

Posição e densidade dos zeros de  
Yang-Lee do modelo de  
Blume-Emery-Griffiths  
unidimensional sobre anéis conexos e  
desconexos.

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Fernanda Lopes Sá

**Posição e densidade dos zeros de  
Yang-Lee do modelo de  
Blume-Emery-Griffiths  
unidimensional sobre anéis conexos e  
desconexos.**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Denis Dalmazi

Guaratinguetá  
2007

Sá, Fernanda Lopes

*S111p*

Posição e densidade dos zeros de Yang-Lee do modelo de Blume-Emery-Griffiths unidimensional sobre anéis conexos e desconexos./ Fernanda Lopes Sá. - Guaratinguetá: [s.n.], 2007  
99 f.: il.

Bibliografia: f. 95 – 99

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista,  
Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2007

Orientador: Prof. Dr. Denis Dalmazi

1. Teoria quântica de campos 2. Física estatística

I. Título

*CDU530.145*

# Dados Curriculares

**FERNANDA LOPES SÁ**

NASCIMENTO 30.09.1981 - BARRA MANSA / RJ

FILIAÇÃO Francisco de Assis Cardoso de Sá  
Liliana Lopes Sá

2001 - 2005 Bacharelado em Física  
Departamento de Física - UFJF

2005 - 2007 Mestrado em Física  
Departamento de Física e Química - FEG/UNESP

*Aos meus pais*

# Agradecimentos

Desejo expressar os meus sinceros agradecimentos:

**Aos meus pais**, que são os maiores responsáveis pela minha formação. Pelo apoio e incentivo em todos os momentos.

**Ao meu orientador**, prof Denis Dalmazi, que me motivou e contribuiu para a minha formação profissional.

**Aos amigos da pós-graduação**, as pessoas mais presentes na minha vida nesses últimos dois anos.

**Aos professores da pós-graduação** com os quais aprendi muito.

A todos os meus outros amigos e todas as pessoas que passaram pela minha vida, que fizeram parte dessa jornada.

*Este trabalho contou com o apoio financeiro da CAPES.*

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>11</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>13</b>
<b>2 Zeros do modelo de Ising de spin 1/2 unidimensional</b>	<b>17</b>
2.1 Posição dos zeros de Yang-Lee . . . . .	17
2.2 Zeros de Fisher . . . . .	25
2.3 Densidade de zeros de Yang-Lee . . . . .	26
<b>3 Modelo de Ising de spin 1/2 sobre diagramas de Feynman</b>	<b>29</b>
3.1 Modelo de Ising sobre diagramas de Feynman $\phi^4$ . . . . .	29
3.2 Modelo de Ising 1D sobre anéis conexos e desconexos ( $\phi^2$ ) . . . . .	34
<b>4 Modelo de Blume-Emery-Griffiths</b>	<b>39</b>
4.1 Modelo BEG 1D usual (1 anel) . . . . .	41
4.2 Sub-modelos . . . . .	44
4.2.1 Modelo de Blume-Capel e Ising de spin 1 . . . . .	44
4.2.2 Modelo de Ising de spin 1/2 . . . . .	44
4.2.3 Modelo de Potts de 3 estados . . . . .	45
4.3 Resultados analíticos . . . . .	47
4.3.1 Decomposição de Griffiths . . . . .	48
4.3.2 $T \rightarrow 0$ . . . . .	50
4.3.3 $T \rightarrow \infty$ . . . . .	51
4.3.4 $b = 0$ ( $k \rightarrow -\infty$ ) . . . . .	53
4.4 Resultados analíticos aproximados . . . . .	54
4.4.1 $\tilde{x} \rightarrow 0$ . . . . .	54

4.4.2	$b \rightarrow \infty$	56
4.4.3	$c \rightarrow 0$	57
4.5	Densidade de zeros de Yang-Lee	61
4.6	Mínimos da energia e posição dos zeros	67
<b>5</b>	<b>Modelo BEG sobre anéis conexos e desconexos</b>	<b>70</b>
5.1	Definição do modelo	70
5.2	Posição dos zeros de Yang-Lee	73
5.3	Densidade de zeros de Yang-Lee	77
5.4	Aproximação de ponto de sela	80
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>83</b>
	<b>Apêndices:</b>	<b>85</b>
<b>A</b>	<b>Lema de Wick</b>	<b>85</b>
<b>B</b>	<b>Solução da equação cúbica</b>	<b>88</b>
<b>C</b>	<b>Estudo dos mínimos da energia do modelo BEG</b>	<b>90</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>95</b>

# Lista de Figuras

2.1	Zeros de Yang-Lee para o modelo de Ising de spin 1/2 com $n = 2$ e $c = 0.9$ , para o caso ferromagnético e antiferromagnético . . . . .	21
2.2	Zeros de Yang-Lee do modelo de Ising unidimensional no plano complexo $u^2 = e^{-2h}$ com $n = 40$ spins. . . . .	24
2.3	Zeros do modelo de Ising unidimensional no plano complexo de $h$ com $n = 40$ spins. . . . .	25
2.4	Zeros de Fisher para o modelo de Ising unidimensional no plano complexo $c^2$ com 40 zeros. . . . .	26
3.1	$\langle \phi_+^4 \phi_-^4 \rangle$ . . . . .	30
3.2	Vértice $\phi_+^4$ e $\phi_-^4$ . . . . .	31
3.3	$\langle (\phi_+^4 + \phi_-^4)^2 \rangle$ . . . . .	32
3.4	Vértices $e^h \phi_+^2$ e $e^{-h} \phi_-^2$ . . . . .	34
3.5	Diagramas de Feynman para $Z_2^{nc}$ e $Z_4^{nc}$ . . . . .	36
3.6	Sobreposição dos zeros das funções de partição do modelo de Ising 1D de spin 1/2 para rede estática e dinâmica. Os zeros azuis são da função de partição para anéis conexos e desconexos (dinâmica) e os zeros em vermelho são os da função de partição para um anel conexo (estática) para diferentes números de spins e $c = 0.5$ . . . . .	38
4.1	Zeros do modelo BEG com $n = 80$ para $b = 1/c^3$ $x = u/c^4$ para $c = 0.5$ e $c = 0.25$ . . . . .	47
4.2	Em cada sítio da rede temos dois spins 1/2 . . . . .	48
4.3	Zeros da função de partição do modelo BEG com $c = 0.11$ , $b = 3$ e $x = 7 > 2b$ , para 20 spins. . . . .	50
4.4	Validade da equação (4.53), variando $x$ com $n = 40$ sítios. . . . .	52

4.5	Validade da equação (4.53), variando $x$ com $n = 80$ sítios. . . . .	53
4.6	Zeros do modelo BEG com $n = 80$ para $\tilde{x}$ pequeno. . . . .	56
4.7	Zeros do modelo BEG para $b$ grande ( $\tilde{x} = 9$ , $b = 8$ e $c = 0.9$ ). . . . .	57
4.8	A curva em vermelho é para $\rho_+(\alpha)$ , a rosa é para $\rho_-(\alpha)$ e os pontos azuis são os zeros do modelo BEG $b = 1.1$ , $c = 0.1$ , $\tilde{x} = 1.1$ e $n = 40$ . . . . .	59
4.9	A curva em vermelho é para $\rho_+(\alpha)$ , a rosa é para $\rho_-(\alpha)$ e os pontos azuis são os zeros do modelo BEG para diferentes $\tilde{x}$ , $c$ e $b$ , quando os zeros não estão na $S^1$ . Nas figuras usamos $n = 40$ spins (80 zeros) . . . . .	60
4.10	Zeros do modelo BEG com $b = 2$ , $c = 0.9$ , $x = 5$ e $n = 40$ . . . . .	63
4.11	Gráfico de $\Re(u_1) \times n$ para o arco menor. A curva sólida corresponde a $(A/n^B + C)$ com $A = -0.9137$ , $B = 1.9993$ e $C = 0.0502$ . . . . .	65
4.12	Gráfico da densidade dos zeros da ponta $(\ln(\rho(u_1)) \times \ln n)$ . . . . .	65
4.13	Gráfico de $\rho(u) \times  u - u_1 $ para $b = 2$ , $c = 0.9$ , $x = 5$ e $n = 60$ . . . . .	66
4.14	Zeros do modelo de BEG 1D para diferentes $b$ . . . . .	68
4.15	Zeros do modelo BEG para $x = 0.8$ , $c = 0.5$ e $b = \sqrt{xc} - 0.005 = 0.442$ para os pontos vermelhos e $b = \sqrt{xc} + 0.005 = 0.452$ para os pontos azuis . . . . .	68
4.16	Zeros do modelo BEG para $b = 0.8$ , $c = 0.9$ e $x = 1 - 0.1 = 0.9$ para os pontos vermelhos e $x = 1 + 0.1 = 1.1$ para os pontos azuis . . . . .	69
5.1	Sobreposição dos zeros da função de partição para um anel conexo (zeros vermelhos) com os zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (zeros azuis), com $c = 0.5$ , $x = 0.8$ e $b = 1.1$ . . . . .	74
5.2	Sobreposição dos zeros da função de partição para um anel conexo (zeros vermelhos) e dos zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (zeros azuis), com $c = 0.5$ , $x = 0.8$ e $b = 0.3$ para diferentes números de sítios. . . . .	75
5.3	Zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (pontos azuis) e um anel conexo (pontos vermelhos) com $b = 1/2$ , $x = 1/2$ e $c = 1/2$ ( $n = 25$ spins) . . . . .	75
5.4	Sobreposição dos zeros da função de partição para um anel conexo (zeros vermelhos) com os zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (zeros azuis), com $c = 0.5$ , $x = b^2/(1 - b/2 + \sqrt{1 - b}) \pm 0.01$ e $b = 0.1$ para $n = 20$ spins. . . . .	76

5.5	Zeros do modelo BEG com $n = 40$ para $b = 1/c^3$ $x = u/c^4$ e $c = 0.5$ , os pontos vermelhos são para a rede estática e os pontos em azul são para a rede dinâmica . . . . .	76
5.6	Zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos com $b = 1$ , $x = 6$ , $c = 0.5$ e $n = 60$ spins . . . . .	77
5.7	Gráfico de $\Re u(n) \times n$ . . . . .	78
5.8	Gráfico da densidade dos zeros da ponta ( $\ln(\rho(u_1)) \times \ln n$ ) para o arco de raio maior. . . . .	79
5.9	Gráfico de $\rho(u) \times  u - u_1 $ . . . . .	80
C.1	Diagrama de fase no plano $(\tilde{K} \times \tilde{\Delta}/\gamma)$ . . . . .	93
C.2	Diagrama de fases no plano $(\tilde{K} \times \tilde{\Delta}/\gamma)$ [37] . . . . .	94

SA, F. L. –. 2007. 89 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2007.

## Resumo

Neste trabalho realizamos um estudo detalhado do posicionamento dos zeros de Yang-Lee do modelo de Blume-Emery-Griffiths unidimensional através de métodos analíticos e numéricos. Em particular, analisamos o efeito de uma rede dinâmica (anéis conexos e desconexos) sobre tais zeros. Nossos resultados numéricos e um cálculo via ponto de sela indicam que estes últimos tendem aos zeros do modelo definido sobre um anel conexo (condições periódicas de contorno) no limite termodinâmico. Conjecturamos a existência de uma região no espaço de parâmetros do modelo para a qual os zeros correspondem a campos magnéticos puramente imaginários independentemente da temperatura. Nossos resultados mostram que, ao contrário do que sugere resultados anteriores para o modelo de Blume-Capel, não há uma relação direta entre os mínimos de energia e a posição dos zeros de Yang-Lee. Para o caso de um anel conexo deduzimos uma equação aproximada para a curva dos zeros de Yang-Lee a partir dos autovalores da matriz de transferência. Resultados numéricos e analíticos mostram que mesmo com alguns acoplamentos anti-ferromagnéticos temos zeros para campos magnéticos puramente imaginários. Por fim, calculamos numericamente a densidade dos zeros próximos a ponta da curva a qual pertencem (singularidade da ponta de Yang-Lee) obtendo através de ajustes numéricos e relações de escala de tamanho finito uma densidade que diverge na ponta com expoente crítico  $\sigma$  próximo de  $-1/2$  mesmo quando o campo magnético não é puramente imaginário e a rede é dinâmica.

**Palavras-chave:** Zeros de Yang-Lee; Modelo de Ising; Modelo BEG; Densidade de zeros; Singularidade da ponta de Yang-Lee

SA, F. L. –. 2007. 89 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2007.

## Abstract

In this work we carry out a detailed study of the position of the Yang-Lee zeros of the one-dimensional Blume-Emery-Griffiths model through analytic and numerical methods. In particular, we analyze the effect of a dynamical lattice (connected and non-connected rings) over such zeros. Our numerical results and a saddle point calculation indicate that such zeros tend to overlap the zeros of the model defined on one-ring (periodic boundary conditions) in the thermodynamic limit. We conjecture the existence of a region in the parameter space of the model where the zeros correspond to purely imaginary magnetic fields independently of the temperature. Here we show that, contrary to the previous results for the Blume-Capel model, there is no straightforward relationship between the energy minima and zeros position. For the connected ring we deduce the approximate equation for the Yang-Lee zeros curve from the eigenvalues of the transfer matrix. Our numerical and analytic results show that even with some antiferromagnetic couplings we have zeros at purely imaginary magnetic field. Finally, we calculate numerically the density of the zeros close to the edge of the curves (Yang-Lee edge singularity) obtaining, through numerical fits and finite size scaling relations, a density which diverges at the edge with critical exponent  $\sigma$  approximately  $-1/2$  even when the magnetic field is not purely imaginary and the lattice is dynamic.

**Keywords:** Yang-Lee zeros; Ising model; BEG model; Density of zeros; Yang-Lee edge singularity

# Capítulo 1

## Introdução

Em 1952 Yang e Lee introduziram em dois trabalhos [1] [2] uma nova maneira de estudar transições de fase, a partir dos zeros da função de partição. Para um trabalho de revisão recente dessa técnica vide [3].

O chamado teorema do círculo de Yang e Lee desempenhou um papel fundamental para essa teoria e ainda é um ponto de referência em suas aplicações. Em seu teorema, Yang e Lee provaram que os zeros da função de partição para o modelo de Ising ferromagnético de spin 1/2 unidimensional estão distribuídos sobre a circunferência de raio um ( $|u| = 1$ ) no plano complexo de  $u$ , onde  $u = e^{-2H/k_B T}$  o que equivale a valores puramente imaginários do campo magnético  $H$ . Observa-se que os zeros da função de partição se movem em direção ao semi eixo real positivo para uma temperatura menor ou igual a uma temperatura crítica ( $T \leq T_c$ ). Sendo que somente no limite termodinâmico esses zeros tocariam o eixo real positivo em  $u = 1$  ou  $H = 0$ . Uma consequência do teorema é que mesmo sem conhecermos, até o momento, uma solução exata do modelo de Ising bidimensional na presença de campo magnético, já sabemos de forma rigorosa que não há transição de fase para  $H \neq 0$ . O teorema é independente do número de vizinhos mais próximos de cada sítio, da dimensão do espaço e da topologia da rede.

Posteriormente o teorema do círculo foi generalizado para outros modelos de spins maiores [4] [5], foi também generalizado para modelos ferroelétricos, para certos modelos de Heisenberg e modelos que incluem interações múltiplas entre spins [6], [7]. Para o modelo de Ising sobre diagramas de Feynman com vértices cúbicos (rede dinâmica) há uma prova válida no limite termodinâmico e para baixas temperaturas em [8]. Para o modelo de Ising unidimensional de spin 1/2 sobre anéis conexos e desconexos [9] a prova

é válida para número de spins finito.

Para temperaturas acima da temperatura crítica os zeros não tendem ao eixo real positivo no limite termodinâmico. Entretanto mesmo para  $T > T_c$  observa-se um comportamento crítico típico de transição de fase de 2ª ordem para a densidade de zeros em torno de certos pontos especiais no plano complexo  $u$  conhecidos como singularidades da ponta de Yang e Lee. Para modelos unidimensionais solúveis via matriz de transferência essa transição corresponde a dupla degenerescência do maior autovalor da matriz de transferência. Próxima a tais pontos a densidade de zeros tem um comportamento tipo potência, com um expoente crítico conhecido como  $\sigma$ . Acredita-se que o expoente crítico seja universal e independe da temperatura para sistemas clássicos de spin com interações de alcance finito.

A universalidade desse expoente crítico reside na sua independência dos detalhes da rede e do modelo estatístico, dependendo somente da dimensão do espaço e das simetrias do modelo. Usando técnicas de grupo de renormalização é possível mostrar, por exemplo, que  $\sigma = -1/2$  em uma dimensão [10]. Até onde sabemos não há, em geral, prova analítica direta a partir das soluções dos modelos em mecânica estatística de que  $\sigma = -1/2$  para modelos unidimensionais mesmo quando há soluções via matriz de transferência como admite M. E. Fisher em [11]. Existem demonstrações na literatura [11], [12] para modelos de spins, que incluem o modelo BEG<sup>1</sup>[13], para o caso em que o campo magnético é puramente imaginário, entretanto tais demonstrações admitem que na região livre de zeros os autovalores da matriz de transferência são reais, mas essa hipótese não é óbvia, vide [11]. Nossos cálculos numéricos na rede estática (1 anel conexo) e na dinâmica (anéis conexos e desconexos) indicam  $\sigma \approx -1/2$  até mesmo quando o campo magnético não é puramente imaginário, o que é um dos resultados originais deste trabalho.

Nesta dissertação usaremos como rede dinâmica os diagramas de Feynman da teoria de campos, que no caso unidimensional correspondem a anéis conexos e desconexos. O uso de tais redes dinâmicas tem sua origem nos modelos de matrizes hermitianas aleatórias sugeridos em [14], [15]. Esses modelos por sua vez aparecem no contexto da quantização da gravidade bidimensional.

A investigação dos zeros de Yang e Lee sobre redes dinâmicas do tipo diagramas de Feynman começou em [16] e continuou em [17], [18], [19], [8], [9]. Neste último foram estudados os zeros de Yang e Lee do modelo Blume-Capel sobre anéis conexos e não

---

<sup>1</sup>Nesta dissertação escreveremos modelo BEG no lugar de modelo de Blume-Emery-Griffiths

conexos. O comportamento crítico da densidade próxima a singularidade de Yang e Lee também foi estudado sobre diagramas de Feynman com vértices cúbicos, mas somente para modelo de Ising bidimensional de spin 1/2 em [18].

Aqui vamos estudar os zeros do modelo de Blume-Emery-Griffiths [13] sobre anéis conexos e desconexos (diagramas de Feynman). Os autores de [9] verificaram, para o modelo de Blume-Capel, que o limite da validade do teorema do círculo estava diretamente relacionado com a energia do estado fundamental do sistema, então vamos investigar se essa condição continua sendo válida para o modelo BEG.

A escolha de modelos unidimensionais que não apresentam transições de fase reais é uma tentativa de obtermos resultados exatos para redes dinâmicas, que possam ser generalizados para dimensões maiores da mesma forma que o teorema do círculo de Yang e Lee é válido para qualquer dimensão.

É interessante notar que para modelos que apresentam transições de fases reais, modelos bidimensionais ou em dimensões maiores, pode-se obter a ordem da transição de fase a partir da densidade dos zeros, vide [3]. A transição será de primeira ordem se a densidade linear de zeros, na vizinhança do ponto de transição, tender a um valor diferente de zero e a transição será de segunda ordem se na vizinhança do ponto de transição a densidade linear de zeros tender a zero no limite termodinâmico.

Escolhemos o modelo BEG pois ele possui simetria  $Z_2$  ( $H \rightarrow -H$ ) e engloba diversos outros modelos, como o Ising de spin 1/2 e spin 1, o modelo de Blume-Capel, o modelo de Potts de 3 estados e outros ainda [7].

No capítulo 2 faremos uma revisão sobre o modelo de Ising de spin 1/2 sobre anéis conexos, calcularemos a posição exata dos zeros e calcularemos o expoente crítico da densidade na ponta do arco dos zeros de Yang e Lee. Já no capítulo 3 revisaremos o modelo de Ising de spin 1/2 sobre anéis conexos e desconexos, os resultados obtidos nestes dois capítulos já são conhecidos e nos servirão como referências para futuros cálculos. No capítulo 4 introduziremos o modelo BEG sobre anéis conexos, estudaremos alguns submodelos que são englobados pelo modelo BEG, vamos obter alguns resultados analíticos que nos informam de forma exata exata e aproximada sobre a validade do teorema do círculo para os zeros de Yang e Lee, calcularemos a densidade dos zeros de Yang e Lee e o expoente crítico  $\sigma$  numericamente para zeros<sup>2</sup> na  $S^1$  e fora da  $S^1$  e por último vamos verificar se existe alguma relação entre os mínimos da energia e a validade do teorema

---

<sup>2</sup>Nesta dissertação usaremos  $S^1$  para circunferência de raio um e TS1 como abreviatura para o teorema do círculo de Yang-Lee [2].

do círculo. No capítulo 5 vamos estudar os zeros do modelo BEG sobre anéis conexos e desconexos e comparar a posição dos zeros em redes estáticas com redes dinâmicas. Além disto, ainda vamos calcular a função de partição sobre anéis conexos e desconexos via ponto de sela. Finalmente no capítulo 6 tiramos algumas conclusões.

# Capítulo 2

## Zeros do modelo de Ising de spin 1/2 unidimensional

### 2.1 Posição dos zeros de Yang-Lee

O modelo de Ising foi sugerido há muito tempo atrás [20] para simular o comportamento ferromagnético. Esse modelo é um arranjo de  $n$  pontos fixos chamados sítios, que formam uma rede. Associado a cada sítio da rede temos uma variável de spin  $S_i$ , que vale  $+1$  ou  $-1$ . Se  $S_i = +1$  falamos que o  $i$ ésimo sítio tem spin para cima e se  $S_i = -1$  o  $i$ ésimo sítio tem spin para baixo, por essa razão o modelo de Ising de spin 1/2 também é conhecido como modelo binário. Um dado conjunto de números  $\{S_i\}$  para todos os sítios especifica a configuração do sistema. A energia do sistema, sob a ação de um campo externo  $H$ , supostamente homogêneo, em uma configuração especificada por  $\{S_i\}$  é definida por

$$E(\{S_i\}) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - H \sum_{i=1}^n S_i \quad (2.1)$$

onde a soma  $\sum_{\langle ij \rangle}$  se estende sobre todas as conexões entre pares de spins mais próximos conhecidos como primeiros vizinhos. Essa soma contém  $\gamma \frac{n}{2}$  termos, onde  $\gamma$  é o número de vizinhos mais próximos de um dado sítio. Para o caso unidimensional, com condições de contorno periódicas  $S_{n+j} = S_j$ , cada sítio possui apenas dois vizinhos mais próximos formando uma cadeia em forma de um anel conexo e portanto  $\gamma = 2$ . As constantes de

acoplamento  $J_{ij}$  definem a intensidade da interação entre os vizinhos mais próximos. No caso geral a função partição do modelo é dada por:

$$Z_n = \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta E(\{S_i\})) = \sum_{\{S_i\}} \exp\left(\beta \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j + \beta H \sum_{i=1}^n S_i\right) \quad (2.2)$$

Definindo  $n_+$  e  $n_-$  como o número de sítios com spin para cima e para baixo respectivamente, podemos calcular  $Z_n$  em duas etapas. Primeiro somamos sobre todas as configurações de  $n$  spins com  $n_-$  spins para baixo e no final somamos sobre  $n_-$  de zero a  $n$ . Lembrando que  $\sum_{i=1}^n S_i = n_+ - n_- = n - 2n_-$  escrevemos:

$$Z_n = e^{n\beta H} \sum_{n_-=0}^n e^{-2\beta H n_-} Z_n(n_-, H = 0) \quad (2.3)$$

Com  $Z_n(n_-, H = 0)$  sendo a função partição do modelo de Ising de  $n$  spins a campo nulo tal que  $n_-$  spins apontem para baixo. Definindo  $\beta H = h$ , introduzindo a variável  $u = \exp(-h)$  descrevemos  $Z_n$  a partir de um polinômio  $P_{2n}(u)$  na variável  $u$ :

$$Z_n = u^{-n} \sum_{n_-=0}^n u^{2n_-} Z_n(n_-, H = 0) \equiv u^{-n} P_{2n}(u) \quad (2.4)$$

Dessa forma vemos que  $Z_n$  é completamente determinada pela posição dos  $2n$  zeros  $P_{2n}(u_k) = 0$ ,  $k = 1, 2, \dots, 2n$ , na variável  $u$  ou dos  $n$  zeros na variável  $u^2$  que é chamada de fugacidade. Esse nome se justifica ao fazermos uma analogia com um gás de rede cujo volume do recipiente  $V$  é dividido em células onde podemos ter uma ou nenhuma molécula, correspondendo a um sítio com spin para baixo ou para cima. Como cada molécula tem um volume finito  $V_m$  temos  $V/V_m$  células. Dessa forma  $Z_n$  poderá ser interpretada, a menos do fator multiplicativo  $u^{-n}$  em (2.4), como a função grande partição desse gás de rede se identificarmos  $u^2$  com  $z = e^{\beta\mu}$  e  $n$  com  $V/V_m$ , para mais detalhes dessa analogia vide [2].

Algumas características gerais dos zeros  $u_k$ , chamados zeros de Yang-Lee, podem ser obtidas facilmente. Primeiro, como os coeficientes do polinômio  $P_{2n}(u)$  são funções de partição reais e positivas os zeros jamais serão encontrados no semi-eixo real positivo,

$u_k \notin \mathfrak{R}_+$ , estes serão em geral complexos ou reais negativos. Como  $u = \exp(-h)$ , isso significa que os zeros de  $Z_n$  correspondem a valores complexos do campo magnético. Além disso, se  $P_{2n}(u_k) = 0$  teremos também seu complexo conjugado como um zero  $P_{2n}(u_k^*) = 0$ . Outra propriedade vem da simetria  $Z_n(H) = Z_n(-H)$ . Se  $P_{2n}(u_k) = 0$  teremos o inverso também como um zero:  $P_{2n}(1/u_k) = 0$ . Essa última propriedade foi usada na demonstração em [2] do teorema do círculo de Yang-Lee, que abreviaremos por TS1, que afirma: **Se os acoplamentos entre vizinhos mais próximos forem todos do tipo ferromagnético  $J_{ij} > 0$  então  $|u_k| = 1$  para  $k = 1, 2, \dots, 2n$ .** Ou seja, no plano complexo de  $u$ , para qualquer temperatura, teremos  $u_k \in S^1$ . O teorema é bastante robusto e independe da dimensão do espaço ( $d$ ), do número de sítios ( $n$ ), do número de primeiros vizinhos ( $\gamma$ ) e do formato e topologia da rede. O teorema não é válido para acoplamentos anti-ferromagnéticos ( $J_{ij} < 0$ ) que normalmente levam os zeros para o semi-eixo real negativo ( $\mathfrak{R}_-$ ).

Deste ponto em diante, salvo menção contrária, consideraremos apenas modelos com acoplamento homogêneo  $J_{ij} = J$  para qualquer par  $\langle ij \rangle$ . Como introdução ao modelo BEG 1D cujos zeros serão investigados nesta dissertação apresentaremos inicialmente uma revisão sobre os zeros do modelo de Ising unidimensional com condições periódicas de contorno que corresponde a uma cadeia (anel conexo) de  $n$  spins, onde cada spin interage somente com dois de seus vizinhos mais próximos e com um campo magnético externo constante. Nesse exemplo simples pode-se achar exatamente os zeros de Yang-Lee, inclusive sua densidade sobre  $S^1$  como veremos adiante. Partiremos da solução tradicional via matriz de transferência, vide por exemplo [21].

