

A vantagem da definição das quantidades auxiliares pode agora ser entendida pois das eq. (4.25) e (4.26) vemos que no limite de $B \to \infty$,

$$-\lim_{B \to \infty} \beta\varphi(\beta, B) = -\beta\varphi(\beta, \infty) = -\beta E^{(0)}_{Potts} \tag{4.30}$$

onde

$$E^{(0)}_{Potts} = -\frac{\gamma p J}{2}, \tag{4.31}$$

é a energia do estado fundamental por spin.

Integrando-se (4.29) desde B até o infinito obtém-se, tendo-se em vista (4.28) e (4.30), que

$$\begin{aligned} &\int_B^\infty [M(\beta, b) - p] db = -\beta\varphi(\beta, \infty) + \beta\varphi(\beta, B) \\ &= -\beta E^{(0)}_{Potts} + pB + \beta\psi(\beta, B) \end{aligned} \tag{4.32}$$

Substituindo-se (4.23) na expressão (4.32) a energia livre pode ser escrita da seguinte forma:

$$\beta\psi(\beta, B) = \beta E^{(0)}_{Potts} - pB + (p-1) \int_B^\infty [m(\beta, b) - 1] db \tag{4.33}$$

determinado-se dessa maneira a função $\Phi(\beta)$.

A fim de calcular-se a integral (4.33) usando a expressão do parâmetro de ordem m dada pela equação (4.16) vamos considerar primeiramente a seguinte integral:

$$I = \int_B^\infty \left\{ \frac{\partial}{\partial b} \ell n[p cosh_p(b + \gamma arctanh_p tX)] - \frac{p}{2} \right\} db, \tag{4.34}$$

onde $b \geq 0$ e X é o ponto fixo positivo do mapa.

Tendo-se em conta que $pcosh_p\Theta \sim e^{p\Theta/2}$ quando $\Theta \to \infty$ (veja definição de $cosh_p\Theta$ no apêndice A) e que $X(b) \to 1$ quando $b \to \infty$, a integral I será dada por

$$I = -\ell n[pcosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$
$$+\tfrac{\gamma p}{2} arctanh_p t + \tfrac{pB}{2}. \tag{4.35}$$

Calcula-se em seguida a mesma integral I efetuando-se em primeiro lugar a derivada existente no integrando (veja apêndice C), obtendo-se como resultado que

$$I = (p-1)\int_B^\infty [m(\beta, b) - 1]db$$
$$-\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX) - \ell n[1 + (p-1)tX] + \ell n(1-t)\} \tag{4.36}$$

Utilizando-se a definição do $arctanh_p t$ (veja apêndice A) na expressão (4.35) e então igualando-a a (4.36) obtém-se que

$$(p-1)\int_B^\infty [m(\beta, b) - 1]db = -\ell n[pcosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$
$$+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX) - \ell n[1 + (p-1)tX] \tag{4.37}$$
$$+ \ell n[1 + (p-1)t]\} + \tfrac{pB}{2}.$$

Finalmente substituindo-se (4.37) em (4.33) obtém-se uma expressão para o funcional da energia livre dada por

$$-\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\left\{\ell n[1+(p-1)tX^2]-\ell n(1-tX)-\ell n[1+(p-1)tX]\right. \tag{4.38}$$

$$\left.+\ell n[1+(p-1)t]\right\}-\tfrac{pb}{2}-\tfrac{\gamma\beta pJ}{2}$$

Para compararmos com a expressão de energia livre do modelo de Ising obtida por Thompson, a equação (4.38) pode ainda ser escrita (veja apêndice C) na forma

$$\beta\psi(\beta,B)=-\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\left\{\ell n[1+(p-1)tX^2]-\ell n(1-tX)-\ell n[1+(p-1)tX]\right\}$$

$$+\tfrac{\gamma}{4}\left\{\ell n[1+(p-1)t]+\ell n(1-t)\right\} \tag{4.39}$$

$$-\tfrac{\gamma\beta pJ}{4}-\tfrac{pB}{2},$$

onde no caso $p=2$ (Ising) recupera-se a expressão calculada por Thompson:

$$\beta\psi(\beta,B)=-\ell n[2cosh(B+\gamma arctanh tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\left\{\tfrac{1}{2}\ell n(1-t^2)-\ell n(1-t^2X^2)+\ell n(1+tX^2)\right\} \tag{4.40}$$

$$-\tfrac{\gamma\beta J}{2}-B,$$

a menos dos dois últimos termos. Esses termos correspondem a um deslocamento do zero de energia devido ao uso do delta de Kronecker na definição da nossa Hamiltoniana conforme se mostra no apêndice C.

Fazendo-se uso das definições de algumas funções hiperbólicas generalizadas contidas no apêndice A e de alguma álgebra mostra-se (veja apêndice C) que a expressão (4.38) pode ser colocada na forma

$$\beta\psi(\beta, B) = -\tfrac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n(1 - tX)$$

$$+\tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{e^{pB}[1 + (p-1)tX]^{\gamma} + (p-1)(1 - tX)^{\gamma}\right\} \tag{4.41}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1 - X) + \tfrac{\gamma}{2}\ell n(1 - t) - \tfrac{\gamma}{2}\ell np$$

Como constatação da veracidade da expressão (4.41) ela é reobitida no apêndice B de uma outra maneira usando-se um método proposto por Baumgärtel[16].

Pode-se eliminar a dependência explícita no campo B da expressão (4.38) e escrevê-la numa forma que será utilizada na seção 4.4. Procedendo dessa maneira (veja apêndice C) obtém-se a seguinte expressão

$$\beta\psi = -(\gamma - 1)\ell n(1 - tX) + \ell n(1 - X) + \frac{(\gamma - 2)}{2}\ell n[1 + (p-1)tX^2] + \frac{\gamma}{2}\ell n(1 - t) - \ell np \tag{4.42}$$

4.2.3. Suscetibilidade Magnética

A suscetibilidade magnética χ é dada por

$$\chi = \tfrac{\partial M}{\partial H}$$

$$= \beta(p-1)\tfrac{\partial m}{\partial B} \tag{4.43}$$

Derivando-se a expressão (4.16) em relação a B (veja apêndice C) obtém-se

$$\frac{\partial M}{\partial B} = sech_p^2(B + \gamma arctanh_p tX).$$

$$\cdot \left\{ \frac{(1-tX)[1+(p-1)tX]+tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]} \right\} \tag{4.44}$$

Então de (4.43) podemos escrever a expressão para a suscetibilidade magnética na forma

$$k_B T\chi = (p-1)sech_p^2(B + \gamma arctanh_p tX)$$

$$\cdot \left\{ \frac{(1-tX)[1+(p-1)tX]+tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]} \right\}. \tag{4.45}$$

Podemos ainda eliminar as secantes hiperbólicas generalizadas (veja apêndice C) na expressão (4.45) e obter-se a suscetibilidade magnética na forma

$$k_B T\chi =$$

$$\frac{(p-1)(1-X)(1-tX)[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]\{(1+t)[1-(p-1)tX^2]+2(p-2)tX\}}{[1+(p-1)tX^2]^2\{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)t(1-X)[1+(p-1)X]\}} \tag{4.46}$$

4.2.4. Energia Interna

A energia interna é dada por

$$U = -k_B T^2 \frac{\partial \beta\psi(\beta, B)}{\partial T} \tag{4.47}$$

Derivando-se a expressão (4.41) da energia livre, em relação a T (veja apêndice C) obtém-se que

$$\frac{\partial\beta\psi(\beta,B)}{\partial T} = \frac{H}{k_B T^2}\cdot\frac{[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]}{[1+(p-1)tX^2]}$$

$$+\frac{\gamma J}{2k_B T^2}\cdot\frac{[1+(p-1)X^2][1+(p-1)t]}{[1+(p-1)tX^2]} \tag{4.48}$$

Substituindo-se então (4.48) em (4.47) obtém-se finalmente a expresão para a energia interna :

$$U = -\frac{H[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]}{[1+(p-1)tX^2]}$$

$$-\frac{\gamma J[1+(p-1)X^2][1+(p-1)t]}{2[1+(p-1)tX^2]}. \tag{4.49}$$

Com a finalidade de checar a expressão (4.49) vamos calcular a energia interna do modelo de Potts na rede de Bethe utilizando o formalismo desenvolvido por Christiano. Nesse formalismo a energia interna na ausência de campo magnético externo é dado por [4]:

$$U(\beta,0) = -\frac{\gamma J}{2}[1+(p-1)<\lambda_0\lambda_1>] \tag{4.50}$$

onde $<\lambda_0\lambda_1>$ é a correlação (transmissividade térmica) entre o spin central λ_0 e o spin vizinho λ_1, na árovre de Cayley assimétrica fechada (veja fig. 4.1). Lembrando novamente 'que, como na obtenção do parâmetro de ordem, deve-se considerar a árvore e não somente o ramo, pode-se usar o aglomerado da figura (4.1c) conforme esquematizado na fig. 4.3, no

cálculo da correlação $< \lambda_0 \lambda_1 >$.

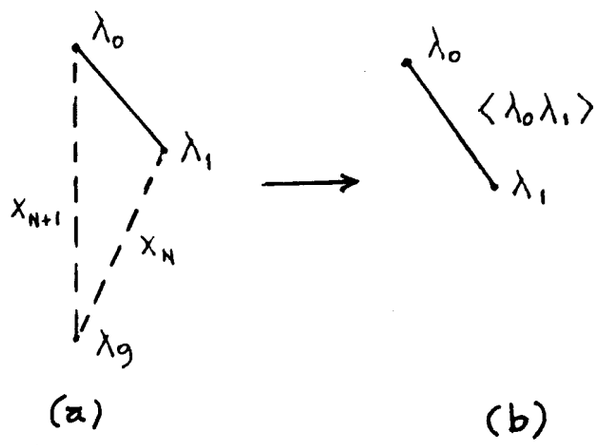


Fig. 4.3. Processo de obtenção da energia interna.

Aplicando-se as regras de composição ao aglomerado da fig. 4.3 obtém-se então que

$$< \lambda_0 \lambda_1 >^D = t^D (X_{N+1} X_N)^D \tag{4.51}$$

No limite $N \rightarrow \infty, X \equiv X_{N+1} = X_N$. Então a expressão (4.51) pode ser escrita na forma

$$< \lambda_0 \lambda_1 >^D = t^D (X^2)^D \tag{4.52}$$

Em termos das transmissividades diretas a expressão (4.52) torna-se

$$\begin{aligned} < \lambda_0 \lambda_1 > &= \frac{1 - t^D (X^2)^D}{1 + (p-1) t^D (X^2)^D} \\ &= \frac{t + [1 + (p-2)t] X^2}{[1 + (p-1) t X^2]} \end{aligned} \tag{4.53}$$

Substituindo-se (4.53) em (4.50) obtém-se finalmente que

$$U(\beta,0) = -\frac{\gamma J}{2}\frac{[1+(p-1)X^2][1+(p-1)t]}{[1+(p-1)tX^2]} \tag{4.54}$$

Pode-se observar agora que a expressão (4.54) é idêntica a (4.49) com $H = 0$.

4.2.5. Calor Específico

O calor específico a campo nulo pode ser obtido derivando-se a expressão (4.54) da energia interna a campo nulo, em relação a temperatura, isto é:

$$C(\beta,0) = \frac{\partial(\beta,0)}{\partial T}$$

$$C(\beta,0) = \frac{\gamma J^2(p-1)(1-t)(1-X)[1+(p-1)t]}{2k_BT^2[1+(p-1)tX^2]^2}\{(1+X)[1+(p-1)X^2] \tag{4.55}$$

$$+\frac{2(\gamma-1)(1-t)X^2[1+(p-1)t][1+(p-1)X]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)t(1-X)[1+(p-1)X]}\}$$

4.2.6. Entropia

A entropia S é claculada utilizando-se a relação bem conhecida da Termodinâmica:

$$\frac{S}{k} = \beta u - \beta\psi \tag{4.56}$$

Deve-se ressaltar que as funções termodinâmicas calculadas na seção 4.2 recuperam as funções obtidas por Peruggi et al [18]. Os resultados de Peruggi et al são expressos em termos das variáveis φ e e^K onde

$$\varphi \equiv X^D = \frac{1-X}{1+(p-1)X} \tag{4.57}$$

e

$$e^K \equiv (t^D)^{-1} = \frac{1+(p-1)t}{1-t}. \tag{4.58}$$

Embora os autores não façam referências a mapeamentos, a eq. 3 da página 380 do referido trabalho é a equação de ponto fixo do mapa de B.P. que nas variáveis duais $x_n \equiv X_n^D$ e $\omega = t^D$ é escrita na forma

$$x_{n+1} = e^{-\beta pH} \cdot \left\{ \frac{[1+(p-2)\omega]x_n + \omega}{1+(p-1)\omega x_n} \right\}^{\gamma-1} \tag{4.59}$$

Caso antiferromagnético.

No caso antiferromagnético determinamos somente o funcional da energia livre porque a partir de sua expressão pode-se determinar as demais funções termodinâmicas. Como estamos generalizando o esquema de Thompson devemos em primeiro lugar obter uma expressão para a magnetização o que será feito a seguir.

4.2.7. Magnetização

A fase de baixa temperatura no caso de acoplamento antiferromagnético corresponde ao ciclo X_1, X_2 do mapa de B.P. Assim no cálculo da magnetização deve-se tomar a média

aritmética das configurações da figura 4.4.

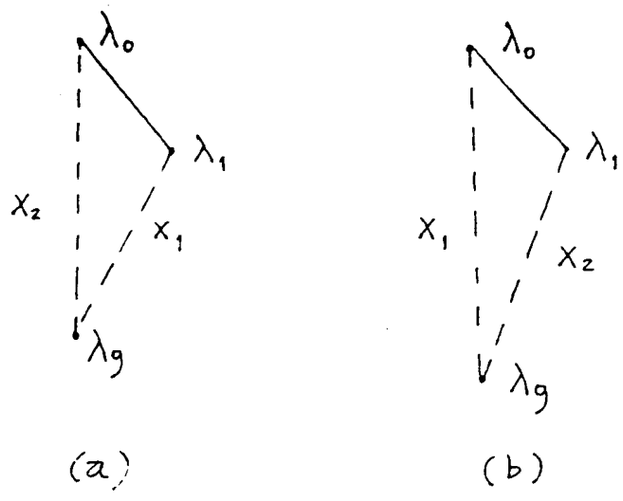


Fig. 4.4. Processo de obtenção de magnetização no caso antiferromagnético.

onde X_1 e X_2 são os pontos pertencentes ao ciclo duplo atrator do mapa de B.P.

Denominado-se de $m_1 =< \lambda_0 \lambda_g >$ o parâmetro de ordem correspondente ao aglomerado da fig. 4.4a e $m_2 =< \lambda_0 \lambda_g >$ o parâmetro de ordem correspondente ao aglomerado da fig. 4.4b obtém-se após a composição das transmissividades que

$$m_1 = \frac{X_1 + tX_2 + (p-2)tX_1X_2}{1 + (p-1)tX_1X_2} \tag{4.60}$$

e

$$m_2 = \frac{X_2 + tX_1 + (p-2)tX_1X_2}{1 + (p-1)tX_1X_2} \tag{4.61}$$

Aplicando-se um procedimento análogo ao utilizado na determinação da expressão (4.16), para a magnetização na região ferromagnética, obtém-se que

$$m_1 = tanh_p[B + \gamma arctanh_p t X_2] \tag{4.62}$$

e

$$m_2 = tanh_p[B + \gamma arctanh_p t X_1] \tag{4.63}$$

Fazendo-se então a média nas configurações mostradas na figura 4.4 determinamos a expressão para a magnetização que é dada por

$$\begin{aligned} M &= \tfrac{1}{2}(M_1 + M_2) \\ &= \tfrac{(p-1)}{2}(m_1 + m_2) \\ &= \tfrac{(p-1)}{2}\{tanh_p[B + \gamma arctanh_p t X_1] \\ &+ tanh_p[B + \gamma arctanh_p t X_2]\} \end{aligned} \tag{4.64}$$

4.2.8. Energia Livre

Uma vez determinada a magnetização passamos a calcular o funcional da energia usando um procedimento análogo ao desenvolvimento na seção 4.2. Agora entretanto devemos levar em consideração a existência do campo crítico. Assim procedendo reescrevemos (4.32) como

$$\int_B^{B_c} [M(\beta, b) - p]db = \beta\psi(\beta, B_c) + \beta\psi(\beta, B) + p(B - B_c). \tag{4.65}$$

Para o cálculo da integral (4.65) procede-se como no caso anterior porém agora no lugar de (4.34) considera-se a integral:

$$I' = \int_B^{B_c} \left\{ \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial b} \left\{ \ell n[p cosh_p(b + \gamma arctanh_p tX_1)] \right.\right.$$

$$\left.\left. \ell n[p cosh_p(b + \gamma arctanh_p tX_2)] - \frac{p}{2} \right\}\right\} db \tag{4.66}$$

