



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

TESE DE DOUTORAMENTO

IFT-T.006/07

Dinâmica de Percolação e Comportamento Crítico

Wanderson Gonçalves Wanzeller

Orientadora

Profa. Dra. *Tereza Mendes*

Co-orientador

Prof. Dr. *Gastão Inácio Krein*

Junho - 2007

Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Agradecimentos

Nestes seis anos de IFT, conheci diversas pessoas. Muitas se tornaram grandes amigos e, sem dúvida, agradeço-lhes. Fica difícil lembrar o nome de todos, mas aqui vai uma pequena lista daqueles que sempre estiveram do meu lado: William Hipólito; Paulo Gustavo; Vagner Jeger; Leandro Holanda; Marcello Talarico; Victor Vizcarra; Sergio Antunes; Raquel de Carvalho; André Taurines, e outros que com certeza estou esquecendo.

É incrível como as amizades feitas durante a graduação ainda são tão fortes (mesmo com tamanha distância). Seria uma injustiça não agradecer ao pessoal de Rio Grande (que muitas vezes abarrotou minha caixa de e-mail): Ives; Gian; Geovane; Vinícius; Fernando Kokubun (FURG); Dimiter Hadjimichef (UFPEl). Sei que cada um torceu por mim nesta empreitada nada fácil. Este trabalho que aqui está teria sido muito mais difícil sem contar com a grande amizade de todos.

Talvez fosse melhor inverter estes parágrafos e agradecer, em primeiro lugar, de todo o coração, a um casal que, era só ligar para ter uma palavra amiga, uma motivação e alguns puxões de orelha. Meus pais, Sônia e Celmar, sempre souberam me guiar em meus estudos e na vida, e se hoje sou uma pessoa de caráter devo tudo a eles. Claro, não posso esquecer de meus irmãos (Heffersom, Sandro e Heloize) que, cada um a seu modo, ajudaram-me desde criança a ultrapassar barreiras e trilhar meu caminho. Como a família é grande deixo para meus sobrinhos, primos, tios, tias e avós (in memoriam) um grande obrigado.

Ficar longe da família não é algo agradável. Nestes últimos anos fui integrado a uma família paulistana que me acolheu com todo amor e carinho, isto devo a uma grande mulher. Nos momentos mais difíceis sei que sempre posso contar com minha amiga, companheira, conselheira, esposa, amada. Não posso deixar de agradecer à Vera Lucia, por tudo o que ela tem me oferecido nestes últimos anos. O amor cresce e as palavras faltam.

Sou grato à Tereza e ao Gastão, os quais tiveram tanta paciência desde o mestrado, tornando possível a realização deste trabalho. Devo mencionar o auxílio técnico e burocrático realizado pelos funcionários do IFT. Em particular, as secretárias, Luzinete e Rosane, e o pessoal do polo, Zezé e Heitor. Além dos funcionários do IFT, agradeço ao Dr. Daniel e à Psicoterapeuta Nilce da UNAMOS. Também sou grato aos do IFSC que tanto me ajudaram nas instalações e logística em minhas diversas visitas ao Instituto de Física da USP de São Carlos. Para finalizar agradeço a CAPES pelo suporte financeiro durante o mestrado e doutorado.

Resumo

Esta tese trata dos aspectos dinâmicos da transição de fase de segunda ordem nos modelos de Ising bi e tridimensionais. Investigamos numericamente, via simulações de Monte Carlo, o comportamento em tempos curtos dos parâmetros de ordem magnético e de percolação. Nossos resultados indicam que estes dois parâmetros de ordem, equivalentes no regime de equilíbrio, apresentam comportamentos distintos em tempos curtos. Nosso estudo poderá melhorar a compreensão da transição de fase que ocorre na cromodinâmica quântica (QCD) a temperatura finita com dois sabores de quarks.

Palavras Chaves: Transições de fase; Modelo de Ising; Teoria da percolação; Método de Monte Carlo; Dinâmica de tempos curtos.

Áreas do conhecimento: Fenômenos críticos; Mecânica estatística; Simulações numéricas.

Abstract

This thesis addresses the dynamical aspects of the second-order phase transitions in two- and three-dimensional Ising spin models. We investigate numerically, by Monte Carlo simulations, the short-time behavior of the magnetic and of the percolation order parameters. Our results show that these two order parameters, which are equivalent in the equilibrium regime, display different behaviors at short times. Our study may improve the understanding of the phase transition that takes place in quantum chromodynamics (QCD) at finite temperature with two quark flavors.

Índice

1	Introdução e motivação	1
2	Breve introdução aos fenômenos críticos	7
2.1	Introdução	7
2.2	Fenômenos críticos em modelos de spins	13
2.3	Aproximação de campo médio	18
2.4	Teoria de Landau	24
2.4.1	Critério de Ginzburg	27
3	Cromodinâmica quântica e percolação	30
3.1	A transição de desconfinamento na QCD	31
3.2	Teoria da percolação	35
3.2.1	Percolação e o modelo de Ising	40
3.2.2	Percolação direcionada	44
3.2.3	Percolação na teoria de gauge $SU(2)$	48
3.3	Comportamento pseudocrítico	50
4	Comportamento dinâmico	54
4.1	Comportamento dinâmico para modelos de spins discretos	57
4.2	Dinâmica de tempos curtos	59
4.2.1	Lei de escala dinâmica	61
4.2.2	Expoentes críticos dinâmicos	62
4.2.3	Comportamento anômalo da magnetização	66
4.3	Método de Monte Carlo	68

5 Simulações	70
5.1 Condições iniciais	71
5.1.1 Algoritmo de banho térmico	73
5.2 Resultados	74
5.2.1 Magnetização inicial dispersa	76
5.2.2 Magnetização inicial concentrada	83
5.2.3 Magnetização “unidimensional”	87
5.2.4 Condição inicial mista	89
5.2.5 Percolação de clusters geométricos	91
5.3 Conclusão	93
6 Modelo $O(4)$	97
6.1 Introdução	97
6.2 Quebra espontânea de simetria	99
6.2.1 Quebra espontânea de simetria global	100
6.3 Simetria quiral	102
6.3.1 Quebra da simetria quiral	105
6.4 Bóson de Goldstone no modelo $O(4)$	106
6.5 O modelo $O(4)$ e a QCD com dois sabores	107
6.6 Simulações em tempos curtos para o modelo $O(4)$	109
6.6.1 Conclusão	112
7 Conclusão	114
A Grupo de renormalização	120
A.1 Modelo de Ising unidimensional	120
A.2 Modelo de Ising bidimensional	123
B Algoritmo de Hoshen-Kopelman	128
C Algoritmo para o modelo $O(4)$	131
D Detalhes de contas do capítulo 6	138
D.1 Tensor suscetibilidade	138

D.2 Método de Gell-Mann-Levy para cálculos de correntes	139
D.2.1 Aplicação	140
Referências	146
Relação das Figuras	152
Relação das Tabelas	155
Índice alfabético	156

Capítulo 1

Introdução e motivação

Um dos maiores desafios da física atual é entender a complexidade existente nos instantes iniciais da criação do Universo. Acredita-se que em um intervalo de tempo microscópico após o *big bang* — a grande explosão que deu origem ao Universo que temos hoje — a densidade de energia fosse tal que as partículas não pudessem existir da forma que temos hoje em dia. Presume-se que, 20 ou 30 microssegundos após o big bang, o Universo contivesse matéria hadrônica na forma de quarks e glúons livres, além de léptons e radiação (fótons). Esta forma de matéria hadrônica é denominada plasma de quarks e glúons (QGP). Com a evolução do Universo, este resfriou-se e os quarks e glúons confinaram-se, dando origem aos mésons e bárions. Estes últimos, por sua vez, formaram os primeiros núcleos atômicos no período da nucleossíntese, aproximadamente 100 segundos após o big bang. Alguns dos experimentos realizados no RHIC* (BNL[†]) e futuramente no LHC[‡] (CERN[§]) investigam (ou investigarão) a formação de um *little bang* (big bang no laboratório) para o estudo do QGP, através da colisão de íons pesados relativísticos e da formação momentânea de uma denominada “bola de fogo” contendo o plasma. Um fato interessante [1] é que os dados coletados no RHIC mostraram que, ao invés de um plasma usual, temos as características de um líquido perfeito. Estes experimentos foram iniciados recentemente (em breve teremos dados

* *Relativistic Heavy Ion Collider*

† *Brookhaven National Laboratory*

‡ *Large Hadron Collider*

§ *Organisation Européenne pour la Recherche Nucléaire*

provenientes do LHC) e há grande interesse na obtenção de previsões teóricas para seus resultados. Note que a formação do QGP no little bang é um processo fora do equilíbrio, ocorrido em uma escala de tempo muito pequena (da ordem de 10^{-23} segundos). Portanto, faz-se necessário um tratamento dinâmico para o estudo da transição de fase de formação do QGP a partir dos hádrons, para que as previsões sejam úteis na comparação com os dados experimentais. O estudo teórico das interações fortes entre quarks (transmitidas pelos glúons) é realizado a partir da cromodinâmica quântica, ou QCD [2].

A QCD é uma teoria quântica de campos com simetria de gauge não abeliana e descreve as interações fortes por meio das chamadas cargas de cor, presentes nos seis tipos (ou sabores) diferentes de quarks: *up*, *down*, *charm*, *strange*, *bottom* e *top*. Esta teoria apresenta problemas em aberto no que diz respeito à transição de fase de desconfinamento a temperatura finita. Mais especificamente, não há um parâmetro de ordem bem definido para a transição e não se conhece completamente a relação entre a transição de desconfinamento e a transição de restauração da *simetria quiral*. Esta última está ligada ao fato de a matéria hadrônica em condições usuais (i.e. a baixas temperaturas e densidades) apresentar-se em um estado com quebra espontânea da chamada simetria quiral, que é uma simetria exata da teoria apenas no limite de massa nula para os quarks [2]. Este estudo representa um dos desafios da área de simulações de QCD na rede, como pode ser visto e.g. nos anais das conferências anuais da área [3]. Felizmente, existe a possibilidade de estudarmos aspectos qualitativos da transição de desconfinamento através de modelos mais simples, como os modelos de spins. Tais aspectos incluem o comportamento fora do equilíbrio [4] e a possibilidade de descrever uma transição física por meio de observáveis de percolação [5]. De fato, muitos estudos relacionados à QCD são primeiramente aplicados a modelos mais simples, especialmente buscando modelos com as mesmas simetrias que a QCD. Nesta tese apresentaremos um estudo de observáveis de percolação fora do equilíbrio para modelos de spins em tempos curtos na dinâmica de Monte Carlo, comparando os resultados com

observáveis magnéticos [6].

De modo geral, o mapeamento de uma transição de fase física em um problema geométrico de percolação é útil para uma melhor compreensão de como a transição ocorre no sistema [7]. Este mapeamento é feito através de uma definição apropriada de aglomerado, ou *cluster*[¶], em termos das variáveis e parâmetros do sistema. No caso do chamado modelo de Ising, o mapeamento é bem entendido [8]. Os clusters físicos relevantes neste caso, conhecidos como “gotas”, foram introduzidos por Coniglio e Klein [9], a partir da prescrição de Kasteleyn e Fortuin [10]. A definição correta de cluster é de interesse especial na descrição de transições de fase mais complexas, tais como a transição de desconfinamento de quarks e glúons na QCD a temperatura finita (descrita acima), na qual o parâmetro de ordem físico não é bem definido. Mais precisamente, a transição de desconfinamento só possui um parâmetro de ordem propriamente dito quando tratada na chamada aproximação *quenched*, em que são desprezados efeitos de pares quark-antiquark. Este parâmetro de ordem não é válido para a QCD completa, isto é, levando-se em conta todos os efeitos da criação/aniquiação de pares quark-antiquark.

Na investigação de propriedades de equilíbrio, a descrição da transição de fase de modelos de spins em termos dos parâmetros de ordem magnético e de percolação é equivalente e encontram-se os mesmos expoentes críticos [11, 12]. O mesmo pode não ser verdade para a evolução dinâmica de diferentes tipos de parâmetros de ordem, embora, em princípio, espere-se encontrar a equivalência também para estas quantidades dinâmicas. Isto vale em particular para o comportamento em tempos curtos. É esperado que o estudo do comportamento crítico dinâmico do parâmetro de ordem com respeito a uma evolução de Monte Carlo com dinâmica de Glauber [13] possa ser relevante para o entendimento de aspectos da QCD fora do equilíbrio a altas temperaturas, tais como efeitos devidos ao aquecimento e resfriamento da matéria produzida em colisões de

[¶]Nesta tese, escolheu-se a palavra cluster em inglês para designar um conjunto ou aglomerado de objetos em contato.

íons pesados. No entanto, como dito acima, o parâmetro de ordem para a transição de desconfinamento da QCD completa não é conhecido. Por esta razão, tem recebido atenção nos últimos anos [5, 14, 15] a possível conexão entre a transição de desconfinamento na QCD e o fenômeno de percolação. De qualquer modo, é preciso primeiramente buscarmos uma melhor compreensão da relação entre parâmetros de ordem físicos e geométricos (de percolação) em situações fora do equilíbrio.

Apresentamos aqui primeiramente a dinâmica fora do equilíbrio para observáveis magnéticos e de percolação no modelo de Ising, através do estudo da chamada dinâmica de tempos curtos. Além do estudo da evolução dinâmica de observáveis nos instantes iniciais da relaxação do sistema, a dinâmica de tempos curtos [16] permite que sejam determinadas características universais de uma transição de fase de segunda ordem, que só seriam acessíveis em um estudo convencional após a relaxação (muito longa) do sistema para o estado de equilíbrio. Em geral estamos interessados em sistemas que sofrem uma transição de fase de segunda ordem (ou fenômeno crítico) em um determinado valor de temperatura, próprio para cada modelo. A Física que está por trás destes fenômenos é bem conhecida desde meados do século passado, principalmente em relação às propriedades de equilíbrio. Boa parte destes avanços são apresentados na série de livros editada por C. Domb, M. S. Green e J. L. Lebowitz [17]. Nas décadas de 80 e 90, muitos esforços foram direcionados para uma melhor compreensão dos fenômenos críticos fora do equilíbrio [16, 18, 19, 20, 21, 22]. Um passo fundamental para o estudo da dinâmica de tempos curtos foi dado por H. K. Janssen, B. Schaub e B. Schmittmann [18]. Utilizando técnicas de grupo de renormalização, em conjunto com simulações numéricas, possibilitou-se a medida de diversos expoentes críticos dinâmicos para diversos modelos físicos, assim como uma melhor compreensão do que possa ocorrer com os observáveis físicos nesta situação.

Claramente, o modelo de spins de Ising pode não ser apropriado para o estudo da transição de fase de desconfinamento na QCD, devido a sua simetria

ser discreta. Como dito acima, a transição na QCD não possui um parâmetro de ordem bem definido. Porém, há evidências de que esta transição coincida com a transição quiral [23] e se desejamos estudar esta quebra de maneira mais apropriada, devemos adotar um modelo com simetria contínua. Um passo natural é a utilização dos modelos $O(N)$, ou N -vetoriais. Estes correspondem a uma generalização do modelo de Ising para o caso da simetria contínua de rotação. A principal diferença em relação ao modelo de Ising é a possibilidade de configurações em que os spins se encontram aproximadamente alinhados localmente mas para grandes distâncias o alinhamento é perdido, resultando em uma média nula para a magnetização. Tais configurações, chamadas *ondas de spins*, possuem energia arbitrariamente pequena, e tenderão a destruir a ordem do sistema mesmo a baixas temperaturas. Em consequência disto, ao contrário do modelo de Ising, estes modelos não apresentam transição de fase com magnetização espontânea em duas dimensões^{||}[24]. Em três dimensões ocorre transição de fase, com a presença de magnetização espontânea abaixo de uma temperatura crítica. Neste caso a quebra da simetria contínua de rotação a baixas temperaturas (dada pela magnetização espontânea) está associada a *modos de Goldstone* [25], as ondas de spin, que causam divergência da suscetibilidade a campo zero não só ao redor da temperatura crítica, mas também para toda a fase de baixas temperaturas. O estudo de modos de Goldstone é de grande importância para a compreensão de fenômenos de quebra espontânea de simetria em teorias quânticas de campos, onde o fenômeno também é observado, por exemplo, na teoria das interações eletrofracas [26].

O caso $N = 4$ é de particular interesse, pois sua simetria é a mesma que a simetria quiral da QCD com dois sabores de quarks. De fato, é previsto que a transição quiral da QCD com dois sabores seja de segunda ordem e ocorra na classe de universalidade do modelo $O(4)$. Este caso é de grande interesse

^{||}Para o caso $N = 2$ há transição de fase do tipo Kosterlitz-Thouless, sem magnetização espontânea. Esta transição difere das transições usuais por considerar defeitos topológicos, tais como vórtices no Hélio superfluido, vórtices no modelo XY, entre outros.

físico, pois os dois sabores correspondem aos quarks leves, up e down [27]. Nosso estudo do caso $O(4)$ encontra-se ainda em andamento.

Além desta Introdução, a tese contém mais seis capítulos. No Cap. 2 apresentamos uma breve revisão teórica sobre fenômenos críticos, com ênfase no escopo teórico relevante para esta tese. No Cap. 3 apresentamos alguns exemplos de fenômenos críticos relacionados a nosso estudo. A seguir, no Cap. 4, descrevemos a dinâmica de tempos curtos e seus expoentes críticos dinâmicos. Apresentamos também uma pequena revisão sobre dinâmica de Langevin e como tratar a dinâmica de tempos curtos via simulações numéricas com diversos tipos de condições iniciais. Explicamos ainda brevemente o método de Monte Carlo. No Cap. 5, apresentamos os resultados principais de nossas simulações em tempos curtos com diversas condições iniciais e algumas conclusões. No Cap. 6 detalhamos o modelo de spins contínuos $O(4)$, discutindo o problema da quebra espontânea de simetria, de modo a complementar o mostrado no Cap. 2. Também apresentamos um estudo da dinâmica de tempos curtos para o parâmetro de ordem magnético desse modelo. No Cap. 7 apresentamos nossas conclusões. Além destes capítulos, temos quatro apêndices. No Ap. A exemplificamos o método de grupo de renormalização para o modelo de Ising uni e bidimensional. No Ap. B descrevemos o algoritmo de Hoshen-Kopelman para identificação de clusters. No Ap. C detalhamos as técnicas numéricas adotadas para a implementação de um código numérico do modelo $O(4)$. No último apêndice, mostramos alguns detalhes algébricos referentes ao Cap. 6.

Capítulo 2

Breve introdução aos fenômenos críticos

Neste capítulo faremos uma breve revisão de fenômenos críticos, tendo como base diversos livros-texto e artigos científicos nesta área. Algumas partes foram extraídas da literatura existente e, quando necessário, faremos referência ao texto original. Os conceitos envolvidos na teoria de fenômenos críticos apresentados aqui são apenas a parte essencial desta teoria que será empregada nos demais capítulos desta tese. Note que não consideraremos aqui os aspectos dinâmicos de um fenômeno crítico, ou seja, todos os fenômenos tratados serão independentes do tempo. O estudo da dinâmica de um sistema próximo à transição de fase revela uma grande riqueza sobre seu comportamento crítico [28]. No Cap. 4 apresentamos um estudo sobre este tema.

2.1 Introdução

A água, quando aquecida a pressão constante, entra em ebulição a uma temperatura bem definida, transformando-se em vapor [29, Cap. 8]. Para cada valor da pressão à qual está submetida a água corresponde uma temperatura de transição. Em um diagrama temperatura-pressão, a transição é representada por uma linha que possui uma inclinação positiva, pois a temperatura de transição cresce com o aumento da pressão. Sobre a linha de transição, o líquido e o vapor podem coexistir em quaisquer proporções. Entretanto, o líquido e o vapor apresentam densidades bem definidas, que dependem apenas da temperatura e da pressão de transição. À medida que aumentamos a temperatura ao longo da

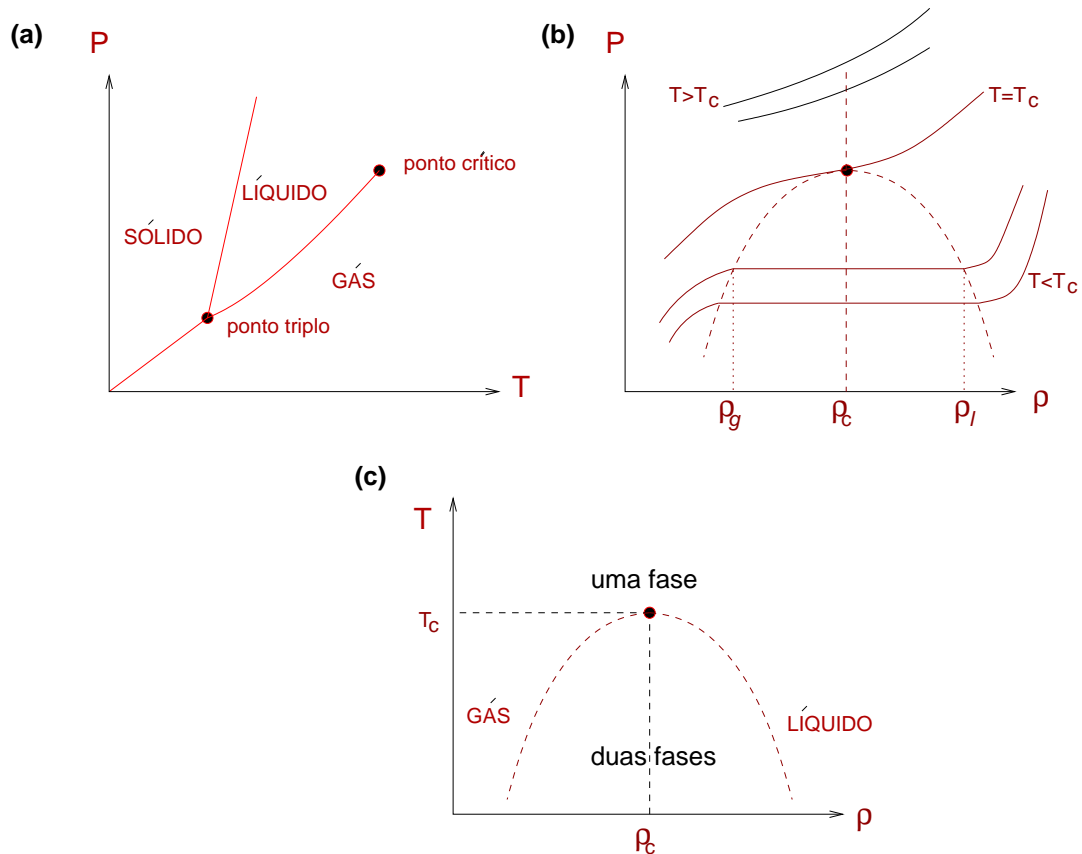


Fig. 2.1: Esquema da transição de fase sofrida por um fluido. Em (a) o plano $P \times T$, em (b) o plano $P \times \rho$ e em (c) o plano $T \times \rho$.

linha de coexistência, as diferenças entre as densidades do líquido e do vapor são cada vez menores e acabam se anulando em um certo ponto, caracterizado por uma temperatura e uma pressão bem definidas. Neste ponto, denominado *ponto crítico*, o líquido e o vapor tornam-se indistintos e a linha de transição tem seu término. A temperaturas mais altas, não há mais distinção entre a fase líquida e a fase gasosa. O ponto final da linha, o ponto crítico, é também chamado de ponto de transição de fase de segunda ordem. Este tipo de transição será estudada para vários sistemas nesta tese.

Um conceito importante para a discussão de sistemas de fluidos é a equação de estado, um funcional da forma $f(P, \rho, T) = 0$, que relaciona os parâmetros termodinâmicos pressão, densidade e temperatura. A equação de estado define

uma superfície tridimensional [30]. Cada um dos pontos desta superfície corresponde a um estado de equilíbrio do sistema. Para uma melhor visualização da superfície $P\rho T$ é conveniente considerar suas projeções nos planos $P \times T$, $P \times \rho$ e $T \times \rho$. No plano $P \times T$, Fig. 2.1 (a), notamos três regiões de fases distintas, correspondentes às três fases usuais da matéria: sólida, líquida e gasosa. As fases sólida e gasosa estão em equilíbrio ao longo de uma curva de sublimação, as fases sólida e líquida estão em equilíbrio ao longo de uma curva de fusão, enquanto as fases líquida e gasosa estão em equilíbrio ao longo de uma curva de vaporização. Cada ponto nestas três curvas corresponde a um estado de equilíbrio no qual duas ou mais fases coexistem (o ponto triplo é onde as três fases coexistem).

Como dito acima, nota-se que a curva vapor-pressão não se estende indefinidamente, mas sim até um determinado ponto. Este é o chamado ponto crítico, e suas coordenadas são (P_c, ρ_c, T_c) . Este fato significa que podemos converter um líquido em gás continuamente sem cruzar uma curva de transição de fase. Neste sentido, não existe diferença fundamental entre as fases líquida e gasosa. No plano $P \times \rho$, Fig. 2.1 (b), observa-se que para baixas temperaturas existe uma diferença significativa entre as densidades quando o fluido está na fase líquida (ρ_l) e na fase gasosa (ρ_g). Mas quando $T \rightarrow T_c$, esta diferença tende a zero. A existência de um parâmetro não nulo abaixo de T_c e nulo acima define uma quantidade importante em nosso estudo. Dizemos que $\rho_l - \rho_g$ é o parâmetro de ordem da transição para a fase simétrica, na qual $\rho_l - \rho_g = 0$.

Para uma temperatura muito alta, a lei dos gases ideais é obedecida e as isotermas no plano $P \times \rho$ são linhas retas dadas pela equação de estado

$$Pm = \rho kT, \quad (2.1)$$

onde k é a constante de Boltzmann e m a massa de uma molécula do fluido. Desta forma, podemos analisar o que ocorre no ponto crítico através de uma analogia com um sistema magnético. Para tanto, imaginemos que o volume macroscópico V que contém o fluido seja particionado em células microscópicas cujo o volume v possua rigorosamente uma molécula constituinte do fluido.

Construímos um sistema magnético análogo considerando cada célula como o sítio de uma rede, no qual um momento magnético está presente. Este momento magnético, ou spin, estará apontando para cima (respectivamente para baixo) se a célula correspondente do fluido for ocupada (respectivamente não ocupada) por uma molécula. Então, para uma temperatura muito maior que a crítica, o movimento livre das moléculas do gás corresponderá a uma inversão rápida e aleatória dos spins. No entanto, com a diminuição da temperatura em direção à temperatura crítica, pequenas “gotas” de spins (fluido) correlacionados surgem. Aproximando-se do ponto crítico, o tamanho das gotas cresce. Estando próximo o suficiente de T_c , as gotas adquirem um “raio” da ordem do comprimento de onda da luz visível. Logo, a luz é fortemente espalhada, dando origem ao fenômeno de opalescência crítica [31].

Uma análise mais cuidadosa das isothermas da Fig. 2.1 (b) mostra que estas curvas adquirem um platô para $T < T_c$ e, nas vizinhanças do ponto crítico, $\partial P/\partial \rho$ vai a zero para $T \rightarrow T_c^+$. Portanto, a compressibilidade isotérmica, definida como

$$K_T \equiv \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial P} \right)_T, \quad (2.2)$$

diverge para $T \sim T_c$. Uma analogia mais precisa entre as transições ocorridas em sistemas de fluidos e sistemas magnéticos se dá quando vinculamos os parâmetros P, ρ, T do sistema de fluidos aos parâmetros magnéticos H, M, T . Por exemplo, aplicando pressão ao fluido sua densidade aumenta, enquanto que aplicando um campo magnético externo H ao sistema magnético a magnetização M aumenta. Então, H é análogo a P e M é análogo* a ρ . A função resposta K_T é análoga à suscetibilidade isotérmica

$$\chi_T \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_T. \quad (2.3)$$

Como no caso anterior, esta quantidade diverge para $T \approx T_c$. Esta divergência é uma característica fundamental de um fenômeno crítico.

*Para uma analogia mais exata, o parâmetro de ordem magnético M deve ser relacionado ao parâmetro de ordem do fluido $\Delta\rho (= \rho_l - \rho_g)$.

Na Fig. 2.1 (c) é esquematizado o diagrama de fase no plano $T \times \rho$. Abaixo da temperatura crítica, as duas fases coexistem [32, Cap. 1]. Ou seja, se aumentarmos a densidade para uma dada temperatura fixa, não é possível passar da fase gasosa para a líquida sem passar através de um regime onde o fluido contenha uma mistura gás-líquido. Acima de T_c , é possível passar continuamente de gás para líquido com o aumento da densidade para uma temperatura constante. Neste caso, não existe uma região com mistura gás-líquido. Isto sugere que nesta situação não temos uma forma real de distinguir entre um líquido e um gás. A forma da curva de coexistência próximo (e abaixo) do ponto crítico é medida experimentalmente. Por exemplo, para o *hexafluoreto de enxofre* é encontrado

$$|\rho_g - \rho_l| \sim |T - T_c|^{0.327(6)}. \quad (2.4)$$

O número 0.327(6) é um exemplo de expoente crítico, e não depende em particular do sistema de fluido estudado. Seria razoável esperar que este expoente mudasse conforme trocamos o fluido, pois teríamos diferentes curvas de coexistência. No entanto, encontra-se que para o ${}^3\text{He}$ o expoente crítico vale 0.321(6), ou seja, o mesmo valor considerando os erros. Este é um exemplo de *classe de universalidade*.

De fato, valores numéricos medidos para os expoentes críticos de muitos sistemas diferentes revelam uma semelhança surpreendente. Isto mostra um comportamento universal da natureza na região crítica. Um expoente crítico qualquer γ medido, por exemplo, para O_2 é o mesmo para o N_2 . Ou seja, diversos fluidos pertencentes a uma classe de universalidade terão o mesmo comportamento na região crítica. No entanto, fatores de escala podem influenciar na medida de um observável. Para identificarmos vários sistemas dentro de uma mesma classe de universalidade, precisamos fazer um re-escalamento de suas dimensões. Este comportamento também é evidenciado em materiais magnéticos, tais como o ferro, o níquel, e outros (veja [31, Cap. 1, Tab. 1.2]). Desta forma concluímos que o comportamento termodinâmico na região crítica pode ser também universal para sistemas de natureza muito diversa. Um

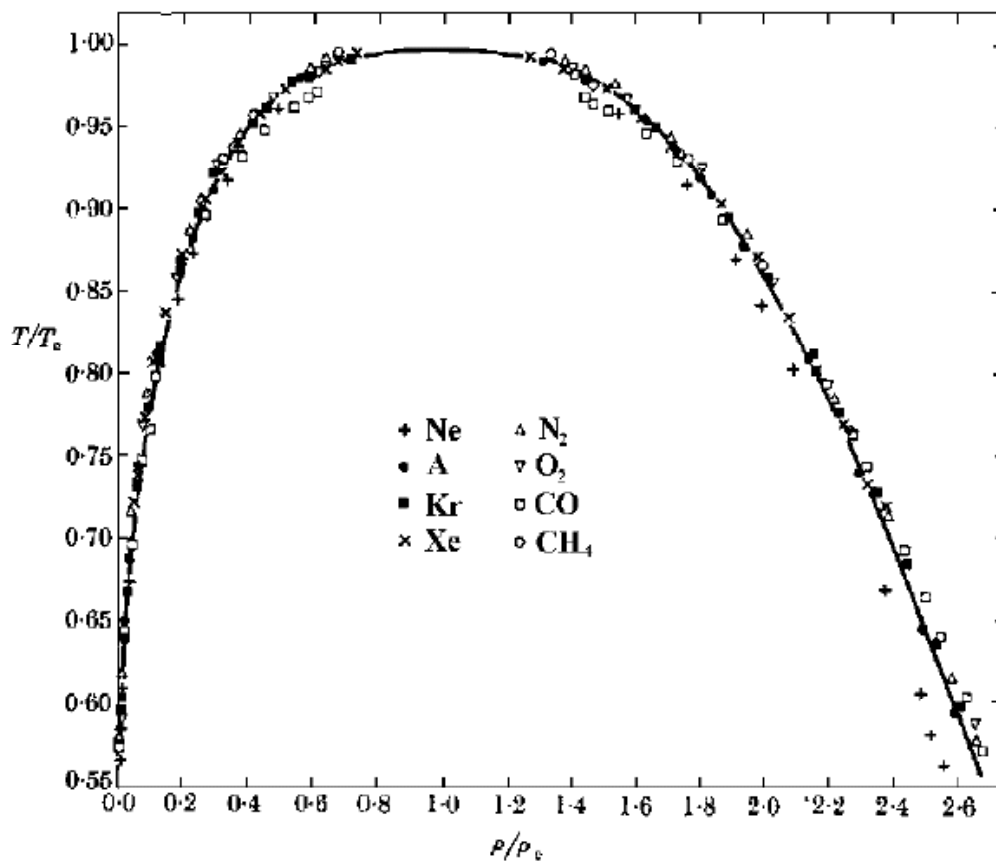


Fig. 2.2: Medida da curva de coexistência para oito fluidos. A curva sólida corresponde ao ajuste de uma função cúbica. Figura extraída de [33].

gráfico da curva de coexistência para oito fluidos pode ser visto na Fig. 2.2. A universalidade depende basicamente de três fatores: (i) das dimensões do sistema, (ii) do alcance das interações entre as componentes que formam o sistema e (iii) das simetrias existentes.

A divergência da primeira derivada do parâmetro de ordem [Eqs. (2.2) e (2.3)] (ou equivalentemente a divergência da segunda derivada da energia livre) e a presença de uma universalidade entre diversos tipos de fluidos, são características fundamentais de um fenômeno crítico ou transição de fase de segunda ordem. No decorrer deste capítulo, discutiremos com mais detalhes os conceitos físicos envolvidos em um fenômeno crítico em sistemas magnéticos. Para tanto, utilizaremos o modelo de Ising, introduzido para a descrição da

transição de fase de um material ferromagnético para paramagnético.