Definindo  $\beta J = j$ , em analogia a  $\beta H = h$ , podemos reescrever a função de partição do modelo como:

$$Z_n = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \dots \sum_{S_n=\pm 1} \prod_{i=1}^n \left[ e^{jS_i S_{i+1} + h \frac{(S_i + S_{i+1})}{2}} \right] = \text{Tr} \mathbf{T}^n \quad (2.5)$$

Onde a matriz de transferência  $T(S_i, S_{i+1}) = e^{jS_i S_{i+1} + h \frac{(S_i + S_{i+1})}{2}}$  é:

$$T = \begin{pmatrix} \exp(j+h) & \exp -j \\ \exp -j & \exp(j-h) \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Diagonalizando a matrix  $\mathbf{T}$  podemos escrever  $Z_n = \lambda_+^n + \lambda_-^n$  onde  $\lambda_+$  e  $\lambda_-$  são os auto-

valores da matriz de transferência obtidos a partir da equação secular  $\det(T - \lambda I) = 0$ . Introduzindo a variável  $c = e^{-J}$ , o intervalo não compacto de temperatura  $0 \leq T < \infty$  corresponderá ao intervalo compacto  $0 \leq c \leq 1$  se o acoplamento for ferromagnético ( $J > 0$ ), do contrário, acoplamento anti-ferromagnético ( $J < 0$ ) teremos ainda um intervalo não compacto  $c \geq 1$  respectivamente. Redefinindo os autovalores  $\tilde{\lambda}_{\pm} = c\lambda_{\pm}$  temos:

$$Z_n = c^{-n} (\tilde{\lambda}_+^n + \tilde{\lambda}_-^n) \quad (2.7)$$

Com  $\tilde{\lambda}_{\pm}$  obtidos a partir da equação secular:

$$\tilde{\lambda}^2 - 2 \cosh(h) \tilde{\lambda} + (1 - c^4) = 0 \quad (2.8)$$

Cujas soluções são:

$$\tilde{\lambda}_{\pm} = \cosh(h) \pm \sqrt{\cosh^2(h) - (1 - c^4)} \quad (2.9)$$

$$\lambda_{\pm} = c \left[ \cosh(h) \pm \sqrt{\cosh^2(h) - (1 - c^4)} \right] \quad (2.10)$$

Para os casos em que  $n = 1$  e  $n = 2$  sítios, lembrando que  $u = e^{-h}$ , temos:

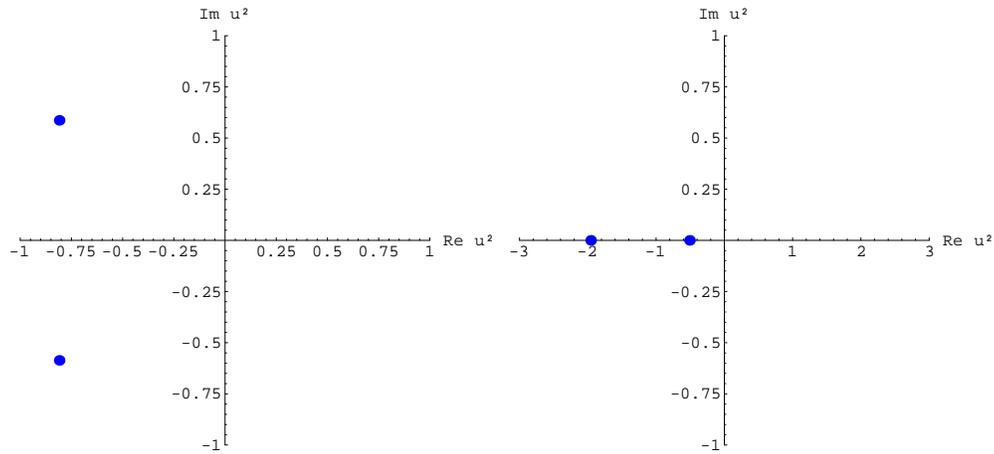
$$Z_1 = \frac{1}{cu} (u^2 + 1) \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} Z_2 &= \frac{1}{c^2 u^2} [u^4 + 2c^4 u^2 + 1] \\ &= \frac{P_4(u)}{c^2 u^2} \end{aligned} \quad (2.12)$$

A função de partição (2.12) é um polinômio nas variáveis  $u$  e  $c$ . Para  $n$  spins,  $Z_n$  será proporcional a um polinômio de grau  $n$  na fugacidade  $u^2$ . Achando os zeros de  $Z_2$  em relação a  $u^2$ , temos

$$u_{\pm}^2 = -c^4 \pm i\sqrt{1-c^8} \quad (2.13)$$

Para o caso ferromagnético ( $J > 0$ ) temos que  $0 \leq c \leq 1$ , então as soluções para  $u^2$  são pares complexo conjugados de módulo um, em acordo com o teorema do círculo de Yang-Lee, como mostra a figura 2.1(a), para  $c = 0.9$ . Já para o caso antiferromagnético ( $J < 0$ ) temos que  $1 \leq c < \infty$ , então as soluções para  $u^2$  serão números reais negativos como ocorre tipicamente para acoplamentos anti-ferromagnéticos, vide a figura 2.1(b) para  $c = 0.9$ . Neste trabalho estaremos interessados somente no caso ferromagnético,  $J > 0$ .



(a) Zeros de Yang-Lee para  $J > 0$  (ferromagnético)

(b) Zeros de Yang-Lee para  $J < 0$  (antiferromagnético)

Figura 2.1: Zeros de Yang-Lee para o modelo de Ising de spin 1/2 com  $n = 2$  e  $c = 0.9$ , para o caso ferromagnético e antiferromagnético

Podemos obter a posição exata dos zeros do modelo de Ising unidimensional de spin 1/2 para valores arbitrários do número de sítios  $n$  e da temperatura. Impondo  $Z_n = 0$  de (2.7) temos:

$$\tilde{\lambda}_+ = (-1)^{1/n} \tilde{\lambda}_- = \exp \frac{i(2k-1)\pi}{n} \tilde{\lambda}_- \quad , \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (2.14)$$

A equação (2.14) garante que  $|\tilde{\lambda}_+| = |\tilde{\lambda}_-|$ . Por outro lado da eq. secular (2.8) temos

$$\tilde{\lambda}_+ \tilde{\lambda}_- = 1 - c^4 \quad (2.15)$$

$$\frac{\tilde{\lambda}_+ + \tilde{\lambda}_-}{2} = \cosh(h) \quad (2.16)$$

De (2.14) e (2.15) temos

$$\tilde{\lambda}_\pm = \sqrt{1 - c^4} \exp\left(\pm \frac{i(2k-1)\pi}{2n}\right) \quad (2.17)$$

De volta em (2.16) encontra-se finalmente:

$$\cosh h_k = \sqrt{1 - c^4} \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n} \quad (2.18)$$

O lado direito da equação (2.18) será sempre um número real entre  $-1$  e  $1$ . Dessa forma, para a igualdade (2.18) ser verdadeira, o campo magnético  $h$  terá que assumir valores puramente imaginários. Então, podemos escrever  $h$  como  $h_k = i\alpha_k$  e  $|u_k| = |e^{-i\alpha_k}| = 1$ , assim os zeros da função de partição estarão na  $S^1$  em acordo com o teorema do círculo de Yang-Lee. Onde:

$$\cos \alpha_k = \sqrt{1 - c^4} \cos \theta_k \quad (2.19)$$

$$\theta_k = \frac{(2k-1)\pi}{2n} \quad (2.20)$$

Mudando de variáveis para a fugacidade  $u_k^2 = e^{-2h_k} = e^{-2i\alpha_k} \equiv e^{-i\beta_k}$ , com  $\beta_k \equiv 2\alpha_k$ . Logo de (2.18) temos:

$$\cos \beta_k = \cos 2\alpha_k = 2(1 - c^4) \cos^2 \theta_k - 1 = (1 - c^4) \cos \frac{(2k-1)\pi}{n} - c^4 \quad (2.21)$$

Esses zeros são conhecidos por zeros de Yang-Lee, estão distribuídos sobre parte da circunferência de raio um, no plano complexo  $u^2$  (figura 2.2) ou no eixo imaginário no plano complexo  $h$  (figura 2.3). Esses aparecem em pares de complexos conjugados, uma

característica desses zeros é, como esperado, que eles não aparecem no semi-eixo real positivo. Os zeros tendem no limite termodinâmico ( $n \rightarrow \infty$ ) a se acumular em determinado ponto e esse ponto é determinado por um ângulo limite, para encontrar esse ângulo basta tomar o limite termodinâmico na equação (2.21) com  $k=1$  que corresponde ao par de zeros mais próximo do eixo real positivo.

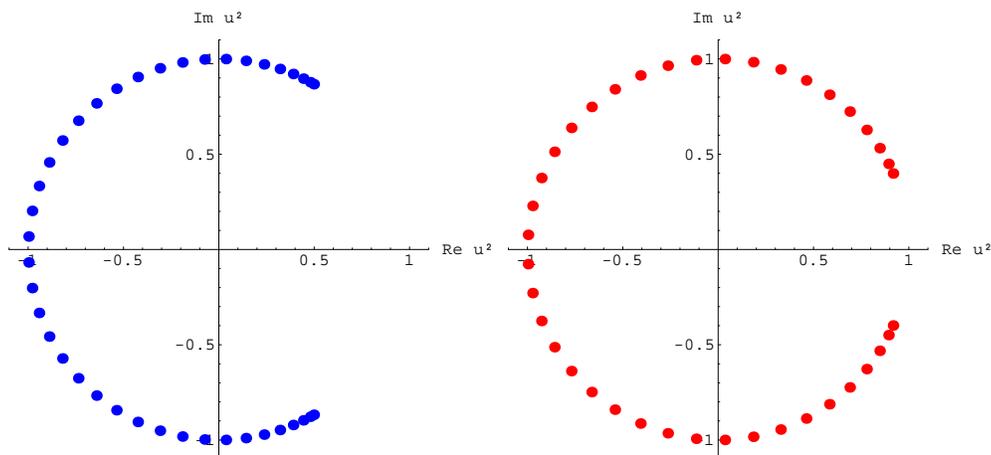
$$\cos \beta_E = \lim_{n \rightarrow \infty} \cos \beta_1 = 1 - 2c^4 \quad (2.22)$$

O índice  $E$  indica a ponta do arco ("Edge"). Esse resultado é importante, pois ele nos diz que o arco de circunferência só tocará no semi-eixo real positivo do plano complexo  $u^2$ , isto é  $\cos \beta_E = 1$  ( $h = 0$ ), quando a temperatura for zero,  $c = 0$ . Alternativamente tomando  $c = 0$  em (2.21) temos  $\cos \beta_1 = \cos \pi/n$ . Como os zeros da função de partição significam pontos de ramificação da energia livre, à medida que  $n$  aumenta teremos singularidades cada vez mais próximas de  $h = 0$ , ou seja, se fizermos uma bola em volta do ponto  $h = 0$  (ou  $\cos \beta = 1$ ), por menor que seja, sempre haverá pontos singulares no seu interior quando aumentamos  $n$ . Isto quer dizer que a energia livre será uma função não analítica em  $h = 0$  no limite termodinâmico, o que indica transição de fase em  $h = 0$ . Como não existe outro ponto de acúmulo para  $T > 0$  o modelo só possui uma transição de fase em  $T = 0$  (trivial) que é bem conhecida para o modelo de Ising unidimensional (vide por exemplo [22]). Esse resultado está de acordo com o teorema de van Hove [23], que diz que modelos unidimensionais com interações de curto alcance não apresentam transição de fase. Isso quer dizer que não era esperado nenhum ponto de acumulação de zeros no semi-eixo real positivo para qualquer  $T > 0$ .

Esse resultado também está de acordo com o argumento de Landau [24], esse argumento mostra que não existe um estado ordenado em sistemas unidimensionais com interações de curto alcance. Para explicarmos o argumento, vide por exemplo [21], consideramos o modelo de Ising unidimensional, com campo nulo e com  $n$  spins ou para cima ou para baixo. Ao invertermos os spins de uma determinada região do sistema, criando duas regiões de orientações opostas, temos um gasto de energia pequeno e uma variação grande na entropia do sistema, então para  $n$  grande, temos uma variação negativa na energia livre ( $\Delta G = \Delta U - T\Delta S = 2J - K_B T \ln(n-1)$ ). Portanto, existe uma tendência de criação de domínios, que impede a estabilidade de qualquer fase ordenada no sistema. O mesmo argumento não se aplica para o modelo bidimensional, pois ao tentarmos trocar a direção dos spins numa determinada região do sistema e criarmos regiões de direções

opostas, temos um gasto de energia alto e a variação de entropia também será alta, então o sinal da variação da energia livre não está definido a princípio.

Obtivemos alguns zeros numericamente usando o software Mathematica e a fórmula (3.30) a ser deduzida no próximo capítulo para diferentes valores da temperatura  $c$ . A figura 2.2 nos fornece os zeros de Yang-Lee no plano complexo da fugacidade, para 40 spins. Os pontos em azul (figura 2.3(a)) são para  $c = 0.5$  e os pontos em vermelho (figura 2.3(b)) são para  $c = 0.2$ , podemos notar que os zeros tendem a se aproximar do eixo real positivo quando a temperatura diminui. Esses resultados serão importantes, porque eles servirão como referência para os nossos cálculos numéricos em modelos mais complexos uma vez que podemos comparar os resultados numéricos com os zeros analíticos dados em (2.19) ou (2.21). Notamos que a diferença ocorre no décimo nono algarismo significativo.



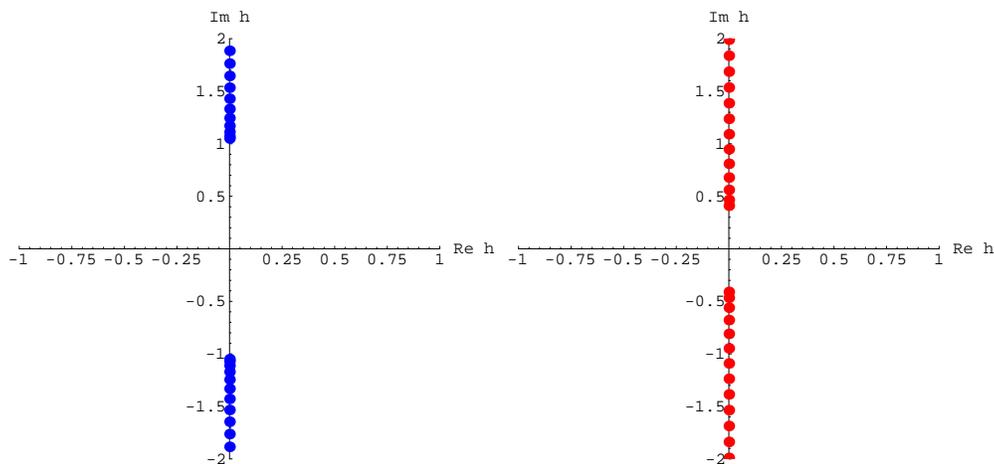
(a) Zeros de Yang-Lee para  $c = 0.5$

(b) Zeros de Yang-Lee para  $c = 0.2$

Figura 2.2: Zeros de Yang-Lee do modelo de Ising unidimensional no plano complexo  $u^2 = e^{-2h}$  com  $n = 40$  spins.

Alternativamente, representamos os mesmos zeros de Yang-Lee mostrados na figura 2.2 também no plano complexo de  $h$ , como mostra a figura 2.3. Podemos notar que quanto menor a temperatura, o acumulo dos zeros ocorre mais próximo da origem, ou seja, para  $c \rightarrow 0$  temos  $h_1 \rightarrow 0$ , indicando a transição de fase à temperatura nula (trivial).

A figura 2.3 deixa clara a não trivialidade do teorema do círculo de Yang-Lee. Não há motivo aparente para que, mesmo sabendo da existência de uma transição de fase em



(a) Zeros do modelo de Ising no plano complexo de  $h$  para  $c = 0.5$

(b) Zeros do modelo de Ising no plano complexo de  $h$  para  $c = 0.2$

Figura 2.3: Zeros do modelo de Ising unidimensional no plano complexo de  $h$  com  $n = 40$  spins.

$H = 0$  e  $T = 0$ , os zeros migrem para a origem, quando  $T \rightarrow 0$ , justamente através do eixo imaginário. A figura 2.3 não mostra todos os zeros apenas por uma questão de espaço, existem mais zeros para cima e para baixo do eixo  $\text{Im } h$ .

## 2.2 Zeros de Fisher

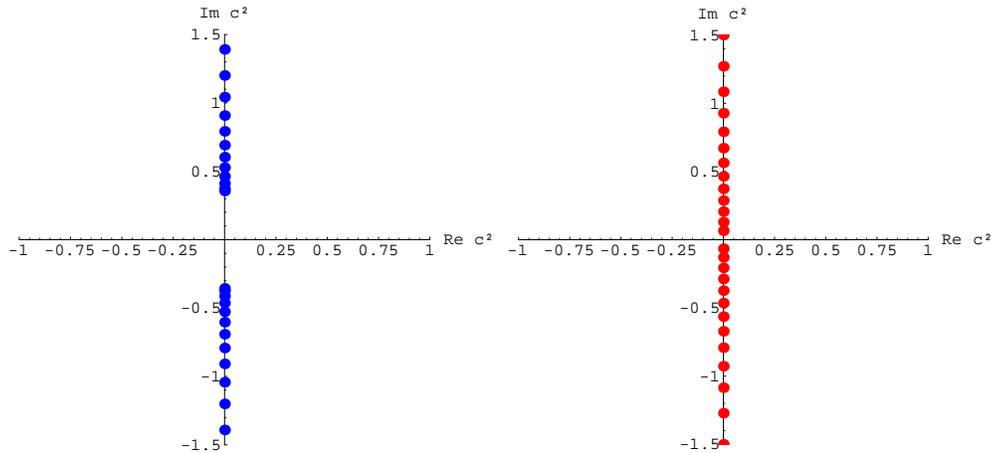
Yang e Lee estudaram a distribuição dos zeros da função de partição para campos magnéticos complexos, mas para temperaturas reais. Já Fisher [25] estudou os zeros da função de partição para temperaturas complexas, mas com campos magnéticos reais.

Nesse caso a equação dos zero (2.18) fornece:

$$c^2 = \pm i \sqrt{\frac{\cosh^2 h}{\cos^2 \frac{k\pi}{2n}} - 1} \quad (2.23)$$

como agora  $h \in \Re$  temos que  $\cosh h$  é maior que um e como  $\cos^2 \frac{k\pi}{2n}$  está entre zero e um, podemos concluir que  $\frac{\cosh^2 h}{\cos^2 \frac{k\pi}{2n}}$  é um número real maior que um, então  $c_k^2 = e^{-\frac{2J}{k_B T_k}}$  será

puramente imaginário. Todos os zeros estarão distribuídos no eixo imaginário do plano complexo da variável  $c^2 = e^{-2j}$  e como sabemos que no modelo de Ising unidimensional só ocorre a transição de fase trivial, para  $T = 0$  ( $c = 0$ ) devemos esperar que haja um acúmulo dos zeros perto da origem. Para  $h = 0$  ( $u = 1$ ) fizemos alguns cálculos numéricos de zeros para confirmar esse resultado, fizemos para  $n = 40$  sítios e para diferentes campos magnéticos  $h = -\ln u$ . Temos dois exemplos na figura 2.4, os azuis, figura 2.4(a), são dados para  $u = 0.2$  e os zeros vermelhos, figura 2.4(b), para  $u = 0.9$ , novamente alguns zeros não aparecem por uma questão de espaço. Podemos perceber que os zeros se acumulam mais próximos da origem para campo magnéticos menores. Esses resultados encontrados estão de acordo com o resultado analítico (2.23). Com  $c^2 \rightarrow 0$  para  $h = 0$  e  $n \rightarrow \infty$ .



(a) Zeros de Fisher para  $h = 0.5$

(b) Zeros de Fisher para  $h = 0.9$

Figura 2.4: Zeros de Fisher para o modelo de Ising unidimensional no plano complexo  $c^2$  com 40 zeros.

## 2.3 Densidade de zeros de Yang-Lee

Na figura 2.2 vemos que os zeros de Yang-Lee tendem a se acumular nas pontas do arco de circunferência  $\cos \beta \leq \cos \beta_1$ . Para número finito de spins definimos uma densidade linear de zeros normalizada:  $\rho(\beta) = (1/n) \sum_{k=1}^n \delta(\beta - \beta_k)$ . No limite termodinâmico  $n \rightarrow \infty$

é possível deduzir uma função contínua para  $\rho(\beta)$  como veremos a seguir. Primeiramente já sabemos que não haverão zeros na lacuna angular  $-\beta_E < \beta < \beta_E$ , ou seja:

$$\rho(\beta) = 0, \quad \text{para } \cos \beta > \cos \beta_E \quad (2.24)$$

Por outro lado, tomando o limite do contínuo da distribuição discreta dos zeros para  $\cos \beta \leq \cos \beta_E$  obteremos  $\rho(\beta)$  neste intervalo. Ao variarmos  $k \rightarrow k + 1$  em (2.19), para  $n$  grande, teremos, em primeira ordem, a variação:

$$d(\cos \alpha_k) = -\frac{\pi}{n} \operatorname{sen} \frac{(2k-1)\pi}{2n} \sqrt{1-c^4} \quad (2.25)$$

E portanto, usando (2.19) novamente,

$$\begin{aligned} d\alpha_k &= \frac{\pi \operatorname{sen}((2k-1)\pi/2n)}{n \operatorname{sen} \alpha_k} \sqrt{1-c^4} \\ &= \frac{\pi}{n \operatorname{sen} \alpha_k} \sqrt{1-c^4} \sqrt{1 - \frac{\cos^2 \alpha_k}{1-c^4}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

O módulo da variação angular (2.26) corresponde ao comprimento do arco de circunferência entre o  $k$ -ésimo e o  $(k+1)$ -ésimo zero de Yang-Lee no plano complexo de  $u$ . Portanto se tivéssemos uma densidade linear de zeros  $\tilde{\rho}_n(\alpha)$ , com a normalização  $\int_0^{2\pi} d\alpha \tilde{\rho}_n(\alpha) = n$ , deveríamos ter correspondentemente  $\tilde{\rho}_n(\alpha) |d\alpha| = 1$ , com  $|d\alpha|$  obtido na equação (2.26) ao passarmos de  $k$  para  $k+1$ . Ou seja, a densidade é o inverso da distância de separação entre dois zeros consecutivos ao longo da curva a qual pertencem

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_n(\alpha) &= \frac{1}{|d\alpha|} = \frac{n}{\pi \sqrt{1-c^4 - \cos^2 \alpha}} \\ &= \frac{n}{\pi \sqrt{\sin^2 \alpha - \sin^2 \alpha_E}} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Acima usamos, vide (2.19), que  $\cos \alpha_E = \lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_1 = \sqrt{1-c^4}$  e portanto  $c^4 = \sin^2 \alpha_E$ . Voltando ao plano complexo da fugacidade  $u^2 = e^{-i\beta}$  onde  $\beta = 2\alpha$ . Usando  $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$  e dividindo por  $n$  para normalizar  $\int_0^{2\pi} d\beta \rho(\beta) = 1$  teremos:

$$\rho(\beta) = \frac{\tilde{\rho}_n(\alpha = \beta/2)}{2n} = \frac{1}{2\pi} \frac{|\operatorname{sen} \beta/2|}{\sqrt{\sin^2 \beta/2 - \sin^2 \beta_E/2}} \quad (2.28)$$

com  $\cos \beta \leq \cos \beta_E$ . A expressão (2.28) reproduz o resultado obtido há muito tempo atrás em [2]. Expandindo em torno da ponta do arco.

$$\operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \approx \operatorname{sen} \frac{\beta_E}{2} + \frac{(\beta - \beta_E)}{2} \cos \frac{\beta_E}{2} \quad (2.29)$$

mostramos que a densidade diverge nas pontas com um expoente  $\sigma = -1/2$ , isto é,

$$\rho(\beta) \sim (\beta - \beta_E)^{-1/2} \quad (2.30)$$

Foi mostrado em [26] que as pontas do arco  $u_E = e^{\pm i\beta_E}$  tem características de ponto crítico de uma transição de 2ª ordem e o expoente  $\sigma$  é um dos seus expoentes críticos característicos. É dito na literatura, vide [27], que  $\sigma$  depende apenas da dimensão do espaço. Para o modelo de Ising 2D temos  $\sigma = -1/6$  [28] enquanto que em 1D, espera-se que  $\sigma = -1/2$  (vide [10], [11], [12]).

Neste trabalho calcularemos  $\sigma$  numericamente no modelo BEG unidimensional mesmo quando os zeros de Yang-Lee não estejam na  $S^1$  e não sejam conhecidos de forma exata. O cálculo será feito a partir dos zeros obtidos numericamente. Assim, para  $n$  grande, supomos que os zeros estejam sobre uma certa curva ( $u_k \in C$ ). Assumindo que o comprimento da curva entre dois zeros consecutivos seja, próximo às pontas do arco, aproximadamente igual a:

$$|du_k| = |u_{k+1} - u_k| \quad (2.31)$$

obteremos a densidade no ponto médio, vide [27],  $\bar{u}_k = (u_{k+1} + u_k)/2$  de forma análoga a (2.27), ou seja, como inverso da distância entre os zeros. Normalizando temos:

$$\rho(\bar{u}_k) = \frac{1}{n|u_{k+1} - u_k|} \quad (2.32)$$

É possível obter  $\sigma$  através de um ajuste numérico da curva  $\rho(u)$ . Calculamos  $\sigma$  numericamente também através de relações de escala de tamanho finito.

# Capítulo 3

## Modelo de Ising de spin 1/2 sobre diagramas de Feynman

Neste capítulo vamos obter uma representação integral para a função partição do modelo de Ising de spin 1/2 sobre diagramas de Feynman. Inicialmente trataremos o caso de diagramas com vértices de quatro linhas e depois nos restringiremos ao caso unidimensional com vértices de duas linhas. Essas idéias tiveram sua origem na quantização da gravitação em duas dimensões [14], [15].

### 3.1 Modelo de Ising sobre diagramas de Feynman $\phi^4$

Em teoria de campos é conveniente usar uma correspondência entre integrais e gráficos (gráficos de Feynman). Sejam as seguintes integrais Gaussianas [29]:

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_n} \rangle \equiv \frac{\int d^p \phi \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_n} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^p (\phi_{\mu} M_{\mu\nu} \phi_{\nu})}}{\int d^p \phi e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^p (\phi_{\mu} M_{\mu\nu} \phi_{\nu})}} \quad (3.1)$$

onde  $d^p \phi = d\phi_1 d\phi_2 \dots d\phi_p$ . Cada uma das integrais acima vai de  $-\infty$  a  $\infty$  e os índices  $\mu$  e  $\nu$  podem assumir  $p$  valores distintos.  $M$  é uma matriz  $p \times p$ , real, simétrica e definida positiva, de forma que assegure a convergência da integral, admitindo então, a inversa  $M^{-1}$ . O valor esperado (3.1) é invariante sob qualquer permutação dos índices  $\mu_1 \mu_2 \dots \mu_n$ .