Lembrando que no limite $B \rightarrow B_c$, $X_1 = X_2 = X$, a integral I' é facilmente obtida como :

$$I' = \ell n[p cosh_p(B_c + \gamma arctanh_p tX)] - \frac{pB_c}{2}$$

$$-\frac{1}{2}\ell n[p cosh_p(B_c + \gamma arctanh_p tX_1)] \tag{4.67}$$

$$-\frac{1}{2}\ell n[p cosh_p(B_c + \gamma arctanh_p tX_2)] + \frac{pB}{2}.$$

Calculando-se agora a integral I' efetuando primeiramente a derivada existente no integrando (veja apêndice C) obtém-se que

$$I' = \int_B^{B_c}[M(\beta, b) - p]db + \frac{\gamma}{2}\left\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX)\right.$$

$$\left. -\ell n[1 + (p-1)tX]\right\} - \frac{\gamma}{4}\left\{2\ell n[1 + (p-1)tX_1X_2] - \ell(1 - tX_1)\right. \tag{4.68}$$

$$\left. -\ell n[1 + (p-1)tX_1] - \ell n(1 - tX_2) - \ell n[1 + (p-1)tX_2]\right\}.$$

Igualando-se as expressões (4.67) e (4.68) obtém-se que

$$\int_B^{B_c}[M(\beta,b)-p]db = \ell n[pcosh_p(B_c+\gamma arctanh_p tX]$$

$$-\tfrac{\gamma}{2}\left\{\ell n[1+(p-1)tX^2]-\ell n(1-tX)-\ell n[1+(p-1)tX]\right\}-\tfrac{pB_c}{2}$$

$$-\tfrac{1}{2}\left\{\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX_1)]+\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX_2)]\right\}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)tX_1X_2]+\tfrac{pB}{2} \tag{4.69}$$

$$-\tfrac{\gamma}{4}\left\{\ell n(1-tX_1)+\ell n[1+(p-1)tX_1]\right.$$

$$\left.+\ell n(1-tX_2)+\ell n[1+(p-1)tX_2]\right\}.$$

Igualando-se as expressões (4.69) e (4.65), tendo-se ainda em conta que

$$\beta\psi(\beta,B_c) = -\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\left\{\ell n[1+(p-1)tX^2]-\ell n(1-tX)-\ell n[1+(p-1)tX]\right\} \tag{4.70}$$

$$-\tfrac{\gamma}{4}\left\{\ell n(1-t)+\ell n[1+(p-1)t]\right\}-\tfrac{\gamma\beta pJ}{4}-\tfrac{pB_c}{2},$$

determina-se finalmente a expressão para o funcional da energia livre do modelo de Potts com p estados, na rede de Bethe, na fase antiferromagnética:

$$\beta\psi(\beta,B) = -\tfrac{1}{2}\,\{\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX_1)]$$

$$+\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX_2)]\} + \tfrac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)tX_1X_2]$$

$$\tfrac{\gamma}{4}\,\{\ell n(1-tX_1)+\ell n[1+(p-1)tX_1]+\ell n(1-tX_2) \tag{4.71}$$

$$+\ell n[1+(p-1)tX_2]-\ell n(1-t)-\ell n[1+(p-1)t]\}$$

$$-\frac{\gamma\beta pJ}{4}-\frac{pB}{2}$$

Para $p=2$ a expressão (4.71) se reduz a

$$\beta\psi(\beta,B) = -\tfrac{1}{2}\,\{\ell n[2cosh(B+\gamma arctanh_p tX_1)]$$

$$+\ell n[2cosh(B+\gamma arctanh_p tX_2)]\} + \tfrac{\gamma}{2}(1+tX_1X_2)$$

$$-\tfrac{\gamma}{4}\,\{\ell n(1-t^2X_1^2)+\ell n(1-t^2X_2^2)-\ell n(1-t^2)\} \tag{4.72}$$

$$-\frac{\gamma\beta J}{2}-B.$$

Novamente a expressão (4.71) recupera o resultado obtido por Thompson a menos dos dois últimos termos. A razão do aprecimento desses termos adicionais já foi discutida na seção 4.2.

Não é de nosso conhecimento a existência na literatura de uma fórmula semelhante à expressão (4.71) para o modelo de Potts.

4.3. Funções Termodinâmicas (γ infinito)

As funções termodinâmicas nesse caso (aproximação de B.W.) podem ser obtidas tomando-

se os limites de γ infinito nas expressões obtidas na seção 4.2. Deve-se lembrar que o acoplamento é escalado de maneira que $J \rightarrow J/\gamma$.

Em primeiro lugar considera-se o caso ferromagnético. Em seguida, como foi feito no caso de ramificação finita, obtém-se o funcional da energia livre para o caso antiferromagnético.

Nos cálculos que se faz a seguir são utilizados os seguintes limites:

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} t = 0 \tag{4.73}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma arctanh_p tX = \beta JX \tag{4.74}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\gamma}{2} \ell n[1 + (p-1)tX^2] = \frac{\beta J(p-1)X^2}{2} \tag{4.75}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\gamma}{2} \ell n(1 - tX) = -\frac{\beta JX}{2} \tag{4.76}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\gamma}{2} \ell n[1 + (p-1)tX] = \frac{\beta J(p-1)X}{2} \tag{4.77}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\gamma}{4} \ell n[1 + (p-1)t] = \frac{\beta J(p-1)}{4} \tag{4.78}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{\gamma}{4} \ell n(1 - t) = -\frac{\beta J}{4} \tag{4.79}$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} (\gamma - 1)t = \beta J \tag{4.80}$$

Caso ferromagnético.

4.3.1. Magnetização

Substituindo-se o limite (4.74) em (4.16) obtém-se a expressão do parâmetro de ordem m que é dada por

$$m = tanh_p(B + \beta J X) \tag{4.81}$$

Deve-se notar que no caso de ramificação infinita, levando-se em consideração o limite (4.73), a expressão (4.3) do parâmetro de ordem m se reduz a

$$m = X. \tag{4.82}$$

Assim a expressão (4.81) pode ainda ser escrita na forma

$$m = tanh_p(B + \beta J m) \tag{4.83}$$

que para $p = 2$ recupera o resultado bem conhecido para a relação de autoconsistência para a magnetização.

4.3.2. Energia Livre

Por substituição dos limites (4.73) - (4.79) em (4.39), obtém-se para o funcional da energia livre a seguinte expressão

$$\beta\psi(\beta, B) = -\ell n[pcosh_p(B + \beta J X)] + \frac{(p-1)\beta J X^2}{2} - \frac{(p-2)\beta J X}{2} - \frac{\beta J}{2} - \frac{pB}{2} \tag{4.84}$$

Mais uma vez um resultado de Thompson é recuperado quando se faz $p = 2$ na expressão acima.

A expressão (4.84) pode ainda ser escrita numa outra forma que será utilizada posteriormente (veja apêndice C):

$$\beta\psi = \beta Jm + \ell n(1-m) + \frac{\beta J(p-1)m^2}{2} - \frac{\beta J}{2} - \ell np \tag{4.85}$$

Podemos ainda mostrar que a expressão acima é idêntica à obtida por Wu [20] (veja apêndice C):

$$\begin{aligned} \beta\psi = & \tfrac{[1+(p-1)X]}{p}\ell n[1+(p-1).X] + \tfrac{(p-1)(1-X)\ell n(1-X)}{p} \\ & -\tfrac{\beta J}{2}[1+(p-1)X^2] - \ell np \end{aligned} \tag{4.86}$$

4.3.3. Suscetibilidade Magnética

A substituição dos limites (4.73) e (4.80) na expressão (4.46) fornece a seguinte expressão para a suscetibilidade magnética no limite de γ infinito:

$$k_B T\chi = \frac{(p-1)(1-X)[1+(p-1).X]}{1-\beta J(1-X)[1+(p-1).X]} \tag{4.87}$$

Para o caso $p = 2$ a expressão (4.87) se reduz a

$$k_B T\chi = \frac{1-X^2}{1\beta J(1-X^2)} \tag{4.88}$$

que pode ser encontrada, por exemplo, em um livro de C.J.Thompson [25].

4.3.4. Energia Interna

A expressão da energia livre é obtida facilmente nesse caso fazendo-se $t = 0$ e $\gamma J \rightarrow J$ na expressão (4.49):

$$U(\beta, H) = -H[1 + (p-1)X] - \frac{J}{2}[1 + (p-1)X^2] \tag{4.89}$$

4.3.5. Calor Específico

Novamente por substituição dos limites (4.73) e (4.80) na eq. (4.55) obtém-se a expressão para o calor específico, a campo nulo, no limite de γ infinito:

$$C(\beta, 0) = \frac{J^2(p-1)X^2[1 + (p-1)X]}{k_B T^2\{1 - \beta J[1 + (p-1)X]\}} \tag{4.90}$$

4.3.6. Entropia

Com a finalidade de comparar com uma expressão fornecida por Wu [20] vamos determinar explicitamente a expressão para a entropia no limite de γ infinito. Como é sabido a entropia pode ser calculada de:

$$\frac{S}{k} = \beta u - \beta \psi \tag{4.91}$$

Substituindo-se então as expressões (4.89) e (4.86) na equação (4.91) obtém-se de imediato que

$$\frac{S}{k} = -\beta H[1 + (p-1)X] - \frac{[1+(p-1)X]}{p}\ell n[1 + (p-1)X]$$

$$-\frac{(p-1)(1-X)}{p}\ell n(1 - X) + \ell np, \tag{4.92}$$

que no caso de $H = 0$ se reduz a expressão do Wu:

$$\frac{S}{k} = -\frac{[1 + (p-1)X]}{p}\ell n[1 + (p-1)X] - \frac{(p-1)(1-X)}{p}\ell n(1 - X) + \ell np \tag{4.93}$$

Caso antiferromagnético

Nesse caso como foi feito para o caso de γ finito calcula-se somente o funcional da energia livre. A partir dessa as demais funções termodinâmicas podem ser determinadas por derivações.

4.3.7. Energia Livre

Substituindo os limites (4.74) - (4.79) na expressão (4.72) obtém-se a expressão para o funcional da energia livre no limite de γ infinito na forma:

$$\beta\psi(\beta, B) = -\frac{1}{2}\{\ell n[pcosh_p(B + \beta JX_1)]$$

$$+\ell n[pcosh_p(B + \beta JX_2)]\} + \frac{(p-1)\beta JX_1X_2}{2} \tag{4.94}$$

$$+\frac{\beta J(p-2)}{4}(X_1 + X_2) - \frac{\beta J}{2} - \frac{pB}{2}$$

Mais uma vez recupera-se um resultado de Thompson quando se faz $p = 2$ na expressão (4.94)

4.4. Metaestabilidade no Modelo de Potss na Árvore de Cayley

A natureza da transição de fase que ocorre no modelo de Potts ferromagnético foi discutido primeiramente por Kihara et al [26] na aproximação de Bragg-Williams. Para $p > 2$ existe uma transição de fase de primeira ordem na temperatura crítica $T_c(p)$, enquanto para $p \leq 2$ a transição é de segunda ordem em $T_c(2)$. Recentemente um outro esquema de classificação, onde a transição é de primeira ordem para todo $p \neq 2$ e de segunda ordem para $p = 2$, surgiu da aproximação de Bethe-Peierls do modelo de Potts [27]. Esse resultado é obtido estudando o comportamento do sistema bem no interior da árvore de Cayley e selecionando a solução da condição de autoconsistência (ponto fixo do mapa de B.P.) como sendo aquela que fornece o mínimo absoluto da energia livre de cada fase. Nesse último esquema a temperatura crítica t_c correspondente à transição de primeira ordem é dada por [27]

$$t_c = \frac{(p-1) - (p-1)^{(\gamma-2)/\gamma}}{(p-1)(p-1)^{(\gamma-2)/\gamma} - 1}. \tag{4.95}$$

Nessa temperatura a equação (4.10) admite três soluções dadas por [27]

$$X_1 = \frac{1+(p-1)t_c}{p(p-1)}$$

$$X_2 = \frac{1-\sqrt{X_1^p}}{1+(p-1)\sqrt{X_1^p}} \tag{4.96}$$

$$X_3 = 0 \tag{4.97}$$

A primeira e a terceira correspondem às fases estáveis ordenada e desordenada, respectivamente. O sistema sofre uma transição de primeira ordem em t_c caracterizada por um salto no parâmetro de ordem dado por [27]

$$\Delta m = \frac{(p-2)}{(p-1)}. \tag{4.98}$$

Lembrando o fato que aproximações distintas de aglomerados conduzem a uma mesma descrição qualitativa de uma transição de fase, somos levados a concluir que a discrepância entre os esquemas de classificação não deve ser atribuída entre as aproximações de Bragg-Williams e de Bethe-Peierls e que a explicação deve ser outra.

A seguir apresentaremos um cenário completo onde os resultados acima podem ser conciliados. Isso é realizado estudando-se o efeito do sinal do campo superficial H_s no comportamento do sistema.

A condição inicial da transformação do grupo de renormalização é determinada pelo sinal do campo superficial H_s de modo que uma escolha diferente do sinal de H_s produzirá uma solução diferente para o parâmetro de ordem. Como uma conseqüência, transições de fase diferentes podem ser obtidas. O esquema de classificação de Kihara et al, por exemplo, é recuperado se o sistema for resfriado na presença de um campo H_s positivo. Para se obter o esquema de di Liberato et al, deve-se usar condições mistas do campo superficial H_s, que é positivo para $p > 2$ e negativo para $p < 2$. Se, por outro lado, H_s é escolhido como sendo negativo, obtém-se a situação inversa à analizada por Kihara et al, isto é: o sistema com $p > 2$ sofrerá uma transição de segunda ordem em $T_c(2)$, enquanto para $p < 2$ existe uma transição de primeira ordem em $T_c(p)$.

Embora a contribuição dos sítios superficiais tenham sido suprimidos no cálculo dos pontos fixos e consequentemente no do funcional da energia livre o sinal do campo superficial é ainda relevante pois ele determina o ponto fixo. A afirmativa acima relativa aos efeitos das condições iniciais H_s tem como suporte os seguintes resultados da teoria de mapas racionais [22]:

(a) O número de órbitas periódicas atratoras de um mapa racional $R(X)$ de grau $d \geq 2$ é no máximo $2d-2$. Como cada ponto fixo especifica uma fase, o mapa de B.P. com

interações ferromagnéticas $J > 0$ possui no máximo dois pontos fixos atratores.

(b) As órbitas atratoras de um mapa racional $R(X)$ de grau $d \geq 2$ estão contidas no conjunto de Fatou $F(R)$, enquanto as órbitas repulsoras estão contidas no conjunto de Julia $J(R)$ que é o complemento de $F(R)$.

(c) Seja p um ponto fixo atrator de $R(X)$. Então a bacia atratora de p é o conjunto $W^s(p) = \{X | R^n(X) \to p\}$ quando $n \to \infty$ cuja fronteira é $J(R)$.

(d) Os conjuntos de Julia e Fatou são completamente invariantes, isto é, se $X \in F(R)$, então $R(X) \in F(R)$ e $R^{-1}(X) \subset F(R)$, onde $R^{-1}(X)$ são as pré-imagens de X. Isso significa que uma vez dentro de uma bacia atratora (ou em sua borda), um ponto não pode abandoná-la por uma aplicação de $R(X)$.

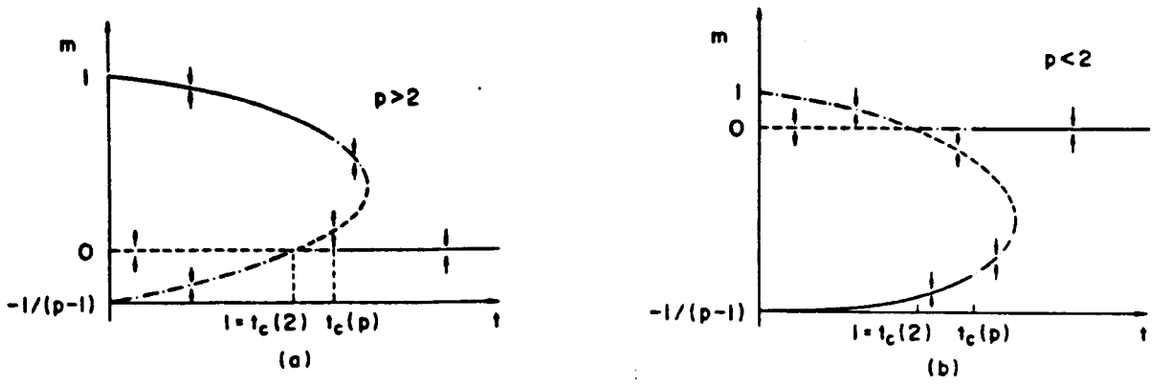


Fig. 4.5. Traçado esquemático dos pontos fixos do mapa de B. W., na ausência de campo magnético externo, como função da temperatura reduzida $t = Kk_BT/J$. As linhas cheias, pontilhadas tracejadas e pontilhadas denotam as fases estável (mínimo absoluto da energia livre), metaestável (mínimo local da energia livre) e instável (maior energia livre). As setas indicam os intervalos onde os pontos fixos são atratores ou repulsores.