2.2 Fenômenos críticos em modelos de spins

O modelo de Ising será um tema recorrente em vários capítulos desta tese, sendo apropriado introduzirmos os expoentes críticos e o conceito de transição de fase através dele. O modelo mencionado constitui uma poderosa ferramenta utilizada para descrever diversos sistemas físicos, tais como spins em uma rede, fluidos, fenômenos de transporte, e outros. Aqui, vamos tratar o modelo da forma usual, ou seja, supondo que um conjunto de spins de um dado material possa ser descrito sobre uma rede e cada um destes só possa interagir com seus vizinhos próximos, além de possuírem apenas dois graus de liberdade: spins apontando para cima ou para baixo em relação a uma direção pré definida. Este modelo é regido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (2.5)$$

onde $\langle \rangle$ representa a interação entre primeiros vizinhos, \mathcal{J} uma constante de acoplamento e H é um campo magnético externo. Uma análise do modelo de Ising via grupo de renormalização pode ser vista no Ap. A. Este modelo apresenta uma transição de fase de segunda ordem em duas dimensões, que pode ser calculada analiticamente [34]. O parâmetro de ordem do modelo de Ising é a magnetização, que em uma rede com N spins é

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i. \quad (2.6)$$

Para uma temperatura próxima a zero, os spins da rede tendem a alinhar-se perfeitamente, formando um ferromagneto, mesmo para H tendendo a zero. No entanto, após um certo valor de temperatura, os spins perdem este auto-alinhamento. Desta forma, temos uma transição (de segunda ordem) de uma fase ferromagnética para uma fase paramagnética na temperatura crítica T_c — historicamente conhecida com temperatura de Curie. Na Fig. 2.3 é

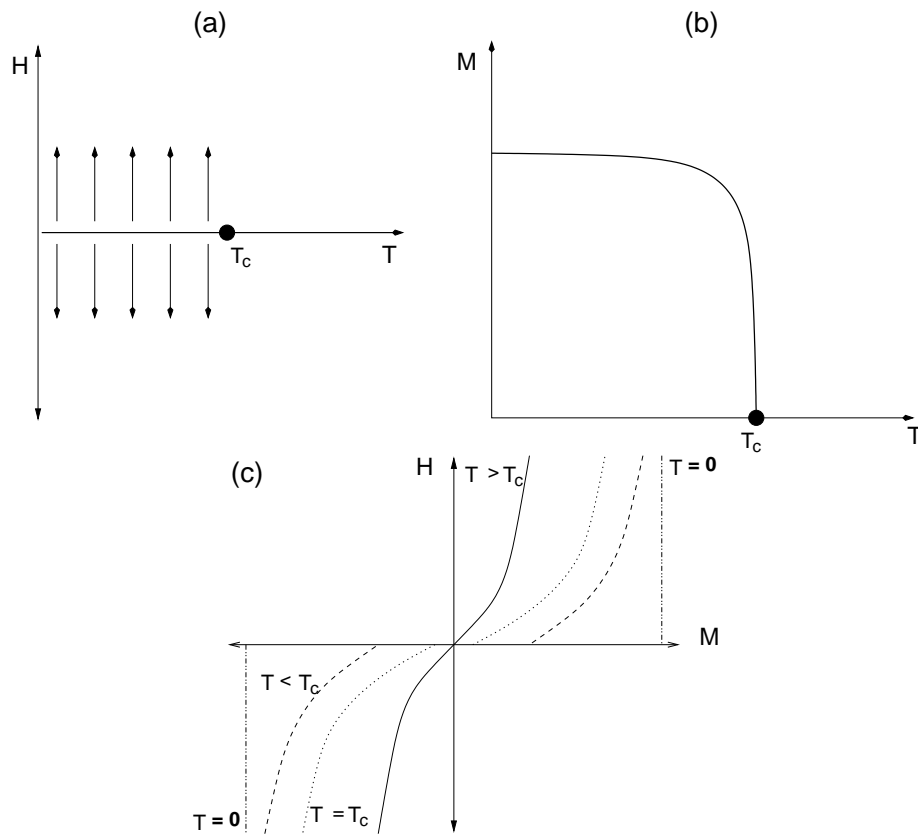


Fig. 2.3: Esquema da transição de fase e do parâmetro de ordem do modelo de Ising. Em (a), mostra-se a existência de duas fases a campo nulo. Em (b), tem-se um esboço do comportamento do parâmetro de ordem a campo nulo, e em (c) temos as curvas de histerese (plano $H \times M$).

esquematizado este comportamento. A solução exata (a campo nulo) para o parâmetro de ordem do modelo de Ising em duas dimensões é dada por [35]

$$M = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \{1 - (\sinh(2\beta J))^{-4}\}^{1/8} & T < T_c \end{cases}, \quad (2.7)$$

sendo $\beta \equiv 1/kT$, onde k é a constante de Boltzmann. Um esquema desta curva pode ser visto na Fig. 2.3 (b).

Podemos definir a função de partição como

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.8)$$

onde $\{S\}$ indica soma sobre todas as configurações de spins. Assim, definimos

$$\begin{aligned} \text{Magnetização : } M &= \partial\Phi/\partial H, \\ \text{Suscetibilidade : } \chi &= \partial M/\partial H, \\ \text{Calor específico : } C &= T^2 \partial^2\Phi/\partial T^2, \end{aligned} \tag{2.9}$$

sendo

$$\Phi = -\frac{1}{\beta} \log(\mathcal{Z}) \tag{2.10}$$

a energia livre de Helmholtz. Outra grandeza útil é a função de correlação $G(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$. Esta nos informa, do ponto de vista de modelos de spins, o quanto um spin na posição i “sente” um outro que está na posição j da rede. Para tanto, definimos

$$G(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \equiv \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle, \tag{2.11}$$

sendo

$$\sum_i \langle S_i \rangle = \frac{1}{\beta \mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial H}, \quad \sum_{i,j} \langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{\beta^2 \mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial H^2}, \tag{2.12}$$

onde \mathcal{Z} é a função de partição [Eq. (2.8)]. Para $T \neq T_c$ a função de correlação decai exponencialmente

$$G(r) \sim e^{-r/\xi}, \tag{2.13}$$

definindo o comprimento de correlação ξ .

As quantidades acima apresentam comportamentos singulares na região crítica. Por exemplo, para $T \sim T_c$, a magnetização vai a zero e a suscetibilidade e o calor específico divergem, como mencionado na pág. 12. A partir destas singularidades, observamos que as quantidades assumem um comportamento

como lei de potência e são dadas por

$$\begin{aligned}
 M &\sim |\tau|^\beta, & H &= 0 \quad \text{para } T < T_c \\
 M &\sim H^{1/\delta}, & T &= T_c \\
 \chi &\sim |\tau|^{-\gamma}, & H &= 0 \\
 C &\sim |\tau|^{-\alpha}, & H &= 0 \\
 G(r) &\sim \frac{1}{r^{d-2-\eta}}, & T &= T_c \\
 \xi &\sim |\tau|^{-\nu}, & H &= 0
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

sendo

$$\tau \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \tag{2.15}$$

denominada temperatura reduzida e ξ o comprimento de correlação, que será discutido a seguir. A partir da divergência de algumas quantidades (susceptibilidade, calor específico e outros), podemos supor que os expoentes críticos vinculados a estas sejam diferentes quando $T \rightarrow T_c^+$ e $T \rightarrow T_c^-$. Por exemplo, a susceptibilidade apresentaria um γ e um γ' . No entanto, é mostrado em geral que isto não ocorre, como será visto abaixo na aproximação de campo médio. As quantidades $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta$ e ν são os expoentes críticos estáticos (ou de equilíbrio). Seus valores para o modelo de Ising e para aproximação de campo médio estão listados na Tab. 2.1.

As quantidades físicas na região crítica apresentam um comportamento simples (lei de potência) em função dos parâmetros externos, tais como a temperatura e o campo magnético externo, como pode ser visto no conjunto de equações acima [Eq. (2.14)]. A partir de uma análise empregando leis de hipótese de escala, mostra-se que os expoentes críticos estáticos não são independentes, satisfazendo algumas relações. Um tratamento desse tipo nos

		expoentes críticos		
	grandezas	campo médio	2d	3d (valores aprox.)
T_c		1	$2/\ln(\sqrt{2} + 1)$	4.5115
β	magnetização	1/2	1/8	0.31
δ	magnetização	3	15	5
α	calor específico	descontínuo	0	0.12
γ	suscetibilidade	1	7/4	1.25
ν	compr. de corr.	1/2	1	0.64
η	função de corr.	0	1/4	0.05

Tab. 2.1: Expoentes críticos estáticos para o modelo de Ising.

permite obter as seguintes relações [30, Cap. 11]:

$$\text{lei de Rushbrooke: } \alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

$$\text{lei de Griffiths: } \alpha + \beta(\delta + 1) = 2$$

$$\text{lei de Fisher: } (2 - \eta)\nu = \gamma \quad (2.16)$$

$$\text{lei de Josephson: } 2 - \alpha = \nu d$$

$$\text{lei de Widom: } \beta(\delta - 1) = \gamma.$$

Além do modelo de Ising, existe uma infinidade de modelos que apresentam transição de fase de segunda ordem. Dentre eles temos os modelos $O(N)$, ou N -vetoriais, que correspondem ao modelo de Ising para spins contínuos. Nestes modelos, que serão tratados com mais detalhes no Cap. 6, os spins são vetores N -dimensionais, logo uma pequena modificação deve ser feita no hamiltoniano e temos

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \cdot \sum_i \vec{S}_i. \quad (2.17)$$

A simetria discreta do modelo de Ising é substituída por uma simetria de rotação (contínua). O caso $N = 2$ (modelo XY) descreve a transição do hélio líquido

para superfluido e o caso $N = 3$ representa a versão clássica do modelo de Heisenberg para ferromagnetos. Os gráficos de fases (veja a Fig. 2.3) continuam válidos para os modelos em três dimensões, apenas os valores dos expoentes críticos e da temperatura crítica são diferentes [Eqs. (6.10) e (6.11)]. Acredita-se que o caso $N = 4$ descreva a transição de fase quiral na QCD com dois sabores de quarks. Neste caso a magnetização e o campo magnético corresponderiam respectivamente ao chamado condensado quiral e à massa dos quarks [36], como será visto na Seção 3.1.

2.3 Aproximação de campo médio

Sabemos que o modelo de Ising é exatamente solúvel em uma e em duas dimensões. A solução exata no caso bidimensional — feita pela primeira vez por L. Onsager em 1944 [34] — é bastante intrincada. Fazemos uma análise aproximada deste caso no Ap. A, utilizando a técnica de grupo de renormalização em espaço real. É também possível aplicar outros tratamentos aproximados a este modelo. Um deles foi introduzido por P. Weiss [37] em 1907, antes dos cálculos do próprio E. Ising. A aproximação de campo médio consiste em supor que cada spin pode ser visto como o seu valor médio mais uma pequena flutuação em torno desta média, ou seja,

$$S_i = \langle S_i \rangle + \delta S_i. \quad (2.18)$$

Logo, o hamiltoniano do modelo de Ising sem campo externo pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \\ &\approx -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} (\langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \delta S_i \langle S_j \rangle + \delta S_j \langle S_i \rangle), \end{aligned} \quad (2.19)$$

desprezando termos da ordem de δ^2 . Sendo $M = \langle S_j \rangle$, concluímos que

$$\mathcal{H}_W = \frac{Nz\mathcal{J}}{2} M^2 - h_W \sum_i S_i, \quad (2.20)$$

pois temos N spins na rede e $h_W \equiv z\mathcal{J}M/2$ funciona como um campo efetivo, devido à magnetização média dos z ($= 2d$) spins primeiros vizinhos. Esta é, em essência, a aproximação de campo médio. Este “campo” é chamado de campo efetivo de Weiss.

A seguir, consideraremos o hamiltoniano do modelo de Ising com um campo externo [veja a Eq. (2.5)]. Podemos calcular $\langle S_k \rangle$ de maneira explícita

$$\begin{aligned} \langle S_k \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{S\}} S_k \exp\{-\beta[-\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i]\} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{S\}} S_k \exp\{-\beta[-S_k(\mathcal{J} \sum_{\langle i \rangle}^* S_i + H) - (\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle}' S_i S_j + H \sum_i' S_i)]\}, \end{aligned} \quad (2.21)$$

sendo \sum' a soma sobre todos os spins menos o spin k e \sum^* a soma sobre os primeiros vizinhos de k . Definindo

$$\begin{cases} \phi \equiv \mathcal{J} \sum_{\langle i \rangle}^* S_i + H \\ \psi \equiv \mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle}' S_i S_j + H \sum_i' S_i \end{cases}, \quad (2.22)$$

podemos escrever a função de partição como

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S\}} e^{\beta S_k \phi} e^{\beta \psi}. \quad (2.23)$$

Temos assim

$$\begin{aligned} \langle S_k \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{S\}} (e^{\beta \phi} - e^{-\beta \phi}) e^{\beta \psi} \\ &= \frac{(e^{\beta \phi} - e^{-\beta \phi}) \sum_{\{S\}}'' e^{\beta \psi}}{(e^{\beta \phi} + e^{-\beta \phi}) \sum_{\{S\}}'' e^{\beta \psi}}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

onde usamos o fato de que $S_k = \pm 1$ e definimos $\sum_{\{S\}}''$ como sendo a soma de todas as configurações menos a configuração de S_k . Então temos

$$\begin{aligned} \langle S_k \rangle &= \frac{e^{\beta \phi} - e^{-\beta \phi}}{e^{\beta \phi} + e^{-\beta \phi}} \\ &= \tanh[\beta(\mathcal{J} \sum_{\langle i \rangle}^* S_i + H)]. \end{aligned}$$

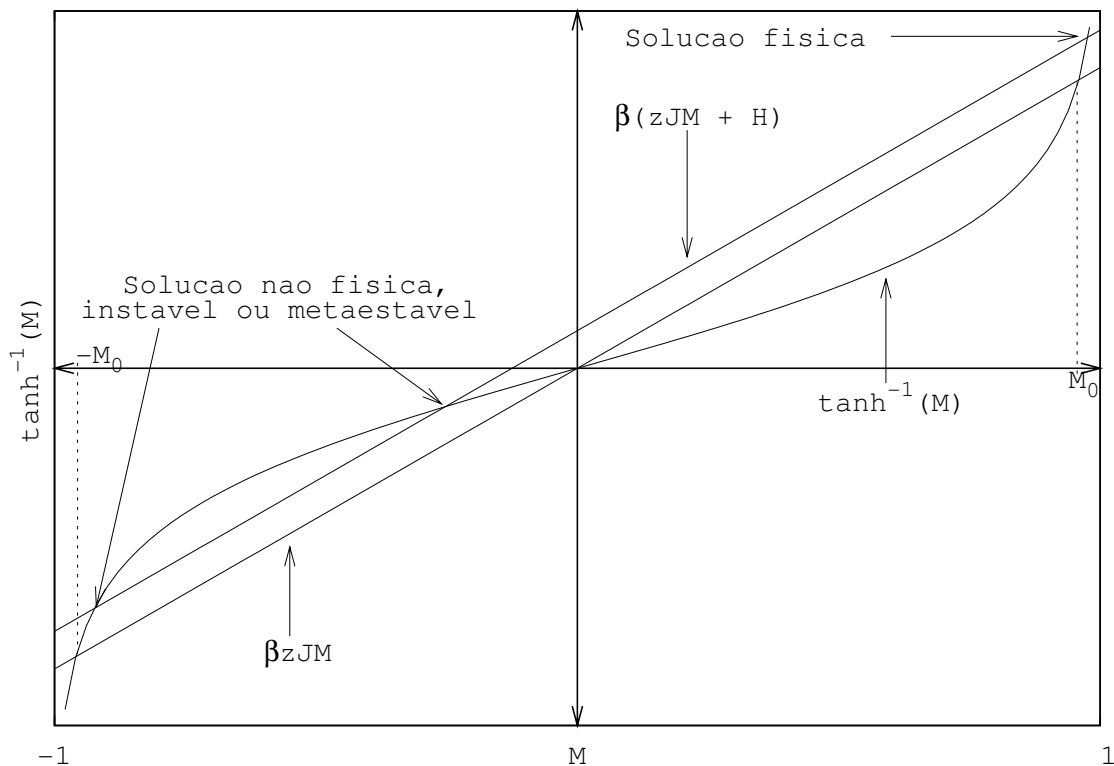


Fig. 2.4: Solução gráfica da Eq. (2.26), onde usamos $\beta = 1.01$ em ambas as retas.

Utilizando a Eq. (2.6) temos

$$\langle S_k \rangle = \tanh[\beta(\mathcal{J}zM + H)], \quad (2.25)$$

ou

$$\tanh^{-1}(M) = \beta(zJM + H). \quad (2.26)$$

Esta equação é transcendental e sua solução é dada pelos pontos de intersecção da função $\tanh^{-1}(M)$ e da reta $\beta(\mathcal{J}zM + H)$, como é esquematizado na Fig. 2.4. Temos três valores como solução para $H > 0$, mas é natural aceitarmos neste caso a solução com $M > 0$, pois a física do problema nos indica que, se temos um campo magnético aplicado, os spins devem se orientar com ele. Como a magnetização é a soma desses objetos, esperamos um valor

positivo. Este raciocínio continua válido mesmo para $H \rightarrow 0$. No entanto, se o campo tende a zero pela esquerda (respectivamente direita) a solução tenderá a um valor finito M_0 (respectivamente $-M_0$) diferente de zero se $\beta\mathcal{J}z$ for maior do que um [38, Cap. 1]. Neste ponto, temos uma quebra espontânea de simetria, pois as duas orientações de spins são equivalentes em princípio, mas para baixas temperaturas a magnetização espontânea $\pm M_0$ escolhe uma das orientações. Na aproximação de campo médio, portanto, teremos para $H = 0$ uma magnetização espontânea quando a temperatura for menor que a crítica, que é igual a $T_c = z\mathcal{J}/k$. Este valor corresponde à temperatura para a qual a inclinação da curva $\tanh^{-1}(\beta z\mathcal{J}M)$ é $\beta z\mathcal{J}$. O mesmo não ocorrerá se a temperatura for maior que a crítica, pois desta forma a única intersecção das duas curvas é na origem.

Próximo da temperatura crítica para campo magnético externo fraco, pode-se expandir o lado direito da Eq. (2.26) supondo M e H pequenos. Lembrando que

$$\tanh^{-1}(x) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+x}{1-x} \right), \quad (2.27)$$

teremos

$$\begin{aligned} \tanh^{-1}(M+a) &= \tanh^{-1}(a) + (M+a) \left(\frac{1}{1-M^2} \right) \\ &+ \frac{(M+a)^2}{2!} \left[\frac{2M}{(1-M^2)^2} \right] \\ &+ \frac{(M+a)^3}{3!} \left[\frac{2}{(1-M^2)^2} - \frac{8M^2}{(1-M^2)^3} \right] + \dots \quad (2.28) \end{aligned}$$

Fazendo $a \rightarrow 0$ temos

$$\tanh^{-1}(M) = M + \frac{M^3}{3} + O(M^5). \quad (2.29)$$

Então, reescrevemos a Eq. (2.26) como

$$M + \frac{M^3}{3} = \frac{T_c}{T}M + \frac{H}{kT}, \quad (2.30)$$

onde usou-se $T_c = z\mathcal{J}/k$ (como definido acima). Então, para $H = 0$,

$$M = (1+\tau) \left(M + \frac{M^3}{3} \right), \quad (2.31)$$

sendo $\tau (\equiv T/T_c - 1)$ a temperatura reduzida definida na Eq. (2.15). A solução desta equação mostra que, para $T \leq T_c$

$$M^2 = -\frac{3\tau}{1+\tau} \longrightarrow M \sim \sqrt{-3\tau}. \quad (2.32)$$

Usando a definição do expoente crítico β , isto é, $M \sim \tau^\beta$ [veja a Eq. (2.14)], concluímos que $\beta = 1/2$. Da mesma forma, quando $T = T_c$ e H for fraco, podemos reescrever a Eq. (2.26) como

$$M = \tanh(\beta_c H + M). \quad (2.33)$$

Expandindo

$$\tanh(\beta_c H + M) \approx \beta_c H + M - \frac{(\beta_c H + M)^3}{3}, \quad (2.34)$$

chegamos a

$$\begin{aligned} M &\approx \beta_c H + M - \frac{(\beta_c H + M)^3}{3} \\ M &\approx (3\beta_c H)^{1/3} - \beta_c H \longrightarrow M \sim H^{1/3}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

ou seja, $\delta = 3$.

Como definido na Eq. (2.9), a suscetibilidade χ é a derivada da magnetização em relação ao campo externo. Então, derivando a Eq. (2.26), temos

$$\chi = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} = \frac{\beta \beta_c}{\beta_c \cosh^2(\beta M/\beta_c) - \beta}. \quad (2.36)$$

No caso $T > T_c$ a magnetização é nula e $\beta_c - \beta = \beta\tau$. No caso $T \lesssim T_c$ a magnetização é pequena, o que possibilita expandir

$$\cosh^2(\beta M/\beta_c) \sim \left(1 + \frac{M^2 \beta^2}{2\beta_c^2}\right)^2 \approx 1 + M^2. \quad (2.37)$$

Nessas condições: $M^2 = -3\tau$ e $\beta \approx \beta_c$. Logo, o denominador da Eq. (2.36) pode ser reescrito como $\beta_c(1 - 3\tau) - \beta_c = -3\beta_c \tau$, levando a

$$\chi = \begin{cases} \beta_c \tau^{-1} & , \quad T > T_c \\ \beta_c (-3\tau)^{-1} & , \quad T < T_c \end{cases}, \quad (2.38)$$

de onde concluímos que o expoente crítico vinculado à suscetibilidade em campo médio é $\gamma = \gamma' = 1$ [31, Cap. 7].

Usando a função de correlação [Eq. (2.11)] as Eqs. (2.12) e a Eq. (2.36), podemos calcular

$$\begin{aligned}
 \chi &= \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \log \mathcal{Z}}{\partial H^2} \\
 &= \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial H^2} - \frac{1}{\mathcal{Z}^2} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial H} \right)^2 \right] \\
 &= \beta \left[\sum_{i,j} \langle S_i S_j \rangle - \left(\sum_i \langle S_i \rangle \right)^2 \right] = \beta \sum_{i,j} G(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \\
 &= \beta \sum_i G(\vec{x}_i) = \frac{\beta}{a^3} \int d^3 r G(\vec{r}), \tag{2.39}
 \end{aligned}$$

sendo a^3 um fator de volume que surge na passagem da soma para a integral. Análises dimensionais mostram que [28]

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{r} f(\vec{r}/\xi). \tag{2.40}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
 \chi &= \frac{\beta}{a^3} \int \frac{1}{r} f(\vec{r}/\xi) r^2 dr d\Omega \\
 &\sim \xi^2 \int x f(x) dx. \tag{2.41}
 \end{aligned}$$

Lembrando que $\chi \sim |\tau|^{-1}$, vemos que o comprimento de correlação se comporta como

$$\xi \sim |\tau|^{-\nu}, \tag{2.42}$$

sendo $\nu = 1/2$. Assim, calculamos vários expoentes críticos na aproximação de campo médio. Na Tab. 2.1 listamos todos eles, inclusive os que não são calculados neste capítulo. Aproveitamos para também listar os valores dos expoentes críticos nos casos bi (calculados analiticamente) e tridimensional (estimados numericamente).

Como apresentamos acima, com a aproximação de campo médio é possível calcular diversos expoentes críticos estáticos. Entretanto, se compararmos estes valores com os conhecidos analiticamente para o modelo de Ising bidimensional a campo nulo (veja Tab. 2.1), notaremos que esta aproximação falha tanto na determinação destes expoentes críticos quanto na determinação da temperatura crítica.

2.4 Teoria de Landau

A teoria de Landau, de que trataremos nesta seção, representa uma aproximação de campo médio mais geral que a desenvolvida por Weiss. Para tanto, define-se a energia livre de Landau como

$$\mathcal{L} = a \tau \phi^2 + \frac{1}{2} b \phi^4 - H \phi, \quad (2.43)$$

onde τ é temperatura reduzida definida na Eq. (2.15), a e b são parâmetros fenomenológicos e o campo externo H surge como um acoplamento externo com o parâmetro de ordem ϕ .

É possível calcular de maneira simples alguns expoentes críticos para a teoria de Landau. Partindo do mínimo do funcional de Landau [Eq. (2.43)] e considerando o parâmetro de ordem ϕ constante, temos (para $H = 0$)

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \phi} &= 2a \tau \phi + 2b \phi^3 = 0 \\ 0 &= \phi(a \tau + b \phi^2), \end{aligned} \quad (2.44)$$

de onde obtemos $\phi = 0$ ou $\phi = \sqrt{-a\tau/b}$. Desta forma, medimos o expoente crítico $\beta = 1/2$. Se $H \neq 0$ temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} &= 2a \tau \phi + 2b \phi^3 - H = 0 \\ H &= 2a \tau \phi + 2b \phi^3. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Se $\tau = 0$ ($T = T_c$):

$$H = 2b \phi^3 \rightarrow \phi = \left(\frac{H}{2b} \right)^{1/3}, \quad (2.46)$$

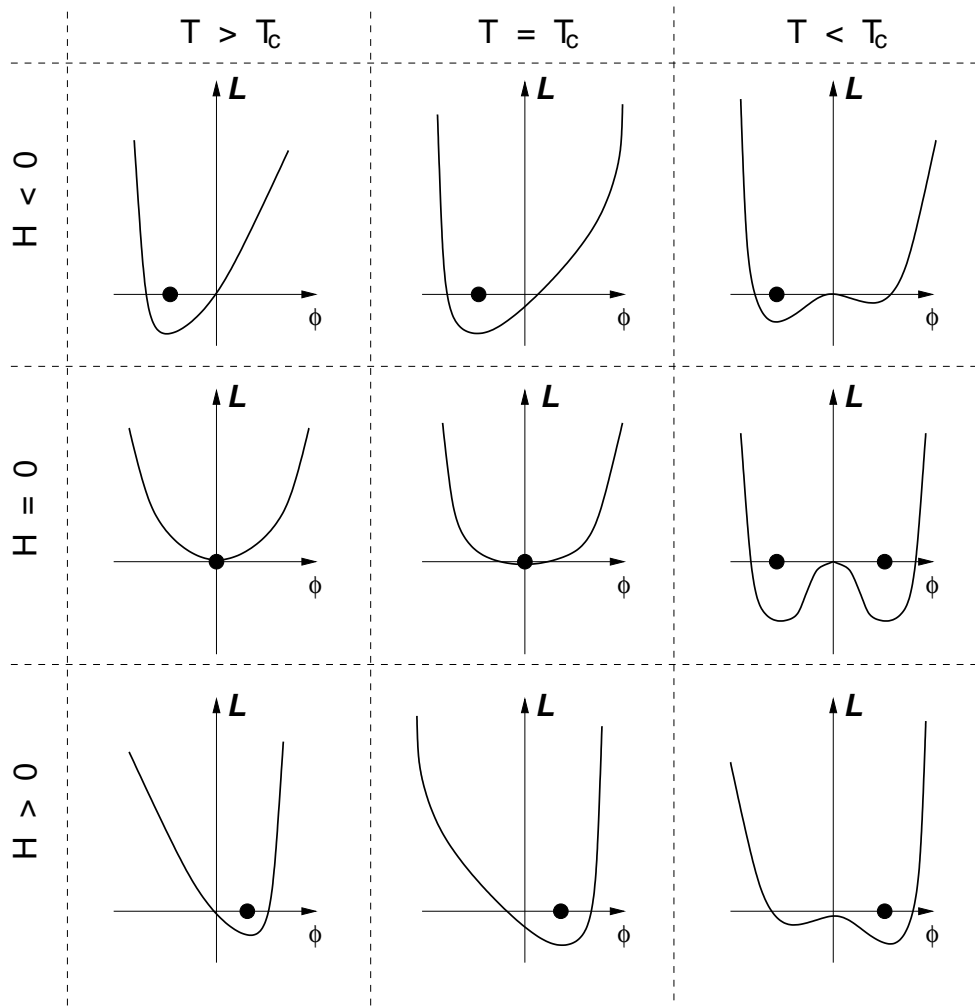


Fig. 2.5: Gráfico das diversas possibilidades da Eq. (2.43). Esta figura é análoga à vista em [32].

ou seja, $\delta = 3$. Usando a Eq. (2.45), calculamos a suscetibilidade

$$\chi = \frac{\partial \phi}{\partial H} = \left(\frac{\partial H}{\partial \phi} \right)^{-1} = \frac{1}{2(a\tau + 3b\phi^2)}. \quad (2.47)$$

Para $\tau > 0$, $\phi = 0$ e para $\tau < 0$, $\phi^2 = -a\tau/b$. Então temos

$$\chi = \begin{cases} (2a\tau)^{-1}, & \tau > 0 \\ (-4a\tau)^{-1}, & \tau < 0 \end{cases}. \quad (2.48)$$

Logo $\gamma = \gamma' = 1$, ou seja, temos expoentes de campo médio. Na Fig. 2.5 mostramos as diversas possibilidades da Eq. (2.43). Para $H = 0$ e $T < T_c$,

notamos que existe uma simetria no funcional. O estado fundamental pode estar em

$$\phi = \pm \sqrt{-a\tau/b}, \quad (2.49)$$

o que demonstra uma simetria no sistema. Porém, quando temos um campo aplicado, o sistema converge para uma direção, quebrando assim explicitamente esta simetria.

Na maioria dos casos, o parâmetro de ordem não é homogêneo, como por exemplo quando temos um campo magnético externo não uniforme. Neste caso, devemos considerar as flutuações do parâmetro de ordem no espaço. Sabemos que, em um sistema com comprimento de correlação $\xi(T)$, existem blocos de spins em uma região de dimensão linear da ordem de ξ onde a magnetização é *aproximadamente* constante. Então, podemos dividir o sistema em blocos de tamanho $\Lambda^{-1} [\approx \xi(T)]$, sendo que em cada bloco o sistema é aproximadamente uniforme. Assim, definimos uma magnetização local

$$M_\Lambda(\vec{r}) = \frac{1}{N_\Lambda(\vec{r})} \sum_{i \in \vec{r}} \langle S_i \rangle, \quad (2.50)$$

dentro de cada bloco Λ centrado em \vec{r} , sendo $N_\Lambda(\vec{r}) = 1 / (a\Lambda)^d$ o número de spins no bloco Λ , d a dimensão da rede e a o espaçamento da rede. Note que, próximo a T_c , $\xi \gg a$ e, se escolhermos $\Lambda^{-1} \leq \xi$, ou seja

$$a \ll \Lambda^{-1} \leq \xi, \quad (2.51)$$

teríamos um grande número de spins dentro de um determinado bloco \vec{r} , especialmente quando T tende a T_c . Portanto, não devemos escolher $\Lambda^{-1} > \xi$, senão a magnetização não será aproximadamente uniforme dentro do bloco.

Dividir o sistema em blocos é o que chamamos de *coarse-graining* e a magnetização é conhecida como magnetização coarse-grained. Porém, $M_\Lambda(\vec{r})$ não é unicamente definida, ela varia para cada bloco Λ . A idéia básica para a construção destas variáveis é que $M_\Lambda(\vec{r})$ não flutue dentro da escala da rede mas varie suavemente no espaço. Para escrever o funcional de Landau, não basta

escrever

$$\mathcal{L} = \sum_{\vec{r}} \mathcal{L}(M_{\Lambda}(\vec{r})), \quad (2.52)$$

pois existe uma grande flutuação entre blocos vizinhos, e minimizar este funcional resultaria no valor de equilíbrio de $M_{\Lambda}(\vec{r})$ em cada bloco e não em todo o sistema. Então, para escrevermos o funcional temos que considerar estas flutuações entre blocos adjacentes, colocando um termo extra de modo a penalizar estas flutuações

$$\mathcal{L}_{CG} = \sum_{\vec{r}} \sum_{\delta} \frac{\gamma'}{2} \left[\frac{M_{\Lambda}(\vec{r}) - M_{\Lambda}(\vec{r} + \vec{\delta})}{\Lambda^{-2}} \right]^2, \quad (2.53)$$

onde $\vec{\delta}$ é um vetor (de magnitude Λ^{-1}) que aponta para os blocos primeiros vizinhos de \vec{r} , e o valor do custo energético é independente do sinal da diferença da magnetização. A constante positiva γ' é em princípio dependente da temperatura. Usando o fato de que $M_{\Lambda}(\vec{r})$ varia suavemente no espaço (comparado com a) podemos escrever

$$\mathcal{L}_{CG} = \int_{\Omega} d^d \vec{r} \left\{ \mathcal{L}(M_{\Lambda}(\vec{r})) + \frac{1}{2} \gamma [\nabla M_{\Lambda}(\vec{r})]^2 \right\}. \quad (2.54)$$

Agora usando a Eq. (2.43) temos

$$\mathcal{L}_{CG} = \int_{\Omega} d^d \vec{r} \left\{ \frac{\gamma}{2} [\nabla M_{\Lambda}(\vec{r})]^2 + a \tau M_{\Lambda}(\vec{r})^2 + \frac{1}{2} b M_{\Lambda}(\vec{r})^4 - H M_{\Lambda}(\vec{r}) \right\}, \quad (2.55)$$

onde o funcional \mathcal{L}_{CG} é a energia livre coarse-grained ou hamiltoniano efetivo. Para dividir o sistema em blocos, com descrito acima, empregamos o grupo de renormalização em espaço real. No Ap. A demonstramos esta técnica para o modelo de Ising em uma e duas dimensões. Como se trata basicamente de uma aproximação, existe um limite de validade implícito para a teoria de Landau. Este limite, explorado por Ginzburg, é tratado a seguir.