É fácil provar as seguintes propriedades (lema de Wick):

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_{2n+1}} \rangle = 0 \quad (3.2)$$

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \rangle = (M^{-1})_{\mu_1 \mu_2} \quad (3.3)$$

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_{2n}} \rangle = \frac{1}{2^n n!} \sum_p \langle \phi_{\mu_{p_1}} \phi_{\mu_{p_2}} \rangle \dots \langle \phi_{\mu_{p_{2n-1}}} \phi_{\mu_{p_{2n}}} \rangle \quad (3.4)$$

Esses resultados serão demonstrados no Apêndice A. Na relação (3.4) a soma ( $\sum_p$ ) se estende sobre todas as permutações dos  $2n$  índices  $\mu_{p_1}, \dots, \mu_{p_{2n}}$ . Para exemplificar supomos que temos apenas duas variáveis ( $p = 2$ ):  $\phi_1 = \phi_+$ ;  $\phi_2 = \phi_-$ . Então, por exemplo vamos calcular  $\langle \phi_+^4 \phi_-^4 \rangle$ . De (3.4) temos:

$$\langle \phi_+^4 \phi_-^4 \rangle = 24 \langle \phi_+ \phi_- \rangle^4 + 9 \langle \phi_+^2 \rangle^2 \langle \phi_-^2 \rangle^2 + 72 \langle \phi_+ \phi_- \rangle^2 \langle \phi_+^2 \rangle \langle \phi_-^2 \rangle \quad (3.5)$$

Os coeficientes 24, 9 e 72 podem ser facilmente calculados. Por exemplo vamos calcular o coeficiente 9 do termo intermediário. Temos 4 índices do tipo +, isto é,  $a_1, a_2, a_3$  e  $a_4$  e 4 do tipo - como  $b_1, b_2, b_3$  e  $b_4$ . Calculando por exemplo, o número de sequências desses oito índices formados dois a dois de forma que tenhamos dois valores esperados do tipo + e dois do tipo -, ou seja  $\langle a_{i_1} a_{i_2} \rangle \langle a_{i_3} a_{i_4} \rangle \langle b_{i_1} b_{i_2} \rangle \langle b_{i_3} b_{i_4} \rangle$  teremos  $9 \cdot 2^4 \cdot 4!$ , o que explica o fator 9 no termo do meio de (3.5). O fator  $2^4$  vem do fato de podermos trocar a posição dos índices dentro dos 4 valores esperados, enquanto que  $4!$  vem da troca de posição dos 4 valores esperados entre si. Por último, o fator 9 vem de podermos formar 3 pares para cada índice, como por exemplo para o índice  $a_1$  temos:  $\langle a_1 a_2 \rangle$ ,  $\langle a_1 a_3 \rangle$  e  $\langle a_1 a_4 \rangle$ , da mesma forma que temos o índice  $a_1$  e 3 pares correspondentes, temos também 3 pares que envolvem o índice  $b_1$ , o que nos leva a  $3 \times 3 = 9$

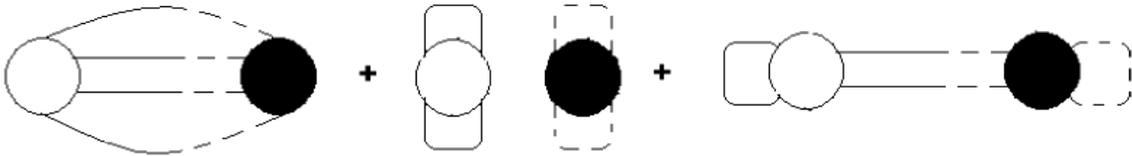


Figura 3.1:  $\langle \phi_+^4 \phi_-^4 \rangle$

Cada termo do lado direito de (3.5) incluindo o fator numérico combinatório, é re-

presentado respectivamente por um dos gráficos da soma que aparece na figura 3.1, onde cada linha que liga um vértice  $\phi_a$  com  $\phi_b$  é associada ao número  $\langle \phi_a \phi_b \rangle$  segundo a legenda:

$$\langle \phi_+ \phi_- \rangle \iff \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \quad (3.6)$$

$$\langle \phi_+^2 \rangle \iff \text{-----} \quad (3.7)$$

$$\langle \phi_-^2 \rangle \iff \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \quad (3.8)$$

Os vértices com bola vazia e cheia representam graficamente  $\phi_+^4$  e  $\phi_-^4$ , que estão no lado esquerdo de (3.5), como mostra a figura 3.2. Os fatores numéricos na frente dos 3 termos



(a) Vértice  $\phi_+^4$       (b) Vértice  $\phi_-^4$

Figura 3.2: Vértice  $\phi_+^4$  e  $\phi_-^4$ .

de (3.5) já estão embutidos nos gráficos da figura 3.1. Do ponto de vista gráfico, cada fator corresponde ao número de maneiras que podemos conectar as linhas dos vértices  $\phi_+^4$  e  $\phi_-^4$  de forma a termos o gráfico em questão.

Ao invés de (3.5) podemos considerar  $\langle (\phi_+^4 + \phi_-^4)^2 \rangle$ :

$$\langle (\phi_+^4 + \phi_-^4)^2 \rangle = \langle \phi_+^4 \phi_+^4 \rangle + \langle \phi_-^4 \phi_-^4 \rangle + 2 \langle \phi_+^4 \phi_-^4 \rangle \quad (3.9)$$

Através de (3.4) mostra-se que (3.9) equivale a expansão diagramática dada pela figura 3.3. Dessa forma vemos que  $\langle (\phi_+^4 + \phi_-^4)^2 \rangle$  corresponde a soma sobre todos os diagramas (conexos e não conexos) de dois vértices onde cada um dos vértices pode ser  $\phi_+^4$  ou  $\phi_-^4$ . Ou

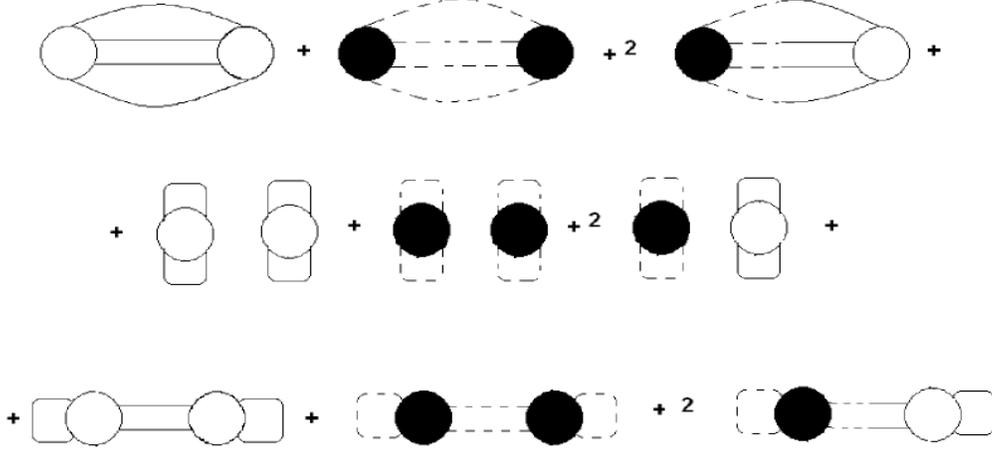


Figura 3.3:  $\langle (\phi_+^4 + \phi_-^4)^2 \rangle$

seja, além de somarmos sobre diagramas somaremos também sobre as duas possibilidades de vértices  $\phi_+^4$  ou  $\phi_-^4$ . Podemos generalizar para  $n$  vértices considerando  $\langle (\phi_+^4 + \phi_-^4)^n \rangle$ .

Para fazer a conexão com a mecânica estatística, vamos considerar a função de partição do modelo de Ising na ausência de campo magnético:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{j \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j} \quad (3.10)$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{j \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + h \sum_{i=1}^n S_i} \quad (3.11)$$

Para cada conexão  $++$ ,  $+-$  ou  $--$ , temos os fatores de Boltzmann  $e^j$ ,  $e^{-j}$  e  $e^j$  respectivamente. Logo se as linhas (propagadores) dos diagramas  $\langle \phi_a \phi_b \rangle$  forem proporcionais aos pesos de Boltzmann  $e^{j S_a S_b}$ , a soma  $\langle (\phi_+^4 + \phi_-^4)^n \rangle$  será proporcional a função de partição do modelo de Ising com campo magnético nulo ( $h = 0$ ) sobre diagramas de Feynman de  $n$  vértices. O campo magnético externo pode ser introduzido da seguinte forma. Cada vértice com spin para cima carrega um fator  $e^h$  e para baixo um fator  $e^{-h}$  na função de partição (2.2), portanto trocando os vértices  $\phi_+^4$  e  $\phi_-^4$  por  $e^h \phi_+^4$  e  $e^{-h} \phi_-^4$  introduzimos o campo magnético:

$$Z_n^{nc} \propto \langle (e^h \phi_+^4 + e^{-h} \phi_-^4)^n \rangle \quad (3.12)$$

onde  $nc$  indica que incluímos diagramas de Feynman não conexos como os da linha intermediária da figura 3.3. Se definirmos a constante de proporcionalidade em (3.12) da forma:

$$Z_n^{nc} = \frac{1}{2^n n!} \langle (e^h \phi_+^4 + e^{-h} \phi_-^4)^n \rangle \quad (3.13)$$

Então podemos definir uma formula simples para a função geratriz das funções de partição  $Z_n^{nc}$ , ou seja, introduzindo uma constante  $g$  arbitrária, temos:

$$G(h, c, g) = \sum_{n=0}^{\infty} g^n Z_n^{nc} \quad (3.14)$$

$$G(h, c, g) = \left\langle \sum_n g^n \left( \frac{e^h \phi_+^4 + e^{-h} \phi_-^4}{2} \right)^n \frac{1}{n!} \right\rangle = \left\langle e^{\frac{g}{2}(e^h \phi_+^4 + e^{-h} \phi_-^4)} \right\rangle \quad (3.15)$$

$$G(h, c, g) = \frac{\int d\phi_+ d\phi_- e^{-\frac{1}{2}[\phi_a M_{ab} \phi_b - g(e^h \phi_+^4 + e^{-h} \phi_-^4)]}}{\int d\phi_+ d\phi_- e^{-\frac{1}{2}[\phi_a M_{ab} \phi_b]}} \quad (3.16)$$

As variáveis  $\phi_{\pm}$  representam os estados de spin  $S_i = \pm 1$  respectivamente. A matriz  $M_{ab}$  é determinada a partir da proporcionalidade entre os propagadores (linhas) e os pesos de Boltzmann para campo nulo ( $h = 0$ ):

$$M_{ab}^{-1} = \langle \phi_a \phi_b \rangle = k e^{j S_a S_b} \quad (3.17)$$

onde  $k$  é uma constante arbitrária a princípio que pode ser reabsorvida numa redefinição de  $g$  (vide (3.16)). Explicitamente temos:

$$(M^{-1})_{ab} = \langle \phi_a \phi_b \rangle = k \begin{pmatrix} \exp j & \exp -j \\ \exp -j & \exp j \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Escolhendo  $k = \frac{c}{1-c^4}$ , a função geratriz se torna [15]:

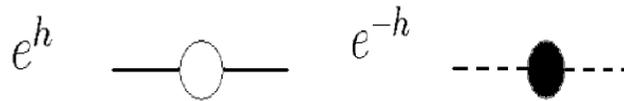
$$G(c, h, g) = \frac{\int d\phi_+ d\phi_- e^{-S_g}}{\int d\phi_+ d\phi_- e^{-S_{g=0}}} \quad (3.19)$$

Com  $S_g = \frac{1}{2}(\phi_+^2 + \phi_-^2 - 2c^2\phi_+\phi_-) - \frac{g}{2}(e^h\phi_+^4 + e^{-h}\phi_-^4)$ . As funções de partição  $Z_n^{nc}$  podem ser calculadas a partir das integrais gaussianas(3.13).

## 3.2 Modelo de Ising 1D sobre anéis conexos e desconexos ( $\phi^2$ )

A função geratriz das funções de partição do modelo de Ising de spin 1/2 unidimensional sobre diagramas de Feynman (anéis conexos e desconexos) pode ser obtida trocando os vértices  $e^{\pm h}\phi_{\pm}^4$  por  $e^{\pm h}\phi_{\pm}^2$  em (3.19), ou seja, de cada vértice agora saem somente duas linhas, como mostra a figura 3.4

$$S_g = \frac{1}{2}(\phi_+^2 + \phi_-^2 - 2c^2\phi_+\phi_-) - \frac{g}{2}(e^h\phi_+^2 + e^{-h}\phi_-^2) \quad (3.20)$$



(a) Vértice  $e^h\phi_+^2$

(b) Vértice  $e^{-h}\phi_-^2$

Figura 3.4: Vértices  $e^h\phi_+^2$  e  $e^{-h}\phi_-^2$ .

No caso unidimensional podemos calcular exatamente a função geratriz a partir de integrais gaussianas obtendo:

$$G(c, h, g) = \left[ \frac{1 - c^4}{P_2(g)} \right]^{1/2} \quad (3.21)$$

onde

$$P_2(g) = c^2 - c \left( \frac{1}{u} + u \right) g + (1 - c^4) g^2 \quad (3.22)$$

Da equação (3.14) podemos escrever  $Z_n^{nc}$  como:

$$Z_n^{nc} = \left\{ \left[ \frac{c^4 - 1}{P_2(g)} \right]^{1/2} \right\}_{g^n} \quad (3.23)$$

Usando a função geratriz dos polinômios de Legendre é possível [9] mostrar que  $Z_n^{nc}(u)$  é proporcional aos polinômios de Legendre  $\mathcal{P}_n(x)$  com  $x = \cosh(h)/\sqrt{1 - c^4}$ :

$$Z_n^{nc} \propto \mathcal{P}_n \left[ \cosh(h)/\sqrt{1 - c^4} \right] \quad (3.24)$$

Como os zeros dos polinômios de Legendre  $\mathcal{P}_n(x_k) = 0$  satisfazem  $-1 < x_k < 1$ , teremos  $-1 < \cosh(h) < 1$  e mostra-se que os zeros do modelo de Ising 1D sobre anéis desconexos estarão na  $S^1$  generalizando o TS1 para uma rede dinâmica (vide [9]).

A generalização do TS1 para redes dinâmicas, onde devemos somar também sobre os diagramas de Feynman, não é trivial. Para entendermos esse ponto é importante esclarecer a relação exata entre as funções de partição na rede dinâmica ( $Z_n^{nc}$ ) e as usuais ( $Z_n$ ). De (3.23) é fácil ver:

$$Z_1^{nc} = \frac{c}{1 - c^4} \frac{Z_1}{2} \quad (3.25)$$

Um fator  $c/(1 - c^4)$  aparecerá para cada propagador (conexão) presente no gráfico uma vez que escolhemos  $k = c/(1 - c^4)$  em (3.17). O fator 2 no denominador corresponde a  $2^n n!$  com  $n = 1$ . Para  $n = 2$  e  $n = 4$  por exemplo temos:

$$Z_2^{nc} = \left[ \frac{c}{1 - c^4} \right]^2 \left[ \frac{Z_2}{4} + \frac{Z_1^2}{8} \right] \quad (3.26)$$

$$Z_4^{nc} = \left[ \frac{c}{1 - c^4} \right]^4 \left[ \frac{Z_4}{8} + \frac{Z_3 Z_1}{12} + \frac{Z_2^2}{16} + \frac{Z_2 Z_1^2}{16} + \frac{Z_1^4}{384} \right] \quad (3.27)$$

Esses resultados correspondem aos diagramas da figura 3.5. Do lado mais à esquerda de

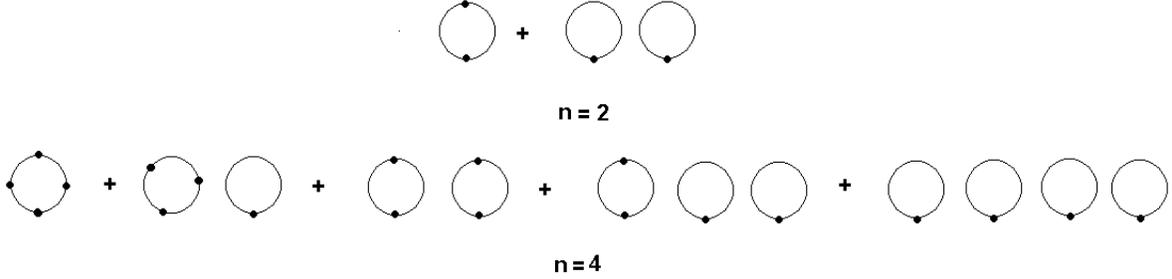


Figura 3.5: Diagramas de Feynman para  $Z_2^{nc}$  e  $Z_4^{nc}$

cada uma das linhas da figura 3.5 temos o diagrama correspondente ao modelo de Ising 1D usual (conexo). Na figura 3.5 não especificamos a soma sobre os dois tipos de vértice  $e^h \phi_+^2$  e  $e^{-h} \phi_-^2$  que está subentendida.

As frações numéricas que aparecem em (3.26) e (3.27) correspondem ao fator  $A_n/(2^n n!)$ . O fator  $1/(2^n n!)$  veio da nossa definição para  $Z_n^{nc}$  em (3.13) ou na forma equivalente em D=1. Já o fator  $A_n$  corresponde aos fatores combinatórios que aparecem à direita de (3.5). Para obter  $A_n$  é conveniente chamar as duas linhas de cada vértice  $i$  como  $(a_i, b_i)$ . Por exemplo, para o caso de um anel conexo, com  $n$  spins, temos um número total de  $2n$  conexões, se começarmos com a conexão  $a_1$  ele pode ser ligado a qualquer link  $a_j$  ou  $b_j$  com  $j \neq 1$ . Deste modo, temos  $(2n - 2)$  possibilidades. Para ligarmos a próxima conexão sem criarmos um diagrama conexo teremos  $2n - 4$  possibilidades, e assim  $A_n/(2^n n!) = (2n - 2)!!/2^n n! = 1/2n$ . Para os diagramas não conexos,  $A_n$ 's podem ser encontrados analogamente. Uma vez que  $Z_{nc}^1 = cZ_1/2(1 - c^4)$ , nota-se que das equações (3.25) e (3.26), temos.

$$\begin{aligned}
 \ln G &= \ln \left( 1 + gZ_1^{nc} + g^2 Z_2^{nc} + \dots \right) \\
 &= gZ_1^{nc} + g^2 \left[ Z_2^{nc} - \frac{1}{2}(Z_1^{nc})^2 \right] + O(g^3) \\
 &= \frac{1}{2} \frac{gc}{1 - c^4} Z_1 + \frac{1}{4} \left[ \frac{gc}{1 - c^4} \right]^2 Z_2 + O(g^3)
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

A expansão até a ordem  $g^2$  ilustra o fato conhecido em teoria de campos que os diagramas conexos podem ser obtidos do conjunto total de diagramas tirando-se o logaritmo

da função geratriz. O fator de simetria correto dos diagramas conexos  $1/2n$  aparecerá naturalmente, ou seja, em geral:

$$\ln G(h, c, g) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n} \left[ \frac{cg}{1-c^4} \right]^n Z_n \quad (3.29)$$

Das equações (3.21) e (3.29) podemos escrever a função de partição para anéis conexos

$$Z_n = n \left( \frac{1-c^4}{c} \right)^n \left[ \ln \left( \frac{c^4-1}{P_2} \right) \right]_{g^n} \quad (3.30)$$

A relação (3.30) será importante porque ela é um exemplo de uma forma alternativa de calcular exatamente a função de partição para modelos de spin 1D com condições periódicas de contorno sem o uso da matriz transferência o que é computacionalmente mais eficiente do que as equações (2.5) ou (2.7). Por exemplo, para uma rede com 90 spins, o cálculo numérico de  $Z_{90}$  via (2.7) leva cerca de 5 minutos, já o cálculo numérico via (3.30) leva cerca de 20 segundos. Nossos cálculos numéricos foram executados em um computador com processador Pentium IV de velocidade 2.40Ghz com 512Mb de memória ram, com ajuda do programa Mathematica versão 4.1.

Exponenciando (3.29) e comparando com (3.14) temos:

$$\left( e^{\ln G} \right)_{g^n} = \left[ \frac{c}{1-c^4} \right]^n \left( e^{\frac{gZ_1}{2} + \frac{g^2Z_2}{4} + \dots} \right)_{g^n} = (G)_{g^n} = \left( \sum_m g^m Z_m^{nc} \right)_{g^n} = Z_n^{nc} \quad (3.31)$$

Ou seja, obtemos formalmente a relação entre  $Z_n^{nc}$  e  $Z_n$  generalizando (3.26) e (3.27) para qualquer  $n$ :

$$Z_n^{nc}(c, h) = \left[ \frac{c}{1-c^4} \right]^n \left[ \exp \left( \frac{gZ_1}{2} + \frac{g^2Z_2}{4} + \dots + \frac{g^n Z_n}{2n} \right) \right]_{g^n} \quad (3.32)$$

$$Z_n^{nc} = \left[ \frac{c}{1-c^4} \right]^n \left[ \frac{Z_n}{2n} + \frac{Z_1 Z_{n-1}}{4(n-1)} + \dots + \frac{Z_1^n}{2^n n!} \right] \quad (3.33)$$

A expressão (3.33) mostra que mesmo que os zeros estejam na  $S^1$  para cada  $Z_n$  e suas potências, não é trivial que os zeros estejam na  $S^1$  para  $Z_n^{nc}$  pois a soma de polinômios tem um efeito dramático sobre seus zeros. Portanto provar que os zeros estarão na  $S^1$  para

rede dinâmica não segue do resultado válido para rede estática (anel conexo).

Na figura 3.6 plotamos os zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (pontos azuis) e os zeros da função de partição para um anel conexo (pontos vermelhos) para  $c = 0.5$ . Na figura 3.6(a) consideramos  $n = 20$ , podemos notar que os zeros das duas funções de partição são próximos, mas eles não coincidem, quando aumentamos o número de spins,  $n = 40$ , a diferença entre a posição dos zeros diminui, como mostra a figura 3.6(b), esse resultado está de acordo com [9], que calcularam  $Z_n^{nc}$ , via ponto de sela para  $n \rightarrow \infty$  e mostraram que a diferença entre os zeros de  $Z_n^{nc}$  e  $Z_n$  é da ordem de  $1/n^2$  para o modelo de Ising de spin  $1/2$ , significando que no limite termodinâmico os zeros do modelo de Ising  $1D$  em diagramas de Feynman coincidirá exatamente com os zeros do modelo em uma rede estática.

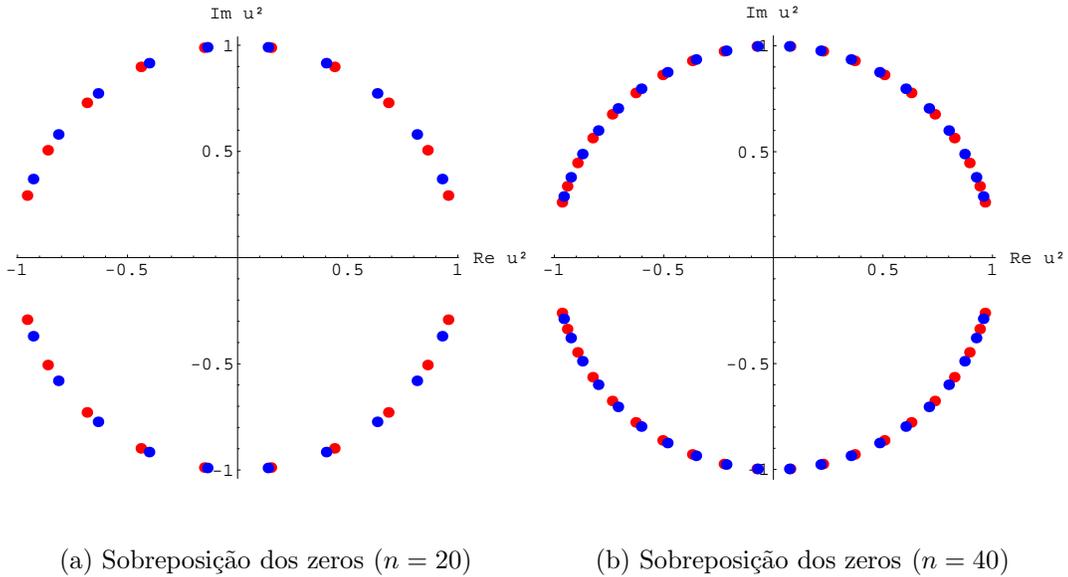


Figura 3.6: Sobreposição dos zeros das funções de partição do modelo de Ising  $1D$  de spin  $1/2$  para rede estática e dinâmica. Os zeros azuis são da função de partição para anéis conexos e desconexos (dinâmica) e os zeros em vermelho são os da função de partição para um anel conexo (estática) para diferentes números de spins e  $c = 0.5$ .

# Capítulo 4

## Modelo de Blume-Emery-Griffiths

Blume, Emery e Griffiths [13] estudaram a separação de fases da mistura líquida de  $\text{He}^3$  e  $\text{He}^4$ . Esse sistema apresenta duas transições de fase diferentes, uma que separa o  $\text{He}^3$  do  $\text{He}^4$  e outra superfluida que ocorre na fase rica em  $\text{He}^4$ . Eles usaram um modelo de spin 1 para descrever essas duas transições. Foi assumido que a mistura de  $\text{He}^3$ - $\text{He}^4$  consistia de uma rede discreta de variáveis de spin  $S_i$ , com valores 0 e  $\pm 1$ , associados a cada sítio da rede. Um átomo de  $\text{He}^3$  no sítio  $i$  corresponde a  $S_i = 0$  e um átomo de  $\text{He}^4$  pode ser representado tanto por  $S_i = +1$  como  $S_i = -1$ . Os números de átomos de  $\text{He}^3$  e  $\text{He}^4$  são dados, respectivamente por

$$\hat{n}_3 = \sum_{i=1}^n (1 - S_i^2), \quad (4.1)$$

$$\hat{n}_4 = \sum_{i=1}^n S_i^2, \quad (4.2)$$

com  $\hat{n}_3 + \hat{n}_4 = n$ , número total de sítios. Temos um grau de liberdade dado pelo sinal de  $S_i$ , associado ao átomo de  $\text{He}^4$ , que nos fornece o parâmetro de ordem superfluida do hélio líquido, dado por:

$$m = \frac{1}{n} \left\langle \sum_{i=1}^n S_i \right\rangle \quad (4.3)$$

A concentração de  $\text{He}^3$  nos fornece um novo parâmetro de ordem, o qual indica que existe

uma possível separação de fases.

$$x = \frac{\langle \hat{n}_3 \rangle}{n} = 1 - \frac{1}{n} \left\langle \sum_{i=1}^n S_i^2 \right\rangle \quad (4.4)$$

onde  $m$  e  $\langle \sum_{i=1}^n S_i^2 \rangle / n$  são a magnetização média e o momento de quadrupolo médio do sistema de spin fictício. O ordenamento superfluido e a separação de fases na mistura são indicados pelo ordenamento magnético e pelo ordenamento quadrupolar respectivamente.

Ao escrever a hamiltoniana do modelo, primeiro devemos começar considerando um termo de interação do tipo Ising ferromagnético:

$$H_s = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^n S_i S_j \quad (4.5)$$

A soma é sobre os primeiros vizinhos e esse termo é responsável pelo alinhamento superfluido. Haverá uma transição de segunda ordem a uma temperatura crítica,  $T_c$ , determinada pela constante de troca  $J$  e pela concentração de átomos de  $\text{He}^3$ . Quando a concentração de  $\text{He}^3$  é zero, temos o modelo de Ising ferromagnético de spin 1/2. A presença de  $\text{He}^3$  significa que um número de  $S_i^2$  são nulos, isso representa impurezas não magnéticas no sistema de spin fictício, dificultando a transição de fase, então  $T_c$  tem que diminuir com o aumento de  $x$  como de fato é observado na solução de campo médio do modelo em [13]. Isto significa que se a concentração  $x$  for grande, o sistema só pode sofrer o ordenamento superfluido se o sistema se separar em duas fases, uma fase rica em  $\text{He}^3$  e outra rica em  $\text{He}^4$ , a fase rica em  $\text{He}^3$  continua no mesmo estado e a fase rica em  $\text{He}^4$  sofrerá o ordenamento superfluido. Essa interpretação é plausível de acordo com a solução de [13].

$$\begin{aligned} E = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^n S_i S_j & - K_{33} \sum_{\langle ij \rangle} (1 - S_i^2) (1 - S_j^2) - K_{44} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 \\ & - K_{34} \sum_{\langle ij \rangle} [S_i^2 (1 - S_j^2) + S_j^2 (1 - S_i^2)] \end{aligned} \quad (4.6)$$

Os autores de [13] tratam a mistura como se fosse um fluido clássico, então, além do termo de Ising (4.5) devemos introduzir as interações de curto alcance entre os átomos dos fluidos. Tais termos são proporcionais às concentrações dos átomos, ou seja:

$$H_I = - K_{33} \sum_{\langle ij \rangle} (1 - S_i^2) (1 - S_j^2) - K_{44} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2$$

$$- K_{34} \sum_{\langle ij \rangle} [S_i^2 (1 - S_j^2) + S_j^2 (1 - S_i^2)] \quad (4.7)$$

onde a somatória é sobre os vizinhos mais próximos,  $S_i^2 = 0$  para  $\text{He}^3$ ,  $S_i^2 = 1$  para  $\text{He}^4$  a quantidade  $-K_{\alpha\beta}$  é a energia de interação do par  $\text{He}^\alpha - \text{He}^\beta$ . Reescrevendo (4.7) a menos (4.5) temos:

$$H_I = -(K_{33} + K_{44} - 2K_{34}) \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 - 2\gamma (K_{34} - K_{33}) \sum_i^n S_i^2 - \gamma n K_{33} \quad (4.8)$$

onde  $\gamma$  é o número de vizinhos mais próximos na rede. A força interatômica entre os átomos de hélio é a mesma, mas na mistura líquida de  $\text{He}^3$  e  $\text{He}^4$  a interação é diferente por causa da massa e da estatística diferente dos átomos de  $\text{He}^3$  e  $\text{He}^4$ , por isso que temos  $K_{\alpha\beta}$  diferentes. Se os  $K_{\alpha\beta}$  fossem iguais,  $H_I$  se tornaria uma constante e se eles possuírem valores bem próximos, faria com que  $H_I$  pudesse ser interpretado como uma pequena perturbação.