Em altas temperaturas o mapa de B.P. possui somente uma bacia atratora, de modo que não importa qual seja o sinal do campo superficial (inicial) $H_D = H_S$, o ponto fixo é o ponto fixo paramagnético $X = 0$. Para uma certa faixa de H e T a equação de autoconsistência admite dois outros pontos fixos (veja fig. 4.5), um atrator e o outro repulsor. O sinal e intensidade do campo superficial determinam de qual bacia atratora estamos partindo na relação de recorrência e assim determina o ponto fixo do mapa de B.P. que será atingido. Observando que esses resultados são independentes de grau do mapa consideramos, por razão de simplicidade nos cálculos numéricos, o limite de coordenação infinita. Nesse limite utilizamos a expressão (4.85) que é equivalente à energia libre obtida por Kihara:

$$\beta\psi = \beta Jm + \ell n(1-m) + \frac{\beta J(p-1)m^2}{2} - \frac{\beta J}{2} - \ell n p \tag{4.99}$$

De acordo com Kihara et al a temperatura crítica

$$p\beta_c J = \frac{2(p-1)}{(p-2)}\ell n(p-1) \tag{4.100}$$

é obtida da condição $\beta\psi'(m) = 0$ e $\beta\psi(m) = \beta\psi(0)$, enquanto a temperatura $T_c(2)$ é obtida da condição que o ponto fixo paramagnético $X = 0$ torne-se indiferente. Utilizando essas condições e selecionando primeiro $H_S > 0$ e então $H_S < 0$ obtivemos os resultados mostrados

na fig. 4.6.

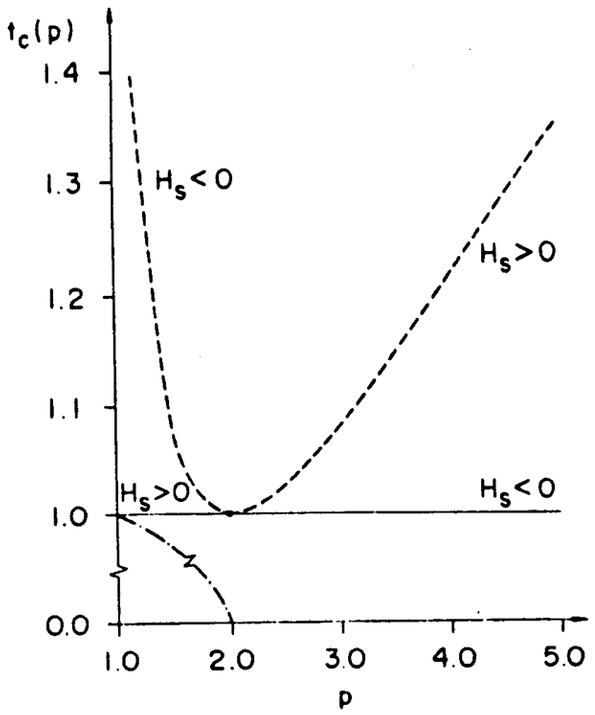


Fig. 4.6. A temperatura reduzida de transição é $t_c(p) = k_B T_c(p)/J$ (linha tracejada) e $t_c(2) = k_B T_c(2)/J$ (linha cheia) como função de p. A transição em $t_c(p)[t_c(2)]$ é de primeira (segunda) ordem e a energia livre a baixa temperatura é um mínimo local (absoluto). O sinal do campo superficial para atingir essas fases está indicado. Abaixo da curva ponto-tracejada $t_v(p)$ a energia livre (mínimo absoluto) fornece uma entropia negativa.

Fixando a temperatura e comparando as energias livres (veja fig. 4.7) obtidas usando-se os diferentes pontos fixos do mapa de B.W., verificamos que as fases de baixa temperatura da transição de primeira ordem em $T_c(p)$ são aquelas que fornecem os mínimos absolutos, enquanto as fases de baixa temperatura da transição de segunda ordem são sempre mínimos relativos. Obbservamos também que existe uma região de comportamento não físico com violações de convexidade [28]. A seguir fazemos um resumo dos resultados obtidos:

(a) A transição em $T_c(p)$ é de primeira ordem. Para $p > 2$ a fase de baixa temperatura é um mínimo absoluto da energia livre. O sistema é bem comportado com um

calor específico e entropia não negativos que se anulam quando $T \to 0$. Para $p < 2$, embora a energia livre seja um mínimo absoluto, a entropia abaixo de $T_v(p)$ como indicado na fig. 4.7.

(b) A transição em $T_c(2)$ é de segunda ordem. Não existe violação de convexidade para qualquer p e a fase de baixa temperatura é um mínimo local da energia livre. Para $p > 2$ existe uma entropia residual $S/k_B = \ln(p-1)$.

(c) O esquema de classificação de Kihara et al é obtido usando somente os pontos fixos estáveis não negativos ($H_S > 0$).

(d) O esquema de classificação de di Liberto et al onde as transições são todas de primeira ordem e obtido usando $H_S > 0 (H_S < 0)$ para $p > 0$ $(p < 0)$. Na fase de baixa temperatura, que é um mínimo da eenrgia livre, observa-se violação de convexidade (entropia negativa) em um sistema com $p < 2$. Na aproximação de Bethe-Peierls (número de coordenação finita), além da entropia negativa à baixa temperatura num sistema com $p > 2$ (veja fig .4.8), a violação de convexidade também se manifesta à baixa temperatura, no calor específico, que se torna negativo para $p < 2$ (veja fig. 4.9).

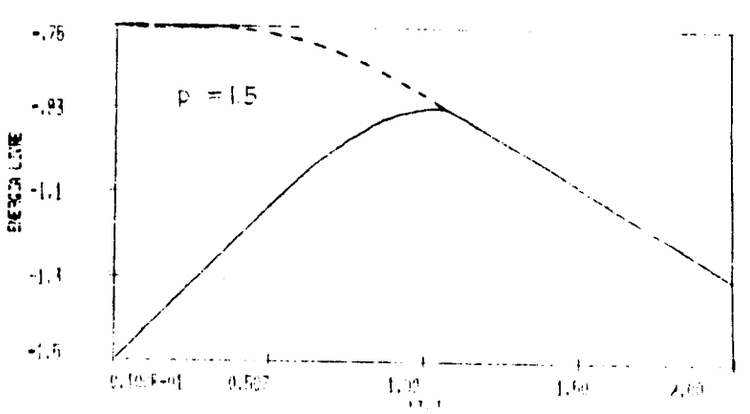


Fig. 4.7. Energias livres correspondentes ao ponto fixo estável trivial X_+ (linha tracejada) e ao ponto fixo estável X_- (linha cheia) do mapa de B.W.

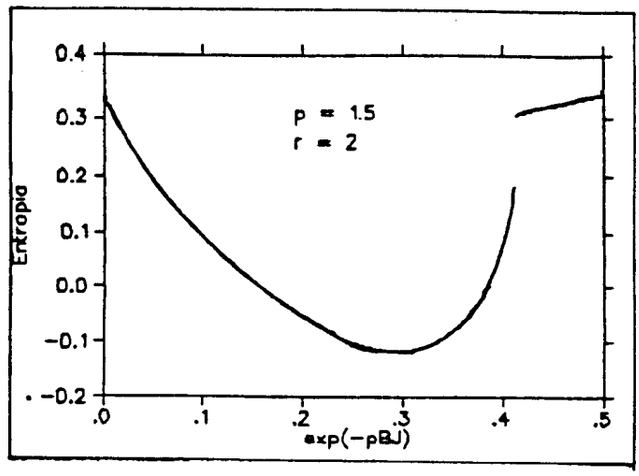


Fig. 4.8. Entropia negativa a baixa temperatura na aproximação de Bethe-Peierls.

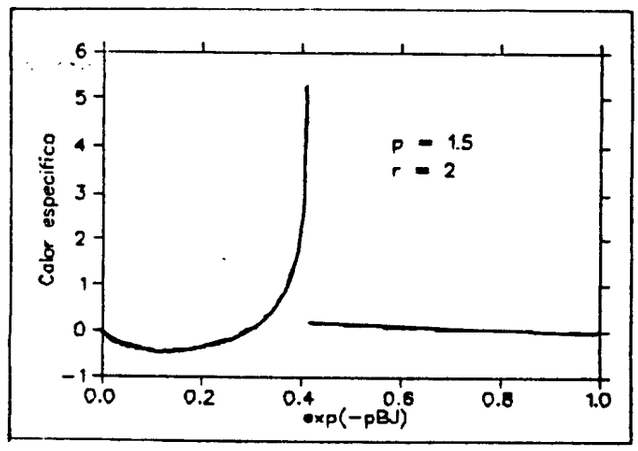


Fig. 4.9. Calor específico negativo a baixa temperatura na aproximação de Bethe-Peierls.

4.4. Conseqüências da Simetria do Mapa

Mostramos a seguir que as propriedades locais do modelo de Potts com p estados na árvore

de Cayley com número de coordenação γ, na temperatura reduzida $t(J)$, na presença de um campo H são mapeadas nas propriedades do modelo com $p'(= p/(p-1))$ estados na mesma temperatura t na presença do campo escalado e invertido $H' = -(p-1)H$.

Já vimos que o funcional da energia livre do modelo de Potts ferromagnético pode ser escrito na forma (eq. 4.42):

$$\beta\psi(X,t,p,\gamma) = -(\gamma-1)\ell n(1-tX) + \ell n(1-X) + \\ + \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[1+(p-1)tX^2] + \tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t) - \ell n p \tag{4.101}$$

Fazendo agora as substituições:

$$X = -(p'-1)X', \tag{4.102}$$

e

$$H = -(p'-1)H', \tag{4.103}$$

em (4.101) obtém-se que

$$\beta\psi(X,t,p,\gamma) = -(\gamma-1)\ell n[1+(p'-1)tX'] \\ + \ell n[1+(p'-1)tX'] + \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[1+(p'-1)tX'^2] \\ + \ell n(1-t) - \ell n p' + \ell n(p'-1) \tag{4.104}$$

Porém da expressão (4.4) do mapa de B.P. podemos mostrar facilmente que

$$-(\gamma-1)\ell n[1+(p'-1)tX'] + \ell n[1+(p'-1)X'] =$$

$$-(\gamma-1)\ell n(1-tX') + \ell n(1-X') + \beta p' H' \tag{4.105}$$

Substituindo-se então (4.105) em (4.104) vem que

$$\beta\psi(X,t,p,\gamma) = -(\gamma-1)\ell n(1-tX') + \ell n(1-X')$$

$$+\tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[1+p'-1)tX'^2]$$

$$+\ell n(1-t) - \ell n p' + \ell n(p'-1) + \beta p' H' \tag{4.106}$$

$$= \beta\psi(X',t,p',\gamma) + \ell n(p'-1) + \beta p' H'$$

Na fase ferromagnética X e X' são os pontos fixos estáveis obtidos com condições iniciais de sinais diferentes.

O resultado expresso na eq. (4.107) é também válido para o modelo antiferromagnético cuja densidade de energia livre, obtida seguindo o mesmo procedimento utilizado na determinação da expressão (4.42), é dada por

$$\beta\psi(\beta,B) = -\tfrac{1}{2}\ell n(1-tX_1) + \ell n(1-X_1)$$

$$-\tfrac{1}{2}\ell n(1-tX_2) + \ell n(1-X_2) + \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[1+(p-1)tX_1X_2] \tag{4.107}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t) - \ell n p$$

Como um lembrete final devemos chamar a atenção que para se obter o resultado bem conhecido que a energia livre do modelo de Ising ($p = 2$) é uma função par no campo

magnético, isto é, que a energia livre é invariante às transformações de escala e inversão devemos adicionar à eq. (4.101) à contribuição $\beta(H + J/2)$. Esses termos como já foi dito correspondem a um deslocamento do nível zero de energia resultante do uso do delta de Kronecker na Hamiltoniana no lugar de produtos de pares de variáveis de spins como é feito usualmente na definição da Hamiltoniana de Ising.

CAPÍTULO 5

O PROBLEMA DA PERCOLAÇÃO

5.1. Introdução

Faremos a seguir uma breve descrição do problema de percolação de ligações a fim de se introduzir a notação e conceitos de algumas grandezas. Para uma introdução a esse problema citamos como referência o livro de D. Stauffer [29].

A percolação de ligações é um modelo geométrico de um sistema aleatório no qual ligações unindo sítios vizinhos de uma rede são colocados ao acaso. Todas as ligações são independentes e π e $1-\pi$ são as probabilidades de uma ligação estar presente e ausente respectivamente. Dois sítios que estão conectados por meio de uma cadeia de ligações presentes são ditos pertencerem ao mesmo aglomerado. Para $\pi < \pi_c$, onde π_c é a concentração crítica de ligações presentes, todos os aglomerados são finitos. Para $\pi > \pi_c$ existe pelo menos um aglomerado infinito numa rede infinita. No estudo de percolação de ligações várias grandezas envolvendo a distribuição de aglomerados podem ser calculadas. Uma delas é a probabilidade de percolação $P(\pi)$ que um dado sítio, a origem da rede por exemplo, pertença a um aglomerado infinito. Outra grandeza importante na descrição do problema é o tamanho médio $S(\pi)$ do aglomerado finito que contém a origem.

Um importante avanço na teoria de percolação foi a sua conexão com um modelo de Potts formulado por Kasteleyn e Fortuin [21] em 1969. Essa formulação é extremamente útil pois permite a aplicação das técnicas já desenvolvidas em Mecânica Estatística no problema geométrico da percolação.

Neste capítulo mostra-se como a correspondência entre o problema de percolação de ligações e o modelo de Potts 1-estado pode ser verificada explicitamente.

5.2. Probabilidade de Percolação, P(π)

Da expressão geral, equação (4.2), obtém-se que no caso $p = 1$ a transmissidade térmica m entre o spin fantasma e o spin central da árvore de Cayley é dado por

$$m = (1 + t)X - tX^2 \tag{5.1}$$

Substituindo agora em (5.1) os pontos fixos dados pela equação (3.9) com $\gamma = 3$ e $h = 0$:

$$X = 0 \quad , \quad t < 1/2 \tag{5.2}$$

e

$$X = (2t - 1)/t^2 \quad , \quad 1/2 < t < 1 \tag{5.3}$$

e lembrando que a temperatura crítica é $t_c = 1/2$ obtém-se que a correlação m é dada por

$$m = 0 \qquad 0 < t < 1/2 \tag{5.4}$$

e

$$m = 1 - \left(\frac{1-t}{t}\right)^3 \qquad 1/2 < t < 1. \tag{5.5}$$

Como nos restringimos somente ao acoplamento ferromagnético tal que $t \in [0, 1)$ a conexão do modelo de Potts com o problema de percolação é feito de acordo com Kasteleyn e Fortuin estabelecendo-se a equivalência de t com π. Dessa forma a expressão (5.5) é idêntica a probabilidade de percolação $P(\pi)/\pi$, isto é:

$$m(t,0) = P(\pi)/\pi \tag{5.6}$$

5.3. Tamanho Médio do Aglomerado $S(\pi)$

A suscetibilidade do parâmetro de ordem m para $h = 0$ é dado por

$$\begin{aligned} \chi &= \left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_{H=0} \\ &= \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{h=0} \left(\frac{\partial h}{\partial H}\right)_{H=0} \\ &= \frac{1}{kT} \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{h=0} \end{aligned} \tag{5.7}$$

Derivando-se (5.1) em relação a h obtém-se

$$\frac{\partial m}{\partial h} = [(1+t) - 2tX] \frac{\partial X}{\partial h} \tag{5.8}$$

Então combinado (5.7) e (5.8) obtém-se que a suscetibilidade é dada por

$$\beta^{-1}\chi = [(1+t) - 2tX]_{h=0} \left(\frac{\partial X}{\partial h}\right)_{h=0} \tag{5.9}$$

Para calcular $(\partial X/\partial h)h = 0$ procede-se da seguinte maneira: A equação do ponto fixo para o modelo de Potts $p = 1$ e $\gamma = 3$ pode ser escrita na forma

$$X = 1 - (1-h)(1-tX)^2 \tag{5.10}$$

Derivando-se ambos os membros de (5.10) em relação a h obtém-se

$$\frac{\partial X}{\partial h} = -\left[-(1-tX)^2 + (1-h)2(1-tX)(-t)\frac{\partial X}{\partial h}\right]$$
$$= (1-tX)^2 + 2t(1-h)(1-tX)\frac{\partial X}{\partial h} \tag{5.11}$$

ou

$$\frac{\partial X}{\partial h} = \frac{(1-tX)^2}{1+2t(1-h)(1-tX)} \tag{5.12}$$

que calculado em $h = 0$ fornece

$$\left(\frac{\partial X}{\partial h}\right)_{h=0} = \frac{(1-X)}{1-2t(1-tX)} \tag{5.13}$$

Para obter-se (5.13) foi utilizada a equação (5.10) com $h = 0$, isto é

$$(1-tX)^2 = 1-X \tag{5.14}$$

Substituindo-se (5.13) em (5.9) obtemos finalmente a expressão da suscetibilidade a campo zero em função do ponto fixo X e da temperatura reduzida t:

$$\beta^{-1}\chi = \frac{[(1+t)-2tX](1-X)}{1-2t(1-tX)} \tag{5.15}$$

As suscetibilidades nas fases paramagnética (não percolante) e ferromagnética (percolante) são obtidas após a substituição dos pontos fixos

$$X = 0, \quad \text{para} \quad t < 1/2, \tag{5.16}$$

e

$$X = (2t-1)/t^2, \quad \text{para} \quad t > 1/2, \tag{5.17}$$

na expressão (5.15):

$$\beta^{-1}\chi = \frac{1+t}{(1-2t)} \quad ,t < 1/2 \tag{5.18}$$

e

$$\beta^{-1}\chi = \frac{(1-t)^2\left[(1+t)t - 2(2t-1)\right]}{t^3(2t-1)} \tag{5.19}$$

Deve-se ressaltar que a expressão de $\beta^{-1}\chi$ no regime de alta temperatura ($t < 1/2$) coincide com a razão $S(\pi)/\pi$ entre o tamanho médio do aglomerado finito e a probabilidade da ligação estar presente.