2.4.1 Critério de Ginzburg

Descrevemos acima a teoria de Landau. Trata-se de uma teoria fenomenológica, e como tal, têm seus limites de validade. O parâmetro de ordem e a própria

teoria são definidos com respeito a uma escala de comprimento Λ^{-1} , que é da ordem do comprimento de correlação ξ . Então a validade da teoria de Landau pode ser estimada calculando

$$E_{LG} = \frac{\left| \int_V d^d(\vec{r}) G(\vec{r}) \right|}{\int_V d^d(\vec{r}) \phi(\vec{r})^2}, \quad (2.56)$$

onde as quantidades no numerador e denominador representam médias sobre uma região de dimensão linear da ordem de ξ . A região não deve ser maior do que ξ , pois neste caso as flutuações são descorrelacionadas. Na Eq. (2.56), a região de integração é o volume de correlação $V = \xi^d$ e $G(\vec{r})$ é a função de correlação de dois pontos, definida na seção anterior [Eq. (2.11) no contexto de modelos de spins]. O critério de Ginzburg diz que E_{LG} deve ser pequeno para a aplicação da teoria de Landau. Abaixo, investigaremos mais a fundo este critério.

O denominador da Eq. (2.56), que basicamente se trata de um termo de normalização, é

$$\int_V d^d(\vec{r}) \phi(\vec{r})^2 = \frac{a}{b} |\tau| \int_V d^d(\vec{r}) = \frac{a}{b} |\tau| \xi^d, \quad (2.57)$$

onde usamos a Eq. (2.49). Podemos escrever

$$\frac{a}{b} |\tau| \xi^d = \frac{a}{b} \xi_0^d |\tau|^{1-d/2}, \quad (2.58)$$

com o auxílio da Eq. (2.42).

Por sua vez, o numerador (transformada de Fourier da função de correlação) é

$$\left| \int_V d^d(\vec{r}) G(\vec{r}) \right| \approx |k T_c \chi_T| \approx \frac{k T_c}{4a |\tau|}, \quad (2.59)$$

onde usamos as Eqs. (2.39) e (2.48), sendo k a constante de Boltzmann e, em ambos os casos, $T < T_c$. Assim temos

$$E_{LG} = \frac{k}{4\Delta C \xi_0^d} \frac{1}{|\tau|^{2-d/2}}, \quad (2.60)$$

onde ΔC ($\equiv a^2/bT_c$) é o termo que considera a descontinuidade do calor específico. A condição para que a teoria de Landau seja auto-consistente, $E_{LG} \ll 1$, requer que

$$|\tau|^{(4-d)/2} \gg \frac{k}{4\Delta C \xi_0^d} \equiv \tau_{LG}^{(4-d)/2}, \quad (2.61)$$

onde τ_{LG} é o valor da temperatura reduzida que marca o início da região crítica. Dentro da região crítica, $|\tau| < \tau_{LG}$, flutuações dominam a termodinâmica, e as previsões da teoria de Landau não são válidas.

Como consequência, a Eq. (2.61) estabelece condições dimensionais para a teoria de Landau. Existem três casos a considerar

caso 1: $d > 4$: para $\tau \rightarrow 0$, o critério de Ginzburg é sempre válido. Neste caso, a teoria de Landau apresenta expoentes críticos corretos.

caso 2: $d < 4$: para $\tau \rightarrow 0$, o critério de Ginzburg não é válido. Logo, a teoria de Landau não é auto-consistente.

caso 3: $d = 4$: a teoria de Landau não é totalmete incorreta, mas apresenta correções logarítmicas para a flutuação. Por exemplo, a suscetibilidade isotérmica comporta-se como

$$\chi_T \sim \frac{1}{\tau} |\log \tau|^{1/3}. \quad (2.62)$$

Capítulo 3

Cromodinâmica quântica e percolação

O foco desta tese é o estudo da dinâmica crítica dos parâmetros de ordem magnético e de percolação de modelo de Ising em duas e três dimensões. Como já mencionado anteriormente, no equilíbrio estes dois parâmetros de ordem são idênticos, isto é, são caracterizados pelos mesmos expoentes críticos e pela mesma temperatura crítica. Uma das motivações para estudos desta natureza, como também já mencionado, é a possibilidade [5] de entender a transição de desconfinamento na cromodinâmica quântica (QCD) como um fenômeno de percolação.

A QCD é a teoria fundamental das interações fortes. Ela é uma teoria quântica de campos relativística, cujos graus de liberdade fundamentais são campos fermiônicos de spin $1/2$, que representam os quarks, e campos bosônicos de spin 1 , que representam os glúons. A lagrangiana que define a teoria é invariante sob uma transformação de *gauge* local, não-abeliana, cujo grupo de simetria é o grupo $SU(3)$ relacionado à carga de “cor”. Os quarks aparecem na representação fundamental do grupo, de dimensão três, e os glúons aparecem na representação adjunta, de dimensão oito. Apesar dos graus de liberdade fundamentais serem quarks e glúons, o que se observa experimentalmente são os hádrons, que são estados singleto de cor (são estados neutros ou “incolores”). Os hádrons conhecidos são estados ligados de três quarks (os bárions) e de um quark e um antiquark (os mésons). O fato de não se observarem quarks e glúons livres é explicado como sendo devido a uma das mais marcantes propriedades da teoria, o *confinamento* da cor.

Esta propriedade da QCD, ainda não completamente entendida, é de natureza tal que somente estados singletos de cor existem no espectro, isto é, estados coloridos parecem não ter energia finita. Uma outra propriedade marcante da QCD é a *liberdade assintótica*, esta sim bem entendida. Esta propriedade prevê que a interação entre quarks e glúons se torne mais fraca a distâncias curtas (ou a grandes momentos transferidos). Com base nesta propriedade, é de se esperar que em sistemas a altas densidades bariônicas, quando estes podem se sobrepor consideravelmente, os hádrons percam sua individualidade e os quarks e glúons se “desconfinem”, dando origem a um sistema de quarks e glúons livres. Da mesma forma, a altas temperaturas, quando há a possibilidade de produção copiosa de pares de partículas e antipartículas, são produzidos estados com grandes energias de excitação, que também levam a estados com grandes densidades. Portanto, na situação de altas temperaturas também pode-se esperar que quarks e glúons sejam liberados do interior dos hádrons. Um estado desta natureza se convencionou chamar de plasma de quarks e glúons (QGP).

A seguir, vamos fazer uma pequena revisão sobre a QCD, com ênfase no chamado *loop de Polyakov*, o parâmetro de ordem para a teoria na chamada aproximação *quenched*, a qual consiste em não considerar efeitos de criação e aniquilação de pares quark-antiquark. Este caso da teoria é também conhecido como QCD pura. Logo após isso, vamos discutir a teoria da percolação. Vamos concluir este capítulo com a discussão da transição magnética como um fenômeno de percolação.

3.1 A transição de desconfinamento na QCD

Aqui vamos revisar brevemente os argumentos que levam à interpretação do loop de Polyakov como parâmetro de ordem relacionado ao desconfinamento da cor numa teoria de gauge pura. Para tal, vamos seguir de perto a linha de argumentação das Refs. [39, 40].

A QCD é definida pela sua densidade lagrangiana. Antes de entrarmos

na discussão desta teoria vamos começar com a densidade lagrangiana da eletrodinâmica quântica (QED), cujo grupo de simetria é mais simples. De fato, as duas teorias podem ser descritas por densidades lagrangianas semelhantes na forma; enquanto que o grupo de simetria para a QED é o grupo abeliano $U(1)$, para a QCD o grupo de simetria é o grupo não-abeliano $SU(3)$. A QED é a teoria mais bem sucedida da Física. Ela é a teoria quântica de campos dos elétrons, pósitrons (o campo elétron-pósitron) e fótons (i.e., o campo eletromagnético ou de radiação). A teoria também se aplica a léptons pesados (μ e τ), e em geral pode ser aplicada para descrever a interação eletromagnética de outras partículas elementares carregadas [41]. A QED é uma teoria de gauge abeliana com simetria $U(1)$ e seu bóson de interação é o fóton. Ela é regida pela densidade lagrangiana [38, Cap. 11]

$$\mathcal{L}_{QED} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\gamma_{\mu}D^{\mu} - M)\psi, \quad (3.1)$$

onde $\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$ são índices de Lorentz e $F^{\mu\nu}$ é o tensor eletromagnético, dado em termos das derivadas do campo vetorial A_{μ} como

$$F^{\mu\nu} = \partial^{\mu}A^{\nu} - \partial^{\nu}A^{\mu} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -E_1 & -E_2 & -E_3 \\ E_1 & 0 & -B_3 & B_2 \\ E_2 & B_3 & 0 & -B_1 \\ E_3 & -B_2 & B_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

As γ_{μ} são as matrizes de Dirac, ψ e seu adjunto de Dirac $\bar{\psi} = \psi^{\dagger}\gamma^0$ são campos espinoriais representando os férmions carregados de massa M , e D_{μ} é a derivada covariante

$$D_{\mu} = \partial_{\mu} - ieA_{\mu}, \quad (3.3)$$

onde e é a carga elétrica.

Por outro lado, a lagrangiana da QCD é dada por

$$\mathcal{L}_{QCD} = -\frac{1}{4}\mathcal{F}_{\mu\nu}^a\mathcal{F}_a^{\mu\nu} + \bar{\psi}^c(i\gamma^{\mu}D_{\mu} - M)^{cc'}\psi^c, \quad (3.4)$$

onde $\mathcal{F}_{\mu\nu}^a$ é o equivalente de $F^{\mu\nu}$ na QED, dado na QCD por

$$\mathcal{F}_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f_{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (a, b, c, = 1, \dots, 8) \quad (3.5)$$

$$(D_\mu)^{cc'} = \delta^{cc'} \partial_\mu - i g \frac{1}{2} (\lambda^a)^{cc'} A_\mu^a \quad (c, c' = 1, 2, 3), \quad (3.6)$$

onde agora os $\psi^{c'}$ s representam os campos de quarks, com c, c' sendo índices de cor, e os campos A_μ^a representam os campos de glúons, sendo a o índice de cor na representação adjunta. Chamamos de M a matriz de massa no espaço de sabor (independente da cor) e de λ^a as matrizes (hermitianas de traço nulo) de Gell-Mann, que satisfazem à relação de comutação

$$\left[\frac{\lambda_a}{2}, \frac{\lambda_b}{2} \right] = i f_{abc} \frac{\lambda_c}{2}, \quad (3.7)$$

sendo f_{abc} um tensor totalmente anti-simétrico. Para o grupo $SU(2)$, as matrizes λ^a são as três matrizes de Pauli e as constantes de estrutura (f_{abc}) são as componentes do tensor anti-simétrico ϵ_{abc} . Note que a diferença básica entre as duas teorias é a auto-interação entre os campos de glúons. Quando $f_{abc} = 0$, obtemos para a Eq. (3.4) uma lagrangiana como a da QED, Eq. (3.1).

O termo de massa na lagrangiana da QCD desempenha um papel importante no estudo de propriedades da QCD a temperatura finita. Este termo pode ser escrito como

$$\mathcal{L}_{massa} = -M \bar{\psi} \psi = - \sum_{c=1}^3 \sum_{f=u,d,s,c,t,b} m_f \bar{\psi}_f^c \psi_f^c. \quad (3.8)$$

Dois limites (teóricos) de valores de m_f são particularmente importantes: $m_f \rightarrow 0$ e $m_f \rightarrow \infty$. No primeiro caso, temos que a lagrangiana apresenta uma simetria quiral, i.e. ela é invariante sob troca de férmions de helicidade positiva (de mão direita) por férmions de helicidade negativa (de mão esquerda). Tecnicamente, para N férmions, a lagrangiana nesse limite é invariante sob transformações axiais e vetoriais, ou quirais (que envolvem a matriz de Dirac $\gamma_5 = \gamma_0 \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3$; para mais detalhes veja a Seção 6.3). Este limite de massa nula é particularmente relevante para o setor dos quarks leves u e d , cujas massas são muito menores

que as massas dos outros quarks. Este é o setor da teoria em que se realiza uma quebra dinâmica da simetria quiral (no limite $m_u = m_d = 0$), com a formação de um condensado de quarks e a existência de bósons de Goldstone. No Cap. 6 será feita uma discussão mais detalhada sobre este setor da teoria, em conexão com uma teoria efetiva descrita em termos de um modelo de spins $O(4)$. O outro limite, $m_f \rightarrow \infty$, corresponde a ignorar efeitos de criação/aniquilação de pares de quark-antiquark, já que as massas de quarks são infinitas. Neste limite — chamado de aproximação quenched ou teoria de gauge pura — a QCD pode ser estudada mais facilmente e pode ser definido neste caso um parâmetro de ordem para a transição de desconfinamento a temperatura finita. Para a definição deste parâmetro de ordem vamos utilizar argumentos de QCD na rede, como segue.

A QCD na rede [42] baseia-se na quantização da Eq. (3.4) por integrais de trajetória, pela continuação analítica da variável temporal a tempos imaginários — ou euclidianos — e pela discretização do espaço-tempo em uma rede. Desta forma, os campos de quarks são representados nos sítios da rede, enquanto os campos de gauge correspondem aos elos entre sítios. Para temperatura nula, o potencial de um par quark-antiquark estático (ou seja, de massa infinita) pode ser determinado através do estudo do valor esperado do estado fundamental do chamado loop de Wilson [43] para grandes tempos euclidianos. Para uma temperatura finita, a rede tem uma direção temporal finita. A pergunta neste caso é qual o objeto que corresponde ao loop de Wilson no estudo da QCD a temperatura finita. Para responder a esta questão observamos que, devido à estrutura periódica da rede, é possível construir quantidades invariantes de gauge examinando o traço do produto de variáveis de elos ao longo da direção temporal. Em uma rede de tamanho finito temos o volume $N_x \times N_y \times N_z \times N_t$. Desta forma podemos construir a expressão

$$L(\vec{n}) = \text{Tr} \prod_{n_4=1}^{N_t} U_4(\vec{n}, n_4), \quad (3.9)$$

onde

$$(\vec{n}, n_4) \equiv (n_x, n_y, n_z, n_t) \equiv n, \quad (3.10)$$

$$U_4(n) = \exp[igaA_4(n)]. \quad (3.11)$$

Note que g é a constante de acoplamento, a é o espaçamento da rede e $A_4(n)$ é quarta componente do campo de gauge na posição n .

A quantidade L na Eq. (3.9) é o loop de Polyakov, o qual possui a seguinte média espacial

$$\bar{L} = \frac{1}{N_x N_y N_z} \sum_{n_1=1}^{N_x} \sum_{n_2=1}^{N_y} \sum_{n_3=1}^{N_z} L(\vec{n}). \quad (3.12)$$

Sendo $F_{q\bar{q}}$ a energia livre do par quark-antiquark separados por uma distância $r = |\vec{n} - \vec{m}|$, vale a relação [42]

$$\exp(-\beta F_{q\bar{q}}) = \langle L(\vec{n}) L^\dagger(\vec{m}) \rangle, \quad (3.13)$$

onde $\beta = 2N_c/g^2$ e N_c é a dimensão do grupo de gauge. Então a energia livre de um par $q\bar{q}$ pode ser calculada a partir da função de correlação espacial do loop de Polyakov. Além disto, a média do loop de Polyakov, definida na Eq. (3.12), pode ser um parâmetro de ordem para a transição de fase de confinamento/desconfinamento. De fato, usando a invariância translacional na Eq. (3.13) e somando sobre \vec{n} e \vec{m} separados por r , a expressão do lado direito torna-se igual a $|\langle \bar{L} \rangle|^2$ no limite $r \rightarrow \infty$. Portanto, se

$$|\langle \bar{L} \rangle| = 0, \quad (3.14)$$

a Eq. (3.13) implica que $F_{q\bar{q}} \rightarrow \infty$. Logo, o sistema está confinado. Um esboço do loop de Polyakov pode ser visto na Fig, 3.1. Estudos de QCD na rede a temperatura finita para o caso quenched permitem uma descrição precisa da transição de fase de desconfinamento, tendo o loop de Polyakov como seu parâmetro de ordem [42]. Como explicado anteriormente, o mesmo não ocorre na caso da QCD com quarks dinâmicos, ou QCD completa.

3.2 Teoria da percolação

Esta teoria surgiu com o estudo de Flory e Stockmayer [44] durante a segunda guerra mundial. Esses autores estudaram processos de polimerização de

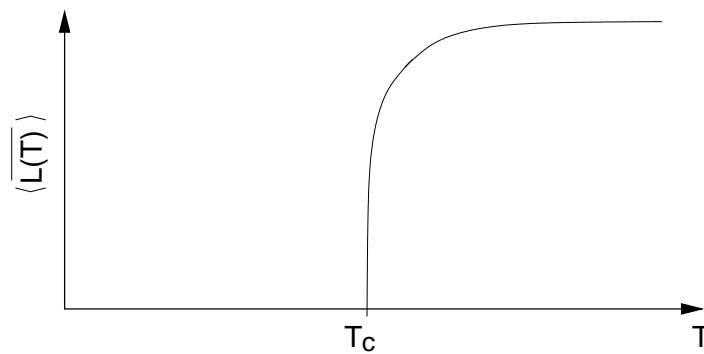


Fig. 3.1: Esboço do loop de Polyakov, o parâmetro de ordem da QCD pura (ou quenched) na transição de confinamento/desconfinamento.

macromoléculas, interessados em entender os processos de formação das mesmas a partir de moléculas menores, com o aumento do número de ligações químicas entre as moléculas. Para mais detalhes veja [11, 12].

A Percolação pode ser vista como um *fluxo* de uma *substância* em um meio aleatório. Os termos fluxo, substância e meio são abstratos e têm interpretações variadas de acordo com o contexto adotado, como por exemplo: fogo em florestas, derramamento de óleo, formação de moléculas, etc. [8, Cap. 1], [45]. Outra particularidade desta teoria é que seus elementos (tubos por onde fluir a substância, árvores, spins, etc) podem ser dispostos em uma rede, onde em cada sítio colocamos o objeto desejado. Em princípio, a substância percolará no meio se determinadas condições puramente geométricas forem favoráveis. Veja por exemplo a Fig. 3.2 (a). Nesta, temos um conjunto de esferas condutoras de eletricidade alinhadas, representadas por \bullet , e esferas isolantes, representadas por \circ (tal como o conjunto de sítios de uma rede unidimensional). Na presente configuração, fica claro que a corrente elétrica não percolará pelo circuito, a menos que todas as esferas sejam condutoras. No entanto, se colocarmos mais conjuntos de esferas alinhadas, formando assim uma rede bidimensional, a eletricidade poderá fluir pelo circuito por outro caminho, veja a Fig. 3.2 (b). Neste exemplo, a grandeza importante para a ocorrência de percolação será a concentração de esferas condutoras. A um conjunto de esferas condutoras em

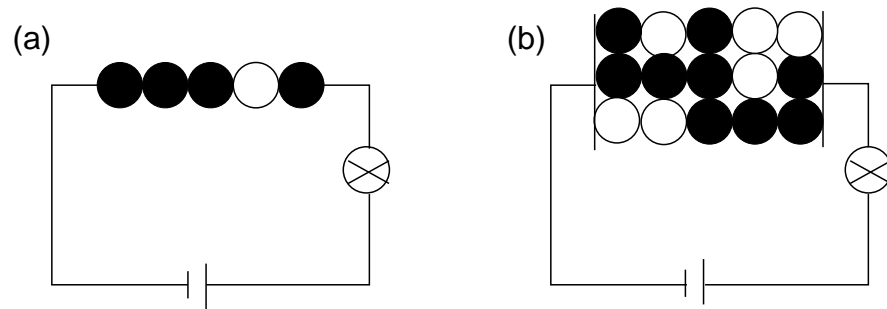


Fig. 3.2: Exemplos de percolação, no caso (a) unidimensional e no caso (b) bidimensional.

contato damos o nome de *cluster** e a um conjunto destas que se estenda de um lado a outro do aparato chamamos de *cluster percolante*.

Se em cada local (sítio) colocarmos uma esfera condutora com probabilidade p ou uma esfera isolante com probabilidade $1 - p$, deve existir um valor crítico p_c a partir do qual sempre ocorrerá a passagem da corrente. É demonstrado que para $p > p_c$ sempre haverá percolação [46]. No entanto, o valor de p_c depende da geometria da rede, pois se mudarmos esta geometria o número de vizinhos de uma esfera condutora é modificado. Por exemplo, em uma rede quadrada cada sítio possui quatro primeiros vizinhos, e em uma rede triangular terá seis primeiros vizinhos. Para medirmos p_c , é conveniente definirmos a probabilidade de percolação. Considerando a quantidade

$$P = \begin{cases} 1, & \text{se ocorreu percolação} \\ 0. & \text{se não ocorreu percolação} \end{cases}, \quad (3.15)$$

temos que a probabilidade de percolação $\langle P \rangle$ é a média de P sobre um número grande de realizações do sistema estudado. Em um gráfico de $\langle P \rangle$ em função de p deveríamos observar o comportamento de uma função degrau no ponto crítico, correspondendo a probabilidade 0 abaixo de p_c e 1 acima de p_c . No entanto, devido ao tamanho finito das redes tratadas numericamente,

*Como dito anteriormente, nesta tese escolheu-se a palavra cluster em inglês para designar um conjunto ou aglomerado de objetos em contato.

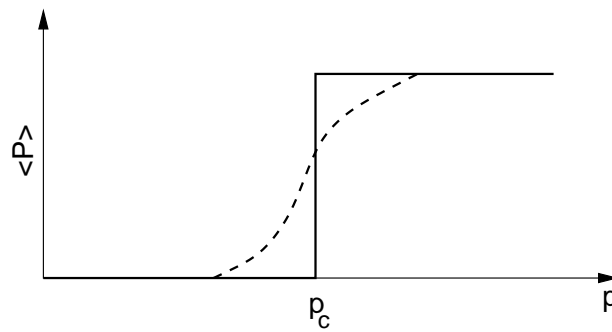


Fig. 3.3: Função degrau, a curva suave corresponde a $L < \infty$; temos o degrau quando $L = \infty$. Com $\langle P \rangle$ sendo a probabilidade de percolação.

isto é, em simulações computacionais, este comportamento não pode ser observado. Um exemplo do comportamento observado para $\langle P \rangle$ pode ser visto pictoricamente na Fig. 3.3. Nesta figura, a curva suave seria obtida com uma rede bidimensional finita de comprimento L . Para uma rede infinita ($L \rightarrow \infty$), teremos exatamente o degrau, determinando assim o valor para o qual p seja igual a p_c . Com um tratamento numérico de percolação de sítios é possível medir $p_c = 0.59274675(88)$ [47]. A transição de percolação é um exemplo de fenômeno crítico, onde p_c é o ponto crítico. Também podemos definir alguns expoentes críticos, mas para tanto é necessário introduzir outras grandezas.

Digamos que, ao invés de esferas, tenhamos nos sítios da rede números 1 (esfera condutora) ou zero (esfera isolante). Podemos medir, por exemplo, a densidade de sítios ocupados (sendo N o número total de sítios na rede)

$$\rho_s = \frac{\sum_i s_i}{N}. \quad (3.16)$$

onde

$$s_i = \begin{cases} 1, & \text{sítio ocupado} \\ 0, & \text{sítio vazio} \end{cases}. \quad (3.17)$$

Chamando de s -cluster um cluster que contenha uma quantidade s de sítios, temos uma probabilidade proporcional a $s n_s$ de que um sítio ocupado da rede pertença a algum s -cluster, onde n_s é o número de s -clusters. Por outro lado, a

probabilidade de que um sítio pertença a algum cluster é igual à probabilidade de o sítio estar ocupado (ou seja, desde que o sítio esteja ocupado, ele pertencerá a um cluster). Então,

$$\sum_s n_s s = pN. \quad (3.18)$$

Para um determinado sítio ocupado da rede, a probabilidade de que ele pertença a um s -cluster é

$$\omega_s = \frac{n_s s}{\sum_s n_s s}. \quad (3.19)$$

Com estas equações podemos definir o tamanho médio dos clusters da rede [8],

$$S = \sum_s \omega_s s = \sum_s \frac{n_s s^2}{\sum_{s'} n_{s'} s'} = \frac{1}{pN} \sum_s n_s s^2. \quad (3.20)$$

Se a soma na Eq. (3.20) incluir o cluster percolante, S será infinito. Ou seja, S diverge em p_c , demonstrando um comportamento crítico da forma (no limite termodinâmico)

$$S \sim |p - p_c|^{-\gamma}, \quad (3.21)$$

onde γ é o expoente crítico. Outra grandeza útil é a *pressão do cluster percolante*, que é definida como[†]:

$$\Omega_P \equiv \begin{cases} 0, & p < p_c \\ \Delta_P/V, & p \geq p_c, \end{cases} \quad (3.22)$$

onde Δ_P é o volume do cluster percolante e $V = L^d$ o volume da rede. Esta quantidade mede o peso que o cluster percolante exerce na rede, considerando a fração da rede que faz parte deste cluster. No caso de um sistema finito (usado para simulações numéricas), é conveniente utilizar a modificação do parâmetro de ordem de percolação descrita a seguir. Em cada configuração, teremos um número finito de clusters de vários tamanhos. Dependendo do valor

[†]Note que em nossos trabalhos iniciais [6, 11, 12] esta quantidade era chamada de Ω .

da temperatura, pode não ocorrer um cluster percolante, resultando em uma contribuição nula para a quantidade acima. No entanto, existem diversos clusters de tamanhos variados e, dentre estes objetos, pode ocorrer um em especial com tamanho significativo. Logo, podemos definir um novo parâmetro de ordem de percolação [‡] [8, Cap. 3], dado por

$$\Omega \equiv \Delta/V, \quad (3.23)$$

onde Δ é o volume do maior cluster, seja ele percolante ou não. No limite de volume infinito as duas definições acima coincidem.

3.2.1 Percolação e o modelo de Ising

Como dito acima, do ponto de vista da teoria de percolação, cada sítio da rede pode estar em dois estados possíveis (graus de liberdade), 1 ou 0. No modelo de Ising cada spin também possui apenas dois graus de liberdade então, em princípio, seria interessante descrever a transição de fase no modelo de Ising através da teoria da percolação. As tentativas iniciais de tratar a transição de fase magnética no modelo de Ising com teoria de percolação falhavam em reproduzir a temperatura de Curie (em geral a temperatura crítica de percolação obtida era menor que a temperatura de Curie). Um passo decisivo no esclarecimento da situação foi o trabalho de Fortuin e Kasteleyn [10] que — a partir do hamiltoniano do modelo de Potts, do qual o modelo de Ising é um caso particular — mostrou que a função de partição deste modelo pode ser reescrita como uma soma sobre configurações de clusters de spins, ao invés de uma soma sobre configurações de spins. A conexão teórica definitiva entre a transição magnética no modelo de Ising com o fenômeno da percolação veio com o trabalho de Coniglio e Klein [9]. Esta conexão é válida também para modelos de spins contínuos [48]. Usando a representação de clusters de Fortuin e Kasteleyn para o modelo de Ising em duas dimensões, Coniglio e Klein mostraram analiticamente, empregando técnicas de grupo de renormalização, que a temperatura crítica magnética do modelo de

[‡]Em [6, 11, 12] esta quantidade é chamada de Ω'

Ising determina o ponto crítico da percolação p_c , onde p_c depende de T_c através da fórmula $p_c = 1 - \exp(-2J/kT_c)$ e k é a constante de Boltzmann. Note que p é a probabilidade de se colocar elos[§] entre spins primeiros vizinhos iguais. Ao contrário dos trabalhos anteriores, onde os elos eram colocados puramente por características geométricas (sempre que os spins primeiros vizinhos fossem iguais, o elo era posto), agora estes elos levavam a informação da temperatura à qual o sistema estava sujeito. Dessa forma, passou-se de clusters geométricos para clusters físicos. Deste momento em diante, ficou claro que realmente se poderia tratar o modelo de Ising via teoria da percolação. O trabalho de Swendsen e Wang [49] estabeleceu através de um algoritmo como usar em simulações numéricas de Monte Carlo a teoria mencionada acima para obter uma atualização mais eficiente das configurações de spins. Foi assim elaborado o chamado *algoritmo de clusters*, descrito a seguir.

Para definirmos a forma desta probabilidade de ligação de elos e sua relação com a função de partição, vamos explorar as propriedades do modelo de Ising. O hamiltoniano para o modelo de Ising [Eq. (2.5)] pode ser escrito de uma maneira um pouco diferente, sem modificar o seu conteúdo físico. Para isto evocamos os modelos de spins discretos de Potts [50], onde o hamiltoniano sem campo magnético é descrito como

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(1 - \delta_{S_i S_j}). \quad (3.24)$$

Aqui S_k representa os spins, que tomam valores discretos de 1 a q e a soma é feita sobre os primeiros vizinhos $\langle ij \rangle$. A equivalência do modelo de Potts com o modelo de Ising dá-se quando $q = 2$ e $J_{ij} = 2\mathcal{J}$. A partir da manipulação da função de partição, podemos escrever

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{S\}} e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}(1 - \delta_{S_i S_j})} \\ &= \sum_{\{S\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta J_{ij}} e^{\beta J_{ij} \delta_{S_i S_j}} \end{aligned}$$

[§]Nesta tese escolhemos denominar de *elos* os objetos colocados entre spins iguais primeiros vizinhos. Na literatura estes objetos também são chamados de ligações ou links.

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\{S\}} \prod_{\langle ij \rangle} e^{-\beta J_{ij}} (\delta_{S_i S_j} e^{\beta J_{ij}} + 1 - \delta_{S_i S_j}) \\
 &= \sum_{\{S\}} \prod_{\langle ij \rangle} [(\delta_{S_i S_j} (1 - e^{-\beta J_{ij}}) + e^{-\beta J_{ij}})], \tag{3.25}
 \end{aligned}$$

definindo

$$p_{ij} \equiv 1 - e^{-\beta J_{ij}} = 1 - e^{-2\beta \mathcal{J}}, \tag{3.26}$$

e através da identidade

$$a + b = \sum_{n=0,1} (a\delta_{n,1} + b\delta_{n,0}),$$

sendo $a \equiv p_{ij}\delta_{S_i S_j}$ e $b \equiv (1 - p_{ij})$, encontrando,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z} &= \sum_{\{S\}} \prod_{\langle ij \rangle} [p_{ij}\delta_{S_i S_j} + (1 - p_{ij})] \\
 &= \sum_{\{S\}} \sum_{\{n\}} \prod_{\langle ij \rangle} [(p_{ij}\delta_{S_i S_j}\delta_{n_{ij}1} + (1 - p_{ij})\delta_{n_{ij}0}], \tag{3.27}
 \end{aligned}$$

ou ainda,

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S\}} \sum_{\{n\}} \left[\prod_{\langle ij \rangle}^{n_{ij}=1} p_{ij}\delta_{S_i S_j} \right] \left[\prod_{\langle ij \rangle}^{n_{ij}=0} (1 - p_{ij}) \right]. \tag{3.28}$$

A nova variável $n_{ij} = 1$ (ou 0) especifica quando dois sítios estão ligados (ou não), isto é, *representa os elos*, sendo que p_{ij} é a probabilidade de se formar um elo entre dois sítios vizinhos ij . Como indicamos anteriormente, o elo depende da temperatura.

Em simulações numéricas, em especial no algoritmo de Swendsen e Wang, um conjunto de sítios interligados por elos forma um cluster. Observamos que, mesmo se os vizinhos de um determinado sítio forem ocupados com objetos do mesmo tipo, isto não implica que estes sítios farão parte do mesmo cluster. Também, não teremos elos formados entre sítios de spins diferentes. No algoritmo de Swendsen e Wang construímos elos entre sítios de mesma espécie de acordo como a Eq. (3.26). Quanto menor a temperatura, maiores serão os clusters. Em uma situação limite, quando $T \rightarrow 0$, o algoritmo de

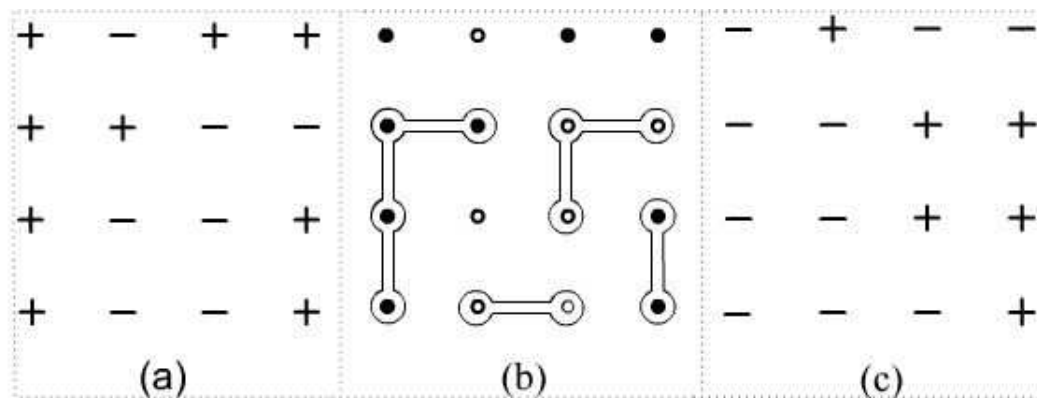


Fig. 3.4: Configuração de sítios para uma dada temperatura. Em (a) temos apenas os sítios com seus respectivos spins; em (b) temos uma rede de clusters com os respectivos elos formados com probabilidade p_{ij} [veja a Eq. (3.26)]; em (c) a rede final após invertermos os clusters com probabilidade $1/2$.

Swendsen e Wang comporta-se tal como um algoritmo de percolação de sítios, a diferença é que sítios isolados também são considerados como clusters. Ao nos aproximarmos de T_c , o cluster quebra-se em vários clusters menores. Quando $T > T_c$, a tendência é serem formados vários clusters cada vez menores a ponto de, quando $T \gg T_c$, visualizarmos apenas spins (clusters) isolados.

Para implementarmos o algoritmo de Swendsen e Wang, procedemos da seguinte forma:

passo 1: Para um determinado valor de temperatura, geramos uma rede de spins de Ising.

passo 2: Para encontrar os clusters, é usado o algoritmo de Hoshen e Kopelman [51], para reparar as eventuais ambigüidades como exemplificado no Ap. B. Neste passo definimos os elos, formando assim uma rede de elos. Lembrando que cada elo será estabelecido com probabilidade p_{ij} [Eq. (3.26)].

passo 3: Na rede de elos, invertemos cada cluster (conjunto de sítios conectados) com probabilidade $1/2$. Retornamos à rede de spins levando

a informação da inversão para implementá-la na rede de sítios. Após a inversão da rede de spins, calculamos o parâmetro de ordem magnético simplesmente contando os sítios da rede.

passo 4: Apagamos a informação dos elos e retornamos ao passo 2. Fazemos isto tantas vezes quanto for o nosso número de iterações para cada valor de temperatura.