Quando  $\langle \hat{n}_3 \rangle$  e  $\langle \hat{n}_4 \rangle$  são dados, temos que acrescentar os potenciais químicos  $\mu_3$  e  $\mu_4$  para o  $\text{He}^3$  e  $\text{He}^4$  na hamiltoniana, que fica

$$H = H_s + H_I - \mu_3 \hat{n}_3 - \mu_4 \hat{n}_4 \quad (4.9)$$

A menos de uma constante aditiva temos:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 - \Delta \sum_i (1 - S_i^2) \quad (4.10)$$

onde  $K = K_{33} + K_{44} - 2K_{34}$  e  $\Delta = \mu_3 - \mu_4 + 2\gamma (K_{33} - K_{44})$ .

A hamiltoniana  $H$  representa um modelo de Ising de spin 1 com interação quártica de intensidade  $K$  e interação quadrupolar de intensidade  $\Delta$ .

## 4.1 Modelo BEG 1D usual (1 anel)

Explicitamente trabalharemos com a seguinte hamiltoniana para o modelo BEG:

$$E_{BEG} = - \sum_{\langle i,j \rangle} [J S_i S_j + K S_i^2 S_j^2] - \sum_{i=1}^n [\Delta (1 - S_i^2) + H S_i] \quad (4.11)$$

onde  $H$  é o campo magnético externo. A função de partição para o modelo de Blume-Emery-Griffiths fica:

$$Z_n = \sum_{\{S_i\}=0,\pm 1} e^{-\beta E_{BEG}(\{S_i\})} \quad (4.12)$$

Para o caso unidimensional com condições periódicas de contorno  $S_i = S_{i+n}$  teremos a solução via matriz de transferência:

$$\begin{aligned} Z(h, T) &= \sum_{S_1=0,\pm 1} \sum_{S_2=0,\pm 1} \dots \sum_{S_n=0,\pm 1} \exp \left[ \sum_{k=1}^n \beta \left( JS_k S_{k+1} + K S_k^2 S_{k+1}^2 + \Delta(1 - S_k^2) + H S_k \right) \right] \\ &= \sum_{S_1=0,\pm 1} \sum_{S_2=0,\pm 1} \dots \sum_{S_n=0,\pm 1} T(S_1, S_2) T(S_2, S_3) \dots T(S_n, S_1) = \text{Tr } \mathbf{T}^n \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde  $T(S_j, S_{j+1}) = \exp [\beta JS_j S_{j+1} + \beta K S_j^2 S_{j+1}^2 + \frac{1}{2} \beta \Delta (2 - S_j^2 - S_{j+1}^2) + \frac{1}{2} \beta H (S_j + S_{j+1})]$ , é a chamada matriz de transferência. Definindo  $j = \beta J$ ,  $h = \beta H$ ,  $k = \beta K$  e  $l = \beta \Delta$ .

Explicitamente temos:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{j+k+h} & e^{(l+h)/2} & e^{-j+k} \\ e^{(l+h)/2} & e^l & e^{(l-h)/2} \\ e^{-j+k} & e^{(l-h)/2} & e^{j+k-h} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Podemos achar a função de partição como função dos autovalores da matriz de transferência (4.14), determinados a partir da equação:  $\det(T - \lambda_T I) = 0$ , assim temos a função de partição:

$$Z_n = \lambda_{T(1)}^n + \lambda_{T(2)}^n + \lambda_{T(3)}^n = \frac{1}{c^n} (\lambda_+^n + \lambda_-^n + \lambda_0^n) \quad (4.15)$$

Onde  $\lambda_{T(i)} = \lambda_i/c$ . Fazendo algumas manipulações na equação  $\det(T - \lambda_T I) = 0$ , chegamos na equação cúbica abaixo, de onde poderemos obter os autovalores  $\lambda_i$ .

$$\lambda^3 - (\tilde{x} + 2Ab) \lambda^2 + [b^2 (1 - c^4) + 2A\tilde{x} (b - c)] \lambda - b\tilde{x} (1 - c^2) [b (1 + c^2) - 2c] = 0 \quad (4.16)$$

onde usaremos frequentemente nesta dissertação a notação:

$$u \equiv e^{-h}, \quad b \equiv e^k \quad (4.17)$$

$$x \equiv e^l, \quad c \equiv e^{-j} \quad (4.18)$$

$$A = \cosh(h) = \frac{1}{2} \left( u + \frac{1}{u} \right), \quad \tilde{x} \equiv c x \quad (4.19)$$

$$u \equiv e^{-H/k_B T}, \quad b \equiv e^{K/k_B T} \quad (4.20)$$

$$x \equiv e^{\Delta/k_B T}, \quad c \equiv e^{-J/k_B T} \quad (4.21)$$

$$2A = \left( u + \frac{1}{u} \right), \quad \tilde{x} \equiv c x \quad (4.22)$$

Para exemplificar, consideramos  $n = 1$  e  $n = 2$  spins:

$$Z_1 = \frac{1}{uc} [2b(u^2 + 1) + u\tilde{x}] \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned} Z_2 &= \frac{1}{c^2 u^2} [b^2(u^4 + 1) + c^2(u^3 + u)x + c^2 u^2(c^2 b^2 + x^2)] \\ &= \frac{P_4(u)}{c^2 u^2} \end{aligned} \quad (4.24)$$

Note que  $Z_n(u)$  é proporcional a um polinômio  $P_{2n}(u)$  e portanto  $Z_n(u) = 0$  possui  $2n$  zeros. A localização dos zeros da função de partição para 1 spin (4.23) é dada por:

$$u_{\pm} = -\frac{\tilde{x}}{2b} \pm \sqrt{\left(\frac{\tilde{x}}{2b}\right)^2 - 1} \quad (4.25)$$

O caso especial  $n = 1$  já nos fornece uma condição não trivial para que os zeros estejam na  $S^1$ . Para  $0 \leq \tilde{x} \leq 2b$  os dois zeros de  $Z_1$  estarão na  $S^1$  ( $|u_+| = |u_-| = 1$ ), mas se  $\tilde{x} > 2b$  os zeros vão para o eixo real negativo. Portanto, existe uma dependência nos parâmetros do modelo para que os zeros da função de partição estejam na  $S^1$ , ao contrário do que ocorre no modelo de Ising unidimensional ferromagnético.

## 4.2 Sub-modelos

Escolhemos o modelo BEG para trabalhar por possuir simetria  $Z_2$  ( $H \rightarrow -H$ ) e por conter vários outros modelos conhecidos. Nesta seção vamos mostrar que o modelo de Blume-Emery-Griffiths engloba outros modelos de spin com interação entre os primeiros vizinhos, como por exemplo o modelo de Ising de spin 1/2 e spin 1, o modelo de Blume-Capel [30], o modelo de Potts de 3 estados, entre outros [7].

Para fazer esse estudo vamos definir algumas variáveis. Temos que o número de spin  $n$  é dado por  $n = n_+ + n_- + n_0$ , onde  $n_+$  é o número de spins para cima,  $n_-$  é o número de spins para baixo e  $n_0$  é o número de spins zero.  $n_{ab}$  é o número de linhas que liga o spin  $S_a$  com  $S_b$  onde  $a, b = \pm 1, 0$ .

### 4.2.1 Modelo de Blume-Capel e Ising de spin 1

Alguns submodelos podem ser facilmente obtidos. Tomando  $x = b = 1$  temos o modelo de Ising de spin 1, cujos zeros no caso ferromagnético pertencem à  $S^1$ . Para  $b = 1$  temos o modelo de Blume-Capel [30]. A condição para que os zeros da função de partição desse modelo estejam no círculo é  $\Delta \leq \ln 2$  ( $0 \leq x \leq 2$ ) e essa condição é válida para qualquer dimensão do espaço [5], ela significa que esse modelo pode ser mapeado num Ising de spin 1/2 com dois tipos de acoplamentos ferromagnéticos  $J$  e  $\frac{1}{2}(\ln 2 - \Delta)$  distintos a princípio. Em [9] foi obtida uma nova condição para que  $u_k \in S^1$  para o modelo de Blume-Capel 1D, ou seja,  $xc \leq 1$  mesmo que  $x > 2$ . O ponto  $xc = 1$  é exatamente o ponto de mudança de mínimo da energia onde temos a configuração de alinhamento total,  $n_+ = n$  ou  $n_- = n$  que é o mínimo para  $xc < 1$ , para a configuração onde todos os spins são nulos ( $n_0 = n$ ), mínimo para  $xc > 1$ .

### 4.2.2 Modelo de Ising de spin 1/2

$$x \rightarrow 0 \quad (l \rightarrow -\infty)$$

Como na função de partição (4.12) aparece o peso de Boltzmann  $e^{ln_0}$  é evidente que para  $l \rightarrow -\infty$  (ou  $x \rightarrow 0$ ), somente as configurações com  $n_0 = 0$  sobreviverão, portanto o modelo se reduz para  $x \rightarrow 0$  ao modelo de Ising de spin 1/2 já que  $k \sum_{i,j} S_i^2 S_j^2$  será uma constante para  $S_i = \pm 1$ .

Essa redução é válida independente da dimensão espacial. Em  $D = 1$  ela pode ser

observada na equação cúbica (4.16) que se reduz a equação quadrática do modelo de Ising de spin 1/2 para  $x \rightarrow 0$  (vide 2.8) após redefinirmos  $\lambda \rightarrow b\tilde{\lambda}$  em (4.16).

$$b \rightarrow \infty \quad (k \rightarrow \infty)$$

Um outro caso em que recaímos no modelo de Ising de spin 1/2 é  $k \rightarrow \infty$ , ou seja,  $b \rightarrow \infty$ , assim o peso de Boltzmann  $e^{k(n_{++}+n_{--}+n_{+-})}$  domina a função de partição do modelo BEG para  $n_{++} + n_{--} + n_{+-} = n$  o que requer  $n_0 = 0$ , essa redução continua sendo válida para qualquer dimensão. Para  $D = 1$  podemos redefinir  $\lambda \rightarrow b\tilde{\lambda}$  e dividindo por  $b^3$  a equação cúbica (4.16), teremos a equação quadrática do modelo de Ising de spin 1/2.

$$c \rightarrow 0 \quad (j \rightarrow \infty)$$

Um terceiro caso onde recaímos no modelo de Ising de spin 1/2 é quando  $c \rightarrow 0$  ( $j \rightarrow \infty$ ), Neste caso o peso de Boltzmann  $e^{j(n_{++}+n_{--}-n_{+-})}$  determina que as configurações de alinhamento total,  $n_+ = n$  e  $n_- = n$ , dominam a função de partição. Essa redução é válida para qualquer dimensão e para  $D = 1$  a equação cúbica novamente retorna à equação quadrática do modelo de Ising de spin 1/2 com  $c = 0$ .

### 4.2.3 Modelo de Potts de 3 estados

Vamos escrever a função de partição para o modelo de Potts [31], [32].

$$Z_q^{\tilde{J}, B} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left( \tilde{J} \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} + 2B \sum_{i=1} \delta_{1, \sigma_i} \right) \quad (4.26)$$

Para  $q = 3$  estados, temos que em cada sítio  $\sigma_i = 1, 2$  ou  $3$ . O peso de Boltzmann é proporcional a:

$$\omega \sim \exp \left[ \tilde{J} (n_{\sigma_1 \sigma_1} + n_{\sigma_2 \sigma_2} + n_{\sigma_3 \sigma_3}) + 2B n_{1, \sigma_i} \right] \quad (4.27)$$

Por outro lado a hamiltoniana do modelo BEG é dada por

$$H = -J(n_{++} + n_{--} - n_{+-}) - K(n_{++} + n_{--} + n_{+-}) - \Delta n_0 - h(n_+ - n_-) \quad (4.28)$$

Usando  $n_+ - n_- = 2n_+ + n_0 - n$  temos a menos de uma constante aditiva:

$$H = -J(n_{++} + n_{--} - n_{+-}) - K(n_{++} + n_{--} + n_{+-}) - n_0(\Delta + h) - 2n_+ h \quad (4.29)$$

Usando as identidades:

$$n_0 = \frac{1}{\gamma} [2n_{00} + n_{0+} + n_{0-}] \quad (4.30)$$

$$n_{+-} = \frac{\gamma n}{2} - (n_{++} + n_{--} + n_{00} + n_{+0} + n_{-0}) \quad (4.31)$$

Temos a menos de uma constante aditiva novamente:

$$\begin{aligned} H = & - 2J(n_{++} + n_{--}) - n_{00} \left[ \frac{2}{\gamma} (\Delta - h) - K + J \right] \\ & - (n_{0+} - n_{0-}) \left[ J - K + \frac{\Delta + h}{\gamma} \right] - 2n_+ h \end{aligned} \quad (4.32)$$

Portanto escolhendo, vide [7],

$$\frac{\Delta + h}{\gamma} = 2J \Leftrightarrow x = \frac{u}{c^{2\gamma}} \quad (4.33)$$

$$K = 3J \Leftrightarrow b = \frac{1}{c^3} \quad (4.34)$$

Teremos  $\tilde{u}$

$$\omega_{BEG} \sim \exp[2J(n_{++} + n_{--} + n_{00}) + 2hn_+] \quad (4.35)$$

O que corresponde a um modelo de Potts de 3 estados com  $\tilde{J} = 2J$  e  $B = h$ .

Pode-se obter [33] uma fórmula fechada, quando o número de spins é grande, para os zeros de Yang-Lee do modelo de Potts de  $Q$ -estados, com  $Q = 2, 3, 4, \dots$ , podem ser calculados exatamente em uma dimensão para uma rede estática (um anel conexo) e mostra-se que  $\tilde{u}_k \in S^1$  após uma certa mudança de variável  $u \rightarrow \tilde{u}(Q)$ . Para  $D=2$  temos  $u_k \notin S^1$  e a mudança de variável  $u \rightarrow \tilde{u}_k(Q)$  não é conhecida, se é que existe.

Tomando  $b = 1/c^3$  e  $x = u/c^4$  de acordo com (4.33) e (4.34) em  $D = 1$  ( $\gamma = 2$ ) verificamos numericamente que na variável  $u = e^{-h}$  os zeros do modelo de Potts unidimensional de 3 estados estão aproximadamente numa circunferência de raio menor que um e se aproximam da  $S^1$  a medida que a temperatura abaixa, vide figura 4.1:

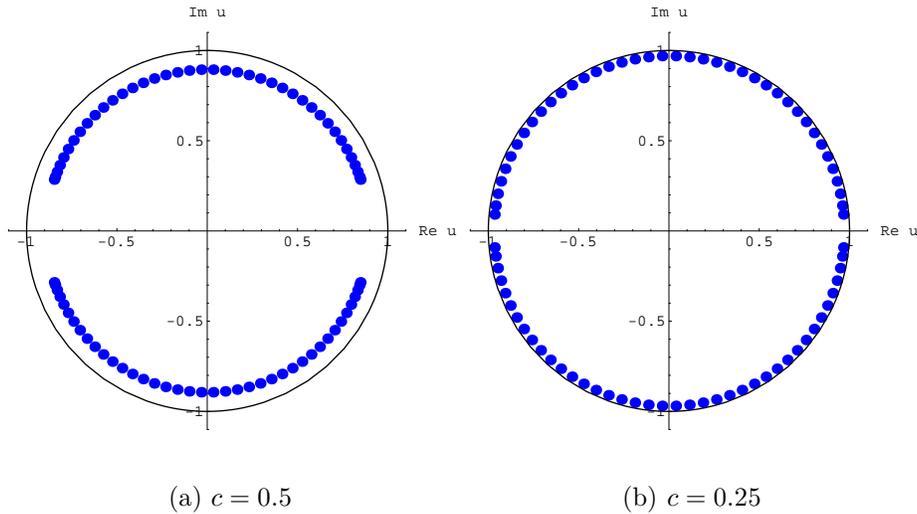


Figura 4.1: Zeros do modelo BEG com  $n = 80$  para  $b = 1/c^3$   $x = u/c^4$  para  $c = 0.5$  e  $c = 0.25$ .

### 4.3 Resultados analíticos

Para os zeros do modelo BEG temos poucos resultados analíticos exatos, os mais importantes, válidos em dimensões maiores do que um, foram obtidos em [7] via decomposição de Griffiths. Por completeza e por termos uma certa discordância com os resultados de [7] eles serão revisados a seguir. Em seguida apresentamos alguns resultados analíticos para o modelo BEG unidimensional para os quais a equação cúbica (4.16) se reduz a uma equação quadrática, com isso podemos saber exatamente a localização dos zeros.

### 4.3.1 Decomposição de Griffiths

É possível obter regiões [7] de validade do TS1 no espaço de parâmetros do modelo BEG em qualquer dimensão reduzindo esse modelo de spin 1 com  $n$  spins a um modelo do tipo Ising generalizado de spin 1/2 com  $2n$  spins. Esse método introduzido em [4] consiste em decompor uma partícula de spin 1 em um conjunto de duas partículas de spin 1/2:  $S_i = (\sigma_i + \tau_i)/2$ , onde  $\sigma_i, \tau_i = \pm 1$ . Na figura 4.2 vemos um exemplo para o caso de  $n = 2$  sítios onde  $S_1 = 0$  à esquerda e  $S_2 = 1$  a direita. Para compensar a dupla degenerescência do estado  $S_i = 0$  devemos introduzir o fator de Boltzmann  $\omega = \exp\left[\frac{1}{2}(\sigma_i\tau_i - 1)\ln 2\right]$  para cada sítio da rede.

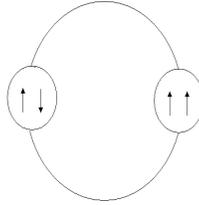


Figura 4.2: Em cada sítio da rede temos dois spins 1/2

Então a função de partição do modelo BEG a menos de uma constante multiplicativa tem a forma:

$$Z_n = \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\tau_i\}} \prod_{i=1}^n u^{-\frac{\sigma_i + \tau_i}{2}} \prod_{i < j} e^{-\beta E_{ij}(\sigma_i, \tau_i, \sigma_j, \tau_j)} \quad (4.36)$$

com

$$E_{ij} = \frac{1}{4} [J(\sigma_i + \tau_i)(\sigma_j + \tau_j) + K(\sigma_i\tau_i\sigma_j\tau_j)] + \tilde{J}(\sigma_i\tau_i + \sigma_j\tau_j) \quad (4.37)$$

e

$$\tilde{J} = \frac{1}{4\gamma} (\ln 2 - \Delta) + \frac{1}{4} K \quad (4.38)$$

onde  $\gamma$  é o número de primeiros vizinhos. O número de spins se relaciona com o número de conexões ou “links” ( $n_L$ ) via  $n_L = \frac{\gamma n}{2}$ .

Em [6] o teorema do círculo de Yang-Lee foi generalizado para o modelo de Ising

de spin 1/2 com interações entre múltiplos spins. É condição necessária para aplicar o teorema de [6] que

$$E_{ij}(\sigma_i, \tau_i, \sigma_j, \tau_j) = E_{ij}(-\sigma_i, -\tau_i, -\sigma_j, -\tau_j), \quad (4.39)$$

o que certamente vale para (4.37). Sendo (4.39) válida, segundo a demonstração de [6], a condição suficiente para que o teorema seja válido é que o peso de Boltzmann da configuração de alinhamento total seja maior que a soma dos pesos de Boltzmann de todas as outras configurações, ou seja,

$$e^{-\beta E(1,1,1,1)} \geq \frac{1}{2} \sum'_{\{\sigma_i=\pm 1\}} \sum'_{\{\tau_i=\pm 1\}} e^{-\beta E_{ij}(\sigma_i, \tau_i, \sigma_j, \tau_j)} \quad (4.40)$$

onde  $\sum'$  significa que vamos somar sobre todas as configurações, menos as de alinhamento total (1, 1, 1, 1) e (-1, -1, -1, -1).

A condição (4.40) restringe a temperatura a um valor máximo abaixo do qual os zeros de Yang-Lee do modelo BEG pertencerão a  $S^1$ . Isto é, (4.40) equivale a

$$0 \leq c \leq \sqrt{G^2 + 1} - G \quad (4.41)$$

onde

$$G = G(x, b) = \left(\frac{x}{2}\right)^\gamma \left[ \left(\frac{x}{2}\right)^\gamma + 2 \right] \frac{1}{b} \quad (4.42)$$

A desigualdade (4.41) foi obtida pela primeira vez em [7] que desnecessariamente, na nossa opinião, assume além de (4.40) que o acoplamento  $\tilde{J}$  deva ser ferromagnético ( $\tilde{J} > 0$ ) o que equivale a  $0 < x < 2b^{\gamma/2}$ . A condição (4.40) é suficiente para garantir a posição dos zeros na circunferência de raio um mesmo que alguns acoplamentos, como  $\tilde{J}$ , sejam anti-ferromagnéticos ( $x > 2b^{\gamma/2}$ ). Nossos cálculos numéricos no caso unidimensional ( $\gamma = 2$ ) confirmam que **não é necessário assumir  $\tilde{J} > 0$** , vide figura 4.3.

É importante salientar que uma consequência da validade do TS1 para temperaturas satisfazendo (4.41) é que nesse intervalo só há transição de fase de 2ª ordem para  $H = 0$ . Alternativamente para temperatura fixa podemos escrever (4.41) como  $b \geq b_{min}$  ou

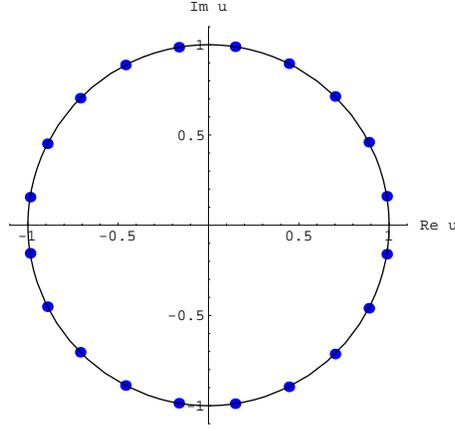


Figura 4.3: Zeros da função de partição do modelo BEG com  $c = 0.11$ ,  $b = 3$  e  $x = 7 > 2b$ , para 20 spins.

$x \leq x_{max}$ , com

$$b_{min} = 2 \frac{c}{(1-c^2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{1/\gamma} \left[ \left(\frac{x}{2}\right)^{1/\gamma} + 2 \right] \quad (4.43)$$

e

$$x_{max} = 2 \left[ \sqrt{1 + b(1-c^2)} - 1 \right]^\gamma \quad (4.44)$$

### 4.3.2 $T \rightarrow 0$

Tomando  $c \rightarrow 0$  na equação cúbica (4.16) lembrando que  $\tilde{x} = xc \rightarrow 0$  e trocando  $\lambda \rightarrow \tilde{\lambda}b$  temos:

$$\tilde{\lambda}^2 - 2A\tilde{\lambda} + 1 = 0 \quad (4.45)$$

Essa é a equação de autovalores para o modelo de Ising de spin 1/2, com  $c = 0$ . A partir da equação (2.18) podemos concluir que a localização dos zeros do modelo BEG com  $c = 0$ , é exatamente igual a dos zeros do modelo de Ising de spin 1/2 a  $T = 0$ , ou seja,

eles estão igualmente espaçados.

$$\cosh h_k = \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n} = \cos \alpha_k \quad (4.46)$$

com  $h_k = i\alpha_k$  e está de acordo com os resultados numéricos obtidos.

### 4.3.3 $T \rightarrow \infty$

Também sabemos a localização exata dos zeros da função de partição do modelo BEG quando  $c = 1$  ( $T \rightarrow \infty$ ), nesse limite um dos autovalores da matriz de transferência se anula e a equação característica (4.16) nos fornece uma equação do segundo grau:

$$\lambda^2 - (x + 2Ab)\lambda + 2Ax(b-1) = 0 \quad (4.47)$$

Como nós sabemos exatamente a localização dos zeros para o modelo de Ising de spin 1/2, vide (2.18) e sua equação secular ( $\lambda^2 - 2 \cosh(h)\lambda + 1 - c^4 = 0$ ) tem a mesma estrutura da equação (4.47), então podemos concluir que os zeros serão obtidos de:

$$\frac{x}{2} + Ab = \sqrt{2Ax(b-1)} \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right) \quad (4.48)$$

A localização dos zeros é dada pela equação:

$$u_k = A \pm i\sqrt{1-A^2} \quad (4.49)$$

onde  $A$  são soluções de (4.48):

$$A_{\pm} = \frac{x}{b^2} \left[ -\left(\frac{b}{2} + (1-b)c_k^2\right) \pm |c_k| \sqrt{(1-b)[b + (1-b)c_k^2]} \right] \quad (4.50)$$

com

$$c_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right). \quad (4.51)$$

Para que os zeros estejam no círculo de raio 1 (vide (4.49)) é preciso que  $A$  seja real, o que requer que  $0 \leq b \leq 1$ , e além disso  $-1 \leq A \leq 1$ . Podemos perceber na equação (4.50)

que  $|A_-|$  aumenta com  $|c_k|$ , assim  $|A_-|$  será máximo quando  $|c_k| = 1$ . Nesse caso

$$A_- = -\frac{x}{b^2} \left[ \left(1 - \frac{b}{2}\right) + \sqrt{1-b} \right] \geq -1 \quad (4.52)$$

garante que  $-1 \leq A \leq 1$  para  $0 \leq b \leq 1$ . Assim encontramos uma relação entre  $x$  e  $b$ , onde o teorema do círculo é válido para  $0 \leq b \leq 1$ , isto é:

$$x \leq \frac{b^2}{1 - \frac{b}{2} + \sqrt{1-b}} \equiv f(b) \quad (4.53)$$

Testamos essa condição numericamente e vimos que ela funciona perfeitamente. Para  $b = 0.5$  temos  $f(b) = 0.1715$ , fizemos uma pequena variação no valor de  $x$ , na figura 4.4. Quando diminuimos  $x$  os zeros permanecem na circunferência, figura 4.4(a), mas quando o aumentamos encontramos zeros fora do círculo para  $0 \leq b \leq 1$ , figura 4.4(b).