5.4. Energia Interna e Calor Específico

A energia interna é determinada calculando-se a transmissividade térmica $< \lambda_0\lambda_1 >$, fazendo-se $p = 1$ na expressão (4.53) obtendo-se a seguinte expressão:

$$< \lambda_0\lambda_1 >= t + (1-t)X^2 \tag{5.20}$$

Da expressão da Hamiltoniana vemos então que a energia interna (por número de pares) a campo nulo é dada por

$$\begin{aligned} U(H=0) &= -\tfrac{N\gamma J}{2} < \lambda_0\lambda_1 > \\ &= \tfrac{N\gamma J}{2}\left[t + (1-t)X^2\right] \end{aligned} \tag{5.21}$$

onde $N\gamma/2$ é o número de pares de spins no sistema.

Considerando-se agora o caso $\gamma = 3$ e substituindo os pontos fixos estáveis na expressão acima obtém-se que

$$\frac{U(H=0)}{N} = u(H=0) = -\frac{3Jt}{2} \quad , \quad t < 1/2 \tag{5.22}$$

$$u(H=0) = -\frac{3J}{2}\left[t + \frac{(1-t)(2t-1)^2}{t^4}\right] \quad , \quad t > 1/2. \tag{5.23}$$

Procedemos agora com o cálculo de calor específico cujo comportamento crítico será analisado posteriormente.

Derivando-se as expressões acima em relação a T obtém-se o calor específico por spin a campo nulo:

$$C = \begin{cases} \frac{3J^2(1-t)}{2k_BT^2} & , \quad t < 1/2 \\ \frac{3J^2(1-t)}{2k_BT^2}\left[\frac{(2t-1)(2t^2-7t+4)+t^5}{t^5}\right] & , \quad t > 1/2 \end{cases} \tag{5.24}$$

5.5. Energia Livre

A energia livre é obtida derivando a expressão geral $\psi(p)$ para o modelo de Potts com p-estados, em relação a p, e tomando-se o limite de $p \to 1$ conforme a prescrição desenvolvida por Kasteleyn e Fortuin:

$$\beta\psi(p=1) = \frac{\partial}{\partial p}\beta\psi(p)|_{p=1} \tag{5.25}$$

Por conveniência reescrevemos aqui a expressão geral da energia livre $\beta\psi(p)$ fornecida pela equação (4.42) para o caso $\gamma = 3$:

$$\beta\psi(p) = -3\ell n(1 - tX) + \tfrac{1}{2}\ell n\left\{e^{B}\left[1 + (p-1)tX\right]^3 + (p-1)(1 - tX)^3\right\}$$

$$+\tfrac{3}{2}\ell n(1 - X) + \tfrac{3}{2}\ell n(1 - t) - \tfrac{3}{2}\ell np. \tag{5.26}$$

Calculando-se agora a derivada, em relação a p no ponto $p = 1$, tem-se que

$$\left(\frac{\partial\beta\psi}{\partial p}\right)_{p=1} = -\frac{3}{(1-t_1X_1)}\frac{\partial}{\partial p}(1 - tX)|_{p=1}$$

$$+\frac{1}{2e^B}\cdot\frac{\partial}{\partial p}\left\{e^{pB}\left[1 + (p-1)tX\right]^3 + (p-1)(1 - tX)^3\right\}|_{p=1}$$

$$-\frac{3}{2(1-X_1)}\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1} - \frac{3}{2(1-t_1)}\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1} - \frac{3}{2}$$

$$= \frac{3}{(1-t_1X_1)}\left[X_1\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1} + t_1\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1}\right] \tag{5.27}$$

$$+\frac{1}{2e^B}\left[Be^B + 3e^Bt_1X_1 + (1 - t_1X_1)^3\right]$$

$$-\frac{3}{2(1-X_1)}\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1} - \frac{3}{2(1-t_1)}\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1} - \frac{3}{2}$$

onde $t_1 = 1 - e^{-\beta J}$ e $X_1 = 1 - e^{-\beta H^*}$ são as transmissidades correspondentes ao caso $p = 1$.

Para $p = 1$ e $\gamma = 3$ a equação de ponto fixo do mapa de B.P. dado pela expressão (5.10) pode ser escrita como

$$e^{-B}(1 - t_1X_1)^2 = (1 - X_1) \tag{5.28}$$

ou ainda na forma

$$(1 - t_1X_1)^3 = e^B(1 - X_1)(1 - t_1X_1) \tag{5.29}$$

Substituindo-se agora (5.29) em (5.27) vem que

$$\left(\frac{\partial\beta\psi}{\partial p}\right)_{p=1} = \frac{3X_1}{(1-t_1X_1)}\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1} + \frac{3t_1}{(1-t_1X_1)}\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1}$$

$$+\frac{1}{2e^B}\left[Be^B + 3e^Bt_1X_1 + e^B(1-X_1)(1-t_1X_1)\right]$$

$$-\frac{3}{2(1-X_1)}\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1} - \frac{3}{2(1-t_1)}\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1} - \frac{3}{2}$$

$$= 3\left[\frac{2t_1(1-X_1)-(1-t_1X_1)}{2(1-X_1)(1-t_1X_1)}\right]\left(\frac{\partial p}{\partial p}\right)_{p=1} \tag{5.30}$$

$$+3\left[\frac{2X_1(1-t_1)-(1-t_1X_1)}{2(1-t_1)(1-t_1X_1)}\right]\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1}$$

$$+\frac{1}{2}\left[B + 3t_1X_1 + (1-X_1)(1-t_1X_1) - 3\right]$$

Para obtermos a forma final da expressão para a energia livre devemos calcular as derivadas $(\partial t/\partial p)_{p=1}$ e $(\partial X/\partial p)_{p=1}$.

Da definição

$$t = \frac{1-e^{-\beta pJ}}{1+(p-1)e^{-\beta pJ}} \tag{5.31}$$

obtemos que

$$\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1} = \beta Je^{-\beta J} - (1-e^{-\beta J})e^{-\beta J}$$

$$= e^{-\beta J}\left[\beta J - (1-e^{-\beta J})\right] \tag{5.32}$$

$$= (1-t_1)(\beta J - t_1)$$

A equação de ponto fixo do mapa de BP com $\gamma = 3$ e p qualquer pode ser escrita na forma

$$e^{-B}\left[\frac{1-tX}{1+(p-1)tX}\right]^2 = \frac{1-X}{1+(p-1)X} \tag{5.33}$$

Derivando-se ambos os membros da expressão acima em relação a p e calculando-se o resultado em $p = 1$ obtém-se que

$$\begin{aligned} &-Be^{-B}(1-t_1X_1)^2 + 2e^{-B}(1-t_1X_1)\left[-X_1\left(\frac{\partial t}{\partial p}\right)_{p=1} - t_1\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1}\right. \\ &\left.-(1-t_1X_1)t_1X_1\right] = -\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1} - X_1(1-X_1) \end{aligned} \tag{5.34}$$

Tendo-se em conta (5.28) e (5.32) a expressão (5.34) pode ser colocada na forma

$$\begin{aligned} &-B(1-X_1) - \frac{2(1-X_1)}{(1-t_1X_1)}\left[X_1(1-t_1)(\beta J - t_1) + t_1\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1}\right. \\ &\left.+(1-t_1X_1)t_1X_1\right] = -\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1} - X_1(1-X_1) \end{aligned} \tag{5.35}$$

Dividindo-se ambos os membros de (5.35) por $(1-X_1)$ e rearranjando os termos obtém-se que

$$\begin{aligned} &3\left[\frac{2t_1(1-X_1)-(1-t_1X_1)}{2(1-X_1)(1-t_1X_1)}\right]\left(\frac{\partial X}{\partial p}\right)_{p=1} = -\frac{3X_1(1-t_1)(\beta J-t_1)}{(1-t_1X_1)} \\ &-\frac{3X_1(2t_1-1)}{2} - \frac{3B}{2} \end{aligned} \tag{5.36}$$

Substituindo-se (5.36) e (5.32) em (5.30) obtém-se finalmente que

$$\left(\frac{\partial\beta\psi}{\partial p}\right)_{p=1} = \frac{-3X_1(1-t_1)(\beta J-t_1)}{(1-t_1X_1)} - \frac{3X_1(2t_1-1)}{2} - \frac{3B}{2}$$

$$+3(1-t_1)(\beta J-t_1)\left[\frac{2X_1(1-t_1)-(1-t_1X_1)}{2(1-t_1)(1-t_1X_1)}\right]$$

$$+\tfrac{1}{2}\left[B+3t_1X_1+(1-X_1)(1-t_1X_1)-3\right] = \tag{5.37}$$

$$= \beta\psi(p=1) = -\left[B+\frac{3\beta J}{2}+\frac{(1-X_1)(t_1X_1-3t_1+2)}{2}\right]$$

Como um teste de validade para os cálculos da magnetização e energia interna feitos diretamente da composição de transmissividades mostramos a seguir que essas expressões podem ser recuperadas partindo-se da expressão (5.37) da energia livre.

Derivando-se (5.37) em relação a B obtém-se que

$$m = -\frac{\partial\beta J\psi(p=1)}{\partial B}\Big|_{B=0} = 1 - \frac{(t_1X_1^0-3t_1+2)}{2}\left(\frac{\partial X_1}{\partial B}\right)_{B=0}$$

$$+\frac{(1-X_1^0t_1)}{2}\left(\frac{\partial X_1}{\partial b}\right)_{B=0} \tag{5.38}$$

$$= 1+(2t_1-t_1X_1^0-1)\left(\frac{\partial X_1}{\partial B}\right)_{B=0}$$

onde X_1^0 é o ponto fixo do mapa de B.P. para o caso particular $p = 1$, $\gamma = 3$ e $B = 0$. Para obtermos a expressão fechada da magnetização é necessário calcular a derivada $(\partial X_1/\partial B)_{B=0}$. Isso é feito derivando-se ambos os membros de (5.28) em relação a B:

$$-e^{-B}(1-t_1X_1)^2 - 2t_1e^{-B}(1-t_1X_1)\left(\frac{\partial X_1}{\partial B}\right) = -\left(\frac{\partial X_1}{\partial B}\right). \tag{5.39}$$

Tendo-se em vista (5.28) podemos escrever (5.39) na forma:

$$-(1-X_1)-\frac{2t_1(1-X_1)}{(1-t_1X_1)}\left(\frac{\partial X_1}{\partial B}\right)=-\left(\frac{\partial X_1}{\partial B}\right) \tag{5.40}$$

ou

$$(2t_1-t_1X_1^0-1)\left(\frac{\partial X_1}{\partial B}\right)_{B=0}=-(1-X_1^0)(1-t_1X_1^0) \tag{5.41}$$

Substituindo-se (5.41) em (5.38) obtemos finalmente a expressão para a magnetização

$$m=(1+t_1)X_1-t_1X_1^2 \tag{5.42}$$

que é idêntica à expressão (5.1).

Procederemos agora com o cálculo da energia interna que é obtida da derivada da expressão (5.37) em relação a β:

$$\begin{aligned} u &= \frac{\partial}{\partial\beta}\left\{-\left[B+\frac{3\beta J}{2}+\frac{(1-X_1)(t_1X_1-3t_1+2)}{2}\right]\right\} \\ &= -\left[H+\frac{3J}{2}+(2t_1t_1X_1-1)\left(\frac{\partial X_1}{\partial\beta}\right)+\frac{(1-X_1)(X_1-3)}{2}\left(\frac{\partial t_1}{\partial\beta}\right)\right] \end{aligned} \tag{5.43}$$

ou

$$u=-\left[H+\frac{3J}{2}+(2t_1-t_1X_1-1)\left(\frac{\partial X_1}{\partial\beta}\right)+\frac{J(1-X_1)(X_1-3)(1-t_1)}{2}\right] \tag{5.44}$$

onde na última passagem levou-se em conta que

$$\frac{\partial t_1}{\partial\beta}=J(1-t_1) \tag{5.45}$$

Para o caso particular de campo nulo a energia interna fica escrita como

$$u(B=0) = -\left[\frac{3J}{2} + \frac{J(1-X_1^0)(X_1^0-3)(1-t_1)}{2} + (2t_1t_1X_1^0 - 1)\left(\frac{\partial X_1}{\partial \beta}\right)_{B=0}\right] \tag{5.46}$$

De maneira análoga como procedemos no caso da magnetização a expressão para $(\partial X_1/\partial\beta)_{B=0}$ é obtida derivando-se ambos os membros de (5.28) em relação a β e calculando-se em $B = 0$, obtendo-se

$$-2(1-t_1X_1^0)\left[X_1^0\left(\frac{\partial t_1}{\partial \beta}\right) + t_1\left(\frac{\partial X_1}{\partial \beta}\right)_{B=0}\right] = -\left(\frac{\partial X_1}{\partial \beta}\right)_{B=0} \tag{5.47}$$

Tendo-se em vista (5.45) podemos escrever que

$$[1-2t_1(1-t_1X_1^0)]\left(\frac{\partial X_1}{\partial \beta}\right)_{B=0} = 2JX_1^0(1-t_1X_1^0)(1-t_1) \tag{5.48}$$

Por conveniência, que será mostrada abaixo, a expressão (5.48) pode ainda ser escrita na forma

$$\left[1 - \frac{2t_1(1-X_1^0)}{(1-t_1X_1^0)}\right]\left(\frac{\partial X_1}{\partial \beta}\right)_{B=0} = \frac{2JX_1^0(1-X_1^0)(1-t_1)}{(1-t_1X_1^0)}, \tag{5.49}$$

pois de (5.28) com $B = 0$ tem-se

$$(1-t_1X_1^0) = \frac{1-X_1^0}{(1-t_1X_1^0)}. \tag{5.50}$$

Multiplicando-se ambos os membros de (5.49) por $(1 - t_1 X_1^0)$ e agrupando-se os termos semelhantes obtém-se

$$(2t_1 - t_1 X_1^0 - 1)\left(\frac{\partial X_1}{\partial \beta}\right)_{B=0} = -2JX_1^0(1 - X_1^0)(1 - t_1) \tag{5.51}$$

Finalmente substituindo-se (5.51) em (5.46) vem que

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \beta\varphi}{\partial \beta}\right) &= -\left[\frac{3J}{2} - 2JX_1^0(1 - X_1^0)(1 - t_1) + \frac{J(1-X_1^0)(X_1^0-3)(1-t_1)}{2}\right] \\ &= -\frac{3J}{2}[t_1 + (1 - t_1)X_1^{0\ 2}]\end{aligned} \tag{5.52}$$

que é idêntica à expressão (5.21), com $\gamma = 3$.

5.6. Expoentes Críticos

Finalizamos o estudo do modelo com $p = 1$ calculando os seus expoentes críticos. Iniciamos pelo cálculo do comportamento crítico do calor específico.

Expandindo-se a expressão (5.24), válida na região de alta temperatura, em torno do ponto crítico $t_c = 1/2$ obtém-se que

$$C \simeq \frac{k_B \ell n^2 2}{2}[1 + (\ell n 2 - 2) \in] \tag{5.53}$$

onde

$$\in = \frac{T - T_c}{T_c} > 0. \tag{5.54}$$

De modo análogo a expansão da expressão (5.21) do calor específico na região de baixa temperatura fornece

$$C \simeq \frac{3k_B \ell n^2 2}{2}[1 + (31\ell n2 + 2)(-\epsilon)] \tag{5.55}$$

As expressões (5.53) e (5.54) mostram um comportamento assintótico tipo cúspide linear para o calor específico. Nesses caso,

$$\alpha = \alpha' = -1 \tag{5.56}$$

conforme definições dos coeficientes críticos dados por H.E.Stanley[30].

Calcularemos agora os expoentes críticos β, γ, γ' e δ.

Das expressões (5.5), (5.18), (5.19) e (5.1) obtém-se os seguintes comportamentos assintóticos para a magnetização, suscetibilidade e campo magnético

$$m \simeq (6\ell n2)(-\varepsilon) \tag{5.57}$$

$$\chi = -\frac{5\ell n2}{J} - \frac{3}{2J}\varepsilon^{-1} \quad , \quad T < T_c \tag{5.58}$$

$$\chi = \frac{3}{2J}\,\epsilon^{-1} \quad , \quad T > T_c \tag{5.59}$$

$$H \simeq \frac{J}{9\ell n2} m^2 \tag{5.60}$$

As expressões (5.57) a (5.60) mostram que $\beta = 1$, $\gamma = \gamma' = 1$ e $\delta = 2$. Todos os expoentes críticos obtidos para o modelo de Potts $p = 1$ concordam com os expoentes de campo médio da percolação. Assim a identificação de t com a probabilidade π é suficiente para que se

recupere as funções da percolação e seus expoentes. O procedimento usado automaticamente satisfaz os requisitos do teorema de Kasteleyn-Fortuin. Observa-se ainda que os resultados da percolação podem ter uma continuação analítica estendida a toda região à direita da linha crítica $-3/4 = t(1-t)(1-h)$. (Veja diagrama de fase, Fig. 3.2).

O procedimento apresentado acima é a forma mais simples de se obter os resultados do problema de percolação que temos conhecimento na literatura.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

6.1. Motivação e Estratégia

O que motivou a realização desta tese foi, em última análise, o nosso interesse na aproximação de campo médio do vidro de spins de Potts. Os resultados conhecidos na literatura sobre esse modelo são contraditórios e estimulam o engajamento, de pesquisadores nesse assunto.