Este algoritmo é ergódico, pois existe a probabilidade de ir de uma configuração para qualquer outra em uma varredura na rede, e satisfaz a condição de balanço detalhado[¶] [52, Cap. 4]. Na Fig. 3.4 temos a seqüência a ser obedecida: em (a) a rede de spins (**passo 1**) é formada aleatoriamente, em (b) temos a rede de elos (**passo 2**) estipulados com probabilidade dada pela Eq. (3.26) e em (c) temos a inversão da rede de elos que é passada para a rede de spins (**passo 2**). Apesar desse algoritmo não ter sido usado para a atualização dos spins aqui, foi utilizada a identificação dos clusters (**passo 2**).

3.2.2 Percolação direcionada

Até o momento tratamos da chamada percolação isotrópica. Nela os clusters podem propagar-se em todas as a direções do espaço, assim como na percolação de sítios e elos em uma rede quadrada. No entanto, é possível analisar efeitos de percolação em uma determinada direção privilegiada do espaço. A esta abordagem é dado o nome de percolação direcionada. Para discutirmos este assunto, seguiremos de perto a Ref. [53].

A percolação direcionada foi introduzida por Broadbent e Hammersley [54], trata-se de uma variação anisotrópica da percolação isotrópica. Com ela é possível estudar, por exemplo, a proliferação de epidemias. Do ponto de vista de um processo epidêmico (que tem como agentes bactérias, vírus e outros) o indivíduo infectado poderá transmitir essa doença e propagá-la para a sua comunidade. Através de ações de saúde pública, esta doença poderá ser

[¶]Ambas as provas destas propriedades não serão abordadas aqui.

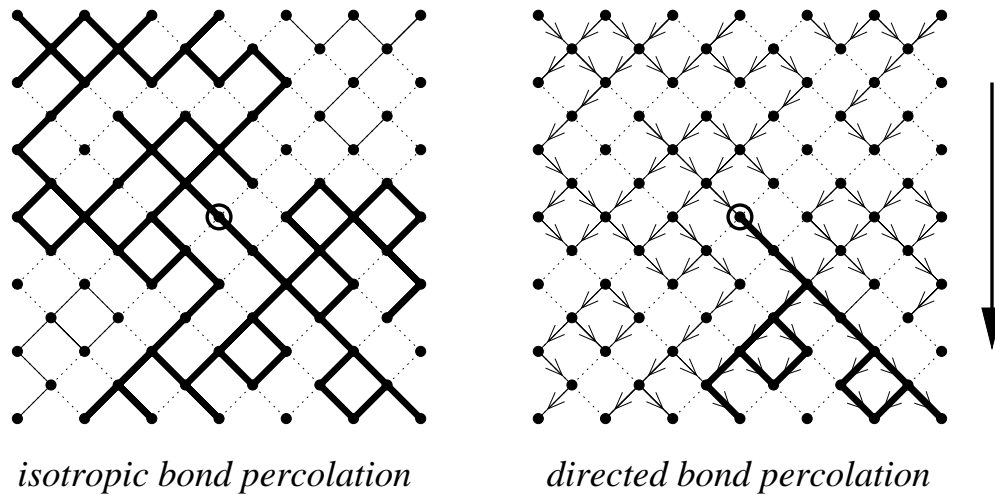


Fig. 3.5: Percolação isotrópica (esquerda) e direcionada (direita). A seta indica a direção de percolação. Figura extraída de [53].

controlada ou extinta. Dependendo da razão relativa de indivíduos infectados e curados, duas situações podem surgir. Se o processo epidêmico domina, a epidemia se espalhará por todos os indivíduos, aproximando-se de um estado estacionário no qual a doença e a cura equilibram um ao outro. Mas, a soma total de indivíduos infectados diminuirá a ponto de desaparecer se a cura domina.

Do ponto de vista isotrópico — como tratado até o momento — o fenômeno de percolação ocorre isotropicamente em todas as direções do espaço, sendo a percolação de sítios e elos o seu exemplo mais simples, principalmente se analisarmos uma rede quadrada bidimensional como mostrada na Fig. 3.5 à esquerda. No limite de redes infinitas, seja p a probabilidade de que um determinado sítio esteja ocupado. Para $p \geq p_c$ o fenômeno de percolação ocorrerá. Por outro lado, se $p < p_c$ este fenômeno não ocorrerá, conforme mencionado na pág. 37. Na percolação direcionada canais ou poros são representados por elos entre sítios primeiros vizinhos ativos, estando abertos com probabilidade p e fechados com $1 - p$. O lado direito da Fig. 3.5 mostra uma típica configuração de percolação direcionada em uma rede bidimensional. Por exemplo, se analisarmos o fenômeno de percolação a partir do sítio central

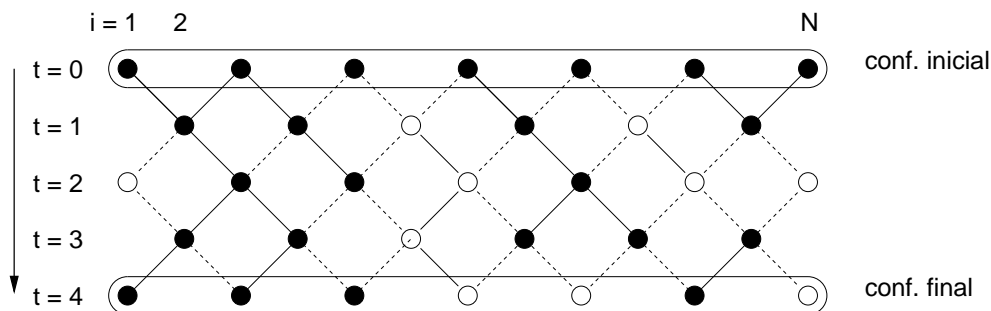


Fig. 3.6: Esquema da implementação da percolação direcionada.

em destaque nesta figura, um cluster de canais conectados será formado. Este cluster poderá estender-se de um lado a outro da rede, dependendo do valor de p , formando assim um cluster percolante. Logo, a percolação direcionada também apresenta uma transição de fase de segunda ordem.

As transições de fase da percolação isotrópica e direcionada são similares em muitos aspectos. Ambas podem ser caracterizadas pelo parâmetro de ordem $\langle P \rangle$ [veja a Eq. (3.15) e discussões abaixo desta]. Embora a percolação isotrópica e a direcionada tenham diversas características em comum, seus comportamentos críticos perto da transição de fase tendem a ser diferentes. No caso isotrópico, as propriedades críticas são as mesmas em todas as direções, pois, é possível encontrar um cluster percolante que se estenda tanto de cima para baixo quanto da direita para a esquerda na rede. Já na percolação direcionada este objeto só ocorre de cima para baixo. O ponto crítico da percolação isotrópica de elos é $p_c = 1/2$ [8], enquanto que, para a percolação direcionada é $p_c^d \simeq 0.6425$ [53]. Além disto, dependendo do valor de p um cluster pode estender-se por toda a rede ou acabar subitamente após algumas iterações^{||}. Neste último caso, o sistema fica preso em um estado denominado de *absorvente*, isto é, não poderá ser abandonado. Portanto, a percolação direcionada não respeita a condição de

^{||}Na percolação isotrópica uma iteração significa varrermos toda a rede. Mas, na percolação direcionada uma iteração corresponde a analisarmos a linha inferior $t + 1$ comparando-a com a linha superior t da rede estabelecendo elos — com uma certa probabilidade — entre sítios ativos (veja a Fig. 3.6).

balanço detalhado.

A interpretação dinâmica da percolação direcionada é ilustrada na Fig. 3.6, onde a rede de sítios de percolação direcionada (1+1)-dimensional é enumerada horizontalmente por uma coordenada espacial i e verticalmente por uma coordenada temporal t . Cada um dos sítios, $s_i(t=0)$ é ocupado aleatoriamente. Se o sítio é ocupado recebe o valor 1, do contrário, recebe o valor 0. O conjunto $s = \{s_i\}$ em um dado tempo t especifica a configuração do sistema. A configuração temporal $t+1$ é determinada de acordo com a configuração t respeitando a seguinte regra:

$$s_i(t+1) = \begin{cases} 1 & \text{se } s_{i-1}(t) = 1 \text{ e } z_i^- < p, \\ 1 & \text{se } s_{i+1}(t) = 1 \text{ e } z_i^+ < p, \\ 0 & \text{demais casos.} \end{cases} \quad (3.29)$$

sendo z_i^\pm dois números aleatórios no intervalo $[0, 1]$. Na Fig. 3.6 um elo ativo (respectivamente aberto) é representado por uma linha sólida (respectivamente tracejada).

Empregando a regra acima [Eq. (3.29)] desenvolvemos um algoritmo numérico partindo de duas condições iniciais:

- (i) Determinamos que 85 % dos sítios da primeira linha da rede ($t=0$) fossem ocupados aleatoriamente.
- (ii) Colocamos apenas um sítio ocupado (única semente) na primeira linha rede ($t=0$) na posição $L/2$, sendo $L (= 100)$ a dimensão espacial da rede. Este valor de L também foi o adotado na condição inicial acima.

Em ambas as condições iniciais usamos $p = 0.2$, p_c^d e 0.8 , ressaltando que $p_c^d \simeq 0.6425$.

As histórias espaço-temporais para condição inicial aleatória que obtivemos são mostradas na parte superior da Fig. 3.7 para os três valores de p estudados. Na parte inferior desta figura temos as histórias espaço-temporais para condição inicial com apenas um sítio ativo. Nas duas condições iniciais adotadas notamos

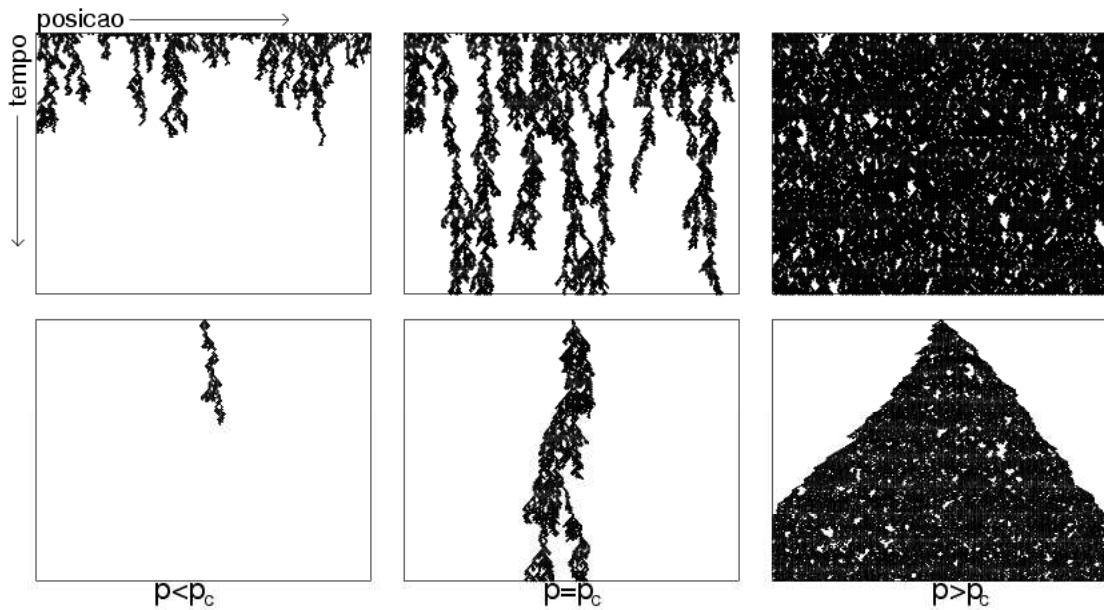


Fig. 3.7: Percolação dirigida de elos em 1+1 dimensões que partem da condição inicial aleatórias (acima) e de uma única semente ativa (abaixo). Resultados foram obtidos empregando as regras apresentadas na Eq. (3.29).

que, para $p < p_c^d$ o sistema evolui para um estado absorvente. Para $p = p_c^d$ temos a existência de clusters percolantes. Para $p > p_c^d$ ocorre o fenômeno da percolação em ambas as condições iniciais, entretanto, para a segunda condição inicial é formado o chamado cone de disseminação.

Existem diversas regras, tais como a Eq. (3.29), para o estudo da percolação direcionada. Pode-se obter mais detalhes sobre estas regras e o tema consultando as Referências [53, seção 3] e [54]. A discussão deste assunto nesta tese tem o intuito de mostrar as diversas possibilidades e aplicações da teoria da percolação. Uma outra aplicação da teoria da percolação é no estudo da transição de fase de confinamento/desconfinamento na QCD, como veremos a seguir.

3.2.3 Percolação na teoria de gauge $SU(2)$

O mapeamento do fenômeno de percolação no modelo de Ising já foi apresentado nesta tese (veja Sec. 3.2.1). Como o modelo de Ising apresenta

a simetria $Z(2)$ — centro de $SU(2)$ ** — pesquisadores levantaram a hipótese da possível extensão deste mapeamento para o estudo da transição de fase de confinamento/desconfinamento na QCD [5, 15, 40]. Apresentaremos nesta seção os argumentos que justificam esta conjectura tendo como material de apoio as Refs. [5, 40].

No modelo de Ising os clusters são formados por spins paralelos conectados com probabilidade [veja a Eq. (3.26)]

$$p_{ij} = 1 - \exp(-2\beta\mathcal{J}),$$

onde $\beta = 1/kT$, sendo k a constante de Boltzmann, T a temperatura do sistema e \mathcal{J} uma constante de acoplamento. Do ponto de vista da QCD na rede, como discutido na pág. 34, é conveniente construir quantidades invariantes de gauge. Tomando como exemplo o caso bidimensional da teoria $SU(2)$, o sistema é dividido em uma rede $N_x \times N_y \times N_\tau$, sendo N_τ uma direção reservada para a temperatura do sistema. Seguindo a analogia com o modelo de Ising, os spins de Ising em uma determinada posição i da rede são substituídos por loops de Polyakov [ver Eq. (3.9) acima] L_i

$$L_i = \frac{1}{2} \text{Tr} \prod_{\tau=1}^{N_\tau} U_{(i; \tau, \tau+1)}, \quad (3.30)$$

sendo $U_{(i; \tau, \tau+1)}$ matrizes $SU(2)$. O produto matricial da equação acima torna-se um loop fechado na direção da temperatura. Então, nesta analogia os valores discretos dos spins de Ising são substituídos pelos valores dos loops de Polyakov, que podem variar continuamente no intervalo $[-1,1]$ em cada sítio i . Desta forma definimos clusters como regiões de “mesmo sinal” de loops de Polyakov conectados. Cada sítio da rede $SU(2)$ apresentará um valor para o loop de Polyakov. Desta forma, sítios vizinhos serão conectados com probabilidade

$$p_{ij} = 1 - \exp(-2\beta' L_i L_j), \quad (3.31)$$

sendo $\beta' = 4(\beta/4)^{N_\tau}$ e $\beta \equiv 4/g^2$, onde g é constante de acoplamento da teoria.

** $Z(N)$ é o centro do grupo $SU(N)$, ou seja, o subconjunto dos elementos que comutam com cada elemento de $SU(N)$.

A definição de β' acima é obtida com a denominada *expansão de acoplamento forte*, desenvolvida por Green e Karsch [55]. Em [40, Cap. 4] é apresentado um amplo estudo sobre este tema.

3.3 Comportamento pseudocrítico

Até o momento não consideramos a ação de um campo magnético externo sobre o sistema e a razão é simples. Introduzindo um campo externo quebramos explicitamente a simetria do hamiltoniano do sistema, pois os spins tenderão a se alinhar com o campo, determinando uma direção privilegiada para a magnetização — isto é, a direção paralela ao campo — que será diferente de zero para qualquer valor de temperatura. O mapeamento do modelo de Ising à teoria da percolação foi estabelecido por Coniglio e Klein (veja pág. 40). Há também uma maneira simples de implementarmos um campo magnético externo, construindo assim clusters para $H \neq 0$. A técnica para implementação de um campo magnético externo no algoritmo de Swendsen e Wang é discutida no Ap. C no contexto do modelo $O(4)$.

De modo geral, se a temperatura for igual a zero a magnetização por spin será unitária, mas se a temperatura tende a infinito (com campo externo finito) a magnetização tenderá a zero. O campo conecta clusters distantes dentro da rede através de um *spin fantasma*, que é paralelo a este. Desta forma, elos entre os sítios e o spin fantasma são distribuídos aleatoriamente na rede com probabilidade [8, Cap. 7]

$$p_H = 1 - \exp(-2H/kT), \quad (3.32)$$

formando um cluster que percola para $H \neq 0$ (qualquer que seja a temperatura), através do campo. Por outro lado, se fizermos uma análise de percolação nesta rede, levando em conta apenas os clusters conexos (isto é, sem considerar o spin fantasma), veremos que, para um determinado valor de campo, a percolação ocorrerá até uma respectiva temperatura $T_p(H)$. A coleção destes valores de temperatura no plano $T \times H$ define a chamada de linha de Kertész [56]. Um

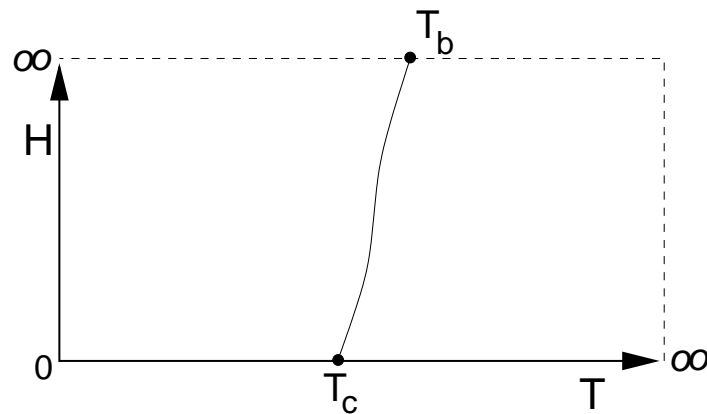


Fig. 3.8: Esquema da linha de Kertész para a teoria da percolação. Figura extraída de [5].

esquema desta é mostrado na Fig. 3.8. Note que a campo nulo $T_p(0) = T_c$ e a Eq. (3.26) garante que o sistema tenha o comportamento crítico do modelo de Ising.

Para um campo magnético infinito, todos os spins da rede se alinharão com este para qualquer valor finito de temperatura. Entretanto, os elos entre os spins da rede e o spin fantasma serão colocados com probabilidade p_{ij} , transformando o problema de percolação de sítios e elos em um problema puramente de percolação de elos. A transição de percolação ocorrerá para aqueles valores de T_p para os quais a probabilidade p_{ij} seja igual à densidade crítica de elos (para mais detalhes sobre percolação de elos, veja pág. 38)

$$p_{ij} = p_b, \quad (3.33)$$

de onde calculamos

$$T_b = -\frac{2\mathcal{J}}{k \log[1 - p_b(d)]}, \quad (3.34)$$

onde d é a dimensão do sistema. Vejamos agora a linha pseudo-crítica.

Como mencionado acima, a presença de um campo magnético quebra a simetria do sistema, o que elimina o comportamento térmico crítico do modelo. Nenhum dos potenciais termodinâmicos (tal como a suscetibilidade e o calor específico) exibe descontinuidades, pois a função de partição é analítica a campo

não-nulo. A divergência da suscetibilidade $\chi(T, H)$ é substituída por um ponto de máximo em uma dada temperatura para um determinado campo H . Ao variar o valor de H , teremos um conjunto de temperaturas que definirão a chamada linha pseudo-crítica. Em geral, as duas linhas descritas acima não podem coincidir, pois para $H \rightarrow \infty$ a linha de Kertész leva a um valor finito de temperatura, enquanto que para a linha pseudo-crítica temos uma temperatura infinita. Utilizando o grupo de renormalização, encontra-se que a magnetização quando H é pequeno tem a seguinte lei de escala

$$M = H^{1/\delta} \mathcal{N}(\tau H^{-1/\beta\delta}), \quad (3.35)$$

sendo τ a temperatura reduzida [Eq. (2.15)] e \mathcal{N} uma função universal, a qual está de acordo com a segunda equação de (2.14) para $\tau = 0$. Fazendo

$$M = \tau^\beta (\tau H^{-1/\beta\delta})^{-\beta} \tilde{\mathcal{N}}(\tau H^{-1/\beta\delta}), \quad (3.36)$$

podemos escrever

$$M = \tau^\beta \mathcal{M}(\tau H^{-1/\beta\delta}). \quad (3.37)$$

Desta forma, toda a dependência do campo está na função $\mathcal{M}(\tau H^{-1/\beta\delta})$. Como definido na Eq. (2.9), a suscetibilidade magnética é dada pela derivada da magnetização com respeito ao campo magnético externo

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial M}{\partial H} \\ &= -\tau^{\beta+1} \frac{\mathcal{M}'}{\beta\delta} H^{-(1/\beta\delta) - 1}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

com $\mathcal{M}(x)' = \partial\mathcal{M}(x)/\partial x$. Concluimos que

$$\begin{aligned} \chi &\approx \tau^\beta H^{-1} \tau H^{-1/\beta\delta} \mathcal{M}'(\tau H^{-1/\beta\delta}) \\ &\approx H^{-1} [\tau H^{-1/\beta\delta}]^\beta H^{1/\delta} \bar{\chi}(\tau H^{-1/\beta\delta}), \end{aligned}$$

ou seja, a suscetibilidade magnética tem a seguinte lei de escala

$$\chi \approx H^{(1/\delta) - 1} \mathcal{F}(\tau H^{-1/\beta\delta}). \quad (3.39)$$

Para determinarmos os valores de temperatura da linha pseudo-crítica, que chamaremos de τ_χ , derivamos a Eq. (3.39) com respeito τ e igualamos a zero

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \chi}{\partial \tau} \right|_{\tau = \tau_\chi} &= H^{1/\delta - 1} \mathcal{F}' \left(\frac{\tau}{H^{1/\beta\delta}} \right) \\ 0 &= H^{1/\delta - 1/\beta\delta - 1} \mathcal{F}'(\tau_\chi H^{-1/\beta\delta}). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Claramente, o único modo de a Eq. (3.40) ser igual a zero é se $\mathcal{F}' = 0$. Isto ocorre para um certo valor (fixo) de sua variável, implicando portanto que para um dado H a temperatura no pico obedece à relação

$$\tau_\chi \approx H^{1/\beta\delta}. \quad (3.41)$$

Para valores pequenos de campo magnético temos uma lei de potência. Se o campo magnético tende a infinito, τ_χ também tenderá, mas linha de Kertész tem um valor finito de temperatura, T_b [veja Eq. (3.34)]. Então, as duas linhas tem comportamentos distintos para $H \gg 1$. Logo, se quisermos compará-las, o campo magnético deve ser pequeno [57].

Capítulo 4

Comportamento dinâmico

Esta tese trata da dinâmica da transição de fase magnética no modelo de Ising. Até o momento, somente discutimos fenômenos críticos estáticos. Neste capítulo vamos fazer uma breve revisão sobre a dinâmica de transições de fase. Inicialmente, vamos discutir a evolução temporal de parâmetros de ordem em termos de equações estocásticas, do tipo de equações de Ginzburg-Landau dependentes do tempo. Como veremos, estas equações levam à distribuição de probabilidade de equilíbrio para o parâmetro de ordem. Logo após isso, vamos colocar neste contexto modelos de spins discretos, onde definimos as correspondentes equações mestras, e discutimos as dinâmicas de Glauber e de Kawasaki no contexto de simulações de Monte Carlo.

Para a descrição da dependência temporal de um parâmetro de ordem e seu relaxamento ao equilíbrio, é necessário definir uma dinâmica para o sistema. Para exemplificar um estudo desta natureza, vamos fazer uso da teoria de Ginzburg-Landau, apresentada na seção 2.4. Geralmente, não é possível derivar esta dinâmica a partir de variáveis dinâmicas microscópicas do sistema. No entanto, no âmbito da teoria de Ginzburg-Landau, podemos supor a forma do resultado que obteríamos se derivássemos a dinâmica a partir da física microscópica [32].

Em equilíbrio, a configuração espacial do parâmetro de ordem ϕ é dada por

$$\frac{\delta L}{\delta \phi(\vec{r})} = 0, \quad (4.1)$$

sendo

$$L = \int d^d \vec{r} \left\{ \frac{\gamma}{2} [\nabla \phi(\vec{r})]^2 + a\tau \phi(\vec{r})^2 + \frac{1}{2} b \phi(\vec{r})^4 - H \phi(\vec{r}) \right\}. \quad (4.2)$$

Esta expressão pode ser comparada à Eq. (2.55). Se o sistema é levado ligeiramente para fora do equilíbrio, é natural supor que a razão pela qual o sistema relaxa de volta para o equilíbrio é proporcional ao seu desvio do equilíbrio. Esta suposição de resposta linear é puramente fenomenológica, e leva à seguinte equação para a razão de mudança do parâmetro de ordem

$$\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta L}{\delta \phi(\vec{r})}, \quad (4.3)$$

onde Γ é um parâmetro fenomenológico que supomos ser independente do parâmetro de ordem e fracamente dependente da temperatura. Esta equação (conhecida como a equação de Ginzburg-Landau dependente do tempo) possivelmente não é uma descrição correta quando o estado aproxima-se do equilíbrio, pois este estado é um mínimo global de L . A Eq. (4.3) leva o parâmetro de ordem para um mínimo, não necessariamente global. Se desejamos alcançar o mínimo global, devemos considerar um termo referente às flutuações térmicas na Eq. (4.3)

$$\frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial t} = -\Gamma \frac{\delta L}{\delta \phi(\vec{r})} + \zeta(\vec{r}, t), \quad (4.4)$$

onde supomos que o ruído $\zeta(r, t)$ seja uma função gaussiana aleatória. Uma variável aleatória dependente do tempo é conhecida como *variável estocástica* [29]. Isto significa que o ruído é escolhido a partir de um conjunto de funções aleatórias com uma distribuição de probabilidade

$$P_\zeta(\{\zeta(\vec{r}, t)\}) \sim \exp \left[-\frac{1}{2D} \int d^d \vec{r} dt \zeta(\vec{r}, t)^2 \right], \quad (4.5)$$

com a constante de proporcionalidade sendo formalmente igual à inversa da integral funcional

$$\int \mathcal{D}\zeta \exp \left[-\frac{1}{2D} \int d^d \vec{r} dt \zeta(\vec{r}, t)^2 \right], \quad (4.6)$$

e a variância da distribuição sendo D . Ou seja, temos

$$\langle \zeta(\vec{r}, t) \rangle_\zeta = 0 \quad (4.7)$$

$$\langle \zeta(\vec{r}, t) \zeta(\vec{r}', t') \rangle_\zeta = D \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t'), \quad (4.8)$$

onde $\langle \dots \rangle_\zeta$ representa médias com respeito à distribuição de probabilidade P_ζ [veja a Eq. (4.5)]. As equações acima definem as propriedades de um *ruído branco*. Utiliza-se este nome porque a intensidade espectral deste processo estocástico — dada pela transformada de Fourier de sua função de auto-correlação temporal — contém todas as frequências igualmente (como a luz branca), já que a transformada de Fourier da função delta é uma constante [58]. A Eq. (4.4) é conhecida como equação de Langevin. Para que esta equação conduza à correta distribuição de probabilidades de equilíbrio P_ζ^e para ϕ , a amplitude do ruído deve ser relacionada com a temperatura do sistema. A probabilidade de encontrarmos o parâmetro de ordem na configuração $\phi(\vec{r})$ é uma função do tempo

$$P_\phi(\{\phi(\vec{r})\}, t) = \langle \delta[\phi(\vec{r}) - \bar{\phi}(\vec{r}, t, \{\zeta\})] \rangle_\zeta, \quad (4.9)$$

onde $\bar{\phi}(\vec{r}, t, \{\zeta\})$ é a solução da equação de Langevin para um ruído em particular, ou seja, a função delta é zero em média, a menos que a configuração $\phi(\vec{r})$ seja encontrada na solução da equação de Langevin. Dentro de uma pequena região do espaço, a probabilidade de encontrar a função desejada é a integral da função delta sobre toda a região do espaço.

A evolução temporal de P_ϕ pode ser encontrada diferenciando a Eq. (4.9). Utilizando a equação de Langevin, encontra-se a equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial}{\partial t} P_\phi(\{\phi(\vec{r})\}, t) = \int d^d \vec{r} \frac{\delta}{\delta \phi(\vec{r})} \left[\Gamma \frac{\delta L}{\delta \phi(\vec{r})} P_\phi + \frac{D}{2} \frac{\delta P_\phi}{\delta \phi(\vec{r})} \right]. \quad (4.10)$$

Para mais detalhes sobre a dedução desta equação veja [32, Ap. 8]. Quando t tende a infinito, a solução da equação de Fokker-Planck aproxima-se da solução de equilíbrio

$$P_\phi\{\phi(\vec{r})\} \approx \exp\left(-\frac{2\Gamma L\{\phi(\vec{r})\}}{D}\right), \quad (4.11)$$

a qual é uma distribuição de Boltzmann se impusermos a relação

$$D = 2\Gamma kT, \quad (4.12)$$

sendo k é a constante de Boltzmann. Este resultado é um exemplo do teorema da flutuação-dissipação. A seguir, apresentamos os conceitos de dinâmica crítica para modelos de spins discretos.

4.1 Comportamento dinâmico para modelos de spins discretos

Vamos considerar agora o modelo de Ising sem campo externo (e com acoplamentos que podem depender do par de primeiros vizinhos considerados) [28]

$$\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} \mathcal{J}_{ij} S_i S_j, \quad (4.13)$$

sendo \mathcal{J}_{ij} uma constante de acoplamento que depende dos pares de spins primeiros vizinhos S_i e S_j . Seja $\{S\} = (S_1, S_2, S_3, \dots)$ um determinado estado do sistema e $P(\{S\}; t)$ a probabilidade de o sistema estar em um particular estado $\{S\}$ no tempo t . A evolução temporal pode ser discreta ou contínua. O caso discreto corresponde ao empregado em uma simulação de Monte Carlo. Em cada instante de tempo escolhemos aleatoriamente um spin da rede. Decidimos se ele será invertido (ou não) baseado em um número aleatório, cuja distribuição é determinada pelo hamiltoniano. O caso de tempo contínuo pode ser estudado analiticamente. É natural esperar que as propriedades críticas universais para cada modelo dinâmico sejam as mesmas neste caso, e que concordem com as obtidas na teoria de Ginzburg-Landau dependente do tempo.

Supõe-se que, no caso contínuo e em um intervalo de tempo δt , processos em que mais de um spin seja invertido possam ser ignorados. Sendo $w_j(\{S\})\delta t$ a probabilidade de que o spin S_j seja invertido durante o intervalo, a equação

mestra — que governa a evolução dos *processos estocásticos** — tem a forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}P(\{S\}; t) &= - \sum_j w_j(S_j, \dots)P(S_j, \dots; t) \\ &+ \sum_j w_j(-S_j, \dots)P(-S_j, \dots; t). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Os dois termos do lado direito representam, respectivamente, a razão de despopulação e de população de um dado estado pela inversão do spin S_j . Exige-se que w_j dependa apenas do estado do spin adjacente ao sítio j , e também que a solução da equação mestra para o estado de equilíbrio [para tanto, o lado esquerdo da Eq. (4.14) deve ser nulo] seja dado pela distribuição de Boltzmann

$$P \propto \exp[-\beta\mathcal{H}(\{S\})], \quad (4.15)$$

ou seja,

$$\sum_j [w_j(S_j, \dots)e^{-\beta\mathcal{H}(S_j, \dots)} - w_j(-S_j, \dots)e^{-\beta\mathcal{H}(-S_j, \dots)}] = 0. \quad (4.16)$$

Para satisfazer a equação acima determina-se que

$$w_j(\{S\}) = \frac{1}{2} \Gamma [1 - S_j \tanh(h_j)], \quad (4.17)$$

sendo $h_j \equiv \sum_i \mathcal{J}_{ij} S_i$ e Γ uma constante com dimensão t^{-1} . Isto define o modelo de Glauber. Observe que neste caso o parâmetro de ordem não é conservado. Logo, espera-se que o comportamento crítico esteja na classe de universalidade do modelo A, definido em [59]. No entanto, é possível definir um modelo microscópico onde o parâmetro de ordem seja localmente conservado, por exemplo, pela escolha de um processo que inverta dois spins adjacentes opostamente orientados. Esta escolha resulta na denominada dinâmica de Kawasaki, a qual presume-se estar na classe de universalidade do modelo B, definido em [59], o qual conserva o parâmetro de ordem.

*Um processo estocástico é definido como uma coleção de variáveis estocásticas. Como mencionado acima, uma variável estocástica é uma variável aleatória que depende do tempo [58].

4.2 Dinâmica de tempos curtos

Do ponto de vista termodinâmico, o tempo necessário para que um determinado observável alcance a sua configuração de equilíbrio — que respeita uma distribuição de Boltzmann — é irrelevante. Desta forma é possível determinar expoentes críticos através de simulações numéricas no equilíbrio. Mas, alcançar as configurações de equilíbrio nas vizinhanças da região crítica torna-se, do ponto de vista computacional, muito “pesado”, devido à forte correlação entre as configurações. Por outro lado, o trabalho de H. K. Janssen, B. Schaub e B. Schmittmann [18] mostrou a relevância da evolução temporal das grandezas termodinâmicas, possibilitando medidas de expoentes críticos de equilíbrio já nos primeiros instantes da evolução do sistema. Mais precisamente, considera-se como uma iteração o ato de analisar todos os entes de um sistema através de um dado algoritmo[†]. Desta forma define-se uma dinâmica para a evolução, sendo cada unidade de tempo definida como uma iteração. O comportamento do sistema na temperatura crítica T_c para os instantes iniciais desta evolução constitui o que chamamos de *dinâmica de tempos curtos*. Além de expoentes críticos estáticos (ou de equilíbrio) tornou-se possível o estudo de propriedades dinâmicas, tais como os expoentes críticos dinâmicos que introduziremos a seguir, através do comportamento anômalo do parâmetro de ordem. Por outro lado, discussões críticas do método foram recentemente apresentadas em [60].