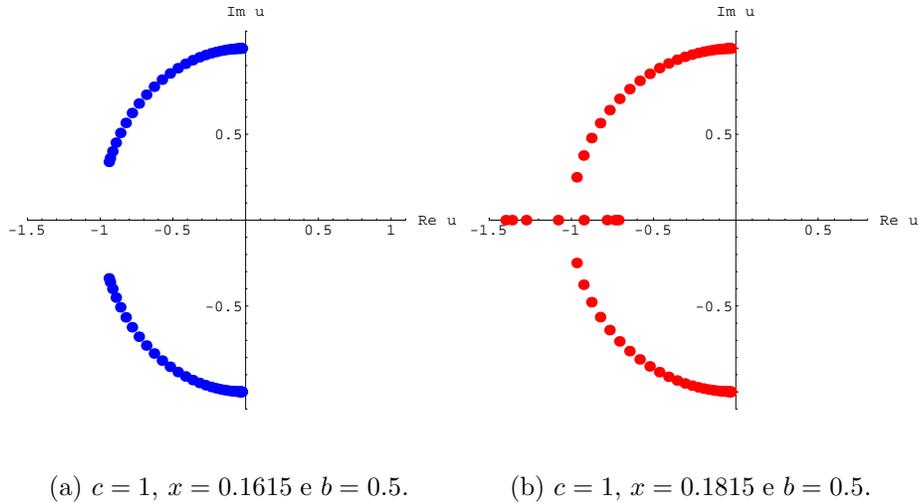


Figura 4.4: Validade da equação (4.53), variando  $x$  com  $n = 40$  sítios.

Notamos um comportamento muito interessante quando o número de sítios aumenta, pois o incremento em  $x$  que tira os zeros da  $S^1$  se torna cada vez menor, como mostra a figura 4.5. Conjecturamos que no limite termodinâmico a condição **suficiente** (4.53) passa a ser uma condição **necessária** para que os zeros da função de partição estejam na  $S^1$ .

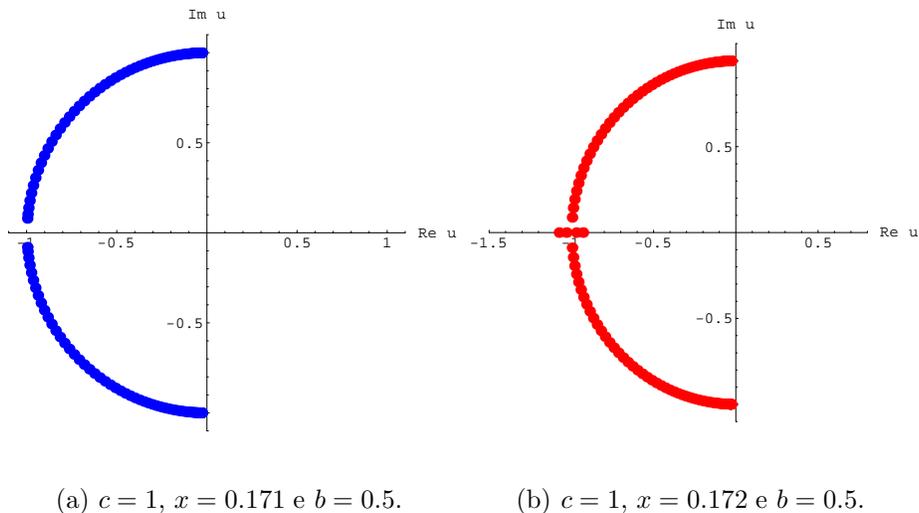


Figura 4.5: Validade da equação (4.53), variando  $x$  com  $n = 80$  sítios.

A condição (4.53) para  $0 \leq b \leq 1$  é válida para  $c = 1$  ( $T \rightarrow \infty$ ). Com a hipótese de que os zeros tendem a ir para a  $S^1$  ao aumentarmos o acoplamento ferromagnético ( $J$ ) ou diminuirmos  $c$  (comportamento válido em geral para zeros de Yang-Lee, vide comentário no artigo de revisão [3]) conjecturamos que, para  $0 \leq b \leq 1$ , a condição (4.53) garante  $u_k \in S^1$  para qualquer temperatura,  $0 \leq c \leq 1$ . Esse resultado é aparentemente válido como indicam nossos resultados numéricos e é uma conclusão original desta dissertação. Não é difícil mostrar que  $f(b) \leq 2b$ , ou seja, a condição (4.53) requer acoplamento ferromagnético ( $\tilde{J} > 0$ ).

#### 4.3.4 $b = 0$ ( $k \rightarrow -\infty$ )

Considerando  $b = 0$ , novamente um dos autovalores da matriz transferência se cancela e podemos reescrever a equação característica (4.16) nos fornece:

$$\lambda^2 - \tilde{x}\lambda - 2Ac\tilde{x} = 0 \tag{4.54}$$

Novamente comparando essa equação com a equação secular do modelo de Ising de spin 1/2 conseguimos achar exatamente a posição dos zeros:

$$\frac{\tilde{x}}{2} = \sqrt{-2A c \tilde{x}} \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n} \quad (4.55)$$

Portanto,

$$A_k = -\frac{\tilde{x}/8}{c \left[ \cos \frac{(2k-1)\pi}{2n} \right]^2} \quad (4.56)$$

com

$$u_k = A_k \pm \sqrt{A_k^2 - 1} \quad (4.57)$$

Os zeros  $u_k$  pertencem à  $S_1$  se  $-1 < A_k < 0$  ou ao eixo real negativo, se  $A_k < -1$ . Para  $\tilde{x} > 8$  todos os zeros estão no eixo real negativo.

## 4.4 Resultados analíticos aproximados

### 4.4.1 $\tilde{x} \rightarrow 0$

Para achar os zeros da função de partição (4.15) temos que encontrar os autovalores da matriz de transferência, que são dados pela equação cúbica (4.16). Os zeros para  $n$  grande aparecem quando temos o módulo de dois autovalores iguais e maiores que o terceiro autovalor [33], isto é, por exemplo  $|\lambda_+| = \rho = |\lambda_-| > \rho_0 = |\lambda_0|$ , nesse caso

$$\begin{aligned} Z_n &= \left(\frac{1}{c}\right)^n [\lambda_+^n + \lambda_-^n + \lambda_0^n] = \left(\frac{1}{c}\right)^n \rho^n [e^{in\theta_+} + e^{in\theta_-} + \left(\frac{\rho_0}{\rho}\right)^n e^{in\theta_0}] \\ &\approx \left(\frac{1}{c}\right)^n \rho^n [e^{in\theta_+} + e^{in\theta_-}] = 0 \end{aligned} \quad (4.58)$$

para  $\theta_+$  e  $\theta_-$  apropriados. O uso das soluções exatas da equação cúbica, vide apêndice B, não é muito útil para satisfazer tal condição. Então vamos calcular algumas soluções aproximadas. Sabemos que recaímos no modelo de Ising de spin 1/2 para  $\tilde{x} = 0$ , então

resolvemos a equação (4.16) fazendo uma expansão para  $\tilde{x}$  pequeno, os autovalores são:

$$\lambda_0 = \frac{b - 2c + bc^2}{b(1 + c^2)} \tilde{x} - \frac{2Ac(b - 2c + bc^2)}{b^3(1 + c^2)^3} \tilde{x}^2 + \mathcal{O}(\tilde{x}^3) \quad (4.59)$$

$$\lambda_{\pm} = b\sqrt{1 - c^4}g_{\pm} + \frac{1}{b} \left( \frac{c}{b} + \frac{2c^3}{(c^2 + 1)(g_{\pm}^2 - 1)} \right) \tilde{x} + \mathcal{O}(\tilde{x}^2) \quad (4.60)$$

onde

$$g_{\pm} = \frac{A}{\sqrt{1 - c^4}} \pm \sqrt{\frac{A^2}{1 - c^4} - 1} \quad (4.61)$$

As expressões (4.59)<sup>1</sup> é singular em  $b = 0$  e (4.60) é singular em  $g_{\pm}^2 = 1$ , que é a singularidade da ponta de Yang-Lee  $(\lambda_+ = \lambda_-)^2$  para o modelo de Ising de spin 1/2 ( $\tilde{x} = 0$ ). Isso quer dizer que a expressão não faz sentido em torno de  $b = 0$  ou  $(\theta_{\pm})^2 = 1$ . Como  $g_+g_- = 1$ , podemos escrever  $g_+ = \rho e^{i\theta}$  e  $g_- = (1/\rho)e^{-i\theta}$ . Assumindo que  $\rho = 1$ , então  $-\sqrt{1 - c^4} < A < \sqrt{1 - c^4}$ , que nos leva a  $S^1 |e^{-h}| = 1$  pois  $-1 < \cosh(h) < 1$ . Nessa situação temos que  $|\lambda_+| = |\lambda_-|$ . Portanto os zeros estarão na  $S^1$  se  $\delta_{\pm} = |\lambda_{\pm}| - |\lambda_0| > 0$ . Chamando  $f_i = \ln \lambda_i$ , podemos escrever que  $\delta_{\pm} = \text{Re}(f_{\pm} - f_0) > 0$ . Podemos checar essa condição à partir das equações (4.59) e (4.60). Assumindo que  $g_{\pm} = e^{\pm i\theta}$ , temos<sup>3</sup>:

$$\delta_{\pm} = \frac{1}{2} \ln \left[ \frac{b^4(1 + c^2)^3(1 - c^2)}{(b - 2c + bc^2)^2} \right] - \ln \tilde{x} + \left( \frac{(2b^2 + 1) \cos \alpha}{b^2(1 + c^2)^2} \right) \tilde{x} + \mathcal{O}(\tilde{x}^2) \quad (4.62)$$

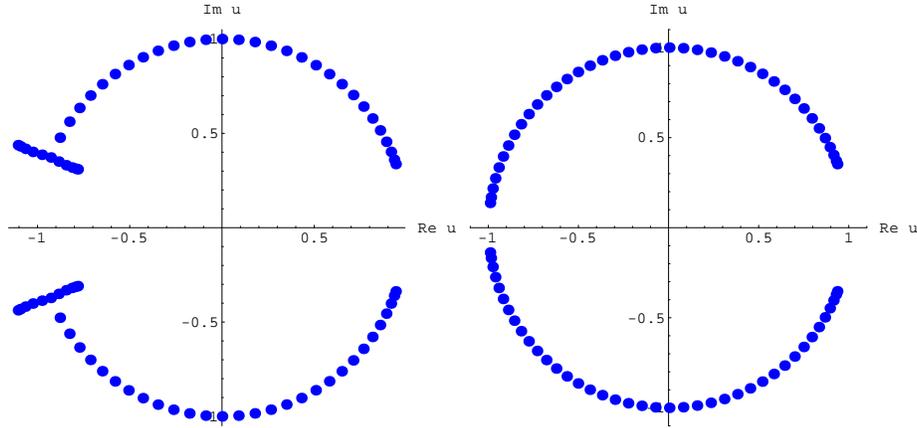
Na equação (4.62)  $h \equiv i\alpha$ , assim  $\cos \theta = \cos \alpha / \sqrt{1 - c^4}$ , o segundo termo do lado direito da equação (4.62) domina as diferenças  $\delta_{\pm}$  para  $\tilde{x} \rightarrow 0$  e garantirá que  $\delta_{\pm} > 0$  contanto que  $c$  não esteja próximo de um. Somente para casos especiais, como o modelo Blume-Capel onde  $b = 1$  e o fator  $(1 - c)$  no numerador do primeiro termo de (4.62) cancela, possibilitando fazer afirmações independentes da temperatura para  $\tilde{x} \rightarrow 0$ . O terceiro termo à direita de (4.62) nos informa que quando  $\tilde{x}$  aumenta, os zeros tendem a sair da

<sup>1</sup>Em [9] que corresponde ao modelo Blume-Capel ( $b = 1$ ) o numerador do primeiro termo da equação (4.59) aparece como  $(1 - c^2)^2$ , mas deveria ser  $(1 - c)^2$  em acordo com nossos resultados para  $b = 1$ .

<sup>2</sup>Como vimos na equação (2.9) o ponto onde  $\lambda_+ = \lambda_-$  corresponde ao cancelamento da raiz, então é ponto de ramificação. Dessa forma não é surpreendente encontrar singularidades nas expansões em torno desses pontos.

<sup>3</sup>Novamente nossos cálculos estão diferentes de [9], o terceiro termo da equação (4.62) aparece como  $\frac{5 \cos \alpha}{(1 + c^2)^2}$ , mas deveria ser  $\frac{3 \cos \alpha}{(1 + c^2)^2}$  em acordo com nossos resultados para  $b = 1$ .

circunferência de módulo 1 quando  $\cos \alpha$  é mais negativo, como indica a figura 4.6(a). Portanto, equação (4.62) nos diz como os zeros se comportam e como eles abandonam a  $S^1$ , confirmando nossos cálculos numéricos pelo menos para  $\tilde{x}$  pequeno.



(a)  $\tilde{x} = 0.33$ ,  $c = 0.3$  e  $b = 0.3$ ,

(b)  $\tilde{x} = 0.1$ ,  $c = 0.5$  e  $b = 0.6$

Figura 4.6: Zeros do modelo BEG com  $n = 80$  para  $\tilde{x}$  pequeno.

#### 4.4.2 $b \rightarrow \infty$

O fato de recairmos no modelo de Ising de spin 1/2 para  $b \rightarrow \infty$  nos sugere olhar também para expansões para  $b$  grande. Resolvendo a equação cúbica (4.16) em séries de potências de  $1/b$  temos:

$$\lambda_0 = \tilde{x} \frac{1}{b} \left( 1 - \frac{2c\gamma}{1+c^2} \right) + \mathcal{O} \left( \frac{1}{b^3} \right) \quad (4.63)$$

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{1-c^4} g_{\pm} - 2\tilde{x} \left( 1 - \frac{1}{g_{\pm}^2 - 1} \right) \frac{1}{b} + \mathcal{O} \left( \frac{1}{b^2} \right) \quad (4.64)$$

onde  $g_{\pm}$  são dados em (4.61). Fazendo as mesmas considerações feitas para a expansão a  $\tilde{x}$  pequeno, podemos escrever  $g_+ = \rho e^{i\theta}$  e  $g_- = (1/\rho) e^{-i\theta}$ , se  $\rho = 1$ , teremos  $|\lambda_+| = |\lambda_-|$

e para que os zeros estejam na  $S^1$ ,  $\delta_{\pm} > 0$ , isto é,  $|\lambda_+| = |\lambda_-| > |\lambda_0|$ . Agora

$$\delta_{\pm} = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 - c^4}{\tilde{x}} \right) - \ln \frac{1}{b} + \left( \frac{c}{1 + c^2} - \frac{\tilde{x} \cos \alpha}{1 - c^4} \right) \frac{1}{b} + \mathcal{O} \left( \frac{1}{b^2} \right) \quad (4.65)$$

Novamente mesmo que  $((1/b) \rightarrow 0)$  não é possível garantir que os zeros estarão na  $S^1$  ( $\delta_{\pm} > 0$ ) para qualquer temperatura pois o primeiro termo do lado direito de (4.65) torna muito negativo para  $c \rightarrow 1$  e assim não temos novamente uma afirmação independente da temperatura sobre a posição dos zeros. Analisando o termo de ordem  $1/b$  podemos concluir que os zeros tenderão a sair da circunferência primeiramente para ângulos  $\alpha$  mais próximos de  $\alpha = 0$  como mostra a figura 4.7.

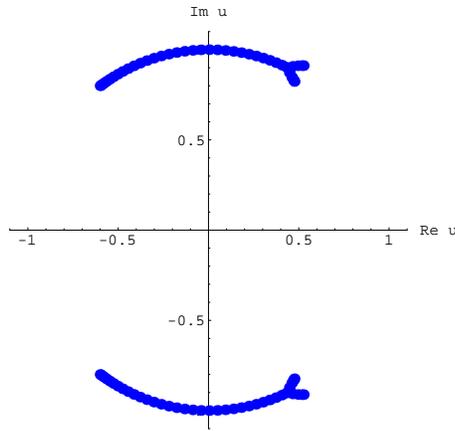


Figura 4.7: Zeros do modelo BEG para  $b$  grande ( $\tilde{x} = 9$ ,  $b = 8$  e  $c = 0.9$ ).

#### 4.4.3 $c \rightarrow 0$

Agora vamos fazer uma expansão a baixas temperaturas. Vamos fazer essa expansão porque sabemos que o modelo BEG se reduz ao modelo de Ising quando  $c \rightarrow 0$ . Resolvendo a equação cúbica (4.16) em séries de potências de  $c$  temos:

$$\lambda_0 = \tilde{x} \left[ 1 + \frac{2(A\tilde{x} - b)}{(\tilde{x} - be^h)(\tilde{x} - be^{-h})} c \right] + \mathcal{O}(c^2) \quad (4.66)$$

$$\lambda_{\pm} = be^{\pm h} \left[ 1 + \frac{\tilde{x}}{b(be^{\pm h} - \tilde{x})}c \right] + \mathcal{O}(c^2) \quad (4.67)$$

Definindo  $e^h = \rho e^{i\alpha}$ , impondo que  $\Re(f_+ - f_0) = 0$  ( $|\lambda_+| = |\lambda_0|$ ) ou  $\Re(f_- - f_0) = 0$  ( $|\lambda_-| = |\lambda_0|$ ), obtemos respectivamente:

$$\rho_+ = \frac{\tilde{x}}{b} + \frac{\tilde{x}(\tilde{x}^2 \cos \alpha - 1)}{\tilde{x}^4 + b^4 - 2\tilde{x}^2 b^2 \cos \alpha} c + \mathcal{O}(c^2) \quad (4.68)$$

$$\rho_- = \frac{b}{\tilde{x}} - \frac{(\tilde{x}^2 \cos \alpha - 1)}{\tilde{x}(\tilde{x}^4 + b^4 - 2\tilde{x}^2 b^2 \cos \alpha)} c + \mathcal{O}(c^2) \quad (4.69)$$

Devido à simetria  $H \rightarrow -H$ , nós temos  $\rho_+ = 1/\rho_-$ . Assumindo que  $|\lambda_+| = |\lambda_0|$ , portanto  $\rho = \rho_+$ , neste caso teremos a diferença:

$$\Re(f_+ - f_-) = 2 \ln \frac{\tilde{x}}{b} + \frac{\tilde{x}^4 - b^4 - 2b^2 + 2\tilde{x}^2 b^2 \cos \alpha}{\tilde{x}^4 + b^4 - 2\tilde{x}^2 b^2 \cos \alpha} \frac{c}{b} + \mathcal{O}(c^2) \equiv F(\tilde{x}, b, c, \alpha) \quad (4.70)$$

$$F(\tilde{x}, b, c, \alpha) \equiv 2 \ln \frac{\tilde{x}}{b} + \frac{\tilde{x}^4 - b^4 - 2b^2 + 2\tilde{x}^2 b^2 \cos \alpha}{\tilde{x}^4 + b^4 - 2\tilde{x}^2 b^2 \cos \alpha} \frac{c}{b} + \mathcal{O}(c^2) \quad (4.71)$$

Sempre que considerarmos  $F > 0$  nós temos que  $|\lambda_+| = |\lambda_0| > |\lambda_-|$ . Se assumirmos que  $\rho = \rho_-$  no cálculo de  $\Re(f_+ - f_-)$  podemos simplificar trocando o sinal do resultado ( $\Re(f_+ - f_-) = -F$ ) e conseqüentemente quando  $F > 0$  teremos  $|\lambda_-| = |\lambda_0| > |\lambda_+|$ . Então, para  $F > 0$  os zeros devem vir tanto de  $\rho = \rho_+$  como  $\rho = \rho_-$  e para  $F < 0$  temos  $|\lambda_+| = |\lambda_-| > |\lambda_0|$  com  $\rho = 1$ , ou seja, zeros na  $S^1$ . Nas figuras 4.8 e 4.9 plotamos  $\rho_+$  e  $\rho_-$  para  $c = 0.1$  e  $b$  e  $x$  diferentes.

Checamos que para as figuras 4.9(a) e 4.9(b)  $F > 0$ , já para figura 4.8  $F$  nem sempre é maior que zero, explicando a divergência com as curvas analíticas. A diferença que aparece a partir das pontas nas curvas dos zeros, é conseqüência do mau comportamento da expansão a baixas temperaturas em torno da singularidade de Yang-Lee. O mesmo problema acontece para o modelo de Ising de spin 1/2 e para o modelo Blume-Capel [9].

Analisamos também o caso em que os zeros poderiam vir de uma tripla degenerescência de autovalores, isto é,  $|\lambda_+| = |\lambda_-| = |\lambda_0|$ , mas isso só acontece para valores bastante especiais (e complicados) dos parâmetros do modelo para os quais não encontramos in-

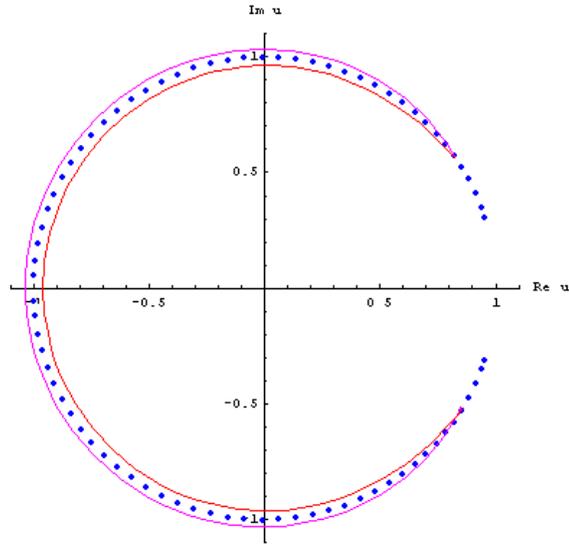
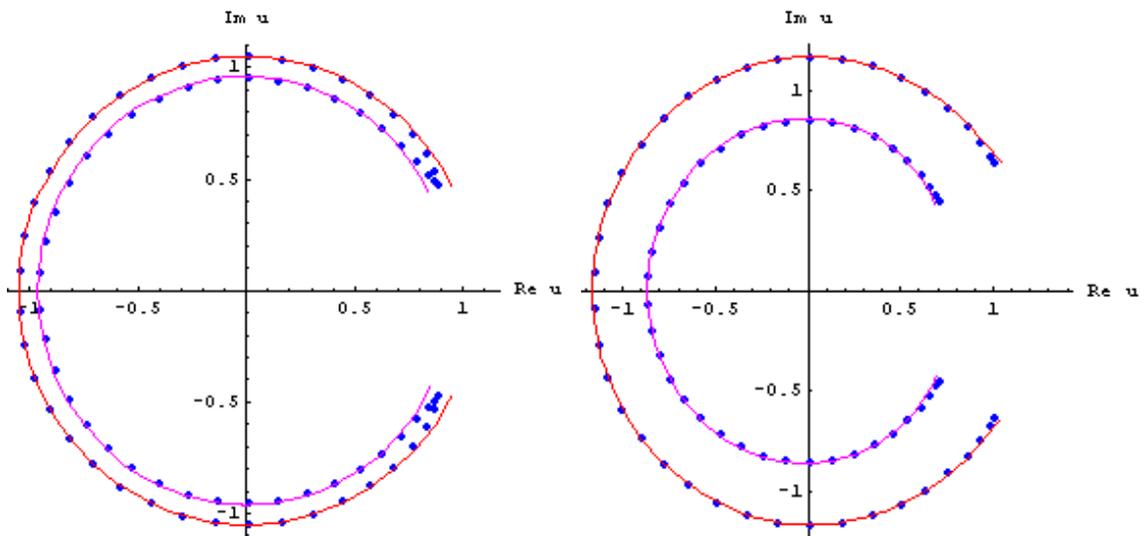


Figura 4.8: A curva em vermelho é para  $\rho_+(\alpha)$ , a rosa é para  $\rho_-(\alpha)$  e os pontos azuis são os zeros do modelo BEG  $b = 1.1$ ,  $c = 0.1$ ,  $\tilde{x} = 1.1$  e  $n = 40$

interpretação razoável e na prática não encontramos zeros que tenham vindo dessa tripla coincidência, da mesma forma que ocorreu no modelo de Blume-Capel.



(a)  $\tilde{x} = 1$ ,  $c = 0.1$  e  $b = 0.9$

(b)  $\tilde{x} = 1.1$ ,  $c = 0.1$  e  $b = 0.9$

Figura 4.9: A curva em vermelho é para  $\rho_+(\alpha)$ , a rosa é para  $\rho_-(\alpha)$  e os pontos azuis são os zeros do modelo BEG para diferentes  $\tilde{x}$ ,  $c$  e  $b$ , quando os zeros não estão na  $S^1$ . Nas figuras usamos  $n = 40$  spins (80 zeros)

## 4.5 Densidade de zeros de Yang-Lee

Vamos calcular o expoente crítico  $\sigma$  para os zeros da função de partição do modelo BEG sobre um anel (rede estática).

O cálculo de  $\sigma$  para zeros que não estejam na  $S^1$  já foi feito anteriormente para o modelo de Potts [33], mas os zeros desse modelo tem uma particularidade, que o torna muito semelhante ao modelo de Ising de spin 1/2. Embora os zeros do modelo de Potts não estejam na  $S^1$  no plano complexo  $e^{-h}$ , pode-se mostrar que fazendo uma mudança de variável eles vão para  $S^1$ . Além disto existe uma fórmula fechada para os zeros de Yang-Lee semelhante a (2.18). O cálculo do expoente crítico  $\sigma$  foi feito analiticamente, sendo  $\sigma = -1/2$ , confirmando a universalidade do expoente crítico para modelos unidimensionais. A demonstração é análoga ao que fizemos para o modelo de Ising de spin 1/2 (vide 2.3). O modelo de Potts unidimensional de  $Q$  estados é especial porque sempre teremos somente 3 autovalores distintos da matriz de transferência, independente do número de estados. Um dos autovalores,  $\lambda_0$ , é um número real e é  $(Q - 2)$  vezes degenerado, isso permite fatorar a equação secular do modelo na equação de 2º grau do modelo de Ising de spin 1/2, por isso que se consegue calcular o expoente crítico e os zeros de Yang-Lee analiticamente. Já para o modelo BEG, nossos três autovalores são complicados (vide Apêndice B), dificultando o cálculo do expoente crítico analiticamente, assim calculamos o expoente crítico apenas numericamente.

Os autores de [34] mostraram que o zero mais próximo do eixo real positivo  $u_1(n)$  para sistemas finitos se aproxima de  $u_E(\infty)$  quando tomamos o limite de  $n \rightarrow \infty$  seguindo a lei de escala:

$$u_1(n) - u_E(\infty) \sim n^{-y_h} \quad (4.72)$$

onde  $y_h$  corresponde [34] a combinação de expoentes críticos  $\beta\delta/\gamma$ . Da mesma forma, temos que a densidade dos zeros próxima de  $u_1(n)$  tem a seguinte relação de escala [27], [35], [36]:

$$\rho(u_1(n)) \sim n^{-(d-y_h)} \quad (4.73)$$

onde  $d$  é a dimensão do espaço. Das relações (4.72) e (4.73) podemos obter o expoente crítico  $\sigma$  pois [26],

$$\rho(u) \sim (u - u_E)^{-\sigma} \sim (u - u_E)^{(d-y_h)/y_h} \quad (4.74)$$

Para o modelo BEG sobre um anel conexo, calculamos o expoente  $y_h$  para a função de partição com  $b = 2$ ,  $c = 0.9$  e  $x = 5$ . Usamos a parte real da relação (4.72), neste caso os zeros não estão no círculo unitário, como mostra a figura 4.10. A tabela 4.1 nos fornece a parte real do zero mais próximo do eixo real positivo para diferentes tamanhos de rede ( $n$ ). Com esses dados fizemos um ajuste usando a função NonLinearFit do Mathematica. A função usada para esse ajuste foi  $\Re(u_1(n)) = A/n^B + C \equiv g(n)$ . Chegamos às constantes  $A = -0.9137$ ,  $B = y_h = 1.9993$  e  $C = \Re(u_E(\infty)) = 0.0502$  para o arco de raio menor. Fizemos o mesmo cálculo para o arco de raio maior obtendo:  $A = -5.8124$ ,  $B = y_h = 1.9993$  e  $C = \Re(u_E(\infty)) = 0.3152$ . Os ajustes, vide por exemplo figura 4.11, tiveram um erro percentual máximo de  $2.7 \times 10^{-6}\%$  para o arco menor e  $3.75 \times 10^{-6}$  para o arco maior. O erro percentual foi calculado a partir da equação:

$$d_{\%}(n_i) = \left| \frac{\Re u_1(n_i) - g(n_i)}{g(n_i)} \right| \times 100\% \quad (4.75)$$

onde  $\Re u_1(n_i)$  é dado pela tabela e  $g(n)$  é obtido a partir do ajuste. Calculamos também o coeficiente  $\chi_2$  que mede a qualidade do ajuste, dado por:

$$\chi_2 = \sum_{i=1}^8 |\Re u_1(n_i) - g(n_i)|^2 \quad (4.76)$$

e obtivemos  $\chi_2 = 4.79 \times 10^{-19}$  para o arco menor e  $\chi_2 = 3.41 \times 10^{-16}$  para o arco maior. No lugar de considerar a parte real do primeiro zero, consideramos a parte imaginária e obtivemos  $y_h = 1.9950$ , com desvio percentual máximo  $d_{\%} = 6.23 \times 10^{-7}\%$  e  $\chi_2 = 1.50 \times 10^{-17}$  para o arco menor e  $d_{\%} = 2.78 \times 10^{-6}\%$  e  $\chi_2 = 4.79 \times 10^{-18}$  para o arco maior.