Como uma etapa preliminar de nossa pesquisa resolvemos obter um melhor conhecimento da aproximação de Bethe-Peierls do modelo de Potts regular. Isso foi conseguido, em grande parte, nesta tese, através do estudo do mapa de B.P. que é a transformação do grupo de renormalização no espaço real do modelo.

A estratégia utilizada no estudo do mapa de B.P. foi estender o domínio do parâmetro p, que determina o número de estados da variável de spins, ao conjunto dos números reais $[1, \infty)$ e o domínio do parâmetro t, temperatura reduzida, ao conjunto dos números reais $(-\infty, +\infty)$.

Isso foi feito para se ter um conhecimento mais abrangente do mapa. Muitas vezes esse procedimento tem sido utilizado e trazido resultados surpreendentes. Como exemplo podemos citar os estudos dos zeros de Yang-Lee [31] no plano complexo da fugacidade e o conjunto obtido por Mandelbrot [23], e que leva seu nome, quando ele estendeu o estudo do mapa logístico $X^2 + C$ ao plano complexo.

6.2. Resultados

As principais contribuições que esta tese trouxe para um melhor conhecimento da

aproximação de Bethe-Peierls do modelo de Potts foram, no nosso entendimento:

(a) A descoberta de uma simetria do mapa que permite reduzir de maneira drástica o domínio do parâmetro p.

(b) A construção do diagrama de fases para o caso $p = 1$ e $\gamma = 3$. Mostramos que nesse caso o mapa de B.P. , é topologicamente conjugado ao mapa logístico. A generalização para γ qualquer também foi considerado mostrando-se sua conjugação com o mapa de Mandelbrot $X^{\gamma-1} + C$. Ainda com relação ao caso $p = 1$ mostramos a maneira mais simples de recuperar os resultados da percolação de ligações.

(c) Baseados no conceito de bacia atratora do mapa mostramos a importância do sinal do campo superficial na determinação da ordem da transição bem como na estabilidade da fase de baixa temperatura. Conseguimos com isso esclarecer os resultados de Kihara et al e os resultados de di Liberto et al.

(d) Fizemos uma generalização para o modelo de Potts do procedimento utilizado por Thompson para o modelo de Ising na árvore de Cayley. Como uma constatação da veracidade dessa generalização recuperamos todas as funções termodinâmicas obtidas por Peruggi. Obtivemos além disso uma expressão fechada para o funcional da energia livre na fase antiferromagnética, que não temos conhecimento da existência de similar na literatura. Ainda como um teste da nossa generalização obtivemos o funcional da energia livre utilizando um método alternativo proposto por Baumgärtel.

(e) Mostramos a existência de um valor crítico $p \simeq 1.51$ para o número de estados da variável de Potts, acima do qual não é possível a existência da fase caótica na região física.

(f) Foi reobtido o mapa de Bragg-Williams como caso particular do mapa de Bethe-Peierls no limite de γ infinito.

6.3. Trabalhos Futuros

(a) Estudar a influência do campo magnético externo no diagrama de bifurcação do mapa de Bethe-Peierls.

(b) Determinação das constantes α e δ de Feigenbaum para o mapa de Bethe-Peierls.

(c) Estudar o caso $0 < p < 1$.

(d) Estudar o comportamento das funções termodinâmicas do modelo de Potts na rede de Bethe, no caso antiferromagnético.

(e) Estudar sistemas aleatórios.

APÊNDICE A

FUNÇÕES HIPERBÓLICAS GENERALIZADAS

Neste apêndice apresentamos as definições e algumas propriedades das funções hiperbólicas generalizadas que introduzimos nesta tese. Essas funções recaem nas funções hiperbólicas usuais quando $p = 2$. Elas são de grande importância no estudo do modelo de Potts pois permitem uma analogia desse modelo com o modelo de Ising.

DEFINIÇÕES:

seno hiperbólico generalizado de $\Theta = \mathrm{senh}_p\Theta$

$$\mathrm{senh}_p\Theta \equiv \frac{e^{p\Theta/2} - e^{-p\Theta/2}}{p} \tag{A.1}$$

coseno hiperbólico generalizado de $\Theta = \cosh_p\Theta$

$$\cosh_p\Theta \equiv \frac{e^{p\Theta/2} + (p-1)e^{-p\Theta/2}}{p} \tag{A.2}$$

tangente hiperbólica generalizada de $\Theta = \tanh_p\Theta$

$$\tanh_p\Theta \equiv \frac{e^{p\Theta/2} - e^{-p\Theta/2}}{e^{p\Theta/2} + (p-1)e^{-p\Theta/2}} \tag{A.3}$$

cossecante hiperbólica generalizada de $\Theta = \mathrm{cossech}_p\Theta$

$$\mathrm{cossech}_p\Theta \equiv \frac{p}{e^{p\Theta/2} - e^{-p\Theta/2}} \tag{A.4}$$

secante hiperbólica generalizada de $\Theta = \mathrm{sech}_p\Theta$

$$\mathrm{sech}_p\Theta \equiv \frac{p}{e^{p\Theta/2} + (p-1)e^{-p\Theta/2}} \tag{A.5}$$

cotangente hiperbólica generalizada de $\Theta = \mathrm{cotanh}_p\Theta$

$$\mathrm{cotanh}_p\Theta \equiv \frac{e^{p\Theta/2} + (p-1)e^{-p\Theta/2}}{e^{p\Theta/2} - e^{-p\Theta/2}} \tag{A.6}$$

RELAÇÕES

$$\tanh_p\Theta = \frac{\mathrm{senh}_p\Theta}{\cosh_p\Theta} \tag{A.7}$$

$$\mathrm{cotanh}_p\Theta = \frac{1}{\tanh_p\Theta} \tag{A.8}$$

$$\mathrm{sech}_p\Theta = \frac{1}{\cosh_p\Theta} \tag{A.9}$$

$$\mathrm{cosech}_p\Theta = \frac{1}{\mathrm{senh}_p\Theta} \tag{A.10}$$

$$\cosh_p\Theta + (p-1)\mathrm{senh}_p\Theta = e^{p\Theta/2} \tag{A.11}$$

$$\cosh_p\Theta - \mathrm{senh}_p\Theta = e^{-p\Theta/2} \tag{A.12}$$

$$\cosh_p^2\Theta - (p-1)\mathrm{senh}_p^2\Theta + (p-2)\mathrm{senh}_p\Theta\cosh_p\Theta = 1 \tag{A.13}$$

$$\mathrm{sech}_p^2\Theta + (p-1)\tanh_p^2\Theta = 1 + (p-2)\tanh_p\Theta \tag{A.14}$$

$$\mathrm{cotanh}_p^2\Theta - \mathrm{cosech}_p^2\Theta = (p-1) - (p-2)\mathrm{cotanh}_p\Theta \tag{A.15}$$

FUNÇÕES DE ARGUMENTOS NEGATIVOS:

$$\mathrm{senh}_p(-\Theta) = -\mathrm{senh}_p\Theta \tag{A.16}$$

$$\cosh_p(-\Theta) = \frac{\cosh_p(\Theta)}{(p-1)} + \frac{(p-2)}{(p-1)}e^{p\Theta/2} \tag{A.17}$$

$$\tanh_p(-\Theta) = -\frac{\tanh_p\Theta}{1+(p-2)\tanh_p\Theta} \tag{A.18}$$

$$\mathrm{cosech}_p(-\Theta) = -\mathrm{cosech}_p\Theta \tag{A.19}$$

$$\mathrm{sech}_p(-\Theta) = \frac{(p-1)\mathrm{sech}_p\Theta}{1+(p-2)e^{p\Theta/2}\mathrm{sech}_p\Theta} \tag{A.20}$$

$$\mathrm{cotanh}_p(-\Theta) = -[\mathrm{cotanh}_p\Theta + (p-2)] \tag{A.21}$$

FÓRMULAS DE ADIÇÃO (SUBTRAÇÃO):

$$\mathrm{senh}_p(\Theta+\Phi) = \mathrm{senh}_p\Theta\cosh_p\Phi + \mathrm{senh}_p\Phi\cosh_p\Theta + (p-2)\mathrm{senh}_p\Theta\mathrm{senh}_p\Phi \tag{A.22}$$

$$\mathrm{senh}_p(\Theta-\Phi) = \mathrm{senh}_p\Theta\cosh_p\Phi - \mathrm{senh}_p\Phi\cosh_p\Theta \tag{A.23}$$

$$\cosh_p(\Theta+\Phi) = \cosh_p\Theta\cosh_p\Phi + (p-1)\mathrm{senh}_p\Phi\cosh_p\Theta \tag{A.24}$$

$$\begin{aligned}\cosh_p(\Theta-\Phi) &= \cosh_p\Theta\cosh_p\Phi - (p-1)\mathrm{senh}_p\Theta\mathrm{senh}_p\Phi \\ &+(p-2)\cosh_p\Theta\mathrm{senh}_p\Phi\end{aligned} \tag{A.25}$$

$$\tanh_p(\Theta+\Phi) = \frac{\tanh_p\Theta + \tanh_p\Phi + (p-2)\tanh_p\Theta\tanh_p\Phi}{1+(p-1)\tanh_p\Theta\tanh_p\Phi} \tag{A.26}$$

$$\tanh_p(\Theta-\Phi) = \frac{\tanh_p\Theta - \tanh_p\Phi}{1-(p-1)\tanh_p\Theta\tanh_p\Phi + (p-2)\tanh_p\Phi} \tag{A.27}$$

$$\mathrm{cotanh}_p(\Theta-\Phi) = \frac{\mathrm{cotanh}_p\Theta\mathrm{cotanh}_p\Phi + (p-1)}{\mathrm{cotanh}_p\Theta + \mathrm{cotanh}_p\Phi + (p-2)} \tag{A.28}$$

$$\mathrm{cotanh}_p(\Theta-\Phi) = \frac{\mathrm{cotanh}_p\Theta\mathrm{cotanh}_p\Phi - (p-2)\mathrm{cotanh}_p\Theta}{\mathrm{cotanh}_p\Theta - \mathrm{cotanh}_p\Phi} \tag{A.29}$$

FÓRMULAS DE DERIVADAS:

$$\frac{d}{d\Theta}\mathrm{senh}_p\Theta = \cosh_p\Theta + \frac{(p-2)}{2}\mathrm{senh}_p\Theta \tag{A.30}$$

$$\frac{d}{d\Theta}\cosh_p\Theta = (p-1)\mathrm{senh}_p\Theta - \frac{(p-2)}{2}\cosh_p\Theta \tag{A.31}$$

$$\frac{d}{d\Theta}\tanh_p\Theta = \mathrm{sech}_p^2\Theta \tag{A.32}$$

$$\frac{d}{d\Theta}\mathrm{cosech}_p\Theta = -\mathrm{cosech}_p\Theta\mathrm{cotanh}_p\Theta - \frac{(p-2)}{2}\mathrm{cosech}_p\Theta \tag{A.33}$$

$$\frac{d}{d\Theta}\mathrm{sech}_p\Theta = -(p-1)\mathrm{sech}_p\Theta\tanh_p\Theta + \frac{(p-2)}{2}\mathrm{sech}_p\Theta \tag{A.34}$$

$$\frac{d}{d\Theta}\mathrm{cotanh}_p\Theta = -\mathrm{cosech}_p^2\Theta \tag{A.35}$$

FUNÇÕES INVERSAS:

$$\mathrm{arcsenh}_p\Theta = \frac{2}{p}\ell n\left[\frac{p\Theta + \sqrt{p^2\Theta^2+4}}{2}\right], -\infty < \Theta < \infty \tag{A.36}$$

$$\mathrm{arccosh}_p\Theta = \frac{2}{p}\ell n\left[\frac{p\Theta+\sqrt{p^2\Theta^2-4(p-1)}}{2}\right], \Theta \geq \frac{2\sqrt{p-1}}{p}$$

$$[\mathrm{arccosh}_p\Theta > 0 \quad \text{é o valor principal} \quad] \tag{A.37}$$

$$\mathrm{arctanh}_p\Theta = \frac{1}{p}\ell n\left[\frac{1+(p-1)\Theta}{1-\Theta}\right], -\frac{1}{(p-1)} < \Theta < 1 \tag{A.38}$$

$$\mathrm{arccotanh}_p\Theta = \frac{1}{p}\ell n\left[\frac{\Theta+(p-1)}{\Theta-1}\right], \Theta > 1 \quad \text{ou} \quad \Theta < -(p-1) \tag{A.39}$$

$$\text{arcsech}_p\Theta = \frac{2}{p}\ell n\left[\frac{p+\sqrt{p^2-4(p-1)\Theta^2}}{2\Theta}\right], 0 < \Theta \leq \frac{p}{2\sqrt{p-1}} \tag{A.40}$$

$$\text{arccoseh}_p\Theta = \frac{2}{p}\ell n\left[\frac{p+\sqrt{p^2+4\Theta^2}}{2\Theta}\right], \Theta \neq 0 \tag{A.41}$$

APÊNDICE B

ENERGIA LIVRE DE B.P. - MÉTODO DE BAUMGÄRTEL

Neste apêndice utilizamos o método desenvolvido por Baumgärtel para o cálculo da energia livre na árvore de Cayley eliminando a contribuição dos spins nos sítios superficiais. A energia assim obtida é denominada de energia livre de Bethe-Peierls porque ela é idêntica a energia livre na aproximação de B.P. para uma rede regular de número de coordenação γ.

O cálculo da energia livre de B.P. é realizado como segue. Numa primeira etapa calcula-se a função de partição Z_N do sistema numa árvore de Cayley assimétrica fechada com N gerações número de coordenação γ e com o spin fantasma congelado no estado "1". Isso é feito congelando o spin central e os spins na primeira geração e efetuando o somatório sobre todos os outros spins na árvore. Procede-se assim para todas as configurações possíveis do spin central e de seus vizinhos λ_i. Somando-se todas essas contribuições obtém-se que

$$\begin{aligned} Z_N = \sum_{\mu=0}^{\gamma} \sum_{\substack{\lambda = 1 \\ \lambda_{\mu+1},\ldots,\lambda_\gamma \neq 1}}^{p} & \binom{\gamma}{\mu} \left[Z_N^b(1)\right]^{\mu} \left[Z_N^b(\neq 1)\right]^{\gamma-\mu} . \\ & \exp\left\{\beta p J \left[\delta(\lambda,1) + \ldots + \delta(\lambda,1)1\right] + \beta p H \delta(\lambda,1)\right\} \\ & . \exp\left\{\beta p J \left[\delta(\lambda,\lambda_{\mu+1}) + \ldots + \delta(\lambda,\lambda_\gamma)\right]\right\} \end{aligned} \tag{B.1}$$

onde

$Z_N^b(1)$ e $Z_N^b(\neq 1)$ são as funções de partição do ramo da árvore de igual geração N que a árvore com o spin do topo no estado "1" e diferente de "1", respectivamente.

A expressão (B.1) pode ser escrita na forma

$$Z_N = \sum_{\mu=0}^{\gamma} A_\mu \sum_{\substack{\lambda = 1 \\ \lambda_{\mu+1},\ldots,\lambda_\gamma \neq 1}}^{p} \{\exp[(\mu\beta pJ + \beta H)(\delta\lambda, 1)] \,.$$

$$.\exp\{\beta pJ\,[\delta(\lambda, \lambda_{\mu+1}) + \ldots + \delta(\lambda, \lambda_\gamma)]\}\} \tag{B.2}$$

onde

$$A_\mu = \binom{\gamma}{\mu} \left[Z_N^b(1)\right]^\mu \left[Z_N^b(\neq 1)\right]^{\gamma-\mu} \tag{B.3}$$

Após efetuar-se o somatório em λ a expressão (B.2) se torna

$$Z_N = \sum_{\mu=0}^{\gamma} A_\mu \left\{e^{\mu\beta pJ}.e^{\beta pH}.\right.$$

$$\sum_{\lambda_{\mu+1},\ldots,\lambda_\gamma \neq 1}^{p} \exp\{\beta pJ\,[\delta(1, \lambda_{\mu+1}) + \ldots + \delta(1, \lambda_\gamma)]\} \tag{B.4}$$

$$\left. + (p-1) \sum_{\lambda_{\mu+1},\ldots,\lambda_\gamma \neq 1}^{p} \exp[\delta(2, \lambda_{\mu+1}) + \ldots + \delta(2, \lambda_\gamma)]\right\}$$

onde levou-se em consideração que todos os estados diferentes do estado "1" são equivalentes.