Toda a simulação numérica de observáveis termodinâmicos para modelos de spins envolve uma dinâmica, mesmo em simulações de equilíbrio. Em simulações de tempos curtos, geralmente adota-se uma dinâmica de Monte Carlo. Nesta, cada spin da rede é direcionado para cima ou para baixo com uma certa probabilidade, gerada a partir de uma variável aleatória uniformemente distribuída entre $[0, 1]$. Esse mesmo tipo de variável aleatória é utilizado para o estabelecimento (ou não) do elo entre spins de mesmo tipo [veja Eq. (3.26)] no algoritmo de Hoshen-Kopelman.

[†]Em sistemas de spins dispostos em uma rede, isto significa varrer toda a rede adotando um algoritmo numérico.

Como mencionamos anteriormente, as primeiras iterações numéricas estão fortemente correlacionadas à distribuição inicial dos spins, e este problema é sentido mais significativamente quando a temperatura é próxima de T_c . As discussões do Cap. 2 (pág. 23) mostraram que o comprimento de correlação espacial diverge na região crítica. Da mesma forma, a correlação temporal entre as configurações estudadas diverge na região crítica. A este fato damos o nome de *critical slowing down*. Então, os comportamentos iniciais dos observáveis termodinâmicos são, em princípio, diferentes de seus comportamentos de equilíbrio. Apesar desta diferença, é possível observar uma física universal para o regime de tempos curtos e expoentes críticos próprios desse tempo inicial. Nesta tese, o termo “dinâmica” é usado para designar o comportamento do observável em sua evolução para o equilíbrio.

Em modelos de spins, tais como o modelo de Ising, a dinâmica de tempos curtos foi estudada por diversos pesquisadores [16, 18, 19, 20, 21, 22]. Estes por sua vez, apoiaram-se no grupo de renormalização para determinar uma forma viável do comportamento dos observáveis físicos em tempos curtos e, com isto, tornaram possível a determinação dos expoentes críticos dinâmicos. Nas décadas de 80 e 90 vários esforços foram feitos nesta direção, principalmente após a introdução da fórmula do k -ésimo momento da magnetização por H. K. Janssen, B. Schaub e B. Schmittmann [18]

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} \mathcal{M}^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0), \quad (4.18)$$

que combina expoentes críticos de equilíbrio, β e ν , e os expoentes críticos dinâmicos z e x_0^\ddagger . Nesta fórmula, b é um fator de escala, t é a variável dinâmica temporal, m_0 é a magnetização inicial, L é o tamanho linear da rede e τ é a temperatura reduzida [veja a Eq. (2.15)]. O papel de m_0 ficará mais claro a seguir.

Os k -ésimos momentos da magnetização são definidos, para um sistema com N spins, para uma magnetização inicial m_0 e independentemente do valor da

[‡]O expoente crítico dinâmico x_0 é também conhecido como a dimensão anômala da magnetização inicial m_0 .

temperatura, por

$$M^{(k)} \equiv \frac{1}{N^k} \left\langle \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^k \right\rangle_{m_0}, \quad (4.19)$$

sendo a média $\langle \dots \rangle$ feita sobre diversas amostras, ou histórias, como será detalhado no Cap. 5 (pág. 71).

4.2.1 Lei de escala dinâmica

A Eq. (4.18) foi derivada utilizando-se técnicas perturbativas do ponto de vista de teoria de campos. No entanto é possível sua dedução, como mostrado em [61], utilizando apenas leis de escala e argumentos de grupo de renormalização. Para tanto, parte-se da expressão da energia livre de Helmholtz de um sistema magnético

$$\Phi(H, \tau, L) = -\frac{1}{\beta N} \log(\mathcal{Z}), \quad (4.20)$$

onde H é o campo magnético, L o tamanho linear da rede, τ a temperatura reduzida, $N = L^d$ e \mathcal{Z} a função de partição [veja Eq. (2.8)]. O grupo de renormalização garante que as quantidades físicas do sistema possam ser reescaladas de modo a manter a função de partição intacta após o reescalonamento. Para tanto consideremos

$$L \rightarrow L' = \lambda L \quad (4.21)$$

$$H \rightarrow H' = \lambda^x H \quad (4.22)$$

$$\tau \rightarrow \tau' = \lambda^{-1/\nu} \tau, \quad (4.23)$$

sendo $x = d + \beta/\nu$. Ou seja, temos

$$\mathcal{Z}(H, \tau, L) = \mathcal{Z}(\lambda^x H, \lambda^{-1/\nu} \tau, \lambda L), \quad (4.24)$$

onde os spins foram reescalados. Desta forma, a Eq.(4.20) é reescrita como

$$\Phi(H, \tau, L) = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{(\lambda L)^d} \log[\mathcal{Z}(\lambda^x H, \lambda^{-1/\nu} \tau, \lambda L)]. \quad (4.25)$$

Temos então

$$\Phi(H, \tau, L) = \lambda^{-d} \tilde{\Phi}(\lambda^x H, \lambda^{-1/\nu} \tau, \lambda L). \quad (4.26)$$

A magnetização espontânea é calculada como [veja Eq. (2.9)]

$$\begin{aligned} M &= \frac{\partial \Phi}{\partial H} \\ &= \lambda^{x-d} \tilde{M}(\lambda^x H, \lambda^{-1/\nu} \tau, \lambda L). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Escolhendo $\lambda = L^{-1}$ e utilizando $x-d = \beta/\nu$, encontra-se a lei de escala estática para a magnetização a campo nulo

$$M(\tau, L) = L^{-\beta/\nu} \bar{M}(L^{1/\nu} \tau). \quad (4.28)$$

Para considerar efeitos dinâmicos, mantém-se o reescalonamento das variáveis L , H e τ , acrescentando

$$t \rightarrow t' = \lambda^z t \quad (4.29)$$

$$m_0 \rightarrow m'_0 = \lambda^{-x_0} m_0. \quad (4.30)$$

Desta forma, com um procedimento análogo ao exposto acima, encontra-se

$$\Phi(H, t, \tau, L, m_0) = \lambda^{-d} \tilde{\Phi}(\lambda^x H, \lambda^z t, \lambda^{-1/\nu} \tau, \lambda L, \lambda^{-x_0} m_0), \quad (4.31)$$

e através da Eq. (2.9) temos (para campo nulo)

$$M(t, \tau, L, m_0) = \lambda^{\beta/\nu} \mathcal{M}(\lambda^z t, \lambda^{-1/\nu} \tau, \lambda L, \lambda^{-x_0} m_0). \quad (4.32)$$

Fazendo $\lambda = b^{-1}$ encontramos a lei de escala dinâmica, Eq. (4.18), para o caso $k = 1$.

4.2.2 Expoentes críticos dinâmicos

A aplicação da Eq. (4.18) no modelo de Ising possibilita o cálculo dos expoentes críticos dinâmicos. Visto que o sistema parte de uma magnetização não nula, utiliza-se o observável M sem tomarmos o módulo. Note que em

simulações numéricas de equilíbrio a campo zero toma-se geralmente o módulo da magnetização como estimador do parâmetro de ordem, para evitar os chamados efeitos de *tunelamento* entre estados de magnetização positiva e negativa. Então, podemos forçar o sistema a ter uma pequena magnetização inicial m_0 e acompanhar como é a evolução temporal do parâmetro de ordem, medindo assim um determinado expoente crítico dinâmico. Ou seja, fazendo $\tau = 0$ (isto é, $T = T_c$), $k = 1$ e $b = t^{1/z}$ temos (para volume infinito)

$$M(t, m_0) = t^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(1, t^{x_0/z} m_0), \quad (4.33)$$

Se m_0 é pequena e $M(t, m_0)$ é uma função analítica de m_0 , podemos expandir a Eq. (4.33) em termos de m_0 .

$$\frac{\partial M}{\partial m_0} = t^{-\beta/\nu z} t^{x_0/z} \mathcal{M}'|_{m_0=0} = t^{(x_0-\beta/\nu)/z} \mathcal{M}'(1, 0),$$

ou

$$M(t, m_0) = M(t, 0) + m_0 t^{(x_0-\beta/\nu)/z} \mathcal{M}'(1, 0) + \dots$$

Já que $M(t, 0) = 0$ em $T = T_c$ para volume infinito, temos

$$M(t) \sim m_0 t^\theta, \quad \theta \equiv (x_0 - \beta/\nu)/z, \quad (4.34)$$

sendo θ um expoente crítico dinâmico. Então esperamos um comportamento de lei de potência no início da evolução temporal do primeiro momento da magnetização. Pode-se também preparar o sistema inicial com uma magnetização inicial igual a 1. Desta forma teremos a dinâmica a partir de um estado ordenado (rede fria). A lei de escala para a magnetização com $\tau = 0$, $k = m_0 = 1$ e $b = t^{1/z}$ na Eq. (4.18) é dada por [20, 62]

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (4.35)$$

Visto que no caso do modelo de Ising sabemos os valores dos expoentes críticos estáticos da equação acima, pode-se medir o expoente crítico dinâmico z .

É possível também medir outros expoentes críticos dinâmicos com $m_0 = 0$. Se analisarmos o segundo momento da magnetização em $m_0 = 0$ e $T = T_c$

teremos

$$M^{(2)}(t, L) = t^{-2\beta/z\nu} \mathcal{M}^{(2)}(t^{-1/z} L), \quad (4.36)$$

ou

$$M^{(2)}(t) \sim t^y, \quad y \equiv (d - 2\beta/\nu)/z, \quad (4.37)$$

definindo assim o expoente crítico y . Seguindo esta mesma condição inicial podemos considerar a auto-correlação

$$A(t) = \frac{1}{N} \left\langle \left[\sum_i S_i(0) S_i(t) \right]^2 \right\rangle, \quad (4.38)$$

que obedece a uma lei de potência do tipo [19]

$$A(t, t' = 0) \sim t^{-\lambda}, \quad \lambda \equiv \frac{d}{z} - \theta, \quad (4.39)$$

definindo o expoente crítico λ . É possível calcular λ e z , em $m_0 = 0$. Logo, podemos inferir o valor de θ também usando as definições acima. O único contraponto a esta idéia é que erros nas medidas destes dois expoentes colaborarão para um erro grande em θ .

Pode-se medir o expoente crítico dinâmico θ realizando diversas simulações numéricas para m_0 s diferentes. Para cada valor de m_0 temos um θ , então extrapolamos seu valor para $m_0 \rightarrow 0$. Entretanto, cada uma destas medidas de θ é acompanhada de um erro, o que deve ser considerado na extrapolação, ocasionando um erro grande na medida final de θ . Para evitar este problema podemos medir este expoente crítico diretamente empregando a função de correlação temporal [63]

$$Q(t) \equiv \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_j S_i(t) S_j(0) \right\rangle \sim t^\theta, \quad (4.40)$$

sendo S_k spins de Ising e $S_j(0)$ um estado inicial com comprimento de correlação nulo. De fato, a aplicação deste método possibilita o cálculo deste expoente crítico dinâmico para diversos modelos, conforme realizado em [63]. Em

particular, sua aplicação para o modelo de Ising bidimensional é apresentada em [64], onde mediu-se o expoente crítico dinâmico θ . A vantagem deste método é evitar a realização de diversas simulações numéricas com m_0 s diferentes e extrapolar $m_0 \rightarrow 0$, resultando assim em um valor para θ . Logo, a utilização da Eq. (4.40) mostra-se vantajosa.

Para uma medida de z independente, usamos o cumulante de Binder dependente do tempo

$$U(t, \tau, L, m_0) = 1 - \frac{1}{3} \frac{M^{(4)}(t, \tau, L, m_0)}{[M^{(2)}(t, \tau, L, m_0)]^2}, \quad (4.41)$$

onde, usando a Eq. (4.18) para $\tau = 0$ e $m_0 = 0$, temos

$$\begin{aligned} U(t, L) &= 1 - \frac{1}{3} \frac{b^{-4\beta/\nu} \mathcal{M}^{(4)}(b^{-z} t, b^{-1} L)}{b^{-4\beta/\nu} [\mathcal{M}^{(2)}(b^{-z} t, b^{-1} L)]^2} \\ &= U(b^{-z} t, b^{-1} L). \end{aligned} \quad (4.42)$$

Se $b = L_1/L_2$

$$\begin{aligned} U(t, L_1) &= U(b^{-z} t, \frac{L_2}{L_1} L_1) \\ U(t, L_1) &= U(b^{-z} t, L_2). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Então, o expoente z pode ser facilmente obtido procurando um fator de escala temporal b^{-z} tal que as duas curvas provenientes da equação acima para dois volumes de redes diferentes (L_1^d e L_2^d) colapsem [21].

Outra possibilidade para uma medida independente para o expoente crítico dinâmico z é através das Eqs. (4.35) e (4.37), definindo a quantidade [65]

$$F_2(t) = \frac{M^{(2)}(t)|_{m_0=0}}{(M(t))^2|_{m_0=1}} \sim \frac{t^{(d-2\beta/\nu)/z}}{t^{-2\beta/z\nu}} = t^{d/z}. \quad (4.44)$$

Também é possível medir alguns expoentes críticos estáticos. Por exemplo, com o segundo momento da magnetização com $m_0 = 0$, medimos $2\beta/\nu$

$$M^{(2)}(t, \tau, L) = b^{-2\beta/\nu} \mathcal{M}^{(2)}(b^{-z} t, b^{1/\nu} \tau, b^{-1} L). \quad (4.45)$$

	Ising 2d	[Ref.]	Ising 3d	[Ref.]
θ	0.191(2)	[19]	0.104(3)	[66]
λ	0.745(12)	[16]	1.36(1)	[67]
z	2.155(3)	[16]	2.032(4)	[66]
y	0.825(14)	[16]	0.970(11)	[67]
$2\beta/\nu$	0.2504(29)	[21]	1.02(3)	[67]
$1/\nu$	0.955(40)	[21]	1.594(4)	[68]

Tab. 4.1: Valores numéricos de alguns expoentes críticos estáticos e dinâmicos. Valores dos expoentes críticos estáticos do modelo de Ising bidimensional (exatos) e tridimensional constam na Tab. 2.1.

Com a derivada do logaritmo do segundo momento com respeito a τ dada por

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \log M^{(2)}(t, \tau, L) \Big|_{\tau=0} = b^{1/\nu} \frac{\partial}{\partial \tau'} \log \mathcal{M}^{(2)}(b^{-z}t, \tau', b^{-1}L) \Big|_{\tau'=0}, \quad (4.46)$$

temos $1/\nu$ independentemente. Na Tab. 4.1, listamos alguns expoentes críticos estáticos e dinâmicos dados pela literatura.

4.2.3 Comportamento anômalo da magnetização

No início da evolução temporal a magnetização crítica apresenta um crescimento [16] — conforme mostrado na Fig. 4.1 — evidenciando o efeito da magnetização inicial m_0 à qual o sistema está sujeito [de acordo com a Eq. (4.34)], possibilitando assim a medida do expoente crítico θ . Após alcançar seu máximo, ela decai gradualmente, levando o sistema a um regime de tempo intermediário dado por

$$M(t) \sim t^{-\beta/\nu z}. \quad (4.47)$$

Após um longo tempo, o sistema alcança seu comportamento de equilíbrio. Neste momento a correlação torna-se relevante e a magnetização evolui como

$$M(t) \sim \exp(-t/\xi_t), \quad (4.48)$$

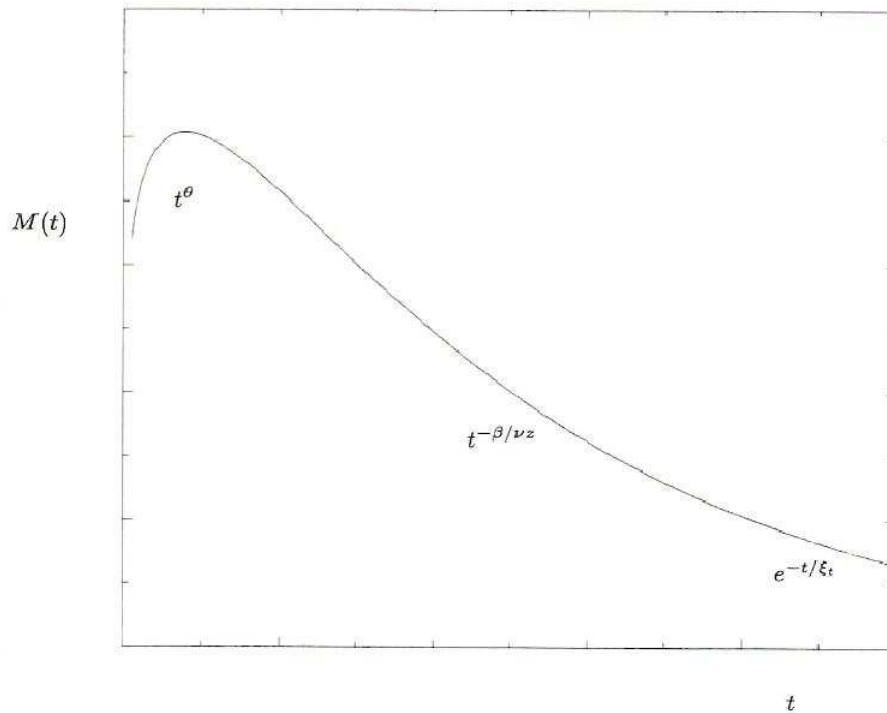


Fig. 4.1: Comportamento ilustrativo da magnetização em tempos curtos. Figura extraída de [16].

para um sistema finito na temperatura crítica, sendo ξ_t o comprimento de correlação temporal, dado por

$$\xi_t \approx L^z, \quad (4.49)$$

onde L é a dimensão lateral do sistema.

O aumento inicial da magnetização pode ser atribuído ao curto comprimento de correlação. Após t_{mic} , grosseiramente falando, existem dois fenômenos competindo em um sistema dinâmico: o crescimento de domínios[§] e a flutuação. O tamanho médio do domínio representa o comportamento de correlação espacial e reflete quão forte é a flutuação. No estágio inicial da evolução temporal, o tamanho do domínio é pequeno e a flutuação fraca. O crescimento do domínio prevalece. Uma pequena magnetização inicial induz mais domínios de spins positivos. Como resultado, o domínio de spins positivos cresce

[§]Conjunto de spins primeiros vizinhos de mesmo tipo.

rapidamente. Isto seria a origem para o crescimento inicial da magnetização. Após algum tempo, os domínios de spins positivos saturam e a flutuação começa a atuar. Finalmente a magnetização alcança seu máximo e começa a decrescer.

4.3 Método de Monte Carlo

Todas as simulações numéricas desta tese foram feitas utilizando o método de Monte Carlo. Em geral, a aplicação deste método se dá sempre que empregamos um algoritmo que utilize variáveis aleatórias. Estas aplicações abrangem cálculos em teoria de campo [69], integração numérica [70], mecânica estatística [71, 72] entre outras. No entanto existem vantagens e desvantagens no emprego deste método.

Em cálculos de integrais multidimensionais, o método de Monte Carlo é útil apenas a partir de uma determinada dimensão. Isto se deve ao comportamento do seu erro estatístico (variância). De fato, para o cálculo numérico de integrais multidimensionais em dimensão baixa, são geralmente empregadas as chamadas fórmulas de Newton-Cotes. Sua aplicação consiste em dividir o intervalo de integração em partes iguais. São exemplos destas fórmulas os métodos do trapézio, de Simpson e Simpson $3/8$. Para mais detalhes veja [73].

O cálculo numérico de uma integral unidimensional com a regra de Simpson nos fornece

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{x_n - x_0}{n} \sum_{j=1}^n w_j f(x_j) - \frac{1}{180} \frac{(x_n - x_0)^5}{n^4} \tilde{f}^{(4)}, \quad (4.50)$$

onde n (o número de intervalos iguais em que a função é dividida) é um número par, $w_0 = w_n = 1/3$ e para $1 \leq j \leq n - 1$ temos $w_j = 4/3$ (respectivamente $2/3$) para j ímpar (respectivamente par). A fórmula apresenta um erro da ordem de $1/n^4$. Para tratar o problema através do método de Monte Carlo, fazemos a aproximação

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad (4.51)$$

sendo o erro da ordem de $1/\sqrt{n}$, onde n é a quantidade de sorteios aleatórios utilizados para preencher a área de integração.

Para integrais multidimensionais utilizando a regra do trapézio temos

$$\int d^d u f(u_1, \dots, u_d) = \frac{1}{n^d} \sum_{i_1=0}^n \cdots \sum_{i_d=0}^n w_{i_1} \cdots w_{i_d} f\left(\frac{i_1}{n}, \dots, \frac{i_d}{n}\right) + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (4.52)$$

No total, temos que calcular a função $N = (n+1)^d \approx n^d$ vezes e isto nos leva a um erro da ordem de $N^{-2/d}$. Com o aumento da dimensão d o erro $O(N^{-2/d})$ aumenta drasticamente. Do ponto de vista do método de Monte Carlo

$$\int d^d u f(u_1, \dots, u_d) = \frac{1}{n^d} \sum_{i_1=0}^n \cdots \sum_{i_d=0}^n f(u_1, \dots, u_d), \quad (4.53)$$

o erro continuará da ordem de $1/\sqrt{N}$, ou seja, se $d > 4$ o método de Monte Carlo apresenta um erro menor do que as fórmulas de Newton-Cotes, como a Eq. (4.52).

A utilização do método de Monte Carlo em mecânica estatística pode ser exemplificada com o próprio modelo de Ising. Em uma simulação numérica podemos por exemplo definir se os spins de Ising são 1 ou -1 com uma probabilidade p . Para tanto sorteamos um número aleatório r e definimos a regra:

$$\text{se } \begin{cases} r < p \rightarrow S = +1 \\ r > p \rightarrow S = -1 \end{cases}. \quad (4.54)$$

Como foi dito na pág. 43, de acordo com o algoritmo de Hoshen e Kopelman, eles são colocados entre spins iguais com uma probabilidade dada pela Eq. (3.26). Para tanto sorteamos um número aleatório r e o comparamos com esta probabilidade, e assim, estabelecemos (ou não) os elos.

Do ponto de vista computacional estes números não são aleatórios no sentido amplo da palavra. Como sua geração respeita um algoritmo, eles são *pseudo-aleatórios*. Logo existem seqüências pré-definidas. Em geral, os números pseudo-aleatórios são uniformemente distribuídos no intervalo $[0, 1]$, mas é possível modificar esta distribuição (para alguns exemplos veja o Ap. C).

Capítulo 5

Simulações

Como foi descrito na Seção 3.2.1, é possível encontrar uma definição de percolação que coincida com a transição magnética do modelo de Ising [11, 12]. Logo, em princípio, existem expoentes críticos dinâmicos associados aos observáveis de percolação. Como o análogo da magnetização é a pressão do cluster percolante, [veja a Eq. (5.1)], esperamos que esta também exiba um comportamento de lei de potência neste regime, possivelmente com um expoente crítico dinâmico θ igual ao dado pela magnetização do modelo de Ising. O primeiro procedimento é impor que o sistema tenha uma magnetização inicial m_0 . Então realizamos várias varreduras na rede fixando a temperatura em T_c . Em cada varredura a rede é levada a um banho térmico através de um algoritmo homônimo. No próximo passo, identificamos clusters nesta rede utilizando o algoritmo de Hoshen e Kopelman*, calculando a pressão do cluster percolante

$$\Omega_P = \begin{cases} 0, & \text{se não houver percolação} \\ \Delta_P/V, & \text{se houver percolação} \end{cases}, \quad (5.1)$$

ou a pressão do maior cluster

$$\Omega = \Delta/V, \quad (5.2)$$

sendo Δ o volume do maior cluster da rede (veja a discussão sobre o parâmetro de ordem de percolação no final da Seção 3.2).

*Para mais detalhes sobre este algoritmo veja o Ap. B.

Para formar a estatística dos dados, realizamos diversas histórias temporais, sendo que em cada história a rede inicial é gerada a partir de uma *semente* aleatória diferente. Assim, ao final teremos uma média nas histórias. Quanto mais histórias, menor será o erro estatístico. Observe que os erros devido à correlação entre o tempo (varredura) t e o tempo $t + 1$ não são relevantes neste passo da análise. Em cada instante de tempo teremos um dado número n_{his} de histórias. Como cada história é independente das demais (ou seja, as histórias não são correlacionadas), basta calcular a variância ou desvio padrão para cada instante de tempo.

5.1 Condições iniciais

A maneira usual de preparar a rede inicial contendo uma magnetização m_0 é distribuir em uma rede “quente” (i.e. com magnetização nula) uma quantidade de spins $+1$ de modo que a magnetização total da rede seja m_0 . Isto é feito invertendo alguns spins aleatoriamente na rede. Este procedimento, denominado nesta tese de *magnetização dispersa*, foi o primeiro adotado nas simulações, mas também foi possível modificar esta condição inicial. Na segunda forma escolhida, chamada de *magnetização concentrada*, determina-se uma região compacta, circular em duas dimensões e esférica em três dimensões, contendo a quantidade exata de spins para que se tenha a magnetização m_0 , sendo o restante da rede com magnetização nula. (Como foi mostrado em [19], a geometria da rede é irrelevante para a avaliação dos expoentes críticos dinâmicos magnéticos. Logo, nas simulações usaram-se redes quadradas, estabelecendo que em uma determinada região todos os spins fossem $+1$.) Na terceira forma, denominada de *magnetização unidimensional*, estipulou-se que as linhas superiores da rede inicial fossem compostas apenas de spins $+1$, com a quantidade exata para que a magnetização m_0 fosse formada, e o restante da rede quente. Na quarta e última abordagem, utilizou-se o fato de a percolação de sítios ocorrer no mesmo ponto crítico que o modelo de Ising em duas dimensões

($T_p^{2D} = T_c^{2D}$) [8, Cap. 7]. Desta forma, através da condição inicial dispersa, evolui-se o sistema colocando-o em um banho térmico com a devida temperatura de percolação T_p . A seguir, eles foram formados com probabilidade $p = 1$ entre spins do mesmo tipo. Desta forma a análise de percolação foi feita do ponto de vista de percolação de sítios. Esta abordagem foi denominada de *percolação de clusters geométricos*.

Em simulações numéricas de equilíbrio o parâmetro de ordem magnético adotado para o modelo de Ising sem campo magnético externo é o módulo da magnetização. A razão disto é o fato de que a magnetização pode passar de um valor positivo para um negativo entre duas iterações subseqüentes (já que a rede é finita). A esta alternância no sinal da magnetização damos o nome de tunelamento. Se não tomássemos este cuidado no cálculo do parâmetro de ordem magnético em equilíbrio, encontraríamos um valor aproximadamente nulo (no caso de muitos tunelamentos) ou arbitrário (para poucos tunelamentos) para este observável. Em simulações numéricas em tempos curtos, partindo de uma magnetização positiva m_0 , a solução positiva para a magnetização é favorecida e não utilizamos o módulo para a magnetização. Mesmo assim, como veremos mais abaixo, teremos tunelamentos em maior ou menor grau dependendo da configuração inicial dos spins. Claramente, como demonstramos na Seção 4.2.1, a lei de escala dinâmica para o parâmetro de ordem magnético não considera o valor absoluto desta quantidade. Da mesma forma, esses efeitos estarão presentes para o parâmetro de ordem de percolação, que será definido (na Seção 5.2 abaixo) de maneira análoga à magnetização, i.e. com contribuição positiva dos clusters formados por spins positivos e negativa dos clusters de spins negativos.

Embora as redes iniciais tenham particularidades distintas, os valores de equilíbrio dos observáveis não devem ser diferentes, pois devido à termalização eles não dependerão das condições iniciais. No entanto, os efeitos de tunelamento (descritos acima) para a magnetização poderão ser diferentes, implicando em um deslocamento do valor de equilíbrio do parâmetro de ordem,

sem contudo modificar o comportamento dinâmico qualitativo do mesmo. De acordo com a condição inicial adotada, a concentração de spins iguais em uma dada região da rede poderá favorecer o tunelamento. A magnetização deverá porém continuar equivalente à pressão do cluster percolante (tanto Ω_P quanto Ω) para tempos longos. Apenas o comportamento dinâmico poderá ser diferente em tempos curtos. Neste capítulo, analisaremos os detalhes de cada uma destas condições iniciais e apresentaremos nossos resultados numéricos para os modelos de Ising bi e tridimensional. Assim como o primeiro estudo do expoente crítico dinâmico θ para o modelo de spins contínuos $O(4)$ em três dimensões.

5.1.1 Algoritmo de banho térmico

No modelo de Ising os spins possuem duas possíveis orientações. Logo, o algoritmo de banho térmico deve considerar estes graus de liberdade na distribuição de probabilidade dos spins na rede. Vamos definir p_i^+ (respectivamente p_i^-) como a probabilidade do spin no sítio i estar para cima (respectivamente para baixo), considerando fixos os demais spins da rede. Como desejamos que ao final do procedimento todos os spins da rede estejam em uma distribuição de Boltzmann, escolhemos a distribuição de probabilidades para um spin (condicionada ao valor dos demais) como

$$p \sim e^{-\beta\mathcal{H}}, \quad (5.3)$$

sendo \mathcal{H} o hamiltoniano do modelo de Ising sem campo magnético externo [Eq. (2.5)] e $\beta = 1/kT$, onde k é a constante de Boltzmann. Neste algoritmo cada spin da rede é posto para cima ou para baixo mediante a configuração dos seus primeiros vizinhos (já que os outros spins da rede são cancelados), devido à probabilidade condicionada. Desta forma temos

$$p_i^+ = \mathcal{N} \exp(+\beta h) \quad (5.4)$$

$$p_i^- = \mathcal{N} \exp(-\beta h), \quad (5.5)$$

onde

$$h \equiv \mathcal{J} \sum_{\langle j \rangle} S_j \quad (5.6)$$

é um campo efetivo gerado pelos primeiros vizinhos do spin i , sendo $\sum_{\langle j \rangle}$ a soma sobre seus primeiros vizinhos. A constante de normalização \mathcal{N} é dada por

$$\mathcal{N} = \frac{1}{\exp(\beta h) + \exp(-\beta h)}. \quad (5.7)$$

Temos portanto

$$p_i^+ = \frac{\exp(\beta h)}{\exp(\beta h) + \exp(-\beta h)} \quad (5.8)$$

$$p_i^- = \frac{\exp(-\beta h)}{\exp(\beta h) + \exp(-\beta h)}. \quad (5.9)$$

Após um certo número de iterações teremos todos os spins da rede respeitando uma distribuição de Boltzmann, formando assim o que chamamos de banho térmico [71, Cap. 5]. Neste processo, uma determinada configuração nunca será rejeitada, a sua escolha depende apenas das direções impostas aos spins pela distribuição de Boltzmann. O algoritmo de banho térmico é um algoritmo local, atualizando cada spin com valores fixos para os seus primeiros vizinhos.

5.2 Resultados

Nas simulações realizadas, temos para cada unidade de tempo (varredura), 50000 configurações, correspondendo às diferentes histórias consideradas. Utilizamos magnetização inicial $m_0 = 0.02$, para quatro volumes de redes bi e tridimensionais, com condições de contorno periódicas. Na condição inicial com magnetização dispersa adotamos também $m_0 = 0.03$ e 0.04 . Mesmo analisando uma história temporal dos observáveis (dinâmica), é conveniente desconsiderarmos nos ajustes as primeiras unidades de tempo, pois o

comportamento tal como lei de potência — prevista na Eq. (4.34) — só ocorre após este tempo microscópico t_{mic} [74]. Para o algoritmo de Metropolis, t_{mic} é da ordem de 30, mas para o algoritmo de banho térmico o tempo microscópico é geralmente muito pequeno.

Embora a magnetização inicial seja positiva, podem ocorrer clusters percolantes formados por spins negativos. Isto nos leva a redefinir a pressão do cluster percolante [veja a Eq. (5.1)] como

$$\Omega_P = \Omega_{P+} - \Omega_{P-}, \quad (5.10)$$

onde $\Omega_{P+(-)}$ é a pressão do cluster percolante quando este é formado por spins positivos (respectivamente negativos) e Ω_P é a média feita sobre n_{his} histórias. O observável assim definido coincide com a magnetização no equilíbrio, como mostrado em [11, 12, e em suas referências]. Durante a evolução temporal do sistema pode ocorrer que para uma dada configuração não tenhamos um cluster percolante. Assim, zeros contribuem na média final. Como dito anteriormente, devido a esta dificuldade, é conveniente utilizar o parâmetro de ordem dado nas Eqs. (3.23) e (5.2), reescrito (levando-se em conta as contribuições de clusters de sentidos opostos e a média nas histórias) como

$$\Omega = \Omega_+ - \Omega_-. \quad (5.11)$$

Em nossas simulações, além das quantidades acima, calculamos também a magnetização

$$M = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \right\rangle_{his}, \quad (5.12)$$

onde $\langle \dots \rangle_{his}$ representa uma média sobre as n_{his} histórias e N é o número de spins da rede. As diversas condições iniciais (listadas na Seção 5.1) foram preparadas com magnetização exata (ou “sharp”) igual a m_0 , diferindo apenas na distribuição espacial da mesma. Para tanto, utilizou-se o algoritmo de banho térmico com condições de contorno periódicas juntamente com o algoritmo de Hoshen e Kopelman para a identificação dos clusters de Fortuin e Kasteleyn [11].