Embora para o caso de um anel conexo, tenhamos certeza de que se trate de uma rede unidimensional ( $d = 1$ ), quando considerarmos anéis conexos e desconexos não saberemos se a soma sobre diagramas afetará  $d$ . Para conferir  $d$  fizemos um novo ajuste considerando a equação (4.73) num gráfico dilog,  $\ln(\rho(n)) \sim A \ln(n) + B$  e obtivemos uma curva bem próxima de uma reta com constantes  $A = y_h - d = 0.9956$  e  $B = -3.8245$ , portanto  $d = 1.0037$  para o arco maior, como mostra a figura 4.12 para  $50 \leq n \leq 120$ . O erro

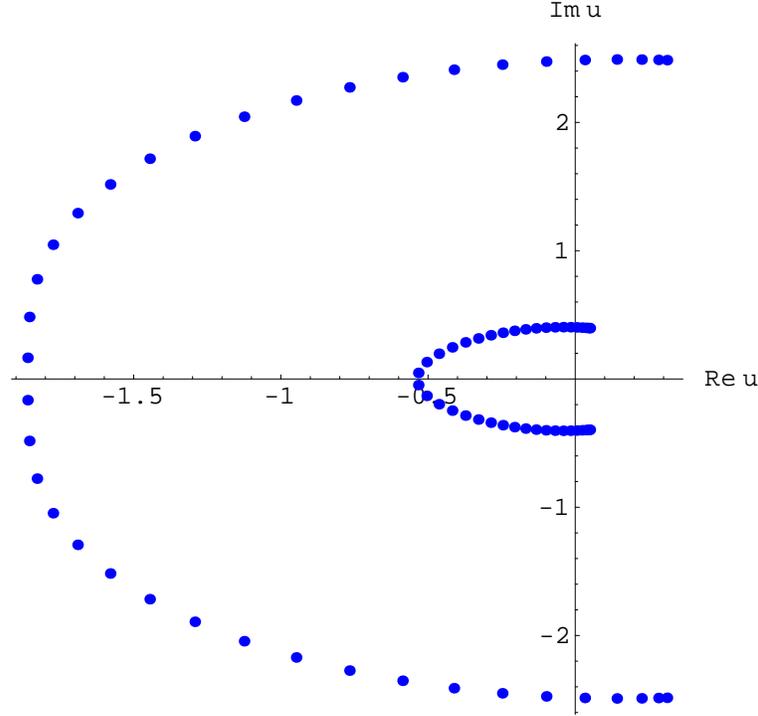


Figura 4.10: Zeros do modelo BEG com  $b = 2$ ,  $c = 0.9$ ,  $x = 5$  e  $n = 40$

percentual máximo foi de 0.018%. Calculamos ainda o coeficiente de Pearson, que mede o grau de relação linear entre duas variáveis, esse coeficiente pode variar de -1 até 1. O valor 0 significa que não há relação linear e os valores 1 e -1 representam uma relação linear perfeita, esse resultado está relacionado com o coeficiente angular da reta, quando valer 1 o coeficiente angular é positivo e quando valer  $-1$  o coeficiente angular é negativo. O coeficiente de Pearson é dado por:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^8 (\ln \rho_i - \langle \ln \rho \rangle) (\ln i - \langle \ln n \rangle)}{\sqrt{\sum_{i=1}^8 (\ln \rho_i - \langle \ln \rho \rangle)^2 \sum_{i=1}^8 (\ln i - \langle \ln n \rangle)^2}} \quad (4.77)$$

onde  $\langle \ln \rho \rangle$  e  $\langle \ln n \rangle$  são as médias aritméticas. Para o arco maior obtivemos 1.00.

A densidade próxima da ponta do arco maior foi obtida a partir dos dois zeros mais próximos do eixo real positivo via:  $\rho \left( \frac{u_1 + u_2}{2} \right) = 1 / (n |u_1 - u_2|)$ . Repetindo o cálculo para o arco menor, encontramos  $A = d - y_h = 0.9962$ ,  $B = -1.9906$  e  $d = 1.0031$ , com erro

n	$\Re(u_1)$ (raio menor)	$\Re(u_1)$ (raio maior)
50	0.049865	0.312930
60	0.049977	0.313642
70	0.050045	0.314071
80	0.050089	0.314350
90	0.050119	0.314541
100	0.050140	0.314678
110	0.050156	0.314779
120	0.050168	0.314856

Tabela 4.1: Parte real do primeiro zero da circunferência de raio menor e de raio maior para diferentes números de spins, com  $b = 2$ ,  $c = 0.9$  e  $x = 5$

percentual máximo de 0.26% e coeficiente de Pearson  $r = 1.00$ .

Substituindo  $y_h$  e  $d$  na equação (4.74) chegamos à conclusão que o expoente crítico  $\sigma = -0.4979$  para o arco de raio maior e  $\sigma = -0.4982$  para o arco de raio menor, considerando nesse caso a parte real do primeiro zero. Usando a parte imaginária encontramos  $\sigma = -0.5019$  para o arco de raio maior e  $\sigma = -0.4993$  para o arco de raio menor, assim obtivemos o valor médio  $\bar{\sigma} = -0.4999$  para o arco de raio maior e  $\bar{\sigma} = -0.4987$  para o arco de raio menor. Refizemos esse cálculo para diferentes valores de  $b$ ,  $c$  e  $x$  e verificamos que  $\sigma \approx -1/2$  para todos os casos estudados. Para ver como a densidade se comporta perto do zero mais próximo do eixo real positivo, fizemos um gráfico considerando os 7 zeros da função de partição  $Z_n$  mais próximos do eixo real positivo com a parte imaginária positiva para  $b = 2$ ,  $c = 0.9$ ,  $x = 5$  e  $n = 60$ , vide figura 4.13. Podemos perceber explicitamente que  $\rho(u)$  cresce quando chegamos perto da singularidade da ponta de Yang-Lee. Na figura 4.13 os pontos cheios correspondem a  $\rho(\bar{u}_k) = 1/(n|u_k - u_{k+1}|)$  onde  $k = 1, \dots, 7$ . A curva foi obtida via NonLinearFit com três parâmetros  $\rho(x) = Ax^B + C$  onde  $A = 0.0962$ ,  $B = -0.5108$  e  $C = 0.0231$ .

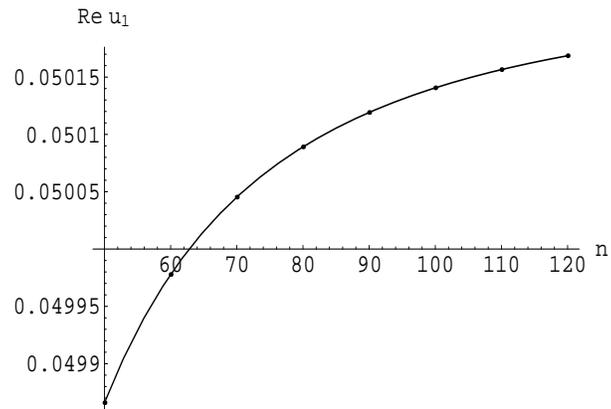


Figura 4.11: Gráfico de  $\Re(u_1) \times n$  para o arco menor. A curva sólida corresponde a  $(A/n^B + C)$  com  $A = -0.9137$ ,  $B = 1.9993$  e  $C = 0.0502$

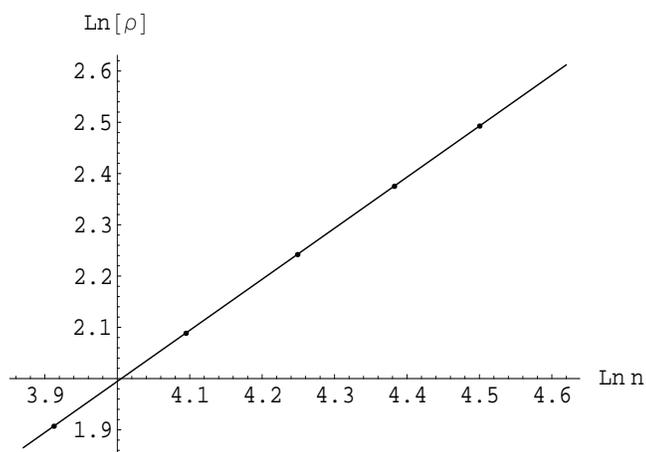


Figura 4.12: Gráfico da densidade dos zeros da ponta ( $\ln(\rho(u_1)) \times \ln n$ )

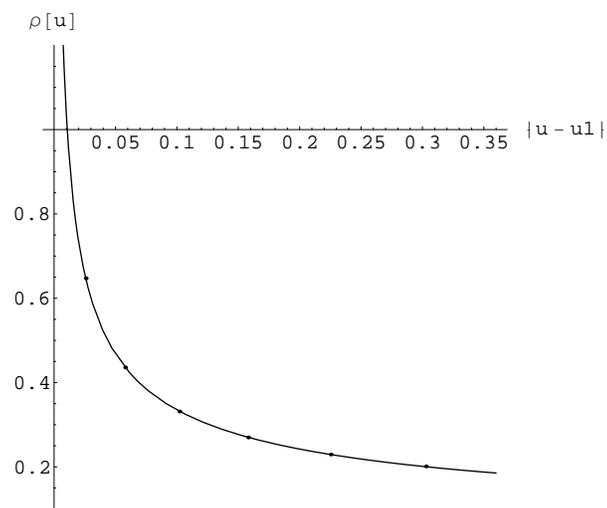


Figura 4.13: Gráfico de  $\rho(u) \times |u - u_1|$  para  $b = 2$ ,  $c = 0.9$ ,  $x = 5$  e  $n = 60$ .

## 4.6 Mínimos da energia e posição dos zeros

Em [9] foi observado numericamente que para  $\tilde{x} < 1$  os zeros de Yang-Lee do modelo Blume-Capel unidimensional, tanto para um anel conexo como para a rede dinâmica, estão na  $S^1$ . Uma análise dos mínimos da energia do modelo Blume-Capel (vide apêndice C para  $k = 0$ ) revela que para  $\tilde{x} < 1$  as configurações de alinhamento total  $n_+ = n$  ou  $n_- = n$  correspondem ao mínimo da energia enquanto que para  $\tilde{x} > 1$  a configuração de energia mínima corresponde a todos os spins nulos. Ou seja,  $\tilde{x} = 1$  parece ser um ponto especial para o modelo Blume-Capel unidimensional. Especulamos que os pontos onde ocorrem mudanças de mínimos para o modelo BEG ( $k \neq 0$ ) nos dariam relações importantes sobre como os zeros saem da  $S^1$ .

As mudanças de mínimos para o modelo BEG unidimensional ocorrem nas fronteiras das regiões abaixo [37] (vide apêndice C, figura C.2).

$$b = xc, \quad \text{se } b > c, \quad (4.78)$$

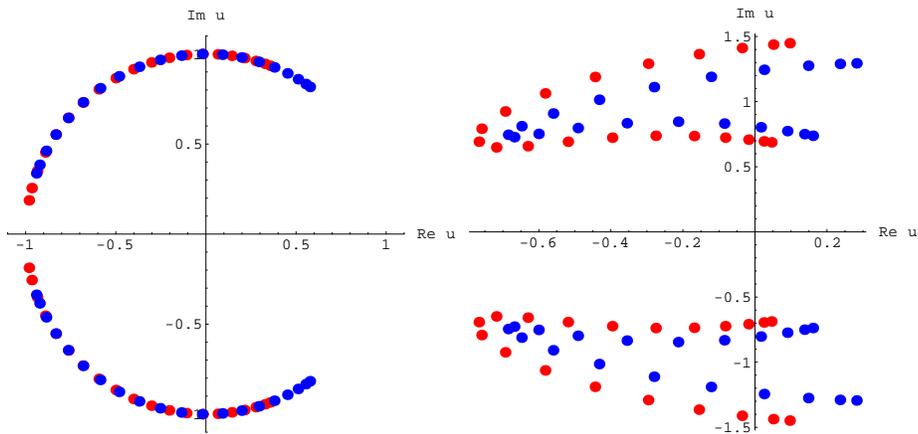
$$b = \sqrt{xc}, \quad \text{se } b < c \quad (4.79)$$

e

$$x = 1, \quad \text{se } b < c \quad (4.80)$$

Os cálculos numéricos indicam que as relações (4.78), (4.79) e (4.80) não parecem ser relevantes para a posição dos zeros de Yang-Lee do modelo BEG unidimensional. Um exemplo são as figuras 4.14 e 4.15. Na figura 4.14 temos o caso  $b > c$  com  $b < xc$  (vermelho) e  $b > xc$  (azul), na figura 4.15 temos o caso  $b < c$  com  $b < \sqrt{xc}$  (vermelho) e  $b > \sqrt{xc}$  (azul) e na figura 4.16 temos o caso  $b < c$  com  $b < \sqrt{xc}$  (vermelho) e  $b > \sqrt{xc}$  (azul).. Não há mudança qualitativa na posição dos zeros.

Concluimos então, que os pontos onde ocorrem mudanças de mínimos não nos dão nenhuma relação para a validade do TS1 para o modelo BEG unidimensional, portanto a importância desse ponto para o modelo de Blume-Capel unidimensional nos parece ter sido apenas uma coincidência.



(a)  $x = 2$ ,  $c = 0.7$  e  $b = xc - 0.2 = 1.2$  para os pontos vermelhos e  $b = xc + 0.2 = 1.6$  para os pontos azuis

(b)  $x = 2$ ,  $c = 0.9$  e  $b = xc - 0.2 = 1.6$  para os pontos vermelhos e  $b = xc + 2/10 = 2$  para os pontos azuis

Figura 4.14: Zeros do modelo de BEG 1D para diferentes  $b$

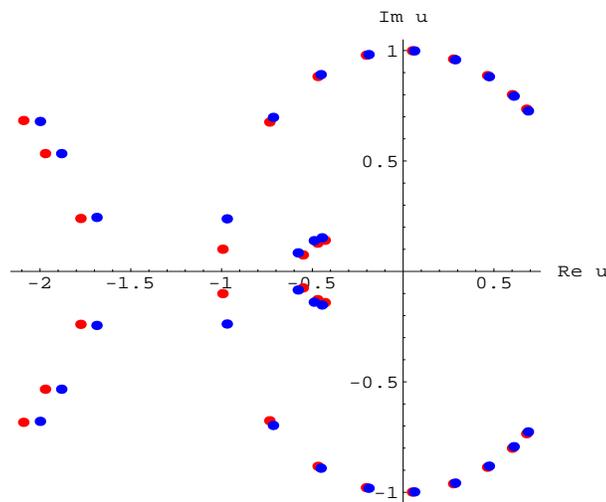


Figura 4.15: Zeros do modelo BEG para  $x = 0.8$ ,  $c = 0.5$  e  $b = \sqrt{xc} - 0.005 = 0.442$  para os pontos vermelhos e  $b = \sqrt{xc} + 0.005 = 0.452$  para os pontos azuis

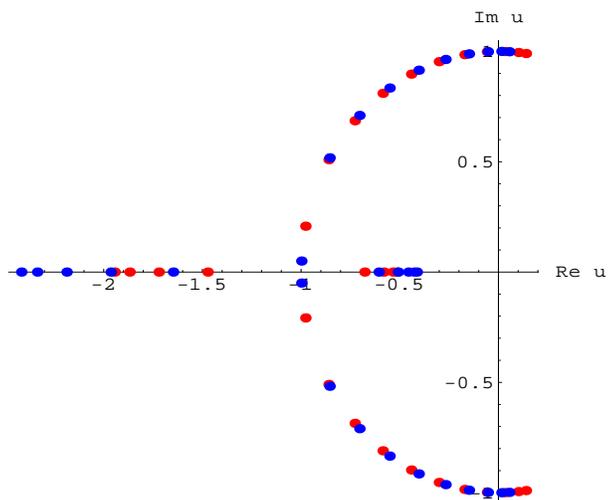


Figura 4.16: Zeros do modelo BEG para  $b = 0.8$ ,  $c = 0.9$  e  $x = 1 - 0.1 = 0.9$  para os pontos vermelhos e  $x = 1 + 0.1 = 1.1$  para os pontos azuis

# Capítulo 5

## Modelo BEG sobre anéis conexos e desconexos

### 5.1 Definição do modelo

A função de partição do modelo BEG, vide (4.11) e (4.12) pode ser escrita como:

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E_{BEG}} = \sum_{\{S_i\}} \exp \left\{ \sum_{\langle i,j \rangle} [j S_i S_j + k S_i^2 S_j^2] + \sum_{i=1}^n [l(1 - S_i^2) + h S_i] \right\} \quad (5.1)$$

Para descrever o modelo BEG sobre anéis conexos e desconexos, usaremos uma função geratriz de diagramas de Feynman, contendo apenas vértices de duas linhas (termos quadráticos nos campos). Agora precisaremos de 3 variáveis diferentes  $\phi_+$ ,  $\phi_-$  e  $\phi_0$  representando os estados  $S_i = +1, -1$  e  $S_i = 0$  respectivamente. Cada vértice corresponde a um sítio da rede e carregará um fator de Boltzmann  $e^h$ ,  $e^{-h}$  e  $e^l$  para  $S_i = +1, -1$  e  $0$  respectivamente, vide (5.1).

Em analogia com o modelo de Ising sobre anéis conexos e desconexos (3.16) sugerimos para o modelo BEG sobre anéis conexos e desconexos a função geratriz:

$$\begin{aligned} G(h, l, k, c, g) &= \frac{\int d\phi_+ d\phi_- d\phi_0 e^{-\frac{1}{2}[\phi_a M_{ab} \phi_b - g(e^h \phi_+^2 + e^{-h} \phi_-^2 + e^l \phi_0^2)]}}{\int d\phi_+ d\phi_- e^{-\frac{1}{2}[\phi_a M_{ab} \phi_b]}} \\ &\equiv \left\langle e^{-\frac{g}{2}(e^h \phi_+^2 + e^{-h} \phi_-^2 + e^l \phi_0^2)} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.2)$$

onde  $g$  é uma constante auxiliar,  $a, b = +, -, 0$  e  $M_{ab}$  é uma matriz simétrica  $3 \times 3$  que

será determinada de forma análoga a (3.17) a partir dos pesos de Boltzmann das conexões entre spins para  $h = 0$  e  $l = 0$ , ou seja,

$$M_{ab}^{-1} = \langle \phi_a \phi_b \rangle = k e^{jS_a S_b + kS_a^2 S_b^2} \quad (5.3)$$

Definindo a função partição sobre anéis conexos e desconexos como:

$$Z_n^{nc} = \frac{1}{2^n n!} \left\langle \left( e^h \phi_+^2 + e^{-h} \phi_-^2 + e^l \phi_0^2 \right)^n \right\rangle \quad (5.4)$$

Para termos uma fórmula simples para a expansão :

$$G(h, l, k, j, g) = \sum_{n=0}^{\infty} g^n Z_n^{nc} \quad (5.5)$$

Podemos interpretar  $e^h \phi_+^2$ ,  $e^{-h} \phi_-^2$  e  $e^l \phi_0^2$  como sendo os sítios (vértices) com spin  $\pm 1$  e 0. A função de partição  $Z_n^{nc}$  corresponde à soma sobre todas as configurações de spin  $S_i = +1, -1, 0$  e sobre todos os anéis conexos e não conexos com  $n$  vértices, de forma que nenhuma linha fique sem conexão.

Podemos fazer a conexão com o modelo estatístico e determinar a matriz  $M_{ab}$ , de (5.3):

$$M_{ab} = k \begin{pmatrix} -1 + \frac{b}{c} & b \left( c - \frac{1}{c} \right) & 1 - cb \\ b \left( c - \frac{1}{c} \right) & b^2 \left( -c^2 + \frac{1}{c^2} \right) & b \left( c - \frac{1}{c} \right) \\ 1 - cb & b \left( c - \frac{1}{c} \right) & -1 + \frac{b}{c} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

Por conveniência para termos uma “ação”  $S_g$  simples, escolhemos:

$$k = \frac{b}{c^2} (1 - c^2) [b (1 + c^2) - 2c] \quad (5.7)$$

Reescrevendo a equação (5.2) temos:

$$G(h, l, k, j, g) = \frac{\int d\phi_+ d\phi_- d\phi_0 e^{-S_g}}{\int d\phi_+ d\phi_- d\phi_0 e^{-S_{g=0}}} \quad (5.8)$$

Com

$$\begin{aligned}
S_g &= \frac{1}{2} \left\{ A (\phi_+^2 + \phi_-^2) + 2B\phi_+\phi_- + D [E\phi_0^2 + 2\phi_0 (\phi_+ + \phi_-)] \right\} \\
&+ \frac{g}{2} (e^h \phi_+^2 + e^{-h} \phi_-^2 + e^l \phi_0^2)
\end{aligned} \tag{5.9}$$

onde  $A = -1 + \frac{b}{c}$ ,  $B = 1 - cb$ ,  $D = b(c - \frac{1}{c})$  e  $E = -b(c + \frac{1}{c})$ . Resolvendo as integrais gaussianas (5.8) e redefinindo  $g \rightarrow k\tilde{g}$  temos:

$$G(h, l, k, c, \tilde{g}) = \frac{1}{[P_3(\tilde{g})]^{1/2}} \tag{5.10}$$

Onde

$$\begin{aligned}
P_3(\tilde{g}) &= 1 - (2Ab + \tilde{x})\tilde{g} + [b^2(1 - c^4) + 2A\tilde{x}(b - c)]\tilde{g}^2 \\
&- b\tilde{x}(1 - c^2)(b - 2c + bc^2)\tilde{g}^3
\end{aligned} \tag{5.11}$$

O polinômio (5.11) obtido aqui via interpretação diagramática é equivalente à equação cúbica (4.16), com  $\tilde{g} = 1/\lambda$ , obtida a partir da matriz de transferência (4.14). Da equação (5.5) podemos escrever:

$$Z_n^{nc} = \frac{1}{k^n} \left\{ [P_3(\tilde{g})]^{-1/2} \right\}_{\tilde{g}^n} \tag{5.12}$$

Por outro lado, em teoria de campos, os diagramas conexos (lado esquerdo da figura 3.5) podem ser extraídos da soma sobre todos os diagramas (conexos e não conexos) tirando-se o logaritmo da função geratriz:

$$\ln G = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}^n \frac{Z_n}{2n} \tag{5.13}$$

Invertendo a equação (5.13), usando (5.10) temos  $Z_n$  do modelo BEG-1D usual (um anel

conexo) que coincide com a definição (4.12) como de fato checamos:

$$Z_n = (2n) (\ln G)_{\tilde{g}^n} \equiv -n [\ln P_3(\tilde{g})]_{\tilde{g}^n} \quad (5.14)$$

Verificamos que os zeros da função de partição (5.14) tem a mesma localização dos zeros da função de partição (4.15) confirmando sua equivalência.

## 5.2 Posição dos zeros de Yang-Lee

Para o cálculo numérico dos zeros sobre anéis conexos e desconexos utilizamos a expressão (5.12) e para um anel conexo (condições periódicas de contorno) usamos (5.14). A equação (5.14) é computacionalmente mais eficiente que a equação (4.15), como ocorreu para o modelo de Ising de spin 1/2.

Comparando a localização dos zeros da função de partição para a rede estática (5.14) e para a dinâmica (5.12), podemos notar que os zeros de (5.14) (pontos vermelhos) não coincidem com os zeros de (5.12) (pontos azuis) nas figura 5.1 e 5.2. A diferença entre a posição dos zeros das diferentes funções de partição é surpreendentemente pequena, não sabemos como explicar isso a partir de (3.33). O mesmo acontece para o modelo de Ising de spin 1/2 (vide capítulo 3).

Considerando números de sítios diferentes, podemos notar que a diferença entre a localização dos zeros diminui conforme aumentamos o número de sítios (figura 5.1), indicando que no limite termodinâmico os zeros da função de partição (5.14) terá a mesma localização dos zeros da função de partição (5.12). Essa análise também é válida quando os zeros da função de partição não estão na  $S^1$ , como mostra a figura 5.2, nem todos os zeros aparecem nas figuras 5.2(a) e 5.2(b) por uma questão de espaço.

A figura 5.3 também mostra a sobreposição dos zeros (azuis) da rede dinâmica (5.12) com os zeros (vermelhos) da rede estática (5.14). Nessa figura podemos notar que os zeros das diferentes funções de partição não estão próximos um dos outros somente em volta do ponto de encontro entre a circunferência de raio um e o arco que cruza com ela. Não entendemos porque esses zeros não seguem a mesma tendência de sobreposição dos demais (vide também figura 5.2(b)).

A condição (4.53), para redes estáticas, nos fornece um valor  $x_{max}$  abaixo do qual para  $0 \leq b \leq 1$  os zeros de  $Z_{nc}^n$  sempre estarão na  $S^1$ . Testamos essa condição e verificamos que ela também funciona para o modelo BEG sobre redes dinâmicas, como mostra a figura

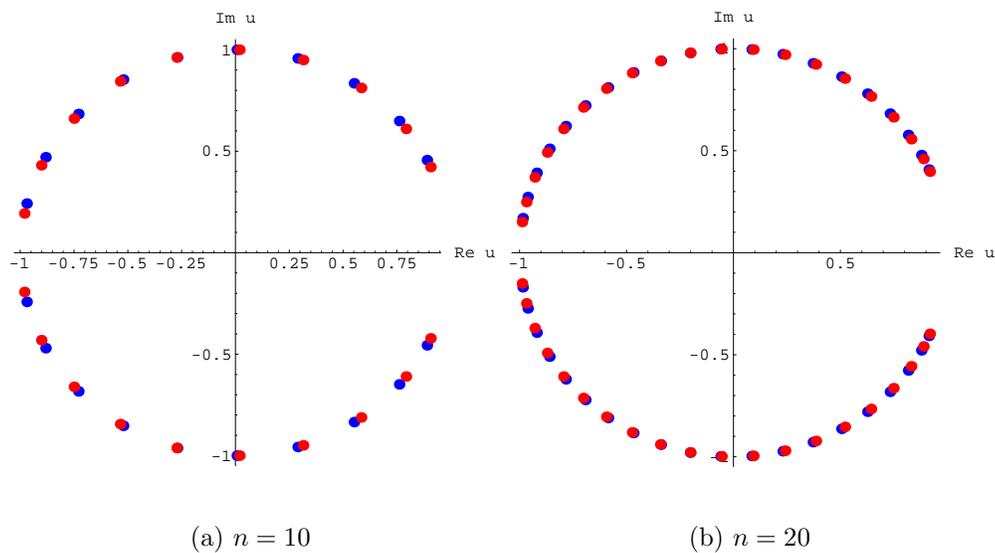


Figura 5.1: Sobreposição dos zeros da função de partição para um anel conexo (zeros vermelhos) com os zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (zeros azuis), com  $c = 0.5$ ,  $x = 0.8$  e  $b = 1.1$ .