Considerando ainda que

$$\sum_{\lambda_{\mu+1},\ldots,\lambda_\gamma \neq 1}^{p} \exp\{\beta pJ\,[\delta(\lambda, \lambda_{\mu+1}) + \ldots + \delta(\lambda, \lambda_\gamma)]\} = \left[\sum_{\lambda_{\mu+1}}^{p} \exp[\beta pJ\delta(\lambda, \lambda_{\mu+1})]\right]^{\gamma-\mu} = (p-1)^{\gamma-\mu} \tag{B.5}$$

e que

$$\sum_{\lambda_{\mu+1},\ldots,\lambda_\gamma \neq 1}^{p} \exp\{\beta pJ\,[\delta(2, \lambda_{\mu+1}) + \ldots + \delta(2, \lambda_\gamma)]\} = \left[\sum_{\lambda_{\mu+1}}^{p} \exp[\beta pJ\delta(2, \lambda_{\mu+1})]\right]^{\gamma-\mu} =$$

$$\left[e^{\beta pJ} + (p-2)\right]^{\gamma-\mu} \tag{B.6}$$

podemos escrever (B.4) na forma

$$Z_N = \sum_{\mu=0}^{\gamma} A_\mu \left\{ e^{\mu\beta pJ}.e^{\beta pH}(p-1)^{\gamma-\mu} + (p-1)\left[e^{\beta pJ} + (p-2)\right]^{\gamma-\mu} \right\}$$
$$= e^{\beta pH} \sum_{\mu=0}^{\gamma} A_\mu (e^{\beta pJ})^\mu (p-1)^{\gamma-\mu} + (p-1) \sum_{\mu=0}^{\gamma} A_\mu \left[e^{\beta pJ} + (p-2)\right]^{\gamma-\mu} \tag{B.7}$$

Substituindo a expressão de A_μ dada por (B.3), em (B.7) e agrupando os termos de mesma potência obtém-se que

$$Z_N = e^{\beta pH} \sum_{\mu=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{\mu} \left[e^{\beta pJ} Z_N^b(1)\right]^\mu \left[(p-1) Z_N^b(\neq 1)\right]^{\gamma-\mu}$$
$$+(p-1) \sum_{\mu=0}^{\gamma} \binom{\gamma}{\mu} \left[e^{\beta pJ} Z_N^b(1)\right]^\mu \left\{\left[e^{\beta pJ} + (p-2)\right] Z_N^b(\neq 1)\right\}^{\gamma-\mu} \tag{B.8}$$

Lembrando que,

$$\sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} a^k b^{n-k} = (a+b)^n, \tag{B.9}$$

podemos então escrever (B.8) na forma

$$Z_N = e^{\beta pH} \left[e^{\beta pJ} Z_N^b(1) + (p-1) Z_N^b(\neq 1)\right]^\gamma$$
$$+(p-1) \left\{Z_N^b(1) + \left[e^{\beta pJ} + (p-2)\right] Z_N^b(\neq 1)\right\}^\gamma . \tag{B.10}$$

O caráter hierárquico dos ramos nos permite estabelecer uma relação de recorrência para Z_N^b. Somando os spins na superfície de um ramo com N gerações a seguinte relação de recorrência entre Z_N^b e Z_{N-1}^b é obtida:

$$Z_N^b(H_s) = \exp\left[(\gamma-1)^{N-1}C_1\right] Z_{N-1}^b(H_1)$$

$$= \left\{\exp\left[\sum_{n=1}^{N}(\gamma-1)^{N-n}C_n\right]\right\} Z_{\text{par}} \tag{B.11}$$

onde

$$C_n(\gamma-1)\ell n\left[e^{\beta pJ} + e^{\beta pJ} + e^{\beta pH_{n-1}} + (p-2)\right]. \tag{B.12}$$

Da expressão (B.11) podemos escrever então que

$$Z_N^b(1) = \varphi_N Z_{\text{par}}(1) \tag{B.13}$$

e

$$Z_N^b(\neq 1) = \varphi_N Z_{\text{par}}(\neq 1) \tag{B.14}$$

onde

$$\varphi_N = \exp\left[\sum_{n=1}^{N}(\gamma-1)^{N-n}C_n\right], \tag{B.15}$$

$Z_{\text{par}}(1)$ e $Z_{\text{par}}(\neq 1)$ são respectivamente a função de partição do par com o spin do topo no estado "1" e diferente de "1".

Das definições de $Z_{\text{par}}(1)$ e $Z_{\text{par}}(\neq 1)$ calcula-se então que

$$Z_N^b(1) = \varphi_N e^{\beta pH_N\delta_{1,1}}$$

$$= \varphi_N Y_N \tag{B.16}$$

e

$$Z_N^b(\neq 1) = \varphi_N e^{\beta p H_N \delta_{p\neq 1,1}}$$

$$= \varphi_N \tag{B.17}$$

onde

$$Y_N = e^{\beta p H_N} \tag{B.18}$$

Substituindo (B.16) e (B.17) em (B.10) obtém-se que a função de partição da árvore de Cayley com N gerações é dada por

$$Z_N = \varphi_N^\gamma \left\{ e^{\beta p H} \left[\zeta Y_N + (p-1)\right]^\gamma + (p-1)\left[\zeta + Y_N + (p-2)\right]^\gamma \right\} \tag{B.19}$$

onde

$$\zeta = e^{\beta p J} \tag{B.20}$$

Da expressão (B.19) determina-se de imediato a energia livre do modelo de Potts com p-estados na árvore de Cayley com N gerações:

$$F_N = -K_B T \gamma \ell n \varphi_N$$

$$-K_B T \ell n \left\{ e^{\beta p H} \left[\zeta Y_N + (p-1)\right]^\gamma + (p-1)\left[\zeta + Y_N + (p-2)\right]^\gamma \right\} \tag{B.21}$$

Uma vez calculada a energia livre da árvore completa procedemos o cálculo da energia livre de Bethe-Peierls seguindo a prescrição de Baumgärtel.

Em primeiro lugar calcula-se a diferença $\beta\Delta F$ entre a energia livre de uma árvore com $(N+\ell)$ gerações e a energia livre de $(\gamma-1)^{\ell}$ árvores com N gerações:

$$\begin{aligned}
\beta\Delta F &= \beta F_{N+\ell} - (\gamma-1)^{\ell}\beta F_N \\
&= \gamma\left[(\gamma-1)^{\ell}\ell n\varphi_N - \ell n\varphi_{N+\ell}\right] \\
&+(\gamma-1)^{\ell}\ell n\left\{e^{\beta pH}\left[\zeta Y_N+(p-1)\right]^{\gamma}+(p-1)\left[\zeta+Y_N+(p-2)\right]^{\gamma}\right\} \\
&-\ell n\left\{e^{\beta pH}\left[\zeta Y_{N+\ell}+(p-1)\right]^{\gamma}+(p-1)\left[\zeta+Y_{N+\ell}+(p-2)\right]^{\gamma}\right\}.
\end{aligned} \tag{B.22}$$

Em seguida calcula-se a densidade de energia

$$\beta F = \frac{\beta\Delta F}{\Delta\nu} \quad , \tag{B.23}$$

onde,

$$\Delta\nu = \frac{2\left[(\gamma-1)^{\ell}-1\right]}{(\gamma-1)} \quad , \tag{B.24}$$

é o número de sítios que a árvore com $(N+\ell)$ gerações possui a mais que a árvore com N gerações.

Substituindo (B.22) e (B.24) em (B.23) obtém-se que

$$\beta F = \frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left[(\gamma-1)^{\ell}\ell n\varphi_N - \ell n\varphi_{N+\ell}\right]$$

$$+\frac{(\gamma-2)}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left\{(\gamma-1)^{\ell}\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_N+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_N+(p-2)]^{\gamma}\}\right. \tag{B.25}$$

$$\left.-\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_{N+\ell}+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_{N+\ell}+(p-2)]^{\gamma}\}\right\}$$

Substituindo (B.14) em (B.25) obtém-se que

$$\beta F = \frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left[\sum_{n=1}^{N}(\gamma-1)^{N+\ell-n}C_n - \sum_{n=1}^{n+\ell}(\gamma-1)^{N+\ell n}C_n\right]$$

$$+\frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left\{(\gamma-1)^{\ell}\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_N+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_N+(p-2)]^{\gamma}\}\right.$$

$$\left.-\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_{N+\ell}+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_{N+\ell}+(p-2)]^{\gamma}\}\right\}$$

$$= -\frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left[\sum_{n=N+1}^{N+\ell}(\gamma-1)^{N+\ell-n}c_n\right]$$

$$+\frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left\{(\gamma-1)^{\ell}\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_N+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_N+(p-2)]^{\gamma}\}\right. \tag{B.26}$$

$$\left.-\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_{N+\ell}+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_{N+\ell}+(p-2)]^{\gamma}\}\right\}$$

$$= -\frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left[\sum_{j=1}^{\ell}(\gamma-1)^{\ell-j}c_{j+N}\right]$$

$$+\frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^{\ell}-1]}\left\{(\gamma-1)^{\ell}\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_N+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_N+(p-2)]^{\gamma}\}\right.$$

$$\left.-\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_{N+\ell}+(p-1)]^{\gamma}+(p-1)[\zeta+Y_{N+\ell}+(p-2)]^{\gamma}\}\right\}$$

Tomando agora o limite termodinâmico ($N \to \infty$) a dependência da densidade de energia livre em ℓ desaparece obtendo-se a energia livre de B.P.

$$\beta F_{BP} = \lim_{N \to \infty} \beta F$$

$$= -\frac{(\gamma-1)\gamma C_\infty}{2[(\gamma-1)^\ell-1]} \left[\sum_{j=1}^{\ell}(\gamma-1)^{\ell-j}\right]$$

$$+\frac{(\gamma-2)\gamma}{2[(\gamma-1)^\ell-1]} \left\{[(\gamma-1)^\ell-1]\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y_N+(p-1)]^\gamma+(p-1)[\zeta+Y+(p-2)]^\gamma\}\right\}$$

$$= -\frac{\gamma C_\infty}{2} + \frac{(\gamma-1)}{2}\ell n\{e^{\beta pH}[\zeta Y+(p-1)]^\gamma+(p-1)[\zeta+Y+(p-2)]^\gamma\}$$

(B.27)

onde

$$Y = \lim_{N \to \infty} Y_N = \lim_{N \to \infty} Y_{N+\ell}. \tag{B.28}$$

Determinamos agora a expressão para C_∞. De (B.12) vemos que

$$C_\infty = \lim_{N \to \infty} C_n$$

$$= (\gamma-1)\ell n[\zeta Y+(p-2)] \tag{B.29}$$

Então finalmente obtemos a expressão para a energia livre de Bethe-Peierls:

$$\beta F_{BP} = -\frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n[\zeta+Y+(p-2)]$$

$$+\frac{(\gamma-1)}{2}\ell n\left\{e^{\beta pH}[\zeta Y+(p-1)]^\gamma+(p-1)[\zeta+Y+(p-2)]^\gamma\right\} \tag{B.30}$$

A expressão (B.30) pode ser escrita em termos das variáveis:

$$t = \frac{1 - \zeta^{-1}}{1 + (p-1)\zeta^{-1}} \tag{B.31}$$

e

$$X = \frac{1 - Y^{-1}}{1 + (p-1)Y^{-1}}. \tag{B.32}$$

De (B.31) e (B.32) obtém-se que

$$\zeta = \frac{1 + (p-1)t}{1 - t} \tag{B.33}$$

e

$$Y = \frac{1 + (p-1)X}{1 - X} \tag{B.34}$$

Então:

$$[\zeta Y + (p-1)] = \frac{p[1 + (p-1)tX]}{(1-t)(1-X)} \tag{B.35}$$

e

$$[\zeta + Y + (p-1)] = \frac{p(1 - tX)}{(1-t)(1-X)} \tag{B.36}$$

Substituindo-se (B.35) e (B.36) em (B.30) obtém-se que

$$\beta F_{BP} = \frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n p - \frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n(1-tX) + \frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n(1-t)$$

$$+\frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n(1-X) + \frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n p \tag{B.37}$$

$$+\frac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{e^{\beta p H}[1+(p-1)tX]^{\gamma} + (p-1)(1-tX)^{\gamma}\right\}$$
$$-\frac{\gamma(\gamma-2)}{2}\ell n(1-t) - \frac{\gamma(\gamma-2)}{2}\ell n(1-X)$$

ou ainda

$$\beta F_{BP} = \frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n(1-tX)$$

$$+\frac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{e^{\beta p H}[1+(p-1)tX]^{\gamma} + (p-1)(1-tX)^{\gamma}\right\} \tag{B.38}$$

$$+\frac{\gamma}{2}\ell n(1-X) + \frac{\gamma}{2}\ell n(1-t) + \frac{\gamma}{2}\ell n p$$

A expressão (3.37) é idêntica a (4.41) como queríamos mostrar.

APÊNDICE C

CÁLCULOS INTERMEDIÁRIOS

C.1. Derivada do mapa de B.P. calculada no ponto fixo

O mapa de B.P. (eq.2.1) pode ser escrito na forma

$$h^D \left[\frac{1 - tX_n}{1 + (p-1)tX_n}\right]^{\gamma-1} = \frac{1 - X_{n+1}}{1 + (p-1)X_{n+1}} \tag{C.1.1}$$

Derivando ambos os membros de (C.1.1) com relação a X_n temos que

$$\begin{aligned}&(\gamma-1)h^D \left[\tfrac{1-tX_n}{1+(p-1)tX_n}\right]^{\gamma-2} \left\{\tfrac{-t[1+(p-1)tX_n]-(1-tX_n)(p-1)t}{[1+(p-1)tX_n]^2}\right\} \\ &= \tfrac{-[1+(p-1)X_{n+1}]-(1-X_{n+1})(p-1)}{[1+(p-1)X_{n+1}]^2} \tfrac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n}\end{aligned} \tag{C.1.2}$$

$$\begin{aligned}&(\gamma-1)pth^D \left[\tfrac{1-tX_n}{1+(p-1)tX_n}\right]^{\gamma-2} \tfrac{1}{[1+(p-1)tX_n]^2} \\ &= \tfrac{-p}{[1+(p-1)X_{n+1}]^2} \tfrac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n}\end{aligned} \tag{C.1.3}$$

$$\begin{aligned}&(\gamma-1)th^D \left[\tfrac{1-tX_n}{1+(p-1)tX_n}\right]^{\gamma-1} \tfrac{1}{(1-tX_n)[1+(p-1)tX_n]} \\ &= \tfrac{1}{[1+(p-1)X_{n+1}]^2} \tfrac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n}\end{aligned} \tag{C.1.4}$$

Levando-se em consideração a expressão (C.1.1) podemos escrever (C.1.4) na forma

$$\frac{(\gamma-1)t(1-X_{n+1})}{[1+(p-1)X_{n+1}]}\cdot\frac{1}{(1-tX_n)[1+(p-1)tX_n]}$$

$$= \frac{1}{[1+(p-1)X_{n+1}]^2}\frac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n} \tag{C.1.5}$$

ou ainda

$$\frac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n} = \frac{(\gamma-1)t(1-X_{n+1})[1+(p-1)X_{n+1}]}{(1-tX_n)[1+(p-1)tX_n]} \tag{C.1.6}$$

No ponto fixo $X = X_{n+1} = X$, vem que

$$\left(\frac{\partial X_{n+1}}{\partial X_n}\right)_{X_n=X} = \frac{(\gamma-1)t(1-X)[1+(p-1)X]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]} \tag{C.1.7}$$

C.2. Cálculo da Integral I (Eq. 4.26)

$$\int_B^{\infty} \left\{ \frac{\partial}{\partial b} \ell n[pcosh_p(b + \gamma arctanh_p tX)] - \frac{p}{2} \right\} db \tag{C.2.1}$$

Efetuando-se em primeiro lugar a derivada existente no integrando obtém-se

$$\begin{aligned} &\tfrac{\partial}{\partial b} \ell n[pcosh_p(b + \gamma arctanh_p tX)] = \\ &= \tfrac{1}{cosh_p \Theta} \tfrac{\partial cosh_p \Theta}{\partial \Theta} \end{aligned} \tag{C.2.2}$$

onde

$$\Theta = b + \gamma arctanh_p tX \tag{C.2.3}$$

Então (veja apêndice A)

$$\begin{aligned} &\tfrac{\partial}{\partial b} \ell n[pcosh_p(b + \gamma arctanh_p tX)] \\ &= \tfrac{1}{cosh_p \Theta} \left[(p-1) senh_p \Theta - \tfrac{(p-2)}{2} cosh_p \Theta \right] \tfrac{\partial \Theta}{\partial b} \\ &= \left[(p-1) tanh_p \Theta - \tfrac{p-2}{2} \right] \left[1 + \tfrac{\gamma t}{(1-tX)[1+(p-1)tX]} \right] \tfrac{\partial X}{\partial b} \\ &= \tfrac{1}{2} \left[2(p-1) m(\beta, b) - (p-2) \right] \left[1 + \tfrac{\gamma t}{(1-tX)[1+(p-1)tX)]} \right] \tfrac{\partial X}{\partial b} \end{aligned} \tag{C.2.4}$$

onde $m(\beta, b)$ é o parâmetro de ordem.