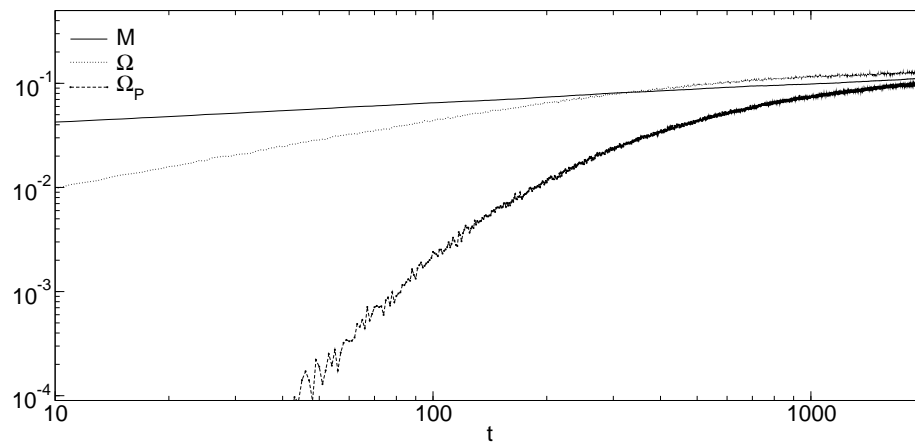


Fig. 5.1: Valores calculados para M , Ω_P [Eq. (5.10)] e Ω [Eq. (5.11)] em uma rede quadrada com $V = 200^2$ e $m_0 = 0.02$.

5.2.1 Magnetização inicial dispersa

Nossos resultados para os vários parâmetros de ordem (M , Ω_P e Ω) com magnetização inicial dispersa podem ser vistos para os casos bi e tridimensional respectivamente nas Figs. 5.1 e 5.2. Mais precisamente, o comportamento de Ω_P é mostrado, em conjunto com a magnetização e com Ω na Fig. 5.1, para $m_0 = 0.02$ e $V = 200^2$. No caso tridimensional também realizamos simulações em diversos volumes de redes, com uma magnetização inicial $m_0 = 0.02$. Na Fig. 5.2 são mostrados M , Ω_P e Ω para o volume 64^3 . Para auxiliar a visualização dos dados, não apresentamos as barras de erro.

Nas Figs. 5.1 e 5.2 é evidenciada a convergência dos três observáveis para valores muito próximos em tempos longos. Entretanto, para o caso bidimensional isto só ocorre após 2000 iterações, enquanto que, para o caso tridimensional esta convergência já pode ser notada a partir de 250 iterações. Este comportamento é característico, ou seja, simulações numéricas realizadas com redes tridimensionais geralmente convergem ao equilíbrio mais rapidamente em comparação com as bidimensionais. Além disto, observa-se outro fato característico em dados coletados em simulações bidimensionais. Estes apresentam mais ruído (como pode ser visto na Fig. 5.1), exigindo assim mais

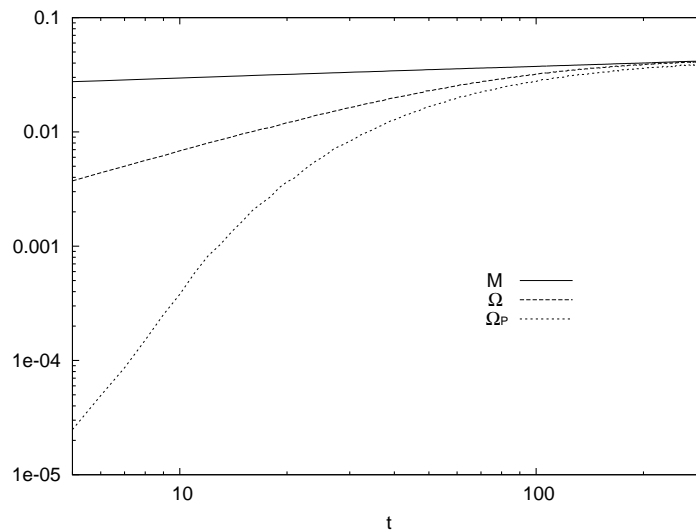


Fig. 5.2: Valores calculados para M , Ω_P [Eq. (5.10)] e Ω [Eq. (5.11)] em uma rede cúbica com $V = 64^3$ e $m_0 = 0.02$

estatística (no caso, um número maior de histórias) para uma melhor medida dos observáveis.

L	$m_0 = 0.04$	$m_0 = 0.03$	$m_0 = 0.02$
100	0.1820(5)	0.1897(7)	0.1850(9)
125	0.1831(4)	0.1843(5)	0.1859(7)
200	0.1836(3)	0.1831(3)	0.1842(7)
250	0.1863(6)	0.186(1)	0.186(2)

Tab. 5.1: O expoente crítico dinâmico θ obtido a partir do ajuste de uma lei de potência para a magnetização M no caso bidimensional. Os intervalos de ajuste são $[t_{mic}, 100]$, com t_{mic} entre 5 e 10. Os valores de $\chi^2/d.o.f.$ são da ordem de 1.

Com esta condição inicial foi calculado o expoente crítico dinâmico θ [ver Eq. (4.34)], através de um ajuste nos dados da magnetização. Demonstra-se assim o comportamento de lei de potência para este observável, como visto na Tab. 5.1, para o caso bidimensional. Por outro lado, os resultados para os parâmetros de ordem de percolação Ω_P e Ω evidenciam comportamentos

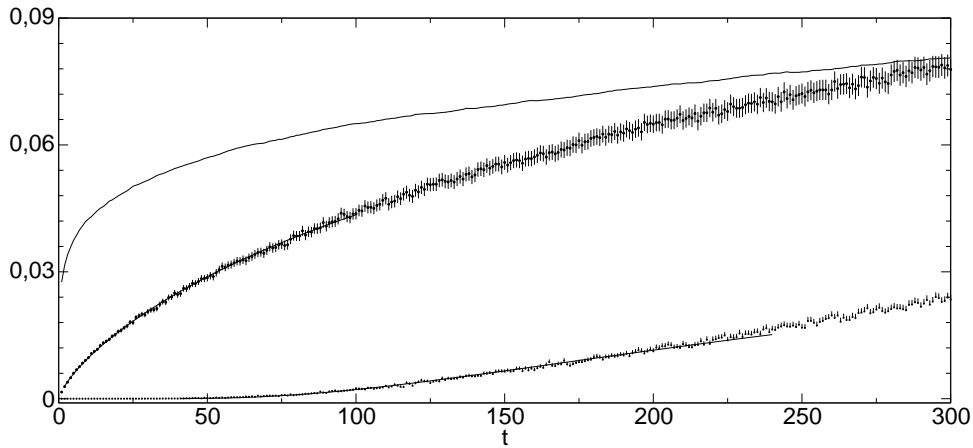


Fig. 5.3: Ajustes dos parâmetros de ordem Ω_P e Ω , correspondentes aos dados respectivamente das Tabs. 5.2 e 5.3. Caso bidimensional com magnetização dispersa para $V = 200^2$ e $m_0 = 0.02$. Na curva superior temos a magnetização, enquanto que na inferior temos Ω_P e ao centro temos Ω .

diferentes entre si e ambos diferem da magnetização.

No ajuste do observável Ω_P utilizamos uma função semelhante à solução da equação de difusão

$$f(t)_{\Omega_P} = A \exp(-\tau/t). \quad (5.13)$$

A difusão é um fenômeno de transporte de matéria causado pela variação em seu potencial químico. Este fenômeno pode ser descrito inteiramente em termos macroscópicos [75], o que em nosso ponto de vista consiste em clusters que são quantidades macroscópicas. A equação da difusão tem como solução

$$f(t) = \frac{c}{\sqrt{t}} \exp(-x^2/4Dt), \quad (5.14)$$

onde D é o coeficiente de difusão. A difusão ocorre na mudança do potencial químico na direção x a partir da posição x_0 em um tempo t . Se dividirmos a função de ajuste do parâmetro de ordem da percolação [Eq. (5.13)] por \sqrt{t} , que corresponde ao comprimento de difusão em um caminho aleatório no tempo t , podemos identificar τ com $x^2/4D$. Os ajustes da Eq. (5.13) aos dados de Ω_P — que podem ser vistos para os casos bi e tridimensional respectivamente nas Figs. 5.3 e 5.4 — são mostrados na Tab. 5.2 para $m_0 = 0.02$.

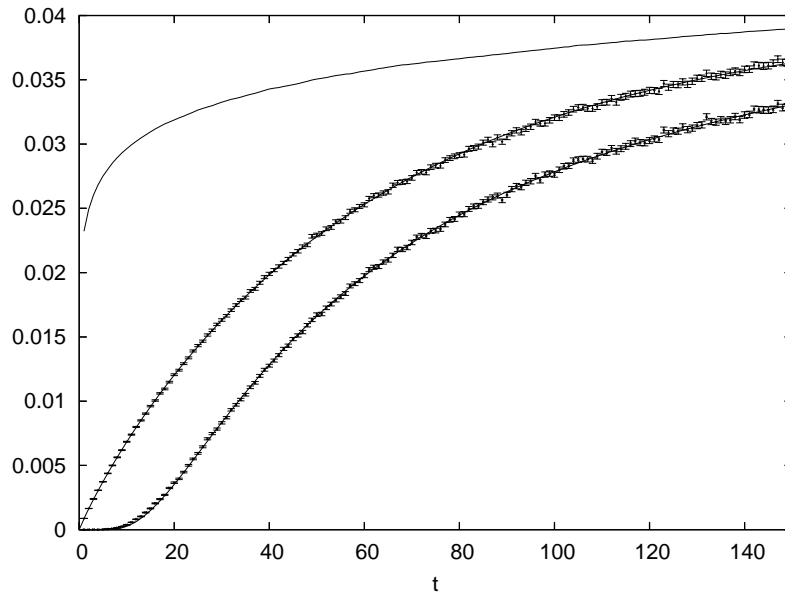


Fig. 5.4: Ajuste dos parâmetros de ordem Ω_P e Ω , correspondentes aos dados respectivamente das Tabs. 5.2 e 5.3. Caso tridimensional para $V = 64^3$ e $m_0 = 0.02$, condição inicial dispersa. Na curva superior temos a magnetização, enquanto que na inferior temos Ω_P e ao centro temos Ω .

O comportamento de Ω é dado por

$$g(t)_\Omega = B \{1 - \exp[-(t/\tau')^\eta]\}. \quad (5.15)$$

Uma função deste tipo corresponde à fração do volume de partículas em um processo de nucleação e crescimento. Este comportamento é observado na dinâmica de transições de fase de primeira ordem. O ajuste desta função (veja as Figs. 5.3 e 5.4) pode ser visto na Tab. 5.3. Portanto, verificamos que os dois observáveis de percolação respeitam leis difusão (no caso de Ω_P) e de nucleação (para Ω), tanto para o caso bidimensional quanto para o tridimensional.

Desta forma, obtemos que, ao contrário da magnetização os parâmetros de ordem de percolação (seja Ω_P ou Ω) não são livres de escala em tempos curtos. Esta escala é dada no caso de Ω_P pelo fator $\tau(L)^\dagger$ e no caso de Ω pelo fator $\tau'(L)^\ddagger$. Logo, é possível ajustar uma lei de potência para $\tau(L)$ e $\tau'(L)$, obtendo

[†]Veja os dados na Tab. 5.2.

[‡]Veja os dados na Tab. 5.3.

Volume	Δt	A	τ	$\chi^2/d.o.f.$
100^2	18–83	0.061(1)	85.5(9)	0.97
125^2	28–110	0.062(1)	134(1)	0.98
150^2	30–150	0.063(1)	192(2)	0.91
200^2	41–240	0.061(1)	334(3)	0.69
24^3	3–100	0.0366(3)	5.9(3)	0.57
32^3	10–120	0.0397(5)	11.7(6)	0.42
48^3	15–120	0.0446(4)	28.4(4)	0.58
64^3	20–130	0.0467(3)	51.6(3)	0.68

Tab. 5.2: Ajustes para Ω_P com a Eq. (5.14). Dados para o caso $m_0 = 0.02$. Os intervalos de ajuste escolhidos são mostrados na segunda coluna.

assim o expoente crítico dinâmico z , sugerindo que a escala temporal relevante em tempos curtos é dada pelo tempo de relaxação para o equilíbrio de ambos os observáveis de percolação.

Um ajuste de $\tau \sim L^z$ para o caso bidimensional, utilizando os dados das quatro primeiras linhas da Tab. 5.2, pode ser visto na Fig. 5.5 à esquerda, resultando em $z \sim 2.12(4)$. Para o caso tridimensional, ajustes feitos com os dados das quatro últimas linhas da Tab. 5.2 demonstram um $z \sim 2.06(2)$ (Fig. 5.5 à direita), evidenciando a escala de Ω_P . O mesmo pode ser feito para a escala de tempo $\tau'(L)$, com dados da Tab. 5.3. Para o caso bidimensional calculamos $z \sim 2.14(7)$ (Fig. 5.6 à esquerda) e para o caso tridimensional $z \sim 2.04(3)$ (Fig. 5.6 à direita). Vemos que — tanto para o caso bidimensional quanto para o tridimensional e considerando seja τ que τ' — os resultados concordam dentro dos erros com os valores encontrados na literatura para o expoente crítico z usual (veja a Tab. 4.1).

Portanto, os comportamentos dos parâmetros de ordem de percolação e magnético parecem ser qualitativamente diferentes. Em particular, não há lei de potência para Ω_P e Ω , enquanto que a magnetização exibe um comportamento

Volume	Δt	B	τ'	η	$\chi^2/d.o.f.$
100^2	7–100	0.104(5)	82(1)	0.71(1)	0.35
125^2	8–100	0.126(5)	168(14)	0.70(1)	0.23
150^2	7–100	0.115(4)	179(13)	0.72(1)	0.17
200^2	10–100	0.20(1)	380(32)	0.73(1)	0.17
24^3	3–100	0.0349(1)	8.0(1)	0.82(1)	0.42
32^3	5–120	0.0372(2)	15.4(3)	0.83(2)	0.50
48^3	10–130	0.0394(3)	34.4(4)	0.90(1)	0.48
64^3	15–150	0.0402(5)	60.5(4)	0.93(1)	0.56

Tab. 5.3: Ajustes para Ω com a Eq. (5.15). Dados para o caso $m_0 = 0.02$. Os intervalos de ajuste escolhidos são mostrados na segunda coluna.

de lei a potência, com um θ compatível com o encontrado na literatura (veja a Tab. 4.1). Além do mais, os parâmetros de ordem de percolação apresentam uma escala temporal com $z \approx 2$, sendo este expoente crítico dinâmico vinculado ao relaxamento do sistema para o equilíbrio.

Antes de tentarmos interpretar este resultado surpreendente, podemos nos perguntar se a condição inicial escolhida (impondo um início não-nulo para M , o parâmetro de ordem magnético) não é “injusta” para com os parâmetros de ordem de percolação. De fato, deveríamos tentar iniciar tais parâmetros também com valores diferentes de zero, de forma que um pequeno cluster concentrado seja já favorecido nas primeiras iterações de nossa dinâmica. Isso é feito a partir da Sec. 5.2.2. Por simplicidade, a partir desta seção consideraremos apenas o caso bidimensional (com $m_0 = 0.02$) e apenas Ω como parâmetro de ordem de percolação. Por outro lado, na seção 5.2.1.1 consideramos alguns aspectos relacionados à nossa escolha para a implementação e para a dinâmica dos clusters.

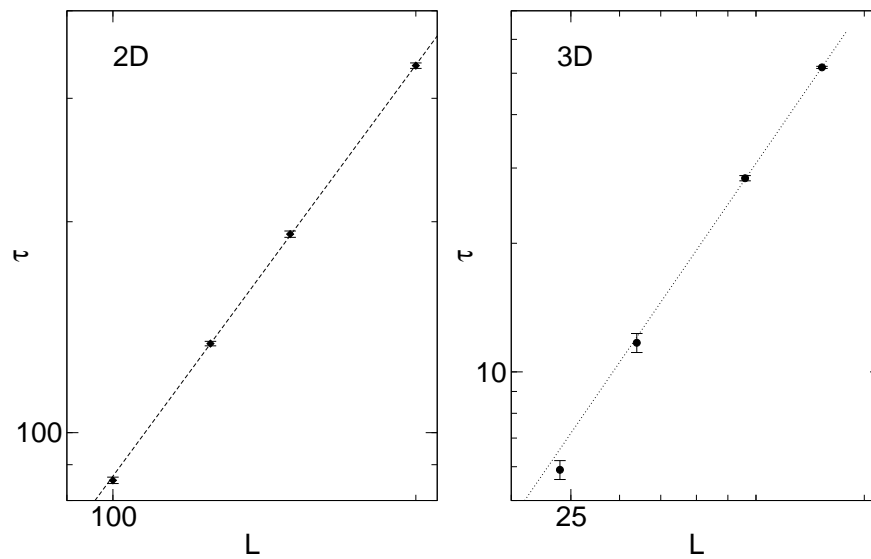


Fig. 5.5: Ajuste de $\tau(L) \sim L^z$, $z \sim 2.12$ no caso bidimensional e $z \sim 2.06$ no caso tridimensional (dados da Tab. 5.2).

5.2.1.1 Considerações adicionais

Além do método descrito acima, podemos calcular um $\langle \Omega \rangle$ tomando n realizações das variáveis de elos, formando para cada instante de tempo a quantidade $\overline{\Omega}$ e depois tomando a média nas sementes. De fato, em cada instante de tempo a rede é levada a um banho térmico e imediatamente identificamos clusters, mediante a uma distribuição aleatória dos elos com o algoritmo de Hoshen e Kopelman calculando Ω . Entretanto, se calcularmos n vezes Ω para cada rede em banho térmico — formando assim um $\langle \Omega \rangle$ — onde em cada uma destas teremos distribuições diferentes para os elos, talvez a média nas sementes em um dado instante de tempo, $\overline{\Omega}$, aproxime-se da magnetização.

Para verificarmos esta possibilidade realizamos 100 medidas de Ω (tendo assim $\langle \Omega \rangle_{n=100}$) em cada instante de tempo, sendo o tempo total igual a 100, para uma rede com $V = 100^2$, $m_0 = 0.02$ e 10000 amostras independentes. Os resultados exibidos na Fig. 5.7 deixam claro que não há uma mudança qualitativa entre $\overline{\Omega}$ em comparação com os dados de Ω calculados com 50000 amostras independentes para o mesmo volume de rede e magnetização inicial.

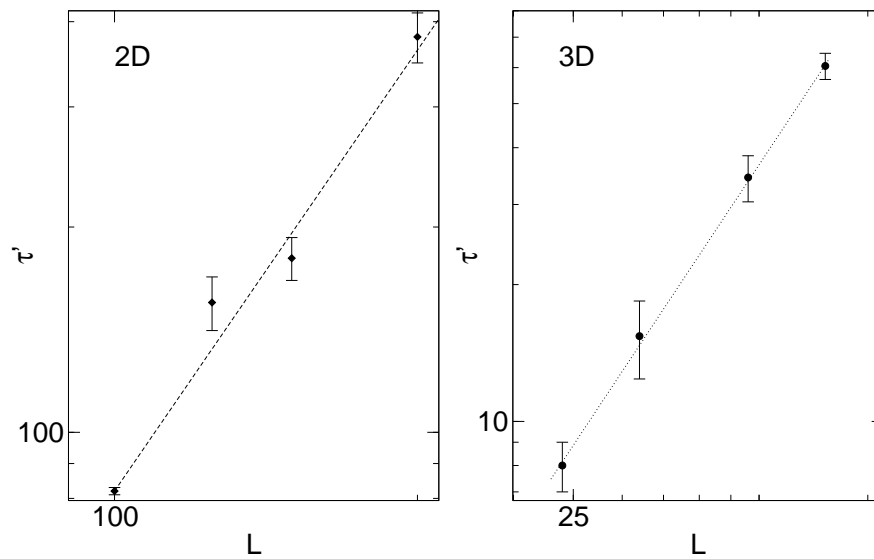


Fig. 5.6: Ajuste de $\tau'(L) \sim L^z$, $z \sim 2.14$ no caso bidimensional e $z \sim 2.04$ no caso tridimensional (dados da Tab. 5.3).

Note que a dinâmica usual consiste em evoluir as configurações de spins segundo o algoritmo escolhido (por exemplo, a dinâmica de banho térmico) e sortear os possíveis elos ocupados de maneira independente, não existindo portanto uma verdadeira correlação temporal para as variáveis de elos. Fundamentalmente, portanto, o parâmetro de ordem de percolação não apresenta uma dinâmica própria. Seria interessante estudar os efeitos de uma dinâmica real para os elos, definida de forma a preservar a probabilidade de ocupação dos elos entre spins primeiros vizinhos de mesmo valor.

5.2.2 Magnetização inicial concentrada

Como o número necessário de spins para formar uma magnetização inicial m_0 é disperso aleatoriamente na rede, não ocorre um cluster de volume significativo nos instantes iniciais, muito menos um percolante. Uma possível solução para este problema é definir uma região com spins iguais, para que a partir deste possa se formar um cluster com um volume significativo. Desta forma, o comportamento de Ω é modificado. Como o elo entre os spins é

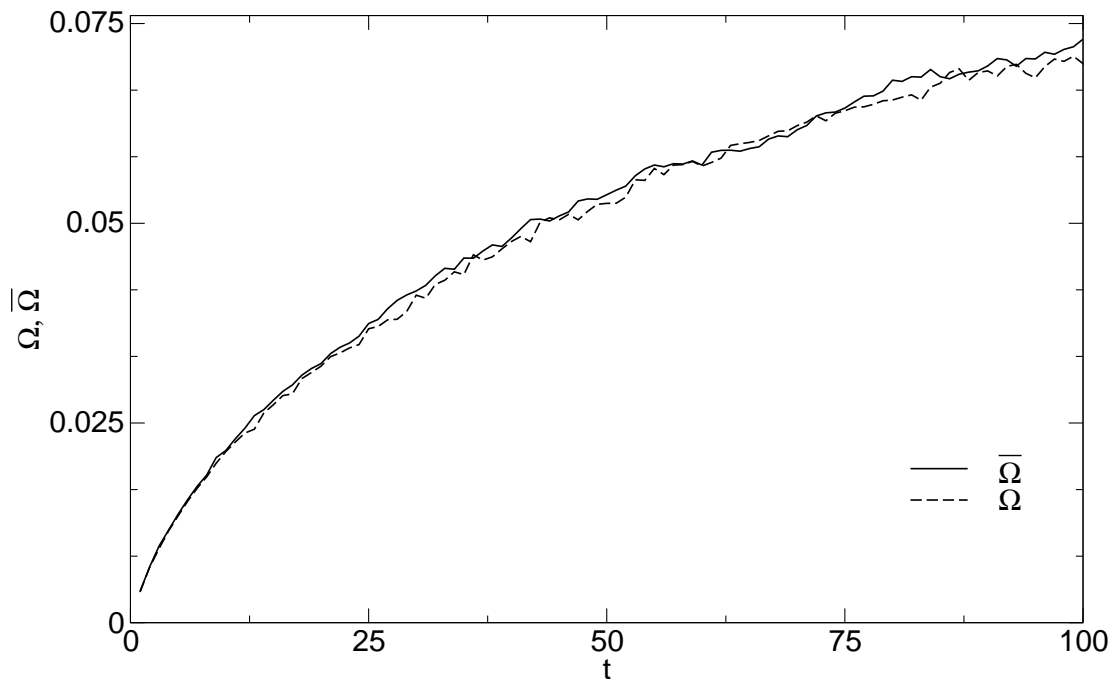


Fig. 5.7: Comparação qualitativa entre Ω e $\bar{\Omega}$ para $V = 100^2$ e $m_0 = 0.02$. Ressaltando que nos dados para Ω foram utilizados 50000 amostras, enquanto que para $\bar{\Omega}$ foram usadas apenas 10000 amostras e a média foi feita sobre 100 configurações de elos.

posto aleatoriamente, respeitando a probabilidade (veja Seção 3.2.1 para mais detalhes)

$$p = 1 - e^{-2J\beta_c}, \quad (5.16)$$

(ressaltando que a simulação numérica é realizada em $T = T_c$) o cluster formado não conterá a totalidade dos spins da região.

No entanto, a sua existência pode modificar a dinâmica inicial do sistema. Para tanto, vamos realizar um pequeno estudo sobre o comportamento dos parâmetros de ordem magnético e de percolação (Ω) variando o raio da região. Esta condição inicial consiste em estabelecer uma região circular da rede (estamos tratando aqui o caso bidimensional) com raio

$$r = \sqrt{V m_0}. \quad (5.17)$$

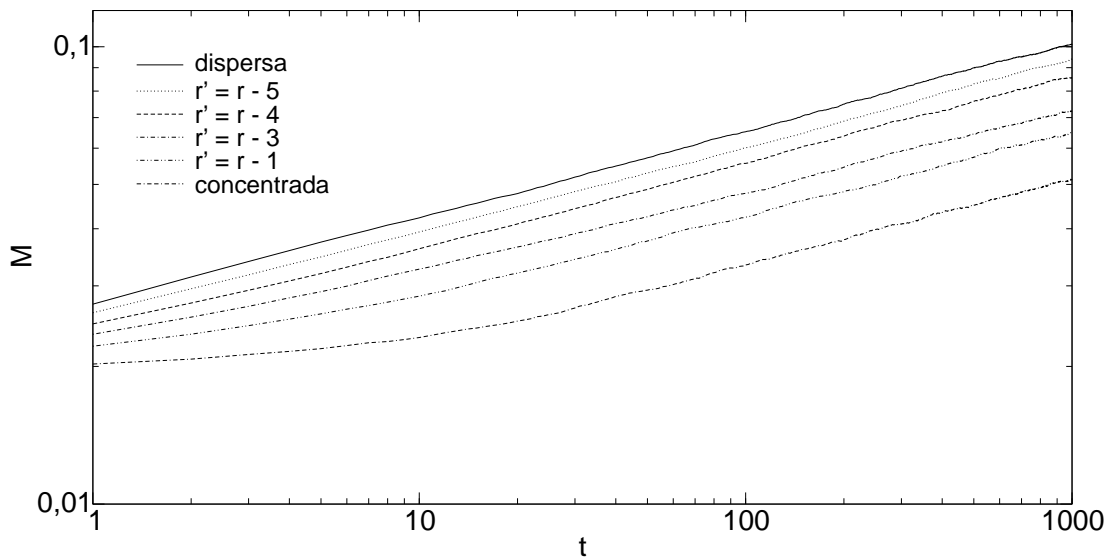


Fig. 5.8: Comportamento da magnetização de acordo com o tamanho da região. Com $V = 100^2$, $m_0 = 0.02$ e $r = 14$.

O efeito da região de magnetização inicial concentrada sobre o comportamento de M pode ser compreendido através da Fig. 5.8. Modificando o tamanho da região, podemos observar que quanto menor o seu raio, o que nos leva próximo à condição inicial dispersa, mais próximos estamos do comportamento obtido com a condição inicial anterior. Nossas simulações numéricas foram realizadas para uma rede com volume $V = 100^2$, magnetização inicial $m_0 = 0.02$, gerando 30000 realizações para cada valor considerado para o raio da região circular, sendo o maior deles dado pela expressão acima. Note que a presença da região causa um aumento significativo no valor do tempo microscópico, “atrasando” o comportamento de lei de potência para a magnetização. Entretanto, ainda observamos o comportamento típico de lei de potência para todos os raios, a partir deste “tempo microscópico estendido”.

Para o parâmetro de ordem de percolação Ω , a modificação no tamanho da região evidenciou a ação desta no valor do observável, principalmente nas primeiras iterações, como pode ser visto na Fig. 5.9. Como na análise para a magnetização, quanto menor o raio mais nos aproximamos do resultado obtido

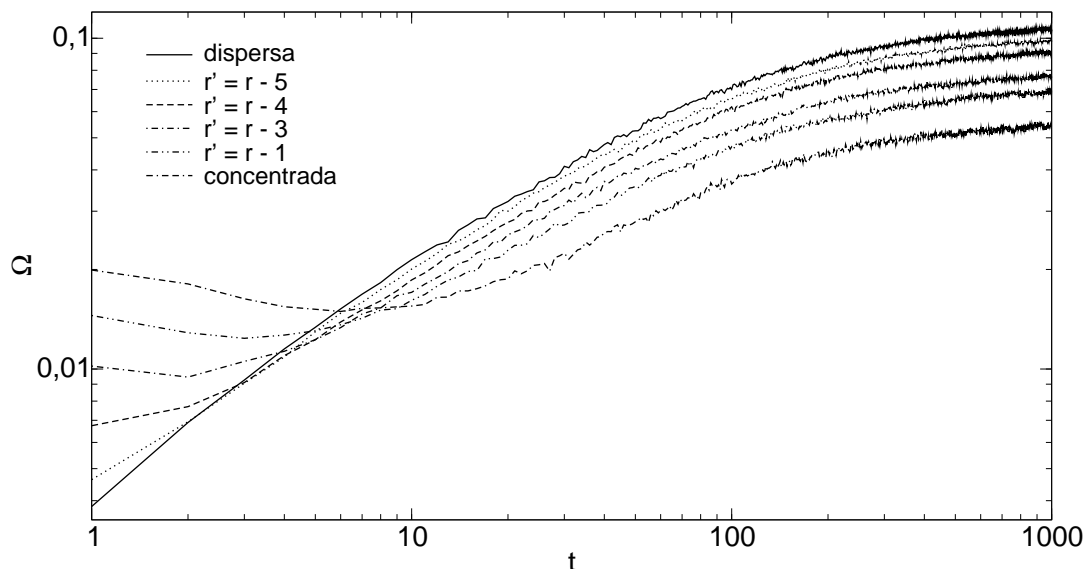


Fig. 5.9: Comportamento de Ω de acordo com o tamanho da região. Com $V = 100^2$, $m_0 = 0.02$ e $r = 14$.

para a condição inicial dispersa. Por outro lado, quanto maior o raio, maior é o valor inicial de Ω , o que demonstra claramente a presença de um cluster de volume significativo já nas primeiras iterações, como proposto. Já que as curvas tornam-se paralelas (na escala log-log) após o tempo microscópico, seu ajuste será equivalente, a menos de uma constante multiplicativa. Concluímos portanto que, para todos os valores estudados de raios, o comportamento de Ω segue uma função de tipo nucleação [veja a Eq. (5.15)]. Note que, como na análise para a magnetização, ocorre um aumento significativo no tempo microscópico, principalmente para o maior raio (magnetização totalmente concentrada).

A seguir, apresentamos simulações numéricas com raio fixo no modelo de Ising bidimensional. Para este caso, realizamos simulações numéricas em uma rede com volume $V = 100^2$, magnetização inicial $m_0 = 0.02$ e 50000 histórias diferentes com tempo total igual a 2000. Os dados para M e Ω são apresentados juntos, na Fig. 5.10 (o comportamento é o mesmo que o mostrado anteriormente, mas com melhor estatística). Como dito antes, o efeito da presença da região de spins concentrada aumentou o valor inicial de Ω , como esperado. Entretanto,

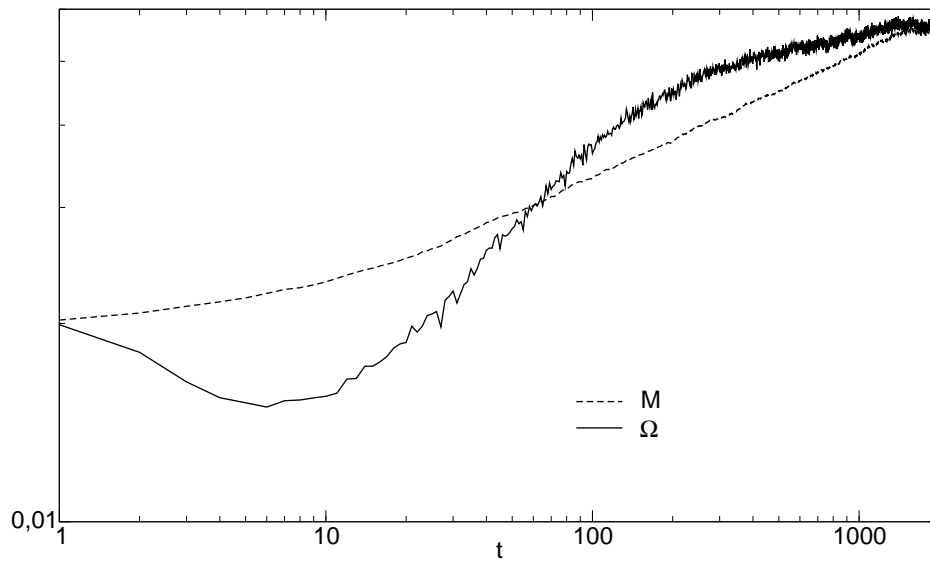


Fig. 5.10: Valores calculados para magnetização e Ω em uma rede bidimensional com $V = 100^2$ e $m_0 = 0.02$. Magnetização inicial concentrada.

este cluster inicial desmembrou-se com a evolução do sistema, acarretando um comportamento singular para o observável. Assim, a formação de um cluster de tamanho significativo nas primeiras iterações é perdida, o que causa uma queda do valor de Ω . Mesmo com o desmembramento do cluster inicial, os dados de Ω ajustam-se a uma função de tipo nucleação para tempos intermediários e coincidem com a magnetização M para tempos longos. Note que, neste caso, o tempo microscópico para a magnetização (ver ajustes na Tab. 5.4) é da ordem de 30 iterações. Ou seja, esta condição inicial retarda de modo mais significativo o início dos comportamentos de lei de potência para M e de nucleação para Ω .

5.2.3 Magnetização “unidimensional”

Para que a rede inicial tenha a magnetização m_0 , sabemos exatamente quantos spins devem ser positivos com o restante da rede quente. Estes spins podem ser espalhados pela rede ou concentrados em uma certa região, mas também pode-se estabelecer que as primeiras linhas da rede contenham apenas spins positivos. Assim, definimos a quantidade

$$l = V m_0, \quad (5.18)$$

Δt	$A (\times 10^{-2})$	θ	$\chi^2/d.o.f.$
8–100	1.547(8)	0.159(1)	0.53
10–100	1.549(8)	0.164(1)	0.34
15–120	1.484(5)	0.175(8)	0.11
20–120	1.458(4)	0.1792(7)	0.06
25–150	1.441(4)	0.1822(6)	0.05
30–150	1.442(5)	0.1821(8)	0.05
35–150	1.437(5)	0.1829(9)	0.05
40–150	1.425(6)	0.1847(9)	0.04

Tab. 5.4: Ajustes para a magnetização ($A t^\theta$). Condição inicial concentrada.

como o número de spins a serem postos nas primeiras linhas da rede, sendo imposto como “quente” o restante desta. Espera-se com isto, como no caso anterior, a formação de um cluster de volume significativo já nas primeiras iterações.