#### 5.4.

Outros casos estudados mostram sempre a tendência geral de sobreposição de zeros das redes estática e dinâmica. Em particular temos o modelo Potts de 3 estados, quando sobrepomos os zeros do modelo BEG nas diferentes redes podemos perceber que há um efeito de achatamento nos pólos devido a rede dinâmica, como mostra a figura 5.5, a priori, não há razão para que os zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos estejam ou tendam pra uma circunferência no limite termodinâmico, já que a solução de [33] só vale para o caso conexo.

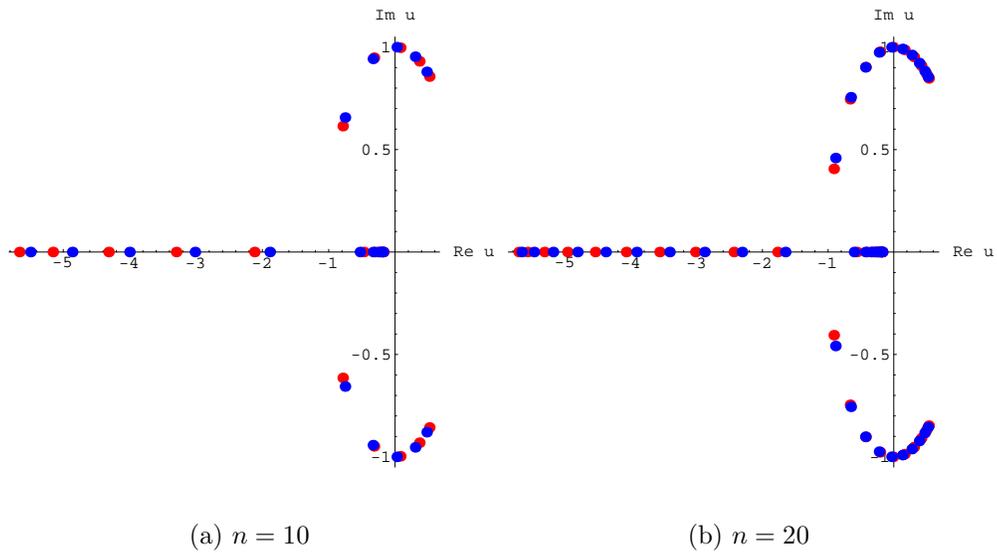


Figura 5.2: Sobreposição dos zeros da função de partição para um anel conexo (zeros vermelhos) e dos zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (zeros azuis), com  $c = 0.5$ ,  $x = 0.8$  e  $b = 0.3$  para diferentes números de sítios.

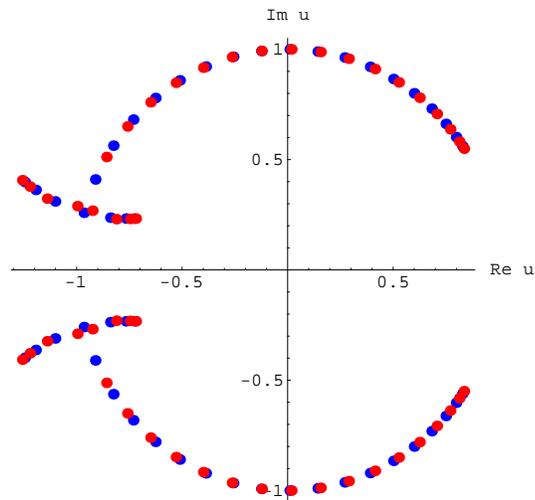
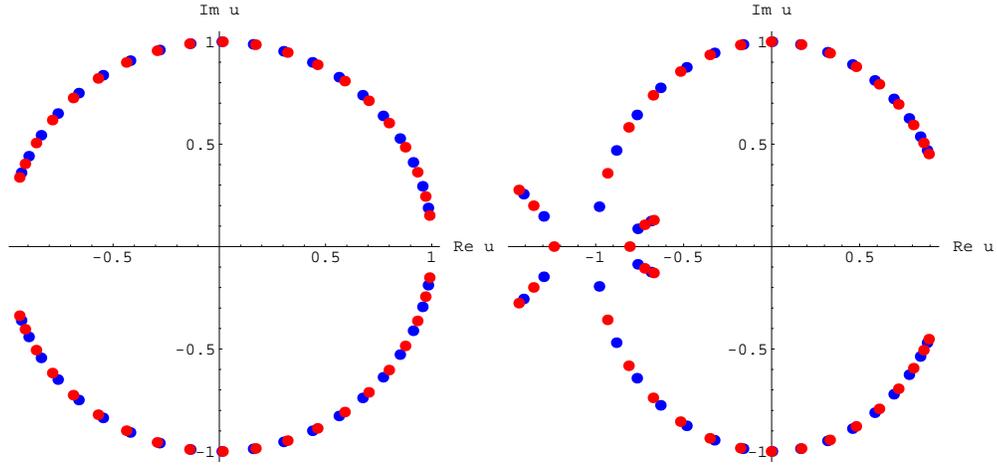


Figura 5.3: Zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (pontos azuis) e um anel conexo (pontos vermelhos) com  $b = 1/2$ ,  $x = 1/2$  e  $c = 1/2$  ( $n = 25$  spins)



(a)  $x = b^2/(1 - b/2 + \sqrt{1 - b}) - 0.01$       (b)  $x = b^2/(1 - b/2 + \sqrt{1 - b}) + 0.01$

Figura 5.4: Sobreposição dos zeros da função de partição para um anel conexo (zeros vermelhos) com os zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos (zeros azuis), com  $c = 0.5$ ,  $x = b^2/(1 - b/2 + \sqrt{1 - b}) \pm 0.01$  e  $b = 0.1$  para  $n = 20$  spins.

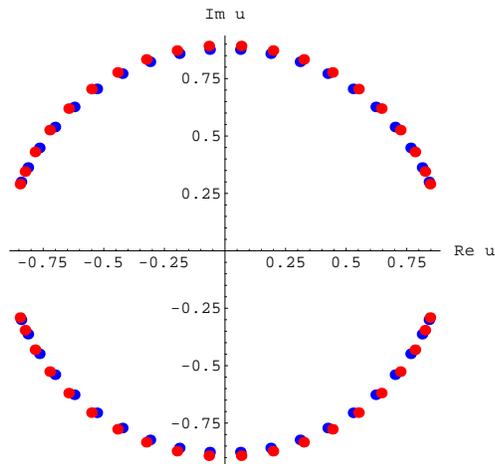


Figura 5.5: Zeros do modelo BEG com  $n = 40$  para  $b = 1/c^3$ ,  $x = u/c^4$  e  $c = 0.5$ , os pontos vermelhos são para a rede estática e os pontos em azul são para a rede dinâmica

### 5.3 Densidade de zeros de Yang-Lee

Agora vamos calcular o expoente crítico  $\sigma$  para os zeros do modelo Blume-Capel (modelo BEG com  $b = 1$ ) em redes dinâmicas. Não calcularemos para o modelo BEG ( $b \neq 1$ ) pois não conseguimos gerar os zeros de Yang-Lee para números grandes de spins na rede dinâmica. O cálculo de  $\sigma$  para o modelo de Blume-Capel sobre anéis conexos e desconexos, será análogo ao que foi feito na seção 4.5.

Vamos calcular  $\sigma$  para o modelo Blume-Capel com  $c = 0.25$  e  $x = 6$ , os zeros não estão na  $S^1$  como mostra a figura 5.6.

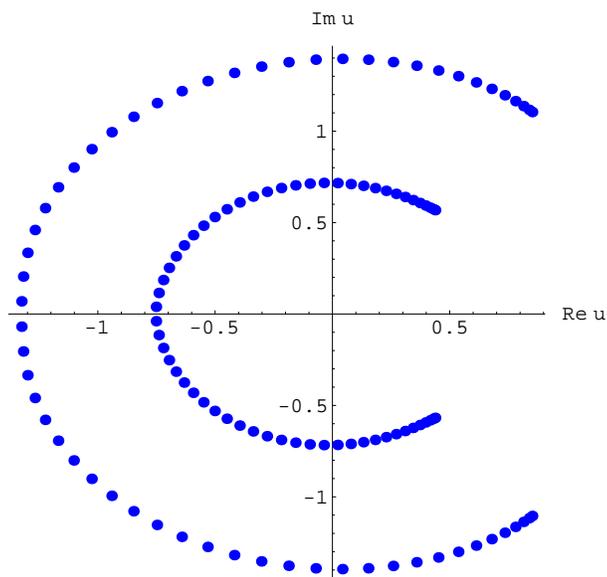


Figura 5.6: Zeros da função de partição para anéis conexos e desconexos com  $b = 1$ ,  $x = 6$ ,  $c = 0.5$  e  $n = 60$  spins

Para calcular o expoente  $y_h$  usamos novamente a parte real da relação (4.72). A tabela 5.1 mostra o zero mais próximo do eixo real positivo para a circunferência de raio menor e de raio maior para diferentes números de spins. Plotando esse resultado e fazendo um ajuste usando a função  $u_1(n) = A/n^B + C$  para descobrir o comportamento desses pontos, chegamos às constantes  $A = -9.9840$ ,  $B = y_h = 1.9719$  e  $C = \Re(u_E(\infty)) = 0.8543$  para o arco de fora, com erro percentual máximo de  $2.8 \times 10^{-5}\%$  e  $\chi_2 = 1.43 \times 10^{-13}$ , vide figura 5.7. Para a circunferência de raio menor obtivemos resultados semelhantes  $A = -6.0707$ ,

$B = y_h = 1.9801$  e  $C = \Re(u_E(\infty)) = 0.4395$ , com erro percentual máximo de  $3.1 \times 10^{-5}\%$  e  $\chi_2 = 4.46 \times 10^{-14}$ .

n	$\Re(u_1)$ (raio menor)	$\Re(u_1)$ (raio maior)
50	0.4369559	0.849916
60	0.4377508	0.851250
70	0.4382321	0.852058
80	0.4385453	0.852585
90	0.4387604	0.852948
100	0.4389146	0.853207

Tabela 5.1: Parte real do primeiro zero da circunferência de raio menor e de raio maior para diferentes números de spins e  $b = 1$ ,  $x = 6$ ,  $c = 0.5$ .

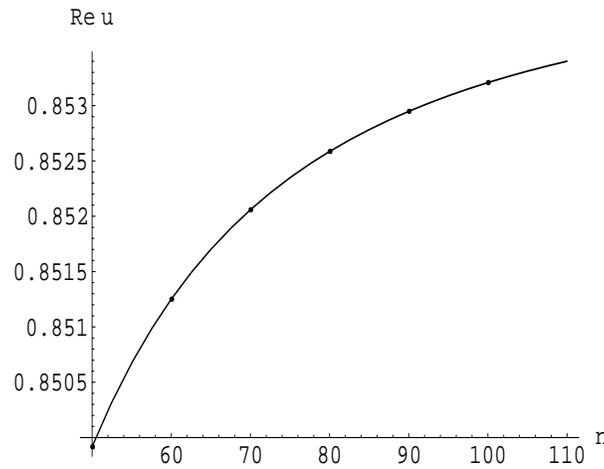


Figura 5.7: Gráfico de  $\Re u(n) \times n$

Para calcular a dimensão do espaço ( $d$ ) fizemos um novo ajuste di-log considerando a equação (4.73) e  $\ln(\rho(u_1)) \sim A \ln(n) + B$  e obtivemos as constantes  $A = y_h - d = 0.9705$ ,  $d = 1.0014$  e  $B = -4.0371$  para a circunferência maior, com o maior erro percentual 1.49% e coeficiente de Pearson igual a 0.9999, vide figura 5.8 e para a circunferência menor  $A = d - y_h = 0.9686$ ,  $d = 1.0115$  e  $B = -3.3606$ , com o maior erro percentual de 0.38% e coeficiente de Pearson igual a 0.9999.

Substituindo os valores encontrados para  $y_h$  e  $d$  na equação (4.74) chegamos a conclusão que o expoente crítico será  $\sigma = -0.5078$  para a circunferência de raio maior e

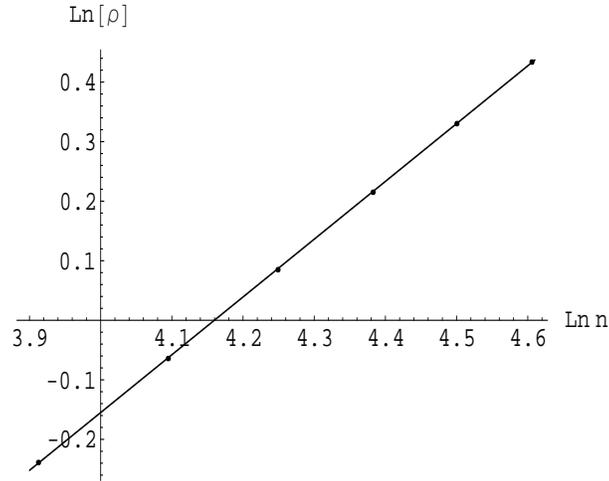


Figura 5.8: Gráfico da densidade dos zeros da ponta ( $\ln(\rho(u_1)) \times \ln n$ ) para o arco de raio maior.

$\sigma = -0.5108$  para a circunferência de raio menor. Considerando a parte imaginária encontramos  $\sigma = -0.5068$  para a circunferência de raio maior e  $\sigma = -0.5176$  para a circunferência de raio menor, assim obtivemos o valor médio  $\bar{\sigma} = 0.5073$  para o arco de raio maior e  $\bar{\sigma} = 0.5142$  para o arco de raio menor. Concluindo, apesar da soma sobre anéis temos ainda  $d \approx 1$  e  $\sigma \approx -1/2$  o que reforça a universalidade desse expoente crítico.

Para ver como a densidade se comporta perto do zero mais próximo do eixo real positivo, fizemos um gráfico considerando os 7 zeros da função de partição  $Z_n$ , figura (5.6), mais próximos do eixo real positivo, de forma análoga ao que foi feito na seção 4.5. A figura 5.9 representa o gráfico  $\rho(u) \times |u - u_1|$ , novamente podemos perceber que  $\rho(u)$  cresce quando chegamos perto da singularidade da ponta de Yang-Lee. Na figura 5.9 os pontos cheios corresponde a  $\rho(u_k) = 1/(n|u_k - u_{k+1}|)$  onde  $k = 1, \dots, 7$ .

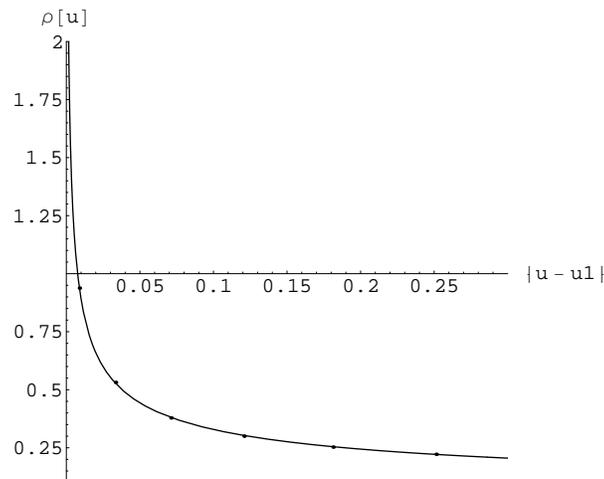


Figura 5.9: Gráfico de  $\rho(u) \times |u - u_1|$ .

## 5.4 Aproximação de ponto de sela

Nesta seção calculamos  $Z_n^{nc}$  em ordem dominante em  $1/n$  via método de ponto de sela. De (5.4) temos:

$$Z_n^{nc} = \frac{1}{2^n n!} \frac{\int d\phi_0 d\phi_+ d\phi_- e^{-S_{g=0} + n \ln V}}{\int d\phi_0 d\phi_+ d\phi_- e^{-S_{g=0}}} \quad (5.15)$$

onde  $S_{g=0}$  é dada em (5.9), com  $g = 0$  e  $V = e^h \phi_+^2 + e^{-h} \phi_-^2 + e^l \phi_0^2$ . Calculando o denominador em (5.15) e fazendo a redefinição  $\phi_a \rightarrow \sqrt{n} \phi_a$  no numerador temos:

$$Z_n^{nc} = \frac{n^{n+3/2} (\det M_{ab})^{1/2}}{2^n n! (2\pi)^{3/2}} \int d\phi_0 d\phi_+ d\phi_- e^{-nS} \quad (5.16)$$

onde

$$S = S_{g=0} - \ln V \quad (5.17)$$

No limite termodinâmico  $n \rightarrow \infty$  podemos obter uma boa aproximação para a integral

tripla (5.16) expandindo  $S$  em torno de seu mínimo, supostamente localizado em  $\phi_a = \tilde{\phi}_a$  a ser determinado pelas equações  $\partial_a S = 0$  que levam a:

$$\left[ \frac{b}{c} - 1 - \frac{2e^h}{V} \right] \phi_+ + (1 - cb) \phi_- + b \left( c - \frac{1}{c} \right) \phi_0 = 0 \quad (5.18)$$

$$(1 - cb) \phi_+ + \left[ \frac{b}{c} - 1 - \frac{2e^{-h}}{V} \right] \phi_- + b \left( c - \frac{1}{c} \right) \phi_0 = 0 \quad (5.19)$$

$$b \left( c - \frac{1}{c} \right) \phi_+ + b \left( c - \frac{1}{c} \right) \phi_- + \left[ b^2 \left( \frac{1}{c^2} - c^2 \right) - \frac{2e^l}{V} \right] \phi_0 = 0 \quad (5.20)$$

As equações (5.18), (5.19) e (5.20) equivalem a equação matricial:

$$\tilde{M}_{ab}(g) \phi_b = 0 \quad ; \quad a, b = 0, \pm \quad (5.21)$$

onde  $\tilde{M}_{ab}(g)$  é exatamente a matriz que aparece em (5.9) ao escrevermos  $S_g = \phi_a \tilde{M}_{ab}^{(g)} \phi_b / 2$  e identificarmos  $2/V$  com  $g$ . Para que (5.21) tenha solução não trivial é preciso que  $\det \tilde{M}(g) = 0$ . Comparando com a equação cúbica  $P_3(\tilde{g}) = 0$  em (5.11) onde sabemos que  $\tilde{g} = g/k = 1/\lambda$ , concluímos que  $2/V = g = k\tilde{g} = k/\lambda$ , assim

$$V = \frac{2}{k} \lambda = \frac{2c^2 [b(1 - c^2) - 2c]}{b(1 - c^2)} \lambda \quad (5.22)$$

onde  $\lambda$  é um dos três autovalores que satisfaz a equação cúbica (4.16). Por outro lado, de  $\phi_+ \times (5.18) + \phi_- \times (5.19) + \phi_0 \times (5.20)$  deduzimos que em todos os pontos de mínimos  $S_{g=0}(\tilde{\phi}_a) = 1$ . Isso quer dizer que, vide (5.17),  $S_{min} = 1 - \log V$ . Portanto expandindo em Taylor em torno do mínimo

$$\phi_a = \tilde{\phi}_a + \frac{\zeta_a}{\sqrt{n}} \quad (5.23)$$

que implica em

$$S \approx S_{min} + \frac{\zeta_a \zeta_b}{2n} (\partial_a \partial_b S)_{min} + \mathcal{O}(n^{-3/2}) \quad (5.24)$$

Temos

$$e^{-nS} = e^{-n(1-\ln V)} \left[ e^{-\frac{\zeta_a \zeta_b}{2} (\partial_a \partial_b S)_{min}} + \mathcal{O}(n^{-1/2}) \right] \quad (5.25)$$

Como (5.23) leva ao Jacobiano:  $d^3 \phi = (\sqrt{n})^3 d^3 \zeta$ , de volta em (5.16) e calculando  $\det M_{ab}$  temos:

$$Z_n^{nc} = \frac{n^{n+3/2} e^{-n} (\det M_{ab})^{1/2} V^n}{2^n n! (2\pi)^{3/2}} \left[ \int d^3 \zeta \exp -\frac{1}{2} \zeta_a (\partial_a \partial_b S)_{min} \zeta_b + \mathcal{O}(n^{-1/2}) \right] \quad (5.26)$$

Usando Stirling  $n! \approx n^n e^{-n} (2\pi n)^{1/2}$ , calculando  $\det M_{ab}$ , usando (5.19) e integrando chegamos a:

$$Z_n^{nc} = \left( \frac{c^2}{b} \right)^n \frac{(b - 2c + bc^2)^{n+1}}{(1 - c^2)^{n-1} (2\pi n)^{1/2}} \frac{\lambda^n}{\left( \sqrt{\det \partial_a \partial_b S} \right)_{min}} \left( 1 + \mathcal{O}(n^{-1/2}) \right) \quad (5.27)$$

Entretanto, note que temos três possibilidades para  $V$  correspondendo aos três autovalores  $\lambda_+$ ,  $\lambda_-$  e  $\lambda_0$  da equação cúbica (4.16). Além disso as equações (5.18), (5.19) e (5.20) tem simetria de sinal  $\phi_a \rightarrow -\phi_a$ . Na verdade temos seis soluções possíveis para  $\phi_a = \tilde{\phi}_a$ . Como  $V$  possui só três possibilidades temos uma dupla degenerescência de três mínimos. Assumindo que todos os pontos de sela ( $ps$ ) devam contribuir para a integral  $Z_n^{nc}$  exatamente como ocorre para o modelo de Ising de spin 1/2 sobre anéis conexos e desconexos, temos:

$$Z_n^{nc} = 2 \left( \frac{c^2}{b} \right)^n \frac{(b - 2c + bc^2)^{n+1}}{(1 - c^2)^{n-1} (2\pi n)^{1/2}} \sum_{ps} \frac{\lambda_{ps}^n}{\left( \sqrt{\det \partial_a \partial_b S} \right)_{ps}} \quad (5.28)$$

onde  $\lambda_{ps} = (\lambda_+, \lambda_-, \lambda_0)$ . Com essa hipótese é fácil demonstrar que os zeros virão da coincidência do módulo dos dois maiores autovalores, se os termos  $\sqrt{\det \partial_a \partial_b S}$  no denominador forem iguais nos 6 pontos de sela. Logo os zeros de  $Z_n^{nc}$  coincidirão com os zeros de  $Z_n$  no limite termodinâmico o que explicaria a tendência a sobreposição dos zeros que vimos nesta dissertação.

# Capítulo 6

## Conclusão

Neste trabalho analisamos a posição dos zeros de Yang-Lee bem como sua densidade próxima da chamada singularidade de ponta de Yang-Lee no modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) unidimensional. Analisamos o modelo sobre uma rede estática (condição periódica de contorno) que corresponde a um anel conexo e também sobre uma rede dinâmica formada de anéis conexos e desconexos.

No primeiro caso (anel conexo), confirmamos numericamente que há uma tendência dos zeros em migrarem para a circunferência de raio um ( $S^1$ ), isto é campo magnético puramente imaginário, para certos limites do modelo (vide subsecção 4.2.2). Nesses limites o modelo BEG de spin 1 se reduz ao modelo de Ising de dois estados (spin 1/2) o que explica a tendência observada. No entanto, em geral, pertencer ou não a  $S^1$  depende da intensidade da interação ferromagnética em relação a temperatura ( $J/k_B T$ ). É difícil fazer afirmações independentes dessa razão. Uma exceção foi a conjectura que fizemos na subsecção 4.3.3 obtendo um valor máximo para o parâmetro  $x$  representando a interação quadrupolar abaixo do qual temos a  $S^1$  como locus dos zeros. Essa conjectura foi baseada na posição dos zeros obtida exatamente no limite  $T \rightarrow \infty$  e na suposição de que os zeros tendam a  $S^1$  ao baixarmos a temperatura que é um fato observado em vários modelos de spin com interação de curto alcance.

Ao contrário do que sugere resultados anteriores para o modelo de Blume-Capel verificamos que não há relação direta entre os mínimos de energia do modelo BEG e o teorema do círculo. Fizemos também a decomposição de Griffiths do modelo de spin 1 em um modelo de Ising de spin 1/2 generalizado e obtivemos um valor mínimo de  $J/k_B T$  a partir do qual os zeros de Yang-Lee pertencerão a  $S^1$ . Assim reproduzimos resultados obti-

dos anteriormente em [7], válidos em qualquer dimensão e para um número arbitrário de primeiros vizinhos. Entretanto, ao contrário de [7], acreditamos que eles sejam válido mesmo que certos acoplamentos sejam anti-ferromagnéticos contanto que o acoplamento ferromagnético do termo de Ising ( $J/k_B T$ ) seja dominante, de acordo com teorema de [6]. Os cálculos numéricos no modelo unidimensional confirmaram esse cenário. Por último, usando expansões a baixas temperaturas obtivemos expressões analíticas aproximadas para as curvas do zeros de Yang-Lee generalizando cálculos anteriores para o modelo de Blume-Capel [9].

Com relação ao segundo caso (rede dinâmica) os cálculos numéricos indicam que os zeros de Yang-Lee tendem a colapsar com os zeros do modelo sobre um anel conexo no limite termodinâmico. Em particular, o limite superior para a variável  $x$  obtido na subseção 4.3.3 via matriz de transferência também é observado para o modelo sobre rede dinâmica, ou seja, para  $x$  abaixo desse limite os zeros pertencem a  $S^1$  independentemente da temperatura. Embora o anel conexo entre com o maior peso na soma sobre anéis ele não é o único que sobrevive na mesma ordem em  $1/n$  no limite termodinâmico  $n \rightarrow \infty$ . Dessa forma não temos uma explicação rigorosa para a sobreposição de zeros no limite termodinâmico, embora tenhamos apresentado uma prova via ponto de sela, ela assume que todos os pontos de sela contribuem para a integral, coisa que não conseguimos provar. Em resumo, os resultados obtidos nesta dissertação e em trabalhos anteriores para a posição dos zeros indicam que possa existir uma generalização do TS1 de Yang-Lee para redes dinâmicas.

Por fim, com relação a densidade dos zeros, embora os modelos unidimensionais com interação de curto alcance não apresentem transições de fase reais, a densidade de zeros próxima à ponta da curva a qual pertencem (singularidade de ponta de Yang-Lee) tem um comportamento do tipo potência com um expoente universal  $\sigma$  que aparentemente só depende da dimensão. Para vários modelos unidimensionais com zeros pertencentes a  $S^1$  tem-se  $\sigma = -1/2$ , vide [11], [12] e [38]. Neste trabalho calculamos a densidade próxima a singularidade de ponta de Yang-Lee numericamente e obtivemos  $\sigma \approx -1/2$  mesmo quando os zeros não estão sobre  $S^1$  e quando a rede é dinâmica o que é um resultado original deste trabalho. Notamos também que as relações de escala  $x_1(L) - x_E(\infty) \sim L^{-y_h}$  e  $\rho(x_1(L)) \sim L^{(y_h-d)}$  são satisfeitas no caso unidimensional com  $y_h \approx 2$  e  $d \approx 1$  tanto no caso 1 (anel conexo) como no 2 (anéis conexos e desconexos).

Recentemente um trabalho foi publicado [39] confirmando analiticamente que  $\sigma = -1/2$  para o modelo de Blume-Capel unidimensional (modelo BEG com  $b = 1$ ).