Assim

$$\frac{\partial}{\partial b}\ell n\left[p\cosh_p(b+\gamma \operatorname{arctanh}_p tX)\right]-\frac{p}{2}=$$

$$=\frac{1}{2}\left[2(p-1)m(\beta,b)-(p-2)\right]$$

$$+\frac{1}{2}\left[2(p-1)m(\beta,b)-(p-2)\right]\left[\frac{\gamma t}{(1-tX)[1+(p-1)tX]}\frac{\partial X}{\partial b}\right]-\frac{p}{2}.$$

$$=\frac{1}{2}\left[2(p-1)m(\beta,b)-(p-2)-p\right] \tag{C.2.5}$$

$$+\frac{1}{2}\left[2(p-1)m(\beta,p)-(p-2)\right]\frac{\gamma t}{(1-tX)[1+(p-1)tX]}\frac{\partial X}{\partial b}$$

$$=(p-1)[m(\beta,b)-1]+\frac{1}{2}\frac{\gamma t[2(p-1)m(\beta,b)-(p-2)]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]}\frac{\partial X}{\partial b}$$

Porém como

$$m \qquad \frac{+t)X+(p-2)tX^2}{[1+(p-1)tX^2]}, \tag{C.2.5}$$

então

$$2(p-1)m-(p-2)=\frac{2(p-1)(1+t)X+2(p-1)(p-2)tX^2-(p-2)[1+(p-1)tX^2]}{[1+(p-1)tX^2]}$$

$$=\frac{2(p-1)(1+t)X+(p-2)[2(p-1)tX^2-1-(p-1)tX^2]}{[1+(p-1)tX^2]} \tag{C.2.6}$$

$$=\frac{2(p-1)(1+t)X-(p-2)[1-(p-1)tX^2]}{[1+(p-1)tX^2]}$$

Substituindo-se (C.2.6) em (C.2.4) vem que

$$\frac{\partial}{\partial b}\ell n\,[p cosh_p(b+\gamma arctanh_p tX)] - \frac{p}{2} =$$

$$= (p-1)[m(\beta,b)-1] + \frac{\gamma t}{2}\frac{2(p-1)(1+t)X-(p-2)[1-(p-1)tX^2]}{(1-tX)[1+(p-1)tX][1+(p-1)tX^2]}\frac{\partial X}{\partial b} \tag{C.2.7}$$

Agora levando-se (C.2.7) em (C.2.1) obtém-se que

$$I = (p-1)\int_B^\infty [m(\beta,b)-1]\,db$$

$$+\frac{\gamma}{2}\int_B^\infty \left\{\frac{t\{2(p-1)(1+t)X-(p-2)[1-(p-1)tX^2]\}}{(1-tX)[1+(p-1)tX][1+(p-1)tX^2]}\frac{\partial X}{\partial b}\right\} db \tag{C.2.8}$$

Porém é fácil verificar que

$$\frac{t\{2(p-1)(1+t)X-(p-2)[1-(p-1)tX^2]\}}{(1-tX)[1+(p-1)tX][1+(p-1)tX^2]} =$$

$$\frac{\partial}{\partial b}\{\ell n[1+(p-1)tX^2] - \ell n(1-tX) - \ell n[1+(p-1)tX]\} \tag{9}$$

Substituindo-se então (C.2.9) em (C.2.8) obtém-se que

$$I = (p-1)\int_B^\infty [m(\beta,b)-1]db$$

$$+\frac{\gamma}{2}\int_B^\infty \frac{\partial}{\partial b}\{\ell n[1+(p-1)tX^2] - \ell n(1-tX) - \ell n[1+(p-1)tX]\}\,db \tag{C.2.10}$$

Lembrando que $X(b) \to 1$ quando $B \to \infty$, a integral I fica expressa por

$$I = (p-1)\int_B^\infty [m(\beta,b)-1]db$$

$$-\frac{\gamma}{2}\{\ell n[1+(p-1)tX^2] - \ell n(1-tX) - \ell n[1+(p-1)tX] + \ell n(1-t)\} \tag{C.2.11}$$

C.3. Equação 4.39

Partindo da eq. 4.38:

$$\beta\psi(\beta,B) = \Phi(\beta,B) + \frac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)t] - \frac{\gamma p\beta J}{2} \tag{C.3.1}$$

onde

$$\begin{aligned}\Phi(\beta,B) &= -\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)] \\ &+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1+(p-1)tX^2] - \ell n(1-tX) - \ell n[1+(p-1)tX]\} - \tfrac{p}{2}\end{aligned} \tag{C.3.2}$$

A expressão (C.3.1) pode ser escrita na forma

$$\beta\psi(\beta,B) = \Phi(\beta,B) + \frac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)t] - \frac{\gamma p\beta J}{4} - \frac{\gamma p\beta J}{4} \tag{C.3.3}$$

Lembrando-se da definição de t

$$t = tanh_p(\beta J) \tag{C.3.4}$$

então

$$\beta J = arctah_p t = \frac{1}{p}\ell n\left[\frac{1+(p-1)t}{1-t}\right] \tag{C.3.5}$$

Substituindo-se (C.3.5) e (C.3.3) vem que

$$\beta\psi(\beta,B) = \Phi(\beta,B) + \tfrac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)t] - \tfrac{\gamma p\beta J}{4}$$

$$-\tfrac{\gamma}{4}\ell n\left[\tfrac{1+(p-1)t}{(1-t)}\right]$$

$$= \Phi(\beta,B) + \tfrac{\gamma}{4}[\ell n[1+(p-1)t] + \tfrac{\gamma}{4}\ell n(1-t) - \tfrac{\gamma p\beta J}{4} \tag{C.3.6}$$

$$= \Phi(\beta,B) + \tfrac{\gamma}{4}\{\ell n[1+(p-1)t] + \ell n(1-t)\} - \tfrac{\gamma p\beta J}{4}$$

Substituindo-se finalmente (C.3.2) em (C.3.6) obtém-se que

$$\beta\psi(\beta,B) = -\ell n[p cosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1+(p-1)X^2] - \ell n(1-tX) - \ell n[1+(p-1)tX]\}$$

$$+\tfrac{\gamma}{4}\{\ell n[1+(p-1)t] + \ell n(1-t)\} \tag{C.3.7}$$

$$-\tfrac{\gamma\beta pJ}{4} - \tfrac{pB}{2}.$$

C.4. Justificativa das constantes adicionais na eq. 4.40

Na definição da Hamiltoniana de Ising Thompson usou a seguinte expressão

$$\mathcal{H}_{Th} = -\beta J \sum_{<ij>} \sigma_i \sigma_j - \beta H \sum_i \sigma_j. \tag{C.4.1}$$

Então

$$Z_{Th} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\beta J \sum_{<ij>} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_i \sigma_i} \tag{C.4.2}$$

Pode-se escrever, supondo o campo H na "direção" $+$, as seguintes relações

$$\sigma_i \sigma_j = 2\delta(\sigma_i \sigma_j) - 1 \tag{C.4.3}$$

$$\sigma_i = 2\delta(\sigma_i +) - 1 \tag{C.4.4}$$

Assim a função de partição de Thompson pode ser escrita como

$$\begin{aligned} Z_{Th} &= \textstyle\sum_{\{\sigma\}} e^{2\beta J} \sum_{<ij>} \delta(\sigma_i \sigma_j) - \beta J \sum_{<ij>} 1 + 2\beta H \sum_i \delta(\sigma_i +) - \beta H \sum 1 \\ &= e^{-\beta J} \textstyle\sum_{<ij>} 1 e^{-\beta H} \sum_i 1 \sum_{\{\sigma\}} e^{2\beta J} \sum_{<ij>} \delta(\sigma_i \sigma_j) + 2\beta H \sum_i \delta(\sigma_i +) \end{aligned} \tag{C.4.5}$$

onde

$$\sum_{<ij>} 1 = \gamma N/2 \qquad \text{\# de pares de primeiros vizinhos}$$

$$\sum_i 1 = N \qquad \# \text{ de sítios}$$

e

$$\sum_{\{\sigma\}} e^{2\beta J \sum_{<ij>} \delta(\sigma_i \sigma_j) + 2\beta H \sum_i \delta(\sigma_i +)} = Z_N \tag{C.4.6}$$

onde Z_N é afunção de partição que usamos utilizando o delta de Kronecker multiplicado por p.

Então

$$Z_{Th} = e^{-\beta J N \gamma/2} e^{-\beta N H} Z_N \tag{C.4.7}$$

Aplicando-se o logaritmo em ambos os membros da expressão (C.4.7) e tomando o limite termodinâmico obtém-se que

$$\begin{aligned} -\ell im N^{-1} \ell n Z_{Th} &= -\lim_{N \to \infty} N^{-1} \ell n Z_n \\ -\lim_{N \to \infty} N^{-1} \ell n \left(e^{-\beta J \gamma N/2} e^{-\beta N H} \right) \end{aligned} \tag{C.4.8}$$

ou finalmente

$$\beta \psi_{Th} = \beta \psi_N + \frac{\gamma \beta J}{2} + \beta H \tag{C.4.9}$$

como queríamos mostrar.

C.5. Determinação da eq. 4.41

Partindo da eq. 4.39:

$$\beta\psi = -\ell n[pcosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX) - \ell n[1(p-1)tX]\} \tag{C.5.1}$$

$$+\tfrac{\gamma}{4}\{\ell n(1-t) + \ell n[1 + (p-1)t]\} - \tfrac{\gamma\beta pJ}{4} - \tfrac{pB}{2}$$

$$\beta\psi = -\ell n[pcosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX) - \ell n[1(p-1)tX]\}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t) - \tfrac{\gamma}{4}\ell n(1-t) + \tfrac{\gamma}{4}\ell n[1 + (p-1)t]$$

$$-\tfrac{\gamma\beta pJ}{4} - \tfrac{pB}{2}$$

$$-\ell n[pcosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX) - \ell n[1(p-1)tX]\}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t) + \tfrac{\gamma}{4}\ell n\left[\tfrac{1+(p-1)t}{1-t}\right] \tag{C.5.2}$$

$$-\tfrac{\gamma\beta pj}{4} - \tfrac{pB}{2}$$

$$\beta\psi = -\ell n[pcosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX) - \ell n[1(p-1)tX]\}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t) - \tfrac{pB}{2}$$

Porém:

$$cosh_p[B + \gamma arctanh_p tX] = cosh_p \{[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX] + arctanh_p tX\}$$

$$= cosh_p[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX]cosh_p[arctanh_p tX] \tag{C.5.3}$$

$$+(p-1)senh_p[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX]senh_p[arctanh_p tX]$$

Utilizando a fórmula (C.5.12) do apêndice A podemos escrever que

$$= cosh_p[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX] =$$

$$= \frac{e^{-p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]/2}}{1-tanh_p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]} \cdot \frac{e^{p[arctanh_p tX]/2}}{1-tanh_p[arctanh_p tX]}$$

$$+(p-1)\frac{e^{-p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]/2} tanh_p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{1-tanh_p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}$$

$$\cdot \frac{e^{-p[arctanh_p tX]/2} tanh_p[arctanh_p tX]}{1-tanh_p[arctanh_p tX]} \tag{C.5.4}$$

$$cosh_p[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX]$$

$$= \frac{e^{-p[B+(\gamma)arctanh_p tX]}}{(1-X)(1-tX)} + (p-1)\frac{e^{-p[B+(\gamma)arctanh_p tX]} \times tX}{(1-X)(1-tX)}$$

onde na última passagem utilizou-se a equação do ponto fixo do mapa de B.P.

Então a eq. (C.5.4) pode ser escrita como

$$cosh_p[B + \gamma arctanh_p tX]$$

$$e^{-p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]/2} \frac{[1+(p-1)tX^2]}{(1-X)(1-tX)} \tag{C.5.5}$$

Escrevendo

$$-\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)] = \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)]$$

$$-\tfrac{\gamma}{2}\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)] \tag{C.5.6}$$

Substituindo (C.5.5) e (C.5.6) em (C.5.2) obtém-se que

$$\beta\psi = \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)]$$

$$-\tfrac{\gamma}{2}\ell n\left\{pe^{-p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]/2}\tfrac{[1+(p-1)tX^2]}{(1-X)(1-tX)}\right\}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\left\{\ell n[1+(p-1)tX^2-\ell n(1-tX)]-\ell n[1+(p-1)tX]\right\} \tag{C.5.7}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t)-\tfrac{pB}{2}$$

$$\beta\psi = \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[pcosh_p(B+\gamma arctanh_p tX)]-\tfrac{\gamma}{2}\ell np$$

$$+\tfrac{\gamma pB}{4}+\tfrac{\gamma^2}{4}parctanh_p tX+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-X) \tag{C.5.8}$$

$$-\tfrac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)tX]-\tfrac{pB}{2}+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t)$$

$$\beta\psi = \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{e^{p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]/2}\left[1+(p-1)e^{-p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]/2}\right]\right\}$$

$$+\tfrac{(\gamma-2)}{4}pB+\tfrac{\gamma^2 p}{4}arctanh_p tX+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-X) \tag{C.5.9}$$

$$-\tfrac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)tX]-\tfrac{\gamma}{2}\ell np+\tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t)$$

$$\beta\psi = \frac{(\gamma-2)}{4}\gamma p arctanh_p tX + \frac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{1 + (p-1)e^{pB}\left[\frac{1-tX}{1+(p-1)tX}\right]^{\gamma}\right\}$$

$$+\frac{\gamma^2 p}{4} arctanh_p tX + \frac{\gamma}{2}\ell n(1-X)$$

$$-\frac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)tX] - \frac{\gamma}{2}\ell np + \frac{\gamma}{2}\ell n(1-t) \tag{C.5.10}$$

$$+\frac{(\gamma-2)pB}{2}$$

$$\beta\psi = \frac{\gamma(\gamma-1)}{2} p arctanh_p tX + \frac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{\frac{e^{pB[1+(p-1)tX]^{\gamma}+(p-1)(1-tX)^{\gamma}}}{e^{pB[1+(p-1)tX]^{\gamma}}}\right\}$$

$$+\frac{\gamma}{2}\ell n(1-X) - \frac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)tX] - \frac{\gamma}{2}\ell np \tag{C.5.11}$$

$$+\frac{\gamma}{2}\ell n(1-t) + \frac{(\gamma-2)pB}{2}$$

$$\beta\psi = \frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n\left[\frac{1+(p-1)tX}{1-tX}\right] - \frac{\gamma(\gamma-2)}{2}\ell n[1+(p-1)tX]$$

$$+\frac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{e^{pB[1+(p-1)tX]^{\gamma}+(p-1)(1-tX)^{\gamma}}\right\}$$

$$+\frac{\gamma}{2}\ell n(1-X) - \frac{\gamma}{2}\ell n[1+(p-1)tX] - \frac{\gamma}{2}\ell np \tag{C.5.12}$$

$$+\frac{\gamma}{2}\ell n(1-t)$$

$$= -\frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n(1-tX) + \frac{\gamma}{2}\ell n(1-X) - \frac{\gamma}{2}\ell np$$

$$+\frac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{e^{pB[1+(p-1)tX]^{\gamma}+(p-1)(1-tX)^{\gamma}}\right\} + \frac{\gamma}{2}\ell n(1-t) \tag{C.5.13}$$

$$+\frac{\gamma}{2}\left[\gamma - 1(\gamma-2) - 1\right]\ell n\left[1+(p-1)tX\right]$$

$$\beta\psi = -\frac{\gamma(\gamma-1)}{2}\ell n(1-tX)$$

$$+\frac{(\gamma-2)}{2}\ell n\left\{e^{pB[1+(p-1)tX]^{\gamma}+(p-1)(1-tX)^{\gamma}}\right\} \tag{C.5.14}$$

$$+\frac{\gamma}{2}\ell n(1-X)+\frac{\gamma}{2}\ell n(1-t)-\frac{\gamma}{2}\ell np$$

C.6. Determinação da eq. 4.42

Partindo da eq. 4.38

$$\beta\psi = -\ell n[pcosh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2] - \ell n(1 - tX) - \ell n[1 + (p-1)tX] \tag{C.6.1}$$

$$+\ell n[1 + (p-1)t]\} - \tfrac{pB}{2} - \tfrac{\gamma\beta pJ}{2}$$

Já vimos (eq. 5 da seção C.4 do apêndice C) que

$$cosh_p(B + \gamma arctanh_p tX) = e^{-p[B+\gamma arctanh_p tX]/2}\frac{[1 + (p-1)tX^2]}{(1 - tX)(1 - X)} \tag{C.6.2}$$

Substituindo a expressão acima em (C.6.1) vem que

$$\beta\psi = \tfrac{\gamma p}{2} arctanh_p tX - \ell n[1 + (p-1)tX^2]$$

$$+\ell n(1 - tX) + \ell n(1 - X) + \tfrac{\gamma}{2}\{\ell n[1 + (p-1)tX^2$$

$$-\ell n(1 - tX) + \ell n[1 + (p-1)tX] + \ell n[1 + (p-1)t]\} \tag{C.6.3}$$

$$-\tfrac{\gamma\beta pJ}{2} - \ell np$$

$$\beta\psi = \tfrac{\gamma}{2}\ell n\left[\tfrac{1+(p-1)tX}{1-tX}\right] + \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[1 + (p-1)tX^2]$$

$$-\tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n(1 - tX) + \ell n(1 - X) - \tfrac{\gamma}{2}\ell n[1 + (p-1)tX] \tag{C.6.4}$$

$$+\tfrac{\gamma}{2}\ell n[1 + (p-1)t] - \tfrac{\gamma}{2}\ell n\left[\tfrac{1+(p-1)t}{1-t}\right] - \ell np$$

onde na última passagem levou-se em conta que

$$\beta J = arctanh_p t = \frac{1}{p}\ell n\left[\frac{1+(p-1)t}{1-t}\right] \tag{C.6.5}$$

Agrupando os termos semelhantes em (C.6.2) vem finalmente que

$$\begin{aligned}\beta\psi = &-(\gamma-1)\ell n(1-tX) + \tfrac{(\gamma-2)}{2}\ell n[1+(p-1)tX^2] \\ &+\ell n(1-X) + \tfrac{\gamma}{2}\ell n(1-t) - \ell np\end{aligned} \tag{C.6.6}$$

C.7. Determinação da eq. (4.44)

Partindo da eq. 4.16:

$$m = tanh_p[B + \gamma arctanh_p tX] \tag{C.7.1}$$

Derivando (C.7.1) em relação a B vem que

$$\begin{aligned} \frac{\partial m}{\partial \beta} &= sech_p^2[B + \gamma arctanh_p tX]\frac{\partial}{\partial B}[B + \gamma arctanh_p tX] \\ &= sec_p^2[B + \gamma arctanh_p tX]\left\{1 + \frac{\gamma t}{(1-tX)[1+(p-1)tX]}\frac{\partial X}{\partial B}\right\} \end{aligned} \tag{C.7.2}$$