Δt	B	τ'	η	$\chi^2/d.o.f.$
2–100	0.101(3)	153(12)	0.621(4)	0.74
4–100	0.091(2)	118(8)	0.641(5)	0.57
6–100	0.090(3)	115(9)	0.643(6)	0.58

Tab. 5.5: Ajustes de Ω com a Eq. (5.15) para a condição inicial unidimensional. Dados para o caso $m_0 = 0.02$, $V = 100^2$.

Nesta condição inicial simulamos uma rede de Ising bidimensional com volume $V = 100^2$, magnetização inicial $m_0 = 0.02$ e 50000 histórias diferentes, por um tempo total igual a 1000. Os dados demonstram (veja a Fig. 5.11) que a presença da magnetização unidimensional acarretou em um valor inferior para o parâmetro de ordem de percolação Ω quando comparada com a magnetização

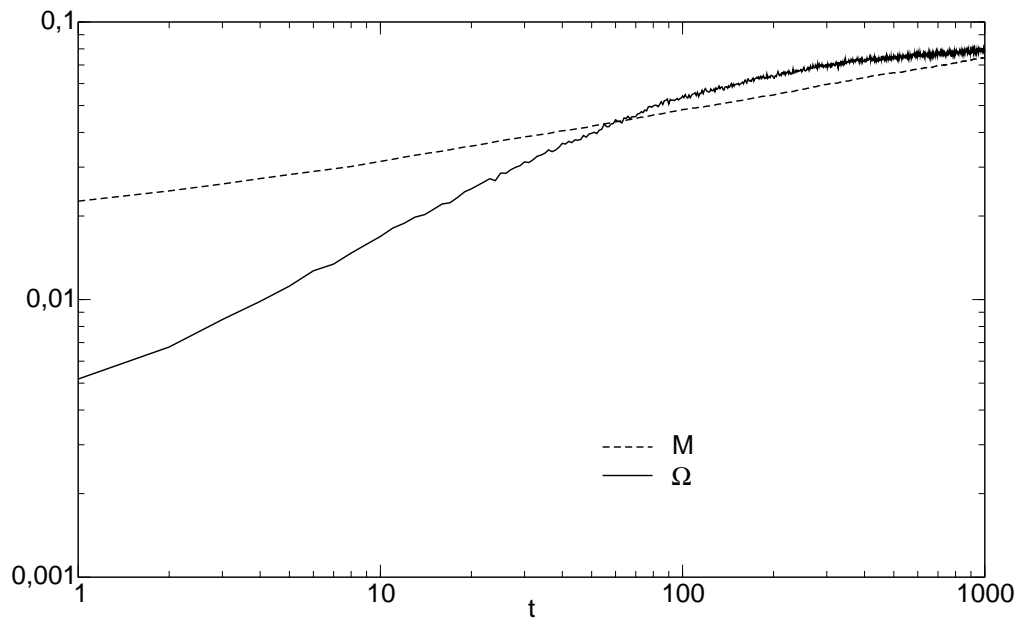


Fig. 5.11: Valores calculados para magnetização e Ω em uma rede bidimensional com $L = 100$ e $m_0 = 0.02$. Magnetização inicial unidimensional.

nos primeiros instantes de tempo. Ao contrário do ocorrido na condição inicial concentrada, a magnetização e Ω não iniciam suas evoluções temporais a partir de valores próximos. É possível ajustar a magnetização através de lei de potência, e o valor do expoente crítico dinâmico θ é comparável com a condição inicial dispersa neste volume de rede e magnetização inicial, como pode ser visto na Tab. 5.6, com o tempo microscópico da ordem de 6. Como nos casos anteriores, nos ajustes de Ω utilizamos uma função de nucleação [Eq. (5.15)] como pode ser visto na Tab. 5.5. Embora o tempo microscópico tenha aumentado significativamente para a condição inicial concentrada, nesta condição inicial isto não ocorre. O tempo microscópico é comparável ao da condição inicial dispersa.

5.2.4 Condição inicial mista

Aplicamos a técnica descrita na pág. 65 a fim de medir o expoente crítico dinâmico z para o modelo de Ising bidimensional através da Eq. (4.44)

$$F_2(t) = \frac{M^{(2)}(t)|_{m_0=0}}{[M(t)]^2|_{m_0=1}} \sim \frac{t^{(d-2\beta/\nu)/z}}{t^{-2\beta/z\nu}} = t^{d/z}.$$

Δt	$A (\times 10^{-2})$	θ	$\chi^2/d.o.f.$
3-100	2.103(4)	0.1796(5)	0.27
5-100	2.082(6)	0.1823(4)	0.11
7-100	2.671(3)	0.1836(4)	0.08
8-100	2.063(3)	0.1846(4)	0.06

Tab. 5.6: Ajustes para M com uma lei de potência ($A t^\theta$). Dados para o caso $m_0 = 0.02$, $V = 100^2$. Condição inicial unidimensional.

Os dados traçados na Fig. 5.12 resultaram em um valor para este expoente crítico compatível com os encontrados na literatura {veja Tab. 4.1 e [65, Tab. 1]}. Calculamos no caso $m_0 = 0$ o expoente crítico dinâmico $y = 0.829(4)$, utilizando a Eq. (4.37)

$$M^{(2)}(t)|_{m_0=0} \sim t^y.$$

Para o caso $m_0 = 1$, através da Eq. (4.35)

$$M(t)|_{m_0=1} \sim t^{-\beta/\nu z},$$

encontramos o expoente crítico dinâmico $z = 2.138(4)$. Os valores medidos para z e y concordam, dentro dos erros, com os listados na Tab. 4.1. Desta forma, verificamos diversos expoentes críticos dinâmicos encontrados na literatura para o parâmetro de ordem magnético.

Para a medida de z utilizando o parâmetro de ordem de percolação, definimos a quantidade

$$G_2(t) = \frac{\Omega^{(2)}(t)|_{m_0=0}}{[\Omega(t)]^2|_{m_0=1}} \sim t^{d/z'}, \quad (5.19)$$

em analogia com a Eq. (4.44). Nossos resultados demonstram, novamente, que o parâmetro de ordem de percolação não é livre de escala, como pode ser visto na Fig. 5.12. De fato, a função $G_2(t)$ acima ajusta-se a uma função tipo nucleação [Eq. (5.15)] sendo $B = 0.120(1)$, $\tau' = 124(1)$ e $\eta = 1.310(3)$ no

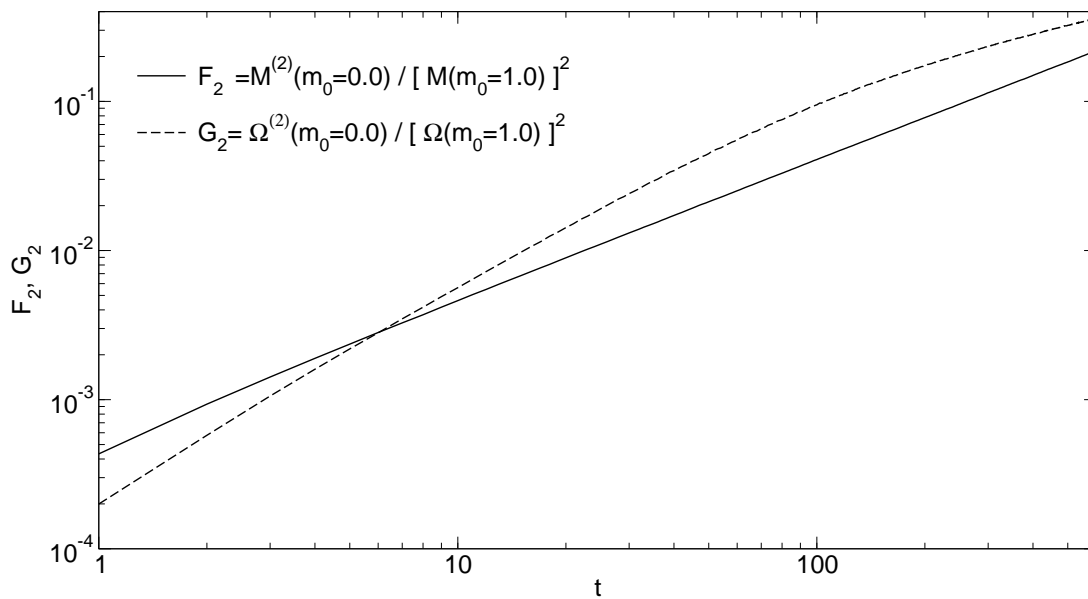


Fig. 5.12: Medida do expoente crítico dinâmico z através da Eq. (4.44) para o parâmetro de ordem magnético e de percolação. Simulação feita com $V = 100^2$ e 50000 histórias.

interlavo $\Delta t = 7 - 100$ com $\chi^2/d.o.f = 0.88$. Isto significa que esta técnica de medida independente do expoente crítico dinâmico z para o parâmetro de ordem de percolação não é aplicável, pois $G_2(t)$ não se comporta como lei de potência em tempos curtos.

5.2.5 Percolação de clusters geométricos

Como mencionamos na Seção 5.1, a temperatura crítica de percolação para o modelo de Ising bidimensional é a mesma que a temperatura crítica de percolação de sítios, apesar de os expoentes críticos serem diferentes. Desta forma, podemos determinar que no algoritmo de Hoshen e Kopelman elos entre spins iguais sejam colocados com probabilidade 1 e estudar os chamados clusters geométricos, a fim de verificar qual a sua dinâmica. Note que os elos entre spins iguais para clusters de Coniglio e Klein são distribuídos aleatoriamente, com a probabilidade dada pela Eq. (3.26). Assim, podemos estudar a dinâmica de percolação de clusters geométricos para o modelo de Ising

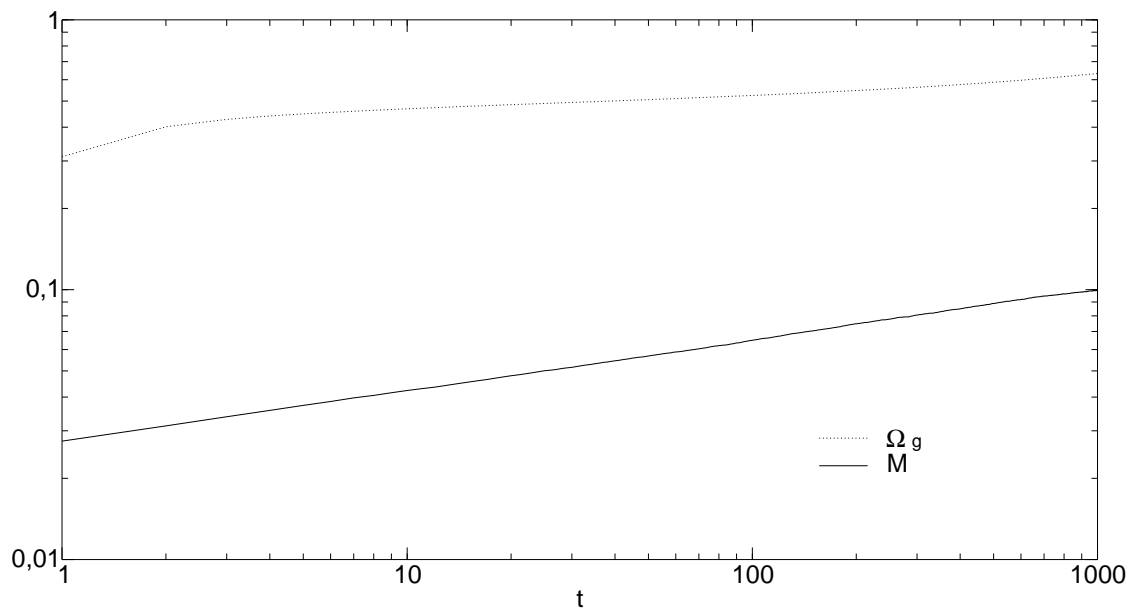


Fig. 5.13: Valores calculados para magnetização e Ω_g em uma rede bidimensional com $V = 100^2$ e $m_0 = 0.02$. Percolação de clusters geométricos.

bidimensional. Com esta abordagem em simulações numéricas do parâmetro de ordem Ω_g (geométrico) para percolação de clusters, procuramos por ajustes para o caso bidimensional com $V = 100^2$ e $m_0 = 0.02$ (dispersa), em 50000 histórias (veja Fig. 5.13). Claramente, a magnetização não muda em relação ao caso anterior de condição inicial dispersa.

Os dados para o parâmetro de ordem magnético resultam em um $\theta = 0.1842(1)$ no intervalo $\Delta t = 4 - 100$ com $\chi^2/d.o.f. \sim 0.20$, que é compatível ao resultado obtido anteriormente, e.g. com a condição inicial dispersa (veja a Tab. 5.1). Neste caso, o parâmetro de ordem de percolação (Ω_g) não foi bem ajustado nem por um comportamento de nucleação nem por lei de potência, estando mais próximo a este último, com expoente muito próximo de zero. Portanto, o tratamento numérico com esta definição para os clusters modifica o comportamento de Ω . De qualquer forma, este caso claramente não corresponde à transição física do modelo.

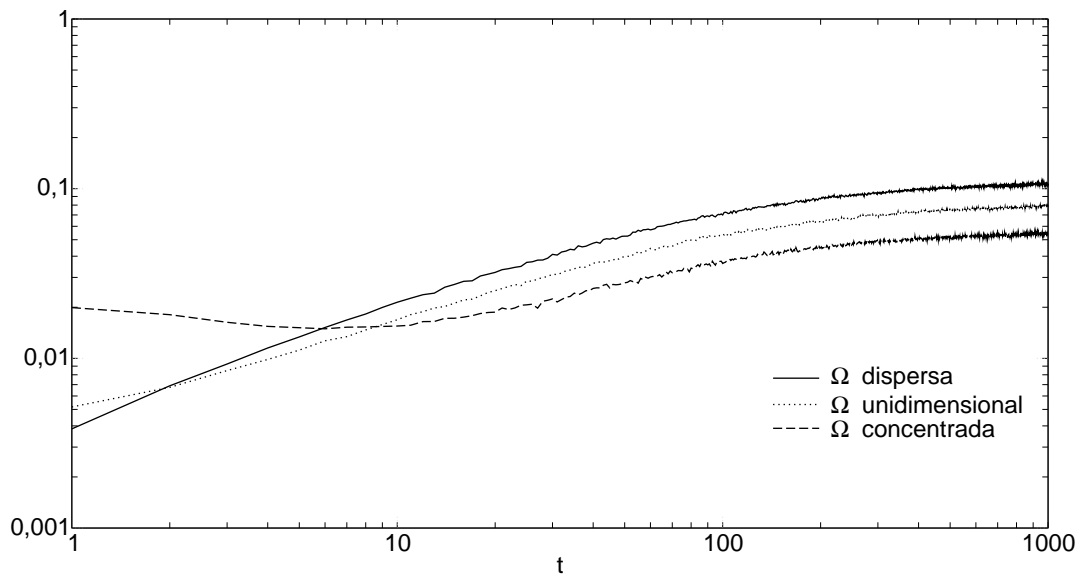


Fig. 5.14: Curvas de Ω para uma distribuição unidimensional, concentrada e dispersa. Rede quadrada com $V = 100^2$ para $m_0 = 0.02$ e 50000 histórias.

5.3 Conclusão

A análise dos resultados demonstrou que, independentemente da condição inicial adotada, a pressão do maior cluster Ω tem comportamento distinto da magnetização em tempos curtos. Em todas as condições iniciais estudadas a magnetização ajustou-se a uma lei de potência, enquanto Ω evoluiu como uma função de tipo nucleação (característica de transições de fase de primeira ordem). Claramente, para tempos longos foi comprovada a equivalência de Ω com a magnetização. Do ponto de vista prático, a definição do observável de percolação como Ω é mais conveniente que como Ω_P , pois considera a existência de um cluster grande, não necessariamente percolante [veja a Eq. (5.11)]. De fato, como $m_0 \ll 1$, a ocorrência de um cluster percolante nos instantes iniciais (primeiras iterações) não é favorecida, embora possa ocorrer um cluster grande que não era contabilizado no cálculo de Ω_P .

Indiferentemente da condição inicial adotada, o comportamento de Ω é o mesmo para tempos maiores que o tempo microscópico, como mostra a Fig. 5.14. Isto garante que a modificação na condição inicial interfere apenas

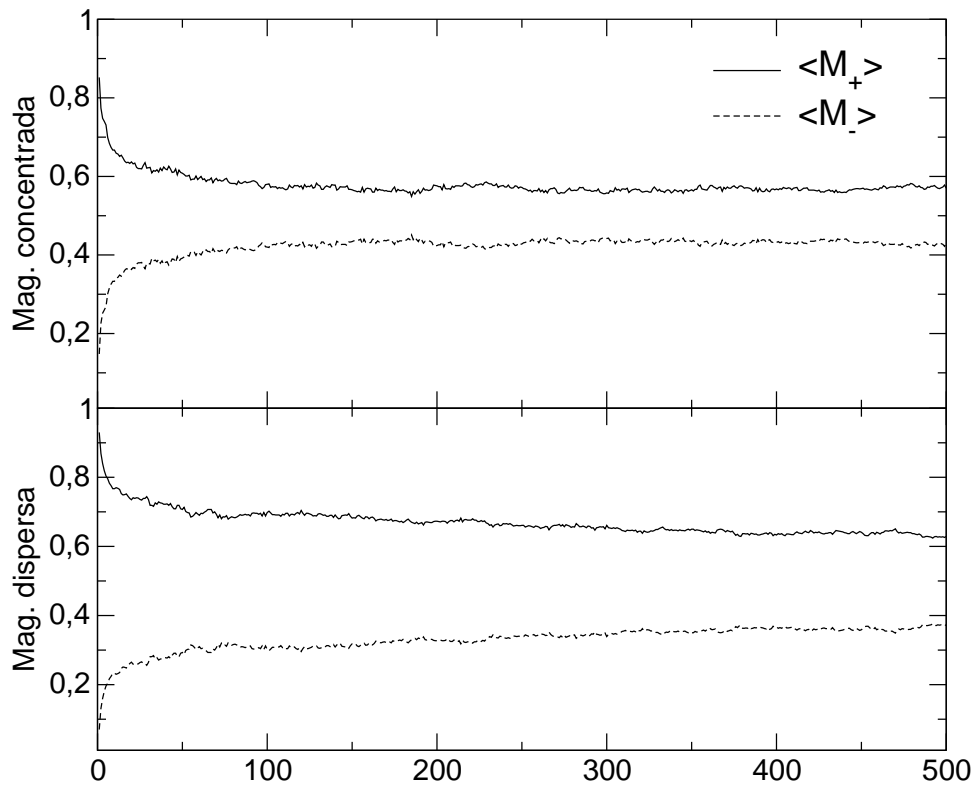


Fig. 5.15: Estatística da magnetização para diferentes condições iniciais para $V = 100^2$ e $m_0 = 0.02$.

nos primeiros instantes de tempo. De fato, o parâmetro de ordem de percolação é ajustado utilizando uma função de tipo nucleação, ao contrário do parâmetro de ordem magnético, que respeita uma lei de potência.

A modificação imposta na distribuição de spins inicial evidenciou a robustez do comportamento encontrado para o sistema. A partir de uma distribuição inicial concentrada, foi possível a formação de um cluster já nos primeiros instantes de tempo, e efeitos de tunelamento tornaram-se mais significativos em comparação com a distribuição inicial dispersa. Note que, na distribuição concentrada, só é possível a formação de um cluster de volume significativo em uma dada região da rede e portanto a probabilidade de tunelamento é maior. Isto não ocorre na distribuição dispersa, devido à possibilidade menor de formação de clusters grandes em todas as regiões da rede. Esta análise pode ser vista na Fig. 5.15

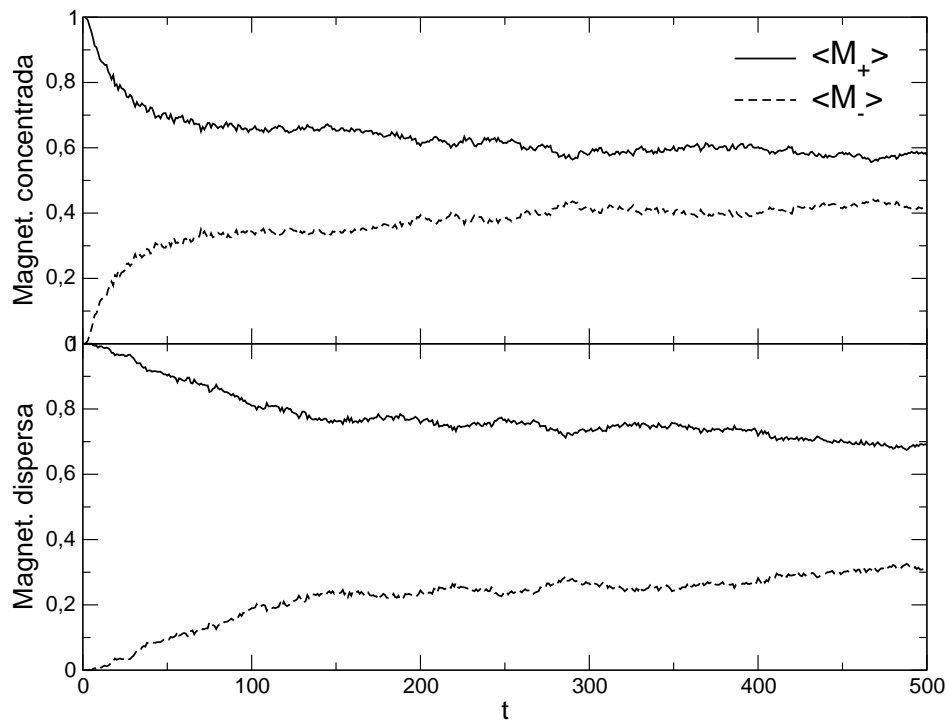


Fig. 5.16: Estatística da magnetização para diferentes condições iniciais para $V = 60^3$ e $m_0 = 0.02$.

para o caso bidimensional e Fig. 5.16 para o caso tridimensional. Nestas figuras temos as estatísticas dos valores da magnetização para as condições iniciais dispersa e concentrada. Note que o espaço entre as curvas que designam a magnetização positiva e negativa é menor para a condição inicial concentrada, demonstrando assim a ocorrência de mais tunelamentos nesta condição inicial.

Em nossas simulações numéricas para o modelo de Ising utilizamos nas diversas condições iniciais 50000 amostras independentes. A necessidade desta quantidade elevada de histórias temporais pode ser visualizada na Fig. 5.17. De fato, o uso de 10000 amostras resulta em um comportamento ruidoso para a magnetização em todo o intervalo temporal. Nesta mesma figura, à direita, temos o comportamento inicial da magnetização. Como é visível, o sistema apresenta um comportamento suave em tempos curtos (e longos) se empregarmos um número grande de amostras. Além disto, se usarmos uma quantidade pequena de amostras o erro estatístico será maior, ou seja, teremos uma curva ruidosa

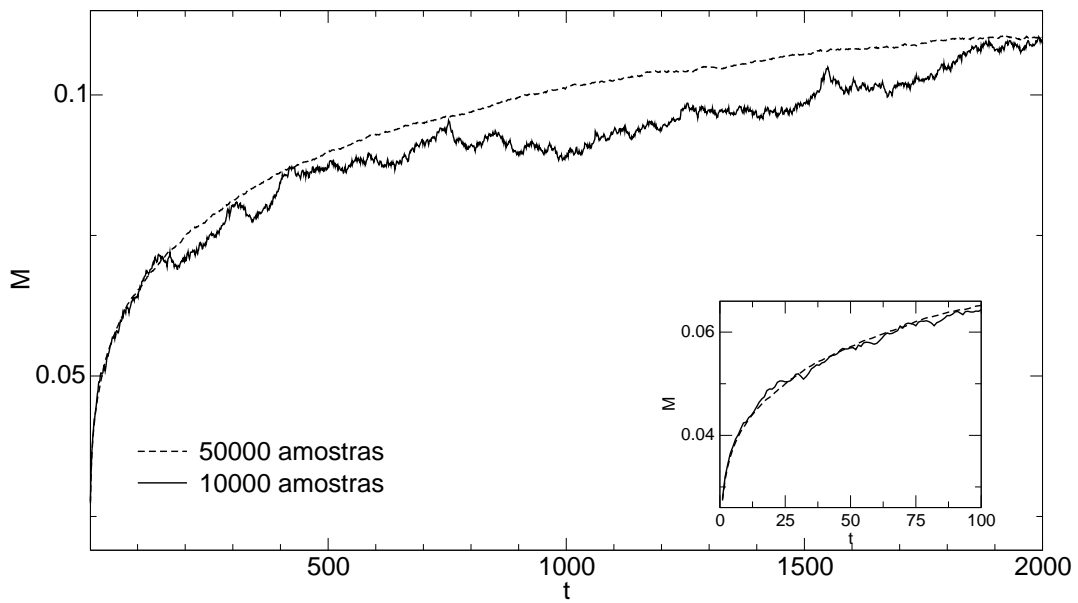


Fig. 5.17: Comparação do comportamento da magnetização de acordo com o número de amostras utilizadas no modelo de Ising bidimensional, sendo $V = 100^2$ e $m_0 = 0.02$ com condição inicial dispersa. Na linha tracejada temos os valores para 50000 amostras enquanto que na linha sólida temos 10000 amostras.

com barras de erros grandes. Para facilitar a visualização dos dados não apresentamos as barras de erros em ambas as curvas da referida figura. Como pode ser visto na fig. 5.2, os dados para o caso tridimensional do modelo de Ising apresentam menos ruído.

Capítulo 6

Modelo $O(4)$

Modelos de spins são amplamente empregados no estudo de transições de fase de segunda ordem. Existe uma variedade de modelos, sendo o mais popular deles o modelo de Ising, que já foi utilizado nas mais diversas situações, tanto em estudos estáticos [11] quanto dinâmicos (como visto no capítulo 4). Outro modelo que oferece um bom campo de estudo é o modelo $O(4)$. Neste modelo, a transição de fase de segunda ordem ocorre acima de duas dimensões (o modelo de Ising apresenta transição a partir de duas dimensões). Outra particularidade do modelo é que, utilizando argumentos de teoria de grupos [76], pode-se mostrar que o grupo $SU(2)$ divide-se em dois grupos $O(4)$. A simetria $SU(2)$ é importante para a descrição da transição de fase quiral na QCD com dois sabores [5]. A verificação desta previsão é um dos problemas em aberto na QCD a altas temperaturas.

6.1 Introdução

O Modelo $O(4)$ é regido por um hamiltoniano semelhante ao do modelo de Ising

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{H} \cdot \sum_i \vec{S}_i, \quad (6.1)$$

mas aqui cada spin \vec{S}_i é um vetor em quatro dimensões. A diferença crucial é que agora cada spin possui um número infinito de graus de liberdade, pois pode “girar” dentro de uma esfera de raio unitário de quatro dimensões. Note que a rede de spins pode ter d dimensões, mas em cada nó, ou sítio, da rede

colocamos um spin de $D (= 4)$ dimensões. Como foi dito acima (Cap. 2), a transição de fase de segunda ordem ocorre em $d \geq 3$. Aqui, não analisaremos outros valores de D .

O campo magnético desempenha um papel fundamental para a “observação” dos bósons de Goldstone, como será detalhado a seguir. No entanto, torna-se necessário definirmos algumas quantidades. Tal como no modelo de Ising, o parâmetro de ordem usado em simulações a campo zero do modelo $O(4)$ é o valor absoluto da magnetização

$$M = \sqrt{\overline{m^2}} = \sqrt{\left(\frac{1}{N} \sum_i \vec{S}_i\right)^2}, \quad (6.2)$$

onde \vec{S} é o spin $O(4)$ em uma rede com N sítios. No caso de termos um campo magnético aplicado, é conveniente escrevermos os spins decompostos em uma parte paralela e outra ortogonal

$$\vec{S}_k = S_k^{\parallel} \hat{H} + \vec{S}_k^{\perp}. \quad (6.3)$$

O parâmetro de ordem então é a magnetização paralela ao campo magnético

$$M = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \vec{S}_i \cdot \hat{H} \right\rangle. \quad (6.4)$$

Utilizando o tensor suscetibilidade

$$\chi_{\alpha\beta} = -\frac{\partial f}{\partial H_{\alpha} \partial H_{\beta}} \quad (6.5)$$

encontra-se a susceptibilidade paralela

$$\chi_{\parallel} = \frac{\partial M}{\partial H} = V (\langle S^{\parallel 2} \rangle - \langle S^{\parallel} \rangle^2), \quad (6.6)$$

e a susceptibilidade ortogonal

$$\chi_{\perp} = \frac{M}{H}, \quad (6.7)$$

para mais detalhes, consultar o Ap. D. Também é possível obter estas duas quantidades através da função de correlação de spins [32, Cap. 11].

Uma rápida análise da Eq. (6.7) evidencia a divergência da susceptibilidade ortogonal quando $H \rightarrow 0$ para todos os valores de temperatura menores que T_c . Não apenas a susceptibilidade ortogonal, mas também a paralela apresenta uma divergência para $2 < d \leq 4$ na curva de coexistência. Cálculos perturbativos mostram que $M \sim H^{d/2-2}$ para $2 < d < 4$. Para $d = 3$ [77],

$$\chi_{\parallel}(T < T_c, H) \sim H^{-1/2} \quad (6.8)$$

$$M(T < T_c, H) = M(T, 0) + cH^{1/2}. \quad (6.9)$$

Se o modelo $O(4)$ apresenta uma transição de fase de segunda ordem, é possível determinar uma temperatura crítica e expoentes críticos. Isto foi feito em grande parte por Kanaya e Kaya [78]. Estes autores mediram, através da intersecção do cumulante de Binder calculado para vários volumes de rede, a temperatura crítica

$$T_c = 1.06835(13), \quad (6.10)$$

e com outras análises os expoentes críticos estáticos

$$\begin{aligned} \nu &= 0.7479(90), \\ \beta &= 0.5129(11), \\ \gamma &= 1.9746(38). \end{aligned} \quad (6.11)$$

Esta transição de fase de segunda ordem sugere que alguma simetria do modelo foi quebrada. Abaixo, exploraremos os conceitos básicos envolvidos em uma quebra de simetria.

6.2 Quebra espontânea de simetria

Dentro de uma teoria física, muitas vezes mais importante que determinarmos equações de movimento, autovalores, etc, é analisarmos as simetrias envolvidas. Aqui, introduziremos argumentos necessários para o entendimento mínimo de como e onde ocorre esta simetria, e se ela é (e como) quebrada. Para tanto,

usaremos uma linguagem de teoria quântica de campos. Olhando para a equação de Schrödinger

$$\mathcal{H}\psi_n = c_n\psi_n, \quad (6.12)$$

sabemos que, para cada estado n , temos uma determinada energia c_n . Podemos definir o vácuo como o estado de mínima energia, ψ_0 . No entanto, pode ocorrer que o vácuo seja degenerado, para isto basta que a ele seja associado mais de um valor de energia. Para definirmos o que é uma quebra de simetria, é preciso anunciar o teorema de Coleman: Seja G um grupo de transformação que, ao agir no vácuo transforma-o nele mesmo. Neste caso o vácuo é dito *invariante*, do contrário *não-invariante*. Além disto, uma mudança do vácuo poderá acarretar em uma mudança na lagrangiana, se o vácuo é invariante, a lagrangiana também será, mas se o vácuo é não-invariante a lagrangiana também será não-invariante; dizemos que ocorreu uma quebra explícita de simetria. Ao contrário, ou seja, se o vácuo é não-invariante mas a lagrangiana é invariante, diz-se que ocorreu uma quebra espontânea da simetria [79, Cap. 3]. Pode ser mostrado, aplicando o teorema de Goldstone, que a quebra espontânea da simetria dá origem a uma partícula de massa nula, que chamamos de bóson de Goldstone.

6.2.1 Quebra espontânea de simetria global

Para exemplificar o que foi dito acima, vamos considerar a lagrangiana abeliana

$$\mathcal{L}(x) = (\partial_\nu\phi^*)(\partial^\nu\phi) - \mu^2\phi^*\phi - \lambda(\phi^*\phi)^2, \quad (6.13)$$

a qual é invariante sob transformações global no grupo $U(1)$

$$\begin{cases} \phi(x) \rightarrow \phi(x)' = e^{-i\alpha}\phi(x) \\ \phi^*(x) \rightarrow \phi^{*'}(x) = e^{i\alpha}\phi^*(x). \end{cases} \quad (6.14)$$

onde

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1(x) + i\phi_2(x)). \quad (6.15)$$

O hamiltoniano pode ser calculado a partir de

$$\mathcal{H}(x) = \pi(x)\dot{\phi}(x) - \mathcal{L}(x), \quad \text{sendo} \quad \pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(x)}, \quad (6.16)$$

ou seja

$$\mathcal{H}(x) = E = (\partial_0 \phi^*)(\partial^0 \phi) + (\nabla \phi^*) \cdot (\nabla \phi) + \mu^2 \phi^* \phi + \lambda(\phi^* \phi)^2. \quad (6.17)$$

Como $\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V}$, tiramos que o potencial é

$$\mathcal{V}(x) = \mu^2 \phi^* \phi + \lambda(\phi^* \phi)^2. \quad (6.18)$$

Para termos um potencial atrativo, exigimos que $\lambda > 0$, e dependendo dos possíveis valores de μ^2 , a simetria será ou não quebrada. Para $\mu^2 > 0$ os dois termos da Eq. (6.18) serão positivos definidos, e o potencial terá apenas um mínimo, ou um vácuo não degenerado, não ocorrendo a quebra espontânea da simetria, veja Fig. 6.1(a). O estado fundamental é único e não degenerado

$$\langle 0 | \phi(x) | 0 \rangle = 0. \quad (6.19)$$

No entanto, para $\mu^2 < 0$ ocorre a quebra espontânea da simetria, pois agora o estado de vácuo (mínimo do potencial), é infinitamente degenerado [veja a Fig. 6.1(b)]. O mínimo do potencial é calculado igualando a sua derivada em relação a ϕ (ou ϕ^*) a zero, resultando em

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{-\mu^2}{2\lambda}} e^{i\theta}. \quad (6.20)$$

Neste momento, a arbitrariedade na escolha da direção de θ evidencia a quebra espontânea de simetria. Fazendo $\theta = 0$, o que significa

$$\phi'_1 \rightarrow \phi'_1 = \phi_1 + a \quad (6.21)$$

$$\phi'_2 \rightarrow \phi'_2 = \phi_2, \quad (6.22)$$

sendo $a \equiv \sqrt{-\mu^2/\lambda}$, acarreta em uma redefinição da Eq. (6.15) como

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + a + i\phi_2), \quad (6.23)$$

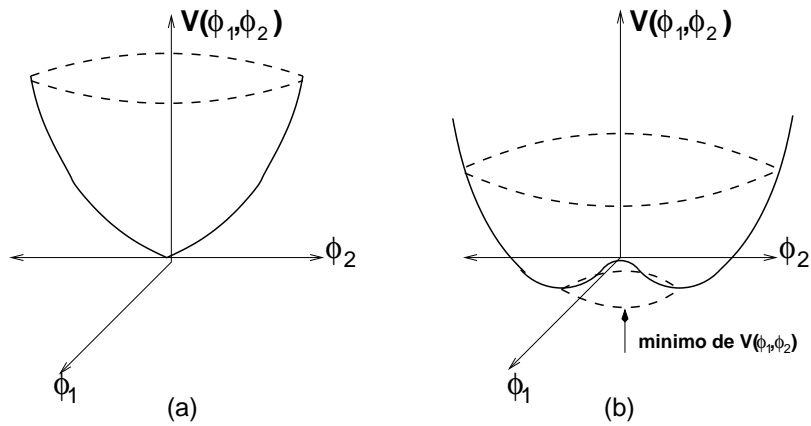


Fig. 6.1: Potencial (Eq. (6.18)): em (a) temos o caso $\mu^2 > 0$ e em (b) $\mu^2 < 0$.

que, ao ser substituída na Eq. (6.13) resulta em

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x) &= \frac{1}{2}(\partial_\nu \phi_1)(\partial^\nu \phi_1^*) + \frac{1}{2}(\partial_\nu \phi_2)(\partial^\nu \phi_2^*) \\ &- \frac{\lambda}{4}(\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 - a\lambda\phi_1(\phi_1^2 + \phi_2^2) - \frac{a^4}{4} - \frac{2a^2\lambda}{2}\phi_1^2. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Note que, na lagrangiana acima, temos termos cinéticos dos campos ϕ_1 e ϕ_2

$$\mathcal{L}_c(x) = \frac{1}{2} \{ (\partial_\nu \phi_1)(\partial^\nu \phi_1^*) - 2a^2\lambda\phi_1^2 + (\partial_\nu \phi_2)(\partial^\nu \phi_2^*) \}, \quad (6.25)$$

termos de interação entre eles

$$\mathcal{L}_i(x) = -\frac{\lambda}{4}(\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 - a\lambda\phi_1(\phi_1^2 + \phi_2^2), \quad (6.26)$$

e uma constante $a^4/4$. Este processo de quebra espontânea de simetria levou a uma lagrangiana para dois campos reais de spin zero [veja a Eq. (6.25)], do tipo Klein-Gordon, sendo um com massa $m_{\phi_1} = \sqrt{2a^2\lambda}$ e outro sem massa, $m_{\phi_2} = 0$, o qual chamamos de bóson de Goldstone {[80, Cap. 13] e [25]}.

6.3 Simetria quiral

Nesta seção, faremos uma breve revisão sobre simetria quiral e sua quebra. O objetivo é apresentar a teoria que esta por trás desta simetria. Nosso objetivo não

é abranger todos os tópicos relevantes, mas sim fazer uma rápida revisão sobre este assunto. Para mais detalhes, veja [81, 2]. Consideramos a lagrangiana

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x) = & i\bar{\Psi} \not{\partial} \Psi + ig\bar{\Psi} \vec{\tau} \gamma_5 \Psi + g\bar{\Psi} \Psi \sigma + \\ & + \frac{1}{2} [(\partial_\nu \phi)^2 + (\partial_\nu \sigma)^2] - \mathcal{V}(\sigma^2 + \phi^2) \end{aligned} \quad (6.27)$$

sendo

$$\mathcal{V}(\sigma^2 + \phi^2) = \frac{\mu^2}{2}(\sigma^2 + \phi^2) + \frac{\lambda^2}{4}(\sigma^2 + \phi^2)^2 \quad (6.28)$$

onde Ψ é um spinor sem massa, $\vec{\phi}$ é um campo pseudoescalar e σ um campo escalar, sendo que σ e $\vec{\phi}$ possuem massa m . A quantidade γ^5 é o produto das matrizes de Dirac e $\vec{\tau} = (\tau_1, \tau_2, \tau_3)$ onde τ_i são matrizes de Pauli.

$$\gamma^5 = i \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 \quad (6.29)$$

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}, \gamma^1 = \begin{bmatrix} 0 & \tau_1 \\ -\tau_1 & 0 \end{bmatrix}, \gamma^2 = \begin{bmatrix} 0 & \tau_2 \\ \tau_2^\dagger & 0 \end{bmatrix}, \gamma^3 = \begin{bmatrix} 0 & \tau_3 \\ \tau_3^\dagger & 0 \end{bmatrix} \quad (6.30)$$

$$\tau_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \tau_2 = \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}, \tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (6.31)$$

$$\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu. \quad (6.32)$$

Podemos fazer transformações nos campos deixando a lagrangiana invariante. Uma possível transformação é

$$\begin{cases} \Psi \rightarrow \Psi' = \Psi - \frac{i}{2}(\vec{\epsilon} \cdot \vec{\tau})\Psi \\ \vec{\phi} \rightarrow \vec{\phi}' = \vec{\phi} + (\vec{\epsilon} \times \vec{\phi}) \\ \sigma' \rightarrow \sigma' = \sigma \end{cases} \quad (6.33)$$

e é possível medir uma corrente, utilizando o teorema de Noether, se $\epsilon_i \ll 1$

$$\mathcal{J}^{\nu a} = (\phi \times \partial^\nu \phi)^a + \frac{1}{2} \bar{\Psi} \gamma^\nu \tau^a \Psi \quad \text{sendo } a = 1, 2, 3. \quad (6.34)$$

Desta forma, definimos uma carga

$$Q^a = \int d^3x \mathcal{J}^{\nu a}. \quad (6.35)$$

A transformação acima (Eq. (6.33)), é dita uma transformação de $SU(2)$, sendo que a transformação para Ψ e $\vec{\phi}$ corresponde a uma rotação no espaço de isospin sob um vetor isotrópico $\vec{\tau}$. Isto é necessário para a conservação do isospin da lagrangiana. No entanto, podemos definir outra transformação de $SU(2)$, tal que

$$\begin{cases} \Psi \rightarrow \Psi' = \Psi + \frac{i}{2}(\vec{\eta} \cdot \vec{\tau}) \gamma_5 \Psi \\ \vec{\phi} \rightarrow \vec{\phi}' = \vec{\phi} - \vec{\eta} \sigma \\ \sigma' \rightarrow \sigma' = \sigma - (\vec{\eta} \cdot \vec{\phi}) \end{cases} . \quad (6.36)$$

Desta forma, também podemos definir uma corrente axial

$$\mathcal{A}^{\nu a} = \frac{1}{2} \bar{\Psi} \gamma^\nu \gamma_5 \tau^a \Psi + (\sigma \partial^\nu \phi^a - \phi^a \partial^\nu \sigma), \quad (6.37)$$

e uma carga

$$Q^a = \int d^3x \mathcal{A}^{\nu a}. \quad (6.38)$$

No entanto o teorema de Goldstone exige que a massa do pión, m_ϕ , seja nula após a transformação, e isto só é possível se

$$\partial^\nu \mathcal{A}_\nu^a = 0, \quad (6.39)$$

que é conhecido como Hipótese da conservação parcial da corrente axial (PCAC).

Com estes dois tipos de cargas, podemos definir uma álgebra

$$[Q^a, Q^b] = i\epsilon_{abc} Q^c, \quad (6.40)$$

$$[Q^a, \mathcal{A}^b] = i\epsilon_{abc} \mathcal{A}^c, \quad (6.41)$$

$$[\mathcal{A}^a, \mathcal{A}^b] = i\epsilon_{abc} Q^c, \quad (6.42)$$

onde a Eq. (6.40) demonstra que Q^a são geradores de $SU(2)$; a Eq. (6.41) informa que \mathcal{A}^a transforma-se como um isovetor sob esta álgebra. Podemos simplificar esta álgebra introduzindo duas novas cargas

$$Q_R^a = \frac{1}{2} \{Q^a + \mathcal{A}^a\} \quad (6.43)$$

$$Q_L^a = \frac{1}{2} \{Q^a - \mathcal{A}^a\}, \quad (6.44)$$

que respeitam as seguintes regras de comutação

$$[\mathcal{Q}_R^a, \mathcal{Q}_R^b] = i\epsilon_{abc} \mathcal{Q}_R^c, \quad (6.45)$$

$$[\mathcal{Q}_L^a, \mathcal{Q}_L^b] = i\epsilon_{abc} \mathcal{Q}_L^c, \quad (6.46)$$

$$[\mathcal{Q}_R^a, \mathcal{Q}_L^b] = 0. \quad (6.47)$$

A relação de comutação (6.47) deixa claro que \mathcal{Q}_R^a e \mathcal{Q}_L^b comutam e as regras (6.45 e 6.46) demonstram que cada uma delas gera uma álgebra de $SU(2)$ separada. Então, temos uma álgebra $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$. Os índices R e L, representam a helicidade, respectivamente direita e esquerda, devido aos férmions. Uma simetria que possui cargas denominadas de direita e esquerda é chamada de simetria quiral.

6.3.1 Quebra da simetria quiral

Como visto na Seção 6.2.1, temos certos problemas quando estipulamos $\mu^2 < 0$ na lagrangiana. Aqui, se determinarmos $\mu^2 < 0$ na Eq. (6.27), o termo de potencial produzirá uma figura análoga à Fig 6.1 em quatro dimensões com um mínimo bem determinado

$$\varphi_0 \equiv \langle \sigma^2 + \phi^2 \rangle = \frac{-\mu^2}{\lambda^2}. \quad (6.48)$$

Neste número de dimensões não teremos um círculo, mas sim a superfície de uma esfera. Podemos proceder como feito na seção (6.2.1) e escolher uma dada direção

$$\langle \phi_0 \rangle = 0 \quad (6.49)$$

$$\langle \sigma_0 \rangle = \sqrt{\frac{-\mu^2}{\lambda^2}} \equiv v. \quad (6.50)$$

Substituindo $\sigma \rightarrow \sigma + v$ na Eq. (6.27) temos

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x) &= \bar{\Psi}(i \not{\partial} + gv)\Psi + ig\bar{\Psi}(\vec{\tau} \cdot \vec{\phi})\gamma_5\Psi + ig\bar{\Psi}\Psi\sigma + \frac{1}{2}[(\partial_\nu\phi)^2 + (\partial_\nu\sigma)^2] \\ &+ \mu^2\sigma^2 - \lambda^2\sigma v(\sigma^2 + \phi^2) - \frac{1}{4}\lambda^2(\sigma^2 + \phi^2)^2. \end{aligned} \quad (6.51)$$

Na lagrangiana acima, os spinores adquirem uma massa de $m_\psi = -gv$, o campo pseudoescalar ϕ é sem massa, o que dá origem a três bósons de Goldstone correspondentes as três direções perpendiculares à modificação em σ imposta para quebrar a simetria, sendo que o campo σ é massivo com $m_\sigma = \sqrt{-2\mu^2}$ e se acopla com ϕ .

6.4 Bóson de Goldstone no modelo $O(4)$

Como dito acima, os spins do modelo $O(4)$ são contínuos, portanto temos uma simetria de rotação envolvida. Como estamos lidando com produtos escalares de vetores quadridimensionais, as configurações possíveis sugerem que spins primeiros vizinhos se encontrem localmente alinhados, mas, a grandes distâncias este alinhamento é perdido, ou seja, a magnetização em média é nula. Estas configurações são chamadas de onda de spins (Fig. 6.4), que têm como particularidade uma energia muito baixa e tenderão a destruir a ordem do sistema, mesmo para temperaturas baixas. Como consequência, o modelo $O(4)$ não apresenta transição de fase usual em duas dimensões (teorema de Mermin-Wagner), apenas transição do tipo Kosterlitz-Thouless, no caso $O(2)$ que não será abordado aqui. Assim, a quebra de simetria contínua de rotação está associada a modos de Goldstone que causam divergências na suscetibilidade quando o campo magnético externo é nulo, não só na região crítica como também em toda a fase de baixas temperaturas. Lembrando que, a campo zero, no modelo de Ising a suscetibilidade era nula tanto para baixas quanto para altas temperaturas, tínhamos apenas uma divergência em T_c (comportamento crítico definido por um expoente crítico), portanto a suscetibilidade exibe um comportamento anômalo no modelo $O(4)$. Se aplicarmos um campo magnético externo ao modelo, determinaremos uma direção privilegiada no espaço de spins. Assim, a magnetização será o valor esperado das componentes dos spins na direção do campo [Eq. (6.4)]. Teremos então 3 modos de Goldstone, correspondentes às componentes transversas dos spins [82].

Note que o estado fundamental de qualquer teoria é aquele de mínima

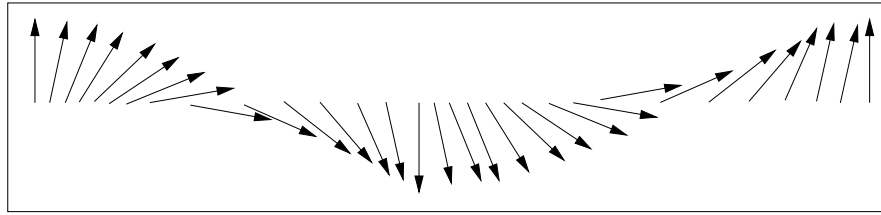


Fig. 6.2: Esquema de uma onda de spins.

energia. Para o modelo de Ising, isto ocorre quando todos os spins estão alinhados para cima ou para baixo. Para o modelo $O(4)$, o estado para temperaturas não nulas, é dado por uma onda de spin infinitamente degenerado, pois os spins possuem graus de liberdade contínuos. Em uma rede infinita, o comprimento de onda da onda de spin tende a infinito. De acordo com os modos de vibração desta onda, teremos bósons diferentes. A garantia que sejam bósons de Goldstone, pode ser dada se explorarmos a relação de Louis de Broglie

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad (6.52)$$

que no limite de $\lambda \rightarrow \infty$ implica em $m \rightarrow 0$.

6.5 O modelo $O(4)$ e a QCD com dois sabores

Espera-se que a transição de fase em altas temperaturas para a QCD com dois sabores de quarks não massivos seja guiada pela restauração da simetria quiral, através de um parâmetro de ordem com simetria $O(4)$ no limite do contínuo. Então, próximo à transição, teríamos propriedades de escala de um modelo de spins $O(4)$. Para quarks massivos ou temperatura não muito perto da temperatura de transição, há conjecturas de que o sistema se comporte como uma teoria de campo médio.

Supondo que a transição de fase da QCD seja de segunda ordem, isto sugere um comportamento universal para os observáveis termodinâmicos próximo à região de transição, significando que o grupo de simetria do parâmetro de ordem

e a dimensão do sistema determinam os expoentes críticos e a forma da parte singular da energia livre a partir da normalização das variáveis de escala. Os expoentes críticos do modelo $O(4)$ são conhecidos, Eq. (6.11), e já temos uma expressão definitiva para a energia, ou função de escala. A analogia entre a QCD e o modelo $O(4)$ fica mais clara se analisarmos os observáveis. Por exemplo, a energia e a magnetização do modelo $O(4)$ são

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{1}{dV} \frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta} \quad (6.53)$$

$$\langle \mathcal{M} \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial H}, \quad (6.54)$$

respectivamente, sendo \mathcal{Z} a função de partição

$$\mathcal{Z} = \int [d\vec{S}] \exp \left\{ \beta \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \vec{H} \cdot \sum_i \vec{S}_i \right\}. \quad (6.55)$$

Na QCD, como foi dito na Seção (2.2), usando resultados de QCD na rede encontra-se que a média sobre a plaqueta, análoga à energia, e o condensado quiral, análogo à magnetização, são respectivamente [83]

$$\langle \square \rangle = \frac{1}{6VN_\tau} \frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial g^{-2}} \quad (6.56)$$

$$\langle \bar{q}q \rangle = \frac{1}{2VN_\tau} \frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial am_q}, \quad (6.57)$$

sendo a o espaçamento da rede. Note que no caso da QCD com férmions dinâmicos discutido acima o loop de Polyakov — o parâmetro de ordem da transição de confinamento/desconfinamento para a QCD pura (veja Sec. 3.2.3) — não é mais o parâmetro de ordem da transição, já que o centro do grupo $SU(N)$ não é mais uma simetria da lagrangiana. De fato, observa-se um pico na suscetibilidade do loop de Polyakov com a temperatura, mas esse pico não corresponde a uma divergência no limite de volume de rede infinito, ou seja o pico “satura” a uma altura finita. Desta forma, considera-se a transição de fase quiral, tomando-se o condensado quiral como parâmetro de ordem. Acredita-se que a transição quiral na QCD coincida com a transição

L	$m_0 = 0.03$	$m_0 = 0.02$	$m_0 = 0.01$	$m_0 = 0.00$
30	0.147(1)	0.149(1)	0.150(1)	0.151(6)
60	0.148(4)	0.149(3)	0.151(1)	0.152(3)

Tab. 6.1: Expoente crítico dinâmico θ para o modelo $O(4)$. O valor de θ para $m_0 = 0$ é calculado por extrapolação.

de confinamento/desconfinamento. Como dito anteriormente, é previsto que a transição quiral da QCD com dois sabores seja de segunda ordem e ocorra na classe de universalidade do modelo $O(4)$. Este caso é de grande interesse físico, pois os dois sabores correspondem aos quarks leves, up e down [27]. Apesar de ter sido investigada em diversos estudos numéricos por vários grupos de pesquisa, esta questão encontra-se ainda em aberto [84], existindo inclusive evidências para uma transição de fase de primeira ordem [85].

6.6 Simulações em tempos curtos para o modelo $O(4)$

Empregando o algoritmo de banho térmico para o modelo de spins contínuos $O(4)$ (ou 4-vetorial) tridimensional introduzido no final da Seção 2.2, é possível calcularmos o expoente crítico dinâmico θ . Este modelo é definido pelo hamiltoniano [Eq. (2.17)]

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

quando não temos um campo magnético externo aplicado ao sistema, sendo os spins de Ising discretos substituídos por vetores unitários em quatro dimensões. Neste modelo a interação entre os spins continua sendo apenas entre primeiros vizinhos e \mathcal{J} é uma constante de acoplamento positiva.

Calculamos — pela primeira vez para um modelo de spins contínuos — o expoente crítico dinâmico θ . Para tanto, utilizamos redes de volumes 30^3 e 60^3 com três diferentes magnetizações iniciais m_0 (0.01, 0.02 e 0.03) para 5000

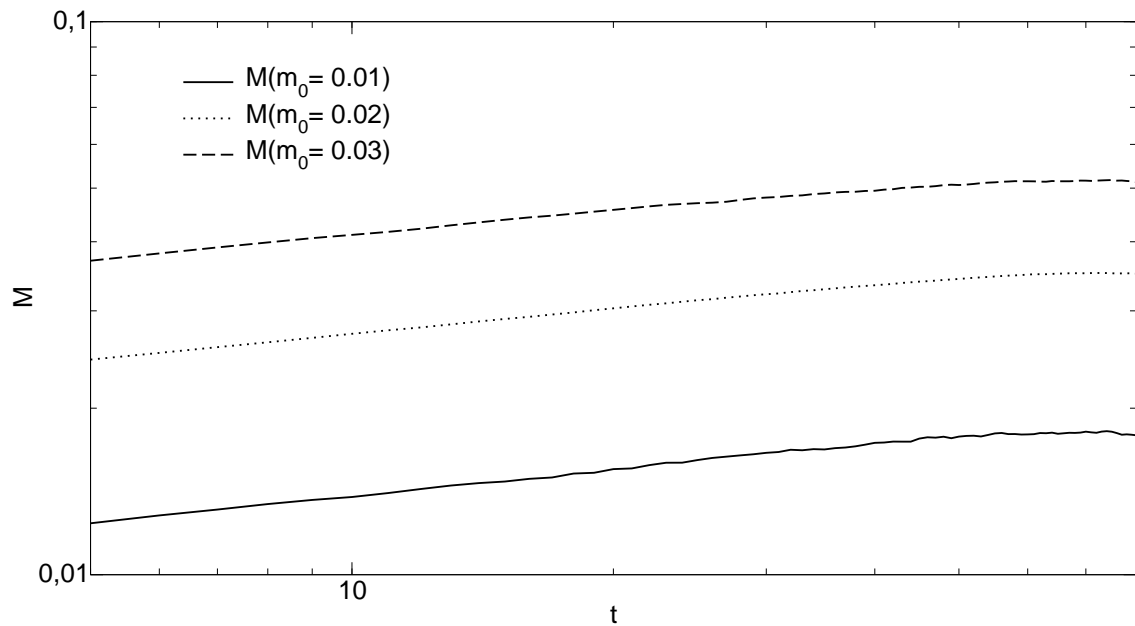


Fig. 6.3: Comportamento da magnetização para o modelo $O(4)$ em tempos curtos para $V = 60^3$, $m_0 = 0.01, 0.02$ e 0.03 com 5000 histórias.

histórias em um tempo total da evolução do sistema igual a 100. Os dados ajustaram-se muito bem a uma lei de potência, possibilitando assim a medida do expoente crítico dinâmico θ para cada m_0 adotada, como mostrado na Tab. 6.1. Conforme mencionado na pág. 65, devemos extrapolar o valor deste expoente crítico dinâmico para $m_0 \rightarrow 0$. Com este procedimento concluímos que

$$\theta = 0.152(3). \quad (6.58)$$

Na Fig. 6.3 temos o comportamento para a magnetização em $V = 60^3$ e os valores de m_0 s utilizados. Como pode ser visto, o comportamento da magnetização para tempos curtos é uma lei de potência. Note que, em nossos ajustes, não foi possível utilizar valores de magnetização para $t > 72$ no caso $m_0 = 0.01$, $t > 51$ no caso $m_0 = 0.02$ e para $t > 42$ no caso $m_0 = 0.03$, em ambos os volumes. De fato, como ilustrado na Fig. 4.1, o crescimento anômalo da magnetização é inicialmente uma lei de potência com expoente crítico dinâmico positivo (θ), mas logo após decai como uma lei de potência com expoente negativo ($-\beta/\nu z$). Nos dois volumes estudados, os valores dos tempos

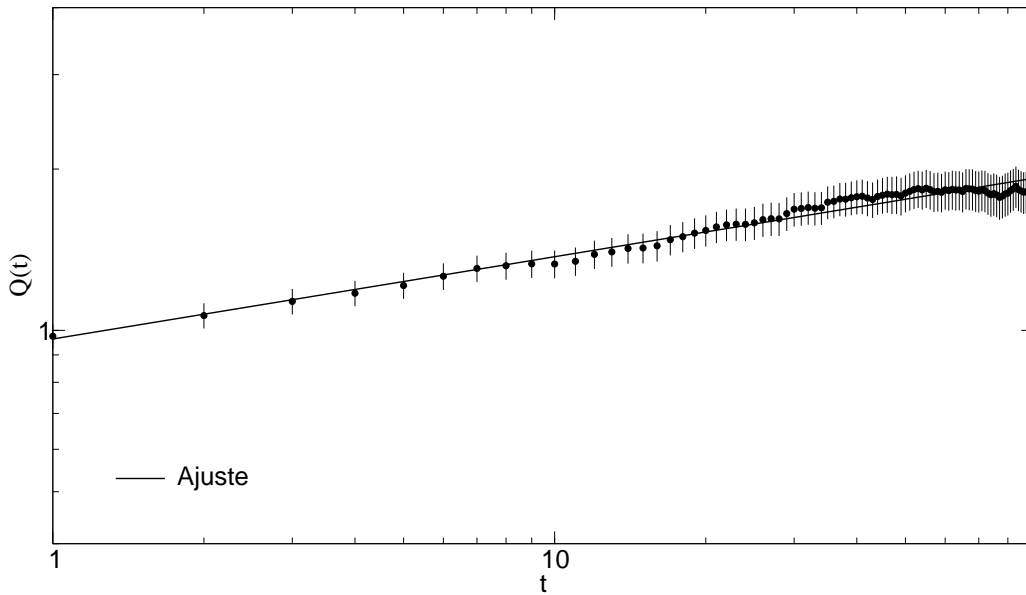


Fig. 6.4: Função de correlação temporal [Eq. (4.40)] o modelo de spins contínuos $O(4)$ em uma rede $V = 30^3$ com 5000 histórias. Obtemos $\theta = 0.153(2)$ com $\chi^2/d.o.f = 0.16$, no intervalo $\Delta t = 3 - 70$ (o ajuste é dado pela linha sólida na figura).

microscópicos são da ordem de 3 iterações para as três magnetizações iniciais estudadas.

Para evitar a extrapolação mencionada na pág. 65 para o cálculo do expoente crítico dinâmico θ para o modelo de spins contínuos $O(4)$, empregamos a técnica descrita em [63] medindo função de correlação temporal

$$Q(t) \equiv \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sum_j \vec{S}_i(t) \cdot \vec{S}_j(0) \right\rangle \sim t^\theta. \quad (6.59)$$

Desta forma, calculamos para uma rede cúbica com $V = 30^3$ e utilizando 5000 amostras e $m_0 = 0$,

$$\theta = 0.153(2). \quad (6.60)$$

Os dados e o ajuste são mostrados na Fig. 6.4.

6.6.1 Conclusão

Investigamos o comportamento em tempos curtos do parâmetro de ordem magnético no modelo de spins contínuos $O(4)$ em redes cúbicas. Nossos resultados demonstram que este observável exibe um comportamento de lei de potência nestas condições. De fato, como mencionado na Seção 4.2.2, o comportamento do parâmetro de ordem magnético é descrito por [Eq. (4.34)]

$$M(t) \sim m_0 t^\theta, \quad \theta \equiv (x_0 - \beta/\nu)/z,$$

lembrando que θ , x_0 e z são expoentes críticos dinâmicos, sendo β e ν expoentes críticos estáticos (ou de equilíbrio). Em nossas simulações numéricas — empregando a condição inicial dispersa — calculamos o expoente crítico dinâmico [Eq. (6.60)]

$$\theta = 0.153(2), \tag{6.61}$$

para o modelo de spins contínuos $O(4)$. Trata-se do primeiro cálculo desta quantidade para modelos de spins contínuos.

Note que, até o momento, não estamos considerando o parâmetro de ordem de percolação para este caso. Desta forma, não é necessário utilizarmos uma quantidade elevada de histórias temporais, pois como mencionado acima, os dados neste caso apresentam menos ruído. Além disto, há um número maior de graus de liberdade (devido às várias componentes e ao fato de utilizarmos rede cúbicas). Para as simulações numéricas do modelo de spins contínuos $O(4)$ utilizamos 5000 amostras para os dois volumes de redes estudados ($V = 30^3$ e 60^3) nas três magnetizações iniciais diferentes ($m_0 = 0.01, 0.02$ e 0.03). Desta forma, foi possível calcular com boa precisão o expoente crítico dinâmico θ [Eq. (6.58)]. Entretanto, este valor foi extrapolado, se desejamos uma medida direta deste expoente crítico dinâmico devemos empregar a Eq. (6.59), o que nos leva a $\theta = 0.153(2)$ [Eq. (6.60)].

Como ilustração, vejamos qual o efeito do uso de uma estatística pobre (poucas amostras) no cálculo do parâmetro de ordem magnético. Utilizando

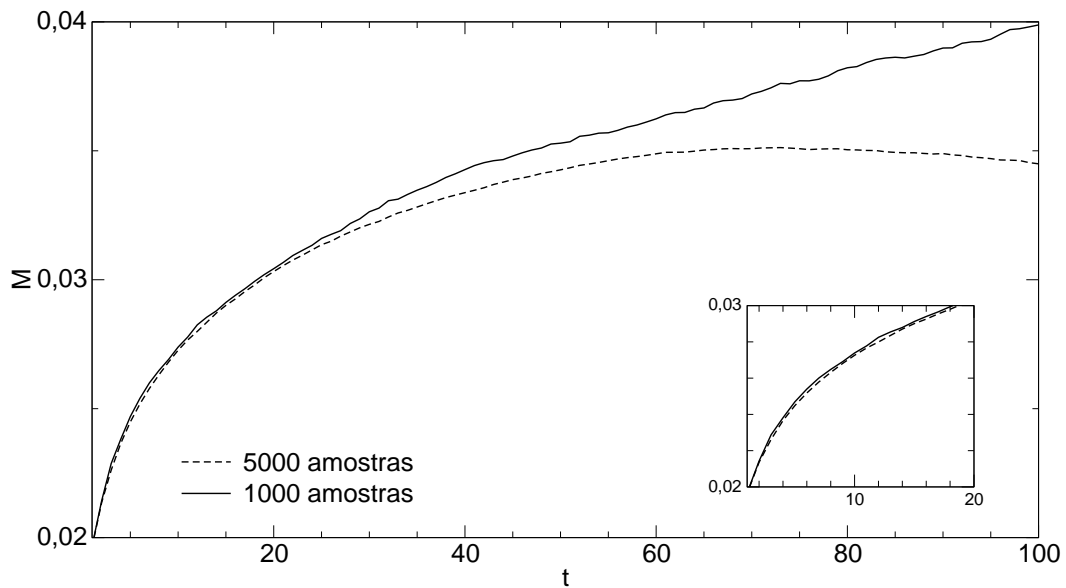


Fig. 6.5: Comparação do comportamento da magnetização de acordo com o número de amostras utilizadas no modelo de spins contínuos $O(4)$ tridimensional, sendo $V = 60^3$ e $m_0 = 0.02$ com condição inicial dispersa. Na linha tracejada temos os valores para 5000 amostras enquanto que na linha sólida 1000 amostras.

1000 amostras temos uma evolução temporal do parâmetro de ordem magnético excessivamente crescente, o que nos leva a super-estimar o valor do expoente crítico dinâmico θ , como mostra a Fig. 6.5. Em simulações tridimensionais é esperado que a curva do parâmetro de ordem decresça como $M(t) \sim t^{-\beta/z\nu}$, como previsto na Fig. 4.1 e demonstrado na Fig. 6.5. Observamos este decréscimo para o modelo de spins contínuos $O(4)$ em nossas simulações numéricas com 5000 histórias (note que para o modelo de Ising tridimensional este comportamento não foi observado para os valores de m_0s considerados). Embora para $t < 20$ o comportamento do parâmetro de ordem não apresente uma diferença significativa — como pode ser visto no gráfico menor à direita na Fig. 6.5 — devemos salientar que as barras de erros são maiores (estatística mais pobre) e o número de pontos para ajuste do expoente crítico dinâmico θ é pequeno.

Capítulo 7

Conclusão

Apresentamos nesta tese um estudo detalhado sobre fenômenos críticos em tempos curtos, através de uma dinâmica de banho térmico para observáveis magnéticos e de percolação (adotando o algoritmo de Hoshen-Kopelman para identificar os clusters da rede*). Partindo do fato de estes observáveis serem análogos em equilíbrio, testamos suas semelhanças fora do equilíbrio. Neste estudo adotamos o parâmetro de ordem magnético [Eq. (2.6)] e de percolação [Eqs. (5.10) e (5.11)] do modelo de Ising em duas e três dimensões, com diversas condições iniciais. Tais condições iniciais foram escolhidas de maneira a favorecer a formação de um conjunto de spins de Ising conectados (cluster) a partir das primeiras iterações, ou unidades de tempo de Monte Carlo, buscando para o parâmetro de ordem de percolação uma condição equivalente à de magnetização inicial m_0 . Também apresentamos a primeira medida do expoente crítico dinâmico θ para o modelo de spins contínuos $O(4)$, utilizando o algoritmo local de banho térmico.

Ressaltamos que, em estudos anteriores do comportamento dinâmico dos observáveis de percolação, foram investigados apenas clusters de tamanhos fixos — o que não representa um parâmetro de ordem para a teoria da percolação — os chamados n_s -clusters (descritos na pág. 38), os quais denotam o número médio de clusters (por sítio da rede) contendo s sítios cada. Tal abordagem não levou a ajustes temporais satisfatórios para esses observáveis [86]. Nesta tese realizamos o estudo dinâmico do parâmetro de

*Para mais detalhes sobre este algoritmo, veja o Ap. B.

ordem de percolação, que é um cluster de tamanho variável, dado pelo volume relativo do maior cluster da rede (parâmetro Ω) ou pelo volume relativo do cluster percolante (parâmetro Ω'). Tipicamente, o valor destes observáveis aumenta com o tempo na temperatura crítica, para um sistema finito e a partir de uma magnetização inicial pequena. Desta forma, obtemos bons ajustes para a descrição temporal de observáveis de percolação. No entanto, verificamos que os comportamentos destes observáveis diferem entre si e diferem qualitativamente do comportamento dinâmico da magnetização, apesar de serem equivalentes a ela em equilíbrio.

Os resultados listados no Cap. 5 mostram uma grande diferença no comportamento dos dois tipos de parâmetros de ordem em tempos curtos. A magnetização — como esperado — ajusta-se a uma lei de potência, com expoente crítico dinâmico θ , sendo portanto “livre de escala” (veja a Tab. 5.1). Entretanto, o parâmetro de ordem de percolação mostrou um comportamento bem diferente (em suas duas possíveis definições, Ω_P e Ω), para todas as condições iniciais testadas. Em particular, Ω_P e Ω apresentam uma escala de tempo, dada respectivamente por τ [Eq. (5.13) e Tab. 5.2] e τ' [Eq. (5.15) e Tab. 5.3] como mostrado na Seção 5.2.1 (pág. 76). Estas duas escalas