# Apêndice A

## Lema de Wick

Considerando as integrais múltiplas abaixo, todas de  $-\infty$  a  $\infty$ ,

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_n} \rangle \equiv \frac{\int d^p \phi \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_n} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^p (\phi_{\mu} M_{\mu\nu} \phi_{\nu})}}{\int d^p \phi e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^p (\phi_{\mu} M_{\mu\nu} \phi_{\nu})}} \quad (\text{A.1})$$

Vamos provar as seguintes propriedades seguindo a referência [29]:

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_{2n+1}} \rangle = 0 \quad (\text{A.2})$$

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \rangle = (M^{-1})_{\mu_1 \mu_2} \quad (\text{A.3})$$

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_{2n}} \rangle = \frac{1}{2^n n!} \sum_p \langle \phi_{\mu_{p_1}} \phi_{\mu_{p_2}} \rangle \dots \langle \phi_{\mu_{p_{2n-1}}} \phi_{\mu_{p_{2n}}} \rangle \quad (\text{A.4})$$

Para obter a relação (A.2), basta trocar  $\phi_{\mu_i}$  por  $-\phi_{\mu_i}$  para  $1 \leq i \leq 2n+1$ . Para obter a relação (A.3) adicionamos um termo de fonte  $\phi^t J = \sum_{\mu=1}^p$  ao expoente do integrando em (A.1) de maneira que provamos facilmente.

$$\left[ \frac{\partial}{\partial J_{\mu_1}} \frac{\partial}{\partial J_{\mu_2}} \ln \left[ \int_{-\infty}^{\infty} d^p \phi e^{-\frac{1}{2} \phi^t M \phi + \phi^t J} \right] \right]_{J_{\mu_i}=0} = \langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \rangle - \langle \phi_{\mu_1} \rangle \langle \phi_{\mu_2} \rangle \quad (\text{A.5})$$

onde  $J_{\mu_i}$  são fontes. Como  $\langle \phi_{\mu_i} \rangle = 0$  (vide (A.2)) então podemos escrever:

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \rangle = \left\{ \frac{\partial}{\partial J_{\mu_1}} \frac{\partial}{\partial J_{\mu_2}} \ln \left[ \int_{-\infty}^{\infty} d^p \phi e^{-\frac{1}{2} \phi^t M \phi + \phi^t J} \right] \right\}_{J=0} \quad (\text{A.6})$$

Redefinindo  $\phi \Rightarrow \phi + M^{-1}J$ , como o Jacobiano é um, chegamos a relação (A.3):

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \rangle = \left\{ \frac{\partial}{\partial J_{\mu_1}} \frac{\partial}{\partial J_{\mu_2}} \ln \left[ \frac{1}{2} J^t M^{-1} J e^{\int_{-\infty}^{\infty} d^p \phi e^{-\frac{1}{2} \phi^t M \phi}} \right] \right\}_{J=0} = M_{\mu_1 \mu_2}^{-1} \quad (\text{A.7})$$

Para demonstrar a relação (A.4) vamos considerar a igualdade que pode ser facilmente provada via  $\phi \Rightarrow \phi + t M^{-1}J$  novamente:

$$\langle e^{t \phi^t J} \rangle = \left\langle \exp \left( t \sum_{\mu=1}^p J_{\mu} \phi_{\mu} \right) \right\rangle = \exp \left( \frac{t^2}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^p J_{\mu} (M^{-1})_{\mu \nu} J_{\nu} \right) \quad (\text{A.8})$$

Expandindo ambos os lados em potências de  $t$  temos <sup>1</sup>:

$$\begin{aligned} & \left\langle 1 + t J_{\mu} \phi_{\mu} + \frac{t^2}{2!} (J_{\mu} \phi_{\mu})^2 + \dots + \frac{t^{2n}}{(2n!)} (J_{\mu} \phi_{\mu})^{2n} + \dots \right\rangle = \\ & 1 + \frac{t^2}{2} \left( \sum_{\mu, \nu}^p J_{\mu} (M^{-1})_{\mu \nu} J_{\nu} \right) + \dots + \frac{t^{2n}}{2^n n!} \left( \sum_{\mu, \nu=1}^p J_{\mu} (M^{-1})_{\mu \nu} J_{\nu} \right)^n + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Podemos notar que os coeficientes com potências ímpares de  $t$  desaparecem, o que confirma (A.2). Igualando os termos de potências pares temos a relação

$$\left\langle \frac{t^{2n}}{(2n!)} (J_{\mu} \phi_{\mu})^{2n} \right\rangle = \frac{t^{2n}}{2^n n!} \left( \sum_{\mu, \nu}^p J_{\mu} (M^{-1})_{\mu \nu} J_{\nu} \right)^n \quad (\text{A.10})$$

Ou seja,

$$\frac{J_{\mu_1} \dots J_{\mu_{2n}}}{(2n)!} \langle \phi_{\mu_1} \dots \phi_{\mu_{2n}} \rangle = \frac{J_{\alpha_1} \dots J_{\alpha_n} J_{\beta_1} \dots J_{\beta_n}}{2^n n!} (M^{-1})_{\alpha_1 \beta_1} (M^{-1})_{\alpha_2 \beta_2} \dots (M^{-1})_{\alpha_n \beta_n} \quad (\text{A.11})$$

Vamos tomar como exemplo  $2n = 4$ . Note que diferenciando em relação as fontes temos:

---

<sup>1</sup>Índices repetidos estão sendo somados.

$$\begin{aligned}
& \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_4}} \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_3}} \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_2}} \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_1}} [J_{\mu_1} J_{\mu_2} J_{\mu_3} J_{\mu_4} \langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \phi_{\mu_3} \phi_{\mu_4} \rangle] \\
&= 4 \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_4}} \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_3}} \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_2}} [J_{\mu_2} J_{\mu_3} J_{\mu_4} \langle \phi_{\gamma_1} \phi_{\mu_2} \phi_{\mu_3} \phi_{\mu_4} \rangle] \\
&= 4! \langle \phi_{\gamma_1} \phi_{\gamma_2} \phi_{\gamma_3} \phi_{\gamma_4} \rangle
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Em geral :

$$\frac{\delta}{\delta J_{\gamma_{2n}}} \dots \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_1}} [J_{\mu_1} \dots J_{\mu_{2n}} \langle \phi_{\mu_1} \dots \phi_{\mu_{2n}} \rangle] = (2n)! \langle \phi_{\mu_1} \dots \phi_{\mu_{2n}} \rangle \tag{A.13}$$

Portanto diferenciando (A.11) temos

$$\langle \phi_{\gamma_1} \dots \phi_{\gamma_{2n}} \rangle = \frac{1}{2^n n!} \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_{2n}}} \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_{2n-1}}} \dots \frac{\delta}{\delta J_{\gamma_1}} \left[ J_{\alpha_1} \dots J_{\alpha_n} J_{\beta_1} \dots J_{\beta_n} (M^{-1})_{\alpha_1 \beta_1} \dots (M^{-1})_{\alpha_n \beta_n} \right] \tag{A.14}$$

Logo,

$$\langle \phi_{\mu_1} \dots \phi_{\mu_{2n}} \rangle = \frac{1}{2^n n!} \sum_p \langle \phi_{\mu_{p_1}} \phi_{\mu_{p_2}} \rangle \dots \langle \phi_{\mu_{p_{2n-1}}} \phi_{\mu_{p_{2n}}} \rangle \tag{A.15}$$

# Apêndice B

## Solução da equação cúbica

Dada a equação cúbica para o modelo BEG

$$\lambda^3 + a_2 \lambda^2 + a_1 \lambda + a_0 = 0 \quad (\text{B.1})$$

onde

$$a_2 = 2A b + x \quad (\text{B.2})$$

$$a_1 = 2A x (b - c) + b^2 (1 - c^4) \quad (\text{B.3})$$

$$a_0 = x b (c^2 - 1) (b - 2c + b c^2) \quad (\text{B.4})$$

O cálculo da solução exata para a equação (B.1) foi realizado através do programa Mathematica e encontramos:

$$\lambda_1 = \frac{1}{3} \left[ -a_2 - \frac{2^{1/3} (3a_1 - a_2^2)}{(-27a_0 + 9a_1a_2 - 2a_2^2) + 27^{1/2} (27a_0^2 + 4a_1^3 - 18a_0a_1a_2 - a_1^2a_2^2 + 4a_0a_2^3)^{1/6}} \right] \\ + \frac{2^{-1/3}}{3} \left[ -27a_0 + 9a_1a_2 - 2a_2^2 + 27^{1/2} (27a_0^2 + 4a_1^3 - 18a_0a_1a_2 - a_1^2a_2^2 + 4a_0a_2^3)^{1/6} \right]$$

$$\lambda_2 = \frac{-a_2}{3} - \frac{2^{1/3} (3a_1 - a_2^2) (1 + i\sqrt{3})}{6(-27a_0 + 9a_1a_2 - 2a_2^2) + 6 \cdot 27^{1/2} (27a_0^2 + 4a_1^3 - 18a_0a_1a_2 - a_1^2a_2^2 + 4a_0a_2^3)^{1/6}}$$

$$+ \frac{2^{-1/3} (-1 + i\sqrt{3})}{6} \left[ -27a_0 + 9a_1a_2 - 2a_2^2 + 27^{1/2} (27a_0^2 + 4a_1^3 - 18a_0a_1a_2 - a_1^2a_2^2 + 4a_0a_2^3)^{1/6} \right]$$

$$\lambda_3 = \frac{-a_2}{3} - \frac{2^{1/3} (3a_1 - a_2^2) (1 - i\sqrt{3})}{6(-27a_0 + 9a_1a_2 - 2a_2^2) + 6 \cdot 27^{1/2} (27a_0^2 + 4a_1^3 - 18a_0a_1a_2 - a_1^2a_2^2 + 4a_0a_2^3)^{1/6}}$$

$$- \frac{2^{-1/3} (1 + i\sqrt{3})}{6} \left[ -27a_0 + 9a_1a_2 - 2a_2^2 + 27^{1/2} (27a_0^2 + 4a_1^3 - 18a_0a_1a_2 - a_1^2a_2^2 + 4a_0a_2^3)^{1/6} \right]$$

# Apêndice C

## Estudo dos mínimos da energia do modelo BEG

Neste apêndice analisamos a distribuição dos mínimos da energia do modelo BEG de acordo com as diferentes regiões no espaço dos parâmetros do modelo. A análise é feita de forma geral sendo válida para uma rede regular de D dimensões com  $\gamma$  vizinhos mais próximos de cada vértice.

Considerando a hamiltoniana do modelo BEG a menos de uma constante aditiva temos:

$$H = -J(n_{++} + n_{--} - n_{+-}) - K(n_{++} + n_{--} + n_{+-}) - \Delta n_0 - h(n_+ - n_-) \quad (\text{C.1})$$

onde

$$n_{++} + n_{--} + n_{+-} + n_{00} + n_{0+} + n_{0-} = n\gamma/2 \quad (\text{C.2})$$

$$2n_{00} + n_{0+} + n_{0-} = n_0\gamma \quad (\text{C.3})$$

$$n_+ + n_- + n_0 = n \quad (\text{C.4})$$

Considerando a parte sem campo magnético temos:

$$E = -J(n_{++} + n_{--} - n_{+-}) - K(n_{++} + n_{--} + n_{+-}) - \Delta n_0 \quad (\text{C.5})$$

De (C.2) e (C.3) temos:  $n_{++} + n_{--} = n_{00} - \gamma n_0 - n_{+-}$ . Logo, fazendo algumas manipulações temos a menos de constantes:

$$\begin{aligned} E/J &= -[n_{00} - \gamma n_0 - 2n_{+-}] - \tilde{K} [n_{00} - \gamma n_0] - \tilde{\Delta} n_0 \\ &= n_0 \left[ (\tilde{K} + 1) \gamma - \tilde{\Delta} \right] - n_{00} (\tilde{K} + 1) + 2n_{+-} \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

onde  $\tilde{K} = K/J$  e  $\tilde{\Delta} = \Delta/J$ .

Agora vamos fazer uma análise dos mínimos da energia para o modelo BEG [37].

*i)* Para isso vamos considerar primeiramente  $\tilde{K} + 1 > 0$  e  $\tilde{\Delta} > \gamma (\tilde{K} + 1)$ , então temos a energia mínima para  $n_+ = n_- = n_{+-} = 0$ , ou seja, só temos spins zero  $n_0 = n$  e de (C.3) temos  $n_{00} = n_0 \gamma/2$ , vide figura C.1(a) na região entre a reta  $\tilde{K} = \tilde{\Delta}/\gamma - 1$  e a reta tracejada.

*ii)* Considerando agora  $\tilde{K} + 1 < 0$  e  $\tilde{\Delta} < \gamma (\tilde{K} + 1)$ , então temos a energia mínima neste caso para,  $n_+ = n$  ou  $n_- = n$ , ou seja, só spins para cima ou para baixo  $n_0 = n_{+-} = n_{+0} = n_{-0} = 0$ , vide figura C.1(b) na região entre a reta  $\tilde{K} = \tilde{\Delta}/\gamma - 1$  e a reta tracejada.

*iii)* Para  $\tilde{K} + 1 > 0$  e  $(\tilde{K} + 1) \gamma - \tilde{\Delta} > 0$ , temos

$$E/J = \begin{cases} n \left( \frac{\tilde{K}+1}{2} \gamma - \tilde{\Delta} \right), & \text{se } n_0 = n, n_0 \gamma/2 \\ 0, & \text{se } n_0 = 0 \text{ e } n_{+-} = 0 \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

Então se  $(\tilde{K} + 1) \gamma/2 - \tilde{\Delta} > 0$ , ou seja,  $\tilde{K} > 2\tilde{\Delta}/\gamma - 1$  teremos um mínimo da energia para as configurações só com spins para cima, ou só para baixo, vide figura C.1(c). E para  $\tilde{K} < 2\tilde{\Delta}/\gamma - 1$  temos um mínimo da energia para  $n_0 = n$ , vide figura C.1(d). Ao longo da reta  $\tilde{K} = 2\tilde{\Delta}/\gamma - 1$  temos uma tripla degenerescência, ou seja, podemos ter todos os spins para cima, ou todos para baixo, ou todos nulos.

*iv)* Considerando agora  $\tilde{K} + 1 < 0$  e  $(\tilde{K} + 1) \gamma - \tilde{\Delta} < 0$ , então a energia se torna:

$$E/J = \begin{cases} n \left( \frac{\tilde{K}+1}{2} \gamma - \tilde{\Delta} \right), & n_0 = n, n_0 \gamma/2 \\ n \left( \frac{\tilde{K}+1}{2} \gamma - \frac{\tilde{\Delta}}{2} \right), & n_0 = \frac{n}{2}, n_{+-} = 0; n_{00} = 0 \\ 0, & n_0 = 0; n_{+-} = 0 \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

Na região onde  $n_0 = n/2$  teremos mais  $n/2$  sítios a serem ocupados com spins para cima  $n_+ = n/2$  ou spins para baixo  $n_- = n/2$  ou com uma mistura de spins para baixo e para cima intercalando com spins nulos já que  $n_{+-} = 0$ . Analisando essa região teremos:

$$n \left( \frac{\tilde{K} + 1}{2} \gamma - \frac{\tilde{\Delta}}{2} \right) = \frac{n\gamma}{2} \left( \tilde{K} + 1 - \frac{\tilde{\Delta}}{\gamma} \right) = F < 0 \quad (\text{C.9})$$

Chamando

$$n \left( \frac{\tilde{K} + 1}{2} \gamma - \tilde{\Delta} \right) = G = F - \frac{\tilde{\Delta}}{2} \quad (\text{C.10})$$

Assim concluímos que se  $\tilde{\Delta} > 0 \Rightarrow G < F$ , então  $G$  é mínimo. Se  $\tilde{\Delta} < 0 \Rightarrow G > F$ , então  $F$  é mínimo e se  $\tilde{\Delta} = 0$ , ambos  $F$  e  $G$  são degenerados. Essas regiões são dadas pela figura C.1(e). Em resumo temos os mínimos distribuídos de acordo com a figura C.2 da referência [37] que reproduzimos aqui por completeza.

Fazendo  $b = e^k$ ,  $c = e^{-j}$  e  $x = e^l$ , com  $\gamma = 2$ . Chegamos a conclusão que a mudança de mínimos ocorre nas regiões:

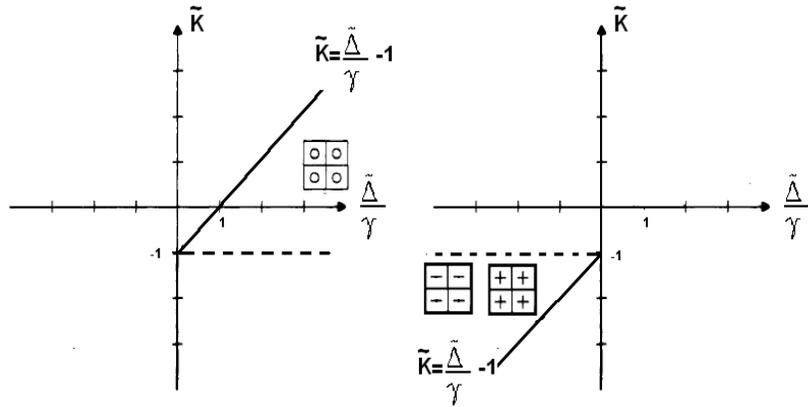
$$b = xc, \quad \text{se } b > c, \quad (\text{C.11})$$

$$b = \sqrt{xc}, \quad \text{se } b < c \quad (\text{C.12})$$

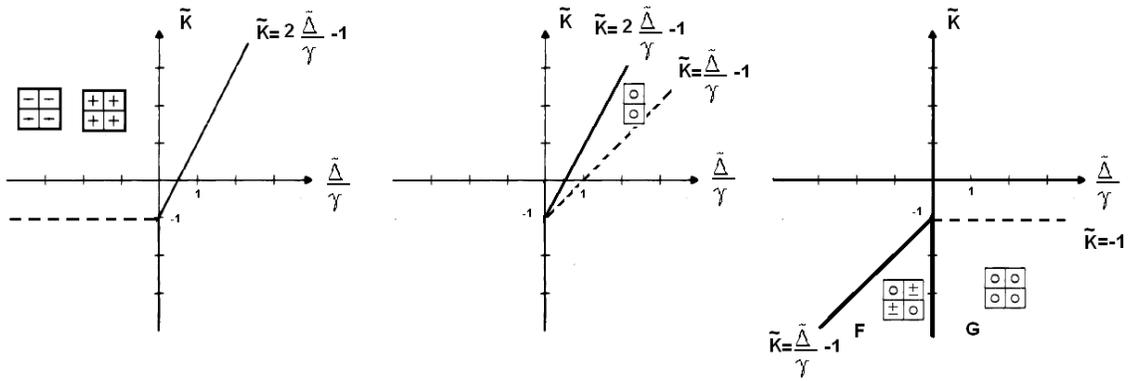
e

$$x = 1, \quad \text{se } b < c \quad (\text{C.13})$$

E temos o ponto crítico tríplice que é vizinho de configurações de mínimos diferentes:  $x = 1$  e  $b = c$ . Note que para o modelo de Blume-Capel ( $\tilde{K} = 0$  ou  $b = 1$ ) o ponto de mudança de mínimos corresponde, vide figura C.2, a  $\tilde{\Delta} = \gamma/2$ , isto é,  $\tilde{\Delta} = 1$ , ou seja,  $\tilde{x} = xc = 1$  para  $\gamma = 2$  (modelo de Blume-Capel unidimensional).



(a)  $\tilde{K} > -1$  e  $\tilde{K} < (\tilde{\Delta}/\gamma - 1)$       (b)  $\tilde{K} < -1$  com  $\tilde{K} > (\tilde{\Delta}/\gamma - 1)$



(c)  $\tilde{K} > -1$  com  $\tilde{K} > (2\tilde{\Delta}/\gamma - 1)$       (d)  $\tilde{K} > -1$  e  $\tilde{K} < (2\tilde{\Delta}/\gamma - 1)$       (e)  $\tilde{K} < -1$  e  $\tilde{K} < (\tilde{\Delta}/\gamma - 1)$

Figura C.1: Diagrama de fase no plano  $(\tilde{K} \times \tilde{\Delta}/\gamma)$

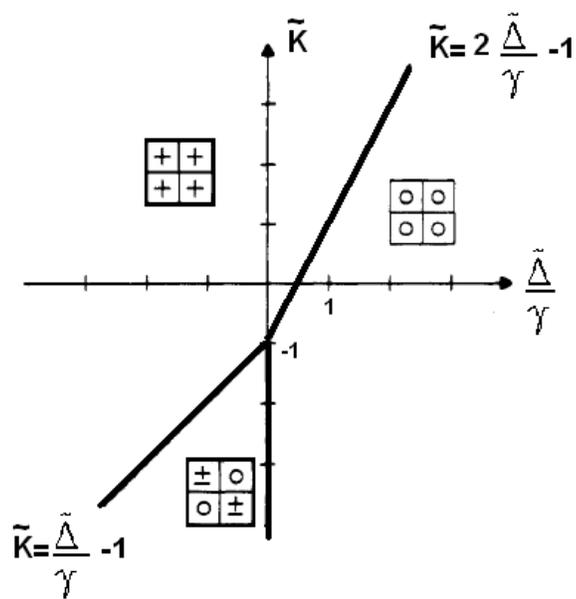


Figura C.2: Diagrama de fases no plano  $(\tilde{K} \times \tilde{\Delta}/\gamma)$  [37]

# Referências Bibliográficas

- [1] C. N. YANG; T. D. LEE. Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of Condensation **Physics Review**, v. 87, n.3, p. 404-409, ago.,1952.
- [2] T. D. LEE; C. N. YANG. Statistical theory of equations of state and phase transitions. II. Lattice gas and Ising model. **Physics Review**, v. 87, n.3, p. 410-419, ago.,1952.
- [3] I. BENA; M. DROZ; A. LIPOWSKI. Statistical mechanics of equilibrium and nonequilibrium phase transitions: The Yang-Lee formalism. **International Journal of Modern Physics B**, v. 19, p. 4269-4329, jan., 2005.
- [4] R. GRIFFITHS. Rigorous Results for Ising Ferromagnets of Arbitrary Spin. **Journal of Mathematical Physics**, v. 10, p. 1559-1568, set., 1969.
- [5] M. SUZUKI. Rigorous results for Ising ferromagnets of general spin with degeneracy or symmetric potentials. **Journal Mathematical of Physics**, v. 14, p. 1088-1093, jan., 1972.
- [6] M. SUZUKI; M. FISHER. Zeros of the Partition Function for the Heisenberg, Ferroelectric, and General Ising Models. **Journal of Mathematical Physics**, v. 12, p. 235-246, fev., 1971.

- [7] F. Y. WU. Transformation Properties of a Spin-1 System in Statistical Physics. **Chinese Journal of Physics**, v. 30, n.2, p. 157-163, abr., 1992.
- [8] L. C. ALBUQUERQUE; D. DALMAZI. Yang-Lee zeros of two- and three-state Potts model defined on  $\phi^3$  Feynman diagrams. **Physical Review E**, v. 67, p. 67-74, jun., 2003.
- [9] L. ALMEIDA; D. DALMAZI. The Yang-Lee zeros of the 1D Blume-Capel model on connected and non connected rings. **Journal of Physics A: Mathematical General**, v. 38, p. 6863-6877, ago., 2005.
- [10] M. BANDER; C. ITZYKSON. Yang-Lee edge singularities in the large-N limit. **Physical Review B**, v. 30, p. 6485-6488, abr., 1984.
- [11] M. FISHER. Yang-Lee Edge Behavior in One-Dimensional Systems. **Supplement of the Progress of Theoretical Physics**. v. 69, p. 14-29, ago., 1980.
- [12] X. WANG; J. KIM. Yang-Lee edge singularity of a one-dimensional Ising ferromagnet with arbitrary spin. **Physical Review E**, v. 58, n. 4, p. 4174-4180, out., 1998.
- [13] M. BLUME; V. EMERY; R. GRIFFITHS. Ising Model for the  $\lambda$  transition and phase separation in  $He^3-He^4$  Mixtures. **Physical Review A**, v. 4, n. 3, p. 1071-1077, set., 1971.
- [14] V. A. KAZAKOV. Ising model on a dynamical planar random lattice: Exact solution. **Physics Letters A**, v. 119, n. 3 p. 140-144, dez., 1986.

- [15] D. V. BOULATOV; V. A. KAZAKOV. The Ising model on a random planar lattice: The structure of the phase transition and the exact critical exponents. **Physics Letters B**, v. 186, p. 379-384, mar., 1987.
- [16] M. STAUDACHER. The Yang-Lee edge singularity on a dynamical planar random surface. **Nuclear Physics B**, v. 336, p. 349-362, nov., 1989.
- [17] J. AMBJORN; K. N. ANAGNOSTOPOULOS; U. MAGNEA. Complex zeros of the 2d Ising model on dynamical random lattices. **Nuclear Physics B - Proceedings Supplements**, v. 63, p. 751-753, jan., 1998.
- [18] D. A. JOHNSTON. The Yang-Lee edge singularity on Feynman diagrams. **Journal of Physics A: Mathematical General**, v. 31, p. 5641-5648, jan., 1998.
- [19] L. C. ALBUQUERQUE, N. A. ALVES, D. DALMAZI. Yang-Lee zeros of the Ising model on random graphs of non planar topology. **Nuclear Physics B**, v. 580, p. 739-756, mai., 2000.
- [20] E. ISING. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, v. 31, p. 253, fev., 1925.
- [21] R. A. SALINAS. **Introdução a Física Estatística**. 2ed. São Paulo: Edusp, 1999. 464p.
- [22] R. J. BAXTER. **Exactly solved models in statistical mechanics**. London; New York: Academic Press, 1982. 486p.
- [23] L. VAN HOVE. Sur L'intégrale de Configuration Pour Les Systèmes De Particules À Une Dimension. **Physica**, v. 16, p. 137, fev., 1950.

- [24] E. M. LIFSHITZ; L. D. LANDAU. **Statistical Physics**. 3ed. Butterworth Heinemann, 1951. 539p.
- [25] M. FISHER. **Lectures in Theoretical Physics VII C**. University of Colorado Press, Boulder, 1965.
- [26] M. FISHER. Yang-Lee Edge Singularity and  $\phi^3$  Field Theory. **Physical Review Letters**. v. 40, p. 1610-1613, jun., 1978.
- [27] S. Y. KIM. Density of Yang-Lee zeros e Yang-Lee edge singularity for the antiferromagnetic Ising model. **Nuclear Physics B**, v. 705, p. 504-520, jan., 2005.
- [28] J. L. CARDY. Conformal Invariance and the Yang-Lee Edge Singularity in Two Dimensions. **Physical Review Letters**. v. 54, p. 1354-1356, jan., 1985.
- [29] D. BESSIS; C. ITZYKSON; J. ZUBER. Quantum Field Theory Techniques in Graphical Enumeration. **Advances in Applied Mathematics**, v. 1, p. 109-157, jan.,1980.
- [30] M. BLUME. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in  $\text{UO}_2$ . **Physical Review**, v. 141, p. 517-524, jan., 1966; H. W. CAPEL. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, v. 32, p. 966-988, maio, 1966.
- [31] R. B. POTTS. Some generalized order-disorder transformations. **Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v48, pp. 106-109, jan., 1952.

- [32] F. Y. WU. The Potts model. **Reviews of Modern Physics**, v.54, p. 235-268, jan.,1982.
- [33] Z. GLUMAC; K. UZELAC. The partition function zeros in the one-dimensional q-state Potts model. **Journal of Physics A**, v. 27, p. 7709-7718, out., 1994.
- [34] C. ITZYKSON; R. B. PEARSON; J. B. ZUBER. Distribution of zeros in Ising and gauge models. **Nuclear Physics B**, v. 220, p. 415-433, set., 1983.
- [35] R. J. CRESWICK; S. Y. KIM. Finite-size scaling of the density of zeros of the partition function in first- and second-order phase transitions. **Physical Review E**, v. 70, p. 2418-2422, set., 1997.
- [36] S. Y. KIM. Density of the Fisher zeros for the three-state and four-state Potts models. **Physical Review E**, v. 70, p. 016110, jul., 2004.
- [37] R. OSÓRIO; M. J. OLIVEIRA; S. R. SALINAS. The Blume-Emery-Griffiths model on a Bethe lattice: bicritical line and re-entrant behaviour. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 1, p. 6887-6892, jul., 1989.
- [38] D. A. KURTZE. The Yang-Lee edge singularity in one-dimensional Ising and N-vector models. **Journal of Statistical Physics**, v. 30, p. 15-35, jan., 1983.
- [39] R. G. GHULGHAZARYAN; K. G. SARGSYAN; N. S. ANANIKIAN. Partition function zeros of the one-dimensional Blume-Capel model in transfer matrix formalism. **Physical Review E** v. 76, p. 021104-1 - 021104-9, ago., 2007.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)