Porém como,

$$X = tanh_p[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX] \tag{C.7.3}$$

então

$$\frac{\partial X}{\partial B} = sech_p^2[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX]\left[1 + \frac{(\gamma - 1)t}{(1 - tX)[1 + (p - 1)tX]}\frac{\partial X}{\partial B}\right] \tag{C.7.4}$$

ou

$$\begin{aligned} &\left\{1 - \frac{(\gamma-1)t sech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]}\right\}\frac{\partial X}{\partial B} = sech_p^2[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX] \\ &\left\{\frac{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)t sech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]}\right\}\frac{\partial X}{\partial B} = sech_p^2[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX] \end{aligned} \tag{C.7.5}$$

ou ainda

$$\frac{\partial X}{\partial B} = \frac{(1-tX)[1+p-1)tX]sech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]} \tag{C.7.6}$$

Substituindo (C.7.6) em (C.7.2) vem que

$$\frac{\partial m}{\partial B} = sech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX].$$

$$\cdot\left\{1+\frac{\gamma tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}\right\} \tag{C.7.7}$$

ou finalmente

$$\frac{\partial m}{\partial B} = sech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX].$$

$$\cdot\left\{\frac{(1-tX)[1+(p-1)tX]+tsech_p^2[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)arctanh_p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]}\right\} \tag{C.7.8}$$

C.8. Determinação da eq. 4.46

Da fórmula (A.11) do apêndice A obtém-se que

$$sech_p^2[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX]$$

$$= e^{p[B+(\gamma-1)arctanh_p tX]} \{1 - tanh_p[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX]\} \tag{C.8.1}$$

$$= (1 - X)^2 e^{pB} \left[\frac{1+(p-1)tX}{1-tX}\right]^{\gamma-1}$$

Porém da equação de ponto fixo do mapa de B.P. temos que

$$e^{pB} \left[\frac{1 + (p - 1)tX}{1 - tX}\right]^{\gamma-1} = \frac{1 + (p - 1)X}{1 - X} \tag{C.8.2}$$

Substituindo então (2) em (1) vem que

$$sech_p^2[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX] = (1 - X)[1 + (p - 1)X] \tag{C.8.3}$$

Além disso da mesma forma

$$sech_p^2[B + \gamma arctanh_p tX] =$$

$$= e^{pB} \left[\frac{1+(p-1)tX}{1-tX}\right]^{\gamma} [1 - tanh_p(B + \gamma arctanh_p tX)]$$

$$= e^{pB} \left[\frac{1+(p-1)tX}{1-tX}\right]^{\gamma-1} \left[\frac{1+(p-1)tX}{1-tX}\right] (1 - m)^2 \tag{C.8.4}$$

$$= \frac{[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]}{(1-X)(1-tX)} \left\{1 - \frac{(1+t)X+(p-2)tX^2}{[1+(p-1)tX^2]}\right\}^2$$

onde na última passagem utilizamos a eq. C.8.2 e a expressão 4.3 para o paâmetro de ordem m.

Então

$$sech_p^2[B + (\gamma - 1)arctanh_p tX] =$$

$$= \frac{[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]}{(1-X)(1-tX)} \left\{ \frac{1+(p-1)tX^2-(1+t)X-(p-2)tX^2}{[1+(p-1)tX^2]} \right\}^2$$

$$= \frac{[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]}{(1-X)(1-tX)} \left\{ \frac{(1-X)(1-tX)}{[1+(p-1)tX^2]} \right\}^2 \tag{C.8.5}$$

$$\frac{(1-X)(1-tX)[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]}{[1+(p-1)tX^2]}$$

Substituindo-se (C.8.3) e (C.8.5) na eq. (4.45), obtém-se finalmente que

$$k_B T \chi \frac{(p-1)(1-X)(1-tX)[1+(p-1)X][1+(p-1)tX]}{[1+(p-1)tX^2]^2} \cdot$$

$$\cdot \frac{(1+t)[1-(p-1)tX^2]+2(p-2)tX}{(1-tX)[1+(p-1)tX]-(\gamma-1)(1-X)[1+(p-1)X]} \tag{C.8.6}$$

C.9. Cálculo da integral I' (eq. 4.68)

Vamos calcular a integral I' efetuando em primeiro lugar as derivadas.

$$\frac{\partial}{\partial b}\ell n[cosh_p(b+\gamma arctanh_p tX_1)]$$

$$= \frac{1}{cosh_p\Theta_1}\left[(p-1)senh_p\Theta_1 - \frac{(p-1)}{2}cosh_p\Theta_1\right]\left[1+\frac{\gamma t}{(1-tX_1)[1+(p-1)/X_1]}\frac{\partial X_1}{\partial b}\right] \tag{C.9.1}$$

onde

$$\Theta_1 = b+\gamma arctanh_p tX_1 \tag{C.9.2}$$

Então

$$\frac{\partial}{\partial b}\ell n[cosh_p(b+\gamma arctanh_p tX_1)]$$

$$= \left[(p-1)tanh_p\Theta_1 - \frac{(p-2)}{2}\right]\left[1+\frac{\gamma t}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1]}\frac{\partial X_1}{\partial b}\right] \tag{C.9.3}$$

$$= \frac{1}{2}\left[2(p-1)m_2-(p-2)\right]\left[1+\frac{\gamma t}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1]}\frac{\partial X_1}{\partial b}\right]$$

De maneira análoga:

$$\frac{\partial}{\partial b}\ell n[cosh_p(b+\gamma arctanh_p tX_2]$$

$$= \frac{1}{2}\left[2(p-1)m_1-(p-2)\right]\left[1+\frac{\gamma t}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1]}\frac{\partial X_1}{\partial b}\right] \tag{C.9.4}$$

Substituindo (C.9.3) e (C.9.4) em (4.67) obtém-se que

$$I' = \int_B^{B_c} \frac{1}{2} \left\{ \left\{ [2(p-1)m_2 - (p-2)] \left[1 + \frac{\gamma t}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1]} \frac{\partial X_1}{\partial b} \right] \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{1}{2}[2(p-1)m_1 - (p-2)] \left[1 + \frac{\gamma t}{(1-tX_2)[1+(p-1)tX_2]} \frac{\partial X_1}{\partial b} \right] \right\} - \frac{p}{2} \right\} db$$

$$= \int_B^{B_c} \left\{ \frac{1}{4}[2(p-1)m_2 - (p-2)] - \frac{p}{4} \right\} db + \frac{1}{4} \int_B^{B_c} \left\{ \frac{[2(p-1)m_2-(p-2)]\gamma t}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1]} \frac{\partial X_1}{\partial b} \right\} db$$

$$+ \int_B^{B_c} \left\{ \frac{1}{4}[2(p-1)m_1 - (p-2)] - \frac{p}{4} \right\} db + \frac{1}{4} \int_B^{B_c} \left\{ \frac{[2(p-1)m_1-(p-2)]\gamma t}{(1-tX_2)[1+(p-1)tX_2]} \frac{\partial X_2}{\partial b} \right\} db \tag{C.9.5}$$

$$\frac{(p-1)}{2} \int_B^{B_c} (m_2 - 1) db + \frac{(p-1)}{2} \int_B^{B_c} (m_1 - 1) db$$

$$+ \frac{\gamma t}{4} \int_B^{B_c} \left\{ \frac{2(p-1)m_2-(p-2)}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1]} \frac{\partial X_1}{\partial b} + \frac{2(p-1)m_1-(p-2)}{(1-tX_2)[1+(p-1)tX_2]} \frac{\partial X_2}{\partial b} \right\} db$$

Porém

$$2(p-1)m_2 - (p-2) = 2(p-1)\frac{X_2 tX_1 + (p-2)X_1X_2}{[1+(p-1)tX_1X_2]} - (p-2)$$

$$= \frac{2(p-1)X_2 + 2(p-1)tX_1 + 2(p-1)(p-2)tX_1X_2 - (p-2) - (p-1)(p-2)tX_1X_2}{[1+(p-1)tX_1X_2]} \tag{C.9.6}$$

$$= \frac{2(p-1)(X_2 + tX_1) - (p-2)[1-(p-1)tX_1X_2]}{[1+(p-1)tX_1X_2]}$$

E da mesma forma

$$2(p-1)m_1 - (p-2) = \frac{2(p-1)(X_1 + tX_2) - (p-2)[1-(p-1)tX_1X_2]}{[1+(p-1)tX_1X_2]} \tag{C.9.7}$$

Substituindo (C.9.6) e (C.9.7) em (C.9.5) e tendo em conta que

$$\frac{(p-1)}{2} \int^{B_c} B(m_1 - 1) db + \frac{(p-1)}{2} \int^{B_c} B(m_2 - 1) db = \int_B^{B_c} [M(\beta, b) - p] db, \tag{C.9.8}$$

obtém-se que

$$I' = \int_B^{B_c}[M(\beta,b) - p]db + \frac{\gamma t}{4}\int_B^{B_c}\left\{\frac{2(p-1)(X_2+tX_1)-(p-2)[1-(p-1)tX_1X_2]}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1][1+(p-1)tX_1X_2]}\frac{\partial X_1}{\partial b}\right.$$

$$\left.+\frac{2(p-1)(X_1+tX_2)-(p-2)[1-(p-1)tX_1X_2]}{(1-tX_2)[1+(p-1)tX_2][1+(p-1)tX_1X_2]}\frac{\partial X_1}{\partial b}\right\} \tag{C.9.9}$$

Porém

$$\frac{\partial}{\partial b}\{2\ell n[1+(p-1)tX_1X_2] - \ell n(1-tX_1) - \ell n[1+(p-1)tX_1]$$

$$-\ell n(1-tX_2) - \ell n[1+(p-1)tX_2]\} =$$

$$t\left\{\frac{2(p-1)(X_2+tX_1)-(p-2)[1-(p-1)tX_1X_2]}{(1-tX_1)[1+(p-1)tX_1][1+(p-1)tX_1X_2]}\frac{\partial X_1}{\partial b}\right. \tag{C.9.10}$$

$$\left.+\frac{2(p-1)(X_1+tX_2)-(p-2)[1-(p-1)tX_1X_2]}{(1-tX_2)[1+(p-1)tX_2][1+(p-1)tX_1X_2]}\frac{\partial X_2}{\partial b}\right\}$$

Substituindo (C.9.10) em (C.9.9)

$$I' = \int^{B_c} B[M(\beta,b) - p]db + \frac{\gamma}{4}\int^{B_c} B\left\{\frac{\partial}{\partial b}\{2\ell n[1+(p-1)tX_1X_2] - \ell n(1-tX_1)\right.$$

$$\left.-\ell n[1+(p-1)tX_1] - \ell n(1-tX_2) - \ell n[1+(p-1)tX_2]\}\right\} db \tag{C.9.11}$$

Lembrando que $B \to B_c \Longrightarrow X_1 = X_2 = X$ obtém-se que

$$I' = \int_B^{B_c}[M(\beta,b) - p]db + \frac{\gamma}{4}\{2\ell n[1+(p-1)tX^2] - 2\ell n(1-tX) - 2\ell n[1+(p-1)tX]\}$$

$$-\frac{\gamma}{4}\{2\ell n[1+(p-1)tX_1X_2] - \ell n(1-tX_1) - \ell n(1-tX_2) - \ell n[1+(p-1)tX_2]\}\Big\} \tag{C.9.12}$$

$$I' = \int_B^{B_c}[M(\beta,b)-p]db + \frac{\gamma}{2}\{\ell n[1+(p-1)tX^2] - \ell n(1-tX) - \ell n[1+(p-1)tX]\}$$

$$-\frac{\gamma}{4}\{2\ell n[1+(p-1)tX_1X_2] - \ell n(1-tX_1) - \ell n[1+(p-1)tX_1] - \ell n(1-tX_2)$$

$$-\ell n[1+(p-1)tX_2]\}$$

(C.9.13)

C.10. Obtenção da eq. (4.85)

Partindo de (4.84)

$$\beta\psi(\beta,B) = -\ell n[pcosh_p(B+\beta JX)] + \frac{(p-1)\beta JX^2}{2}$$
$$-\frac{(p-2)\beta JX}{2} - \frac{\beta J}{2} - \frac{pB}{2} \tag{C.10.1}$$

Da definição do $cosh_p\Theta$ podemos escrever que

$$pcosh_p(B+\beta JX) = e^{p(B+\beta JX))/2}\left[1+(p-1)e^{-p(B+\beta JX)}\right] \tag{C.10.2}$$

Da equação (2.88) de ponto fixo do mapa de B.W. sabemos que

$$e^{-p(B+\beta JX)} = \frac{1-X}{1+(p-1)X} \tag{C.10.3}$$

Substituindo (C.10.3) em (C.10.2) obtém-se que

$$pcosh_p(B+\beta JX) = e^{p(B+\beta JX)/2}\left[\frac{p}{1+(p-1)X}\right] \tag{C.10.4}$$

Levando-se a expressão (C.10.4) em (C.10.1) pode escrever que

$$\beta\psi(\beta,B) = -\frac{p\beta JX}{2} - \ell np + \ell n[1+(p-1)X] + \frac{(p-1)\beta JX^2}{2}$$
$$-\frac{(p-2)\beta JX}{2} - \frac{\beta J}{2} - pB \tag{C.10.5}$$

Utilizando novamente a expressão (C.10.3) podemos escrever que

$$\ell n[1 + (p-1)X] = pB + p\beta JX + \ell n(1 - X) \tag{C.10.6}$$

Substituindo (C.10.6) em (C.10.5) vem que

$$\begin{aligned} \beta\psi(\beta, B) &= \beta JX + \ell n(1 - X) + \frac{\beta J(p-1)X^2}{2} \\ &- \frac{\beta J}{2} - \ell np \end{aligned} \tag{C.10.7}$$

Finalmente, lembrando que no limite de γ infinito $X = m$, obtém-se que

$$\begin{aligned} \beta\psi(\beta, B) &= \beta Jm + \ell n(1 - m) + \beta J(p-1)m^2 \\ &- \frac{\beta J}{2} - \ell np \end{aligned} \tag{C.10.8}$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. M. J. Feigenbaum. J Stat. **19**, 25 (1978)
2. . B. Potts. Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952)
3. S. R. Mckay, A. N. Berker e S. Kirkpatrick. Phys. Rev. Lett. **48**, 767 (1982)
4. P. L. Christiano. Tese de Doutorado. Não publicada.
5. J. W. Essam e M. E. Fisher. Rev. Mod. Phys. **42**, 272 (1970)
6. Wang Y. K., Wu F. Y. J. Phys. A **9**, 593 (1976)
7. E. Müller-Hartmann e J. Zittartz. Phys. Rev. Lett. **33**, 893 (1974)
8. F. S. Aguiar, L. B. Bernanrdes e S. Goulart Rosa Jr. J. Stat. Phys. **64**, 673 (1991)
9. L. Mittag e M. J. Stephen. J. Phys. A **7**, L109 (1974)
10. C. Tsallis e S. V. F. Levy. Phys. Rev. Lett. **47**, 950 (1981)
11. F. S. de Aguiar e S. Goulart Rosa Jr. Phys. Lett. A **162**, 232 (1992)
12. F. S. de Aguiar e S. Goulart Rosa Jr. A ser publicado.
13. C. J. Thompson. J. Stat. Phys. **27**, 441 (1982)
14. F. S. de Aguiar, F. A. Bosco, A. S. Martinez e S. Goulart Rosa Jr. J. Stat. Phys. **58**, 1231 (1990)
15. F. S. de Aguiar e S. Goulart Rosa Jr. Phys. Lett. A **143**, 186 (1990)
16. H. G. Baumgärtel e E. Müller-Hartmann. Z. Phys. B **46**, 227 (1982)
17. R. L. Devaney, An Introduction to Chaotic Dynamical Systems. Addison-Wesley Publishing Co, Menlo Park, 1989
18. F. Peruggi, F. di Liberto e G. Monroy. J. Phys. A **16**, 811 (1983)
19. C. Grebogi e E. Ott . Physica D **7**, 181 (1983)

20. F. Y. Wu. Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982)

21. P. W. Kasteleyn e C. M. Fortuin. J. Phys. Soc. Jpn (suppl.) **26**, 11 (1969), Physica **51**, 536 (1972)

22. P. Blanchard, Bull. Am. Math. Soc. **11**, 85 (1984)

23. H. O. Peitgen, P. H. Richter. The Beauty of Fractals, Springer-Verlag, 1986

24. C. J. Thompson. J. Stat. Phys. **27**, 441 (1982)

25. C. J. Thompson. Mathematical Statistical Mechanics, The Macmillan Company, N. York, 1972

26. T. Kihara, Y. Midzuno e T. Shizume. J. Phys. Soc. Jpn **9**, 681 (1954)

27. F. di Liberto, G. Monroy e F. Peruggi. Z. Phys. B**66**, 379 (1987)

28. R. B. Griffiths e P. D. Gujrati. J. Stat. Phys. **30**, 563 (1983)

29. D. Stauffer, Introduction to Percolation Theory, Taylor e Francis, London, 1985

30. H. E. Stanley. Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, Oxford University Press, N. York, (1971)

31. C. N. Yang e T. D. Lee. Phys. Rev. **87**, 404 (1952), T. D. Lee e C. N. Yang. Phys. Rev. **87**, 410 (1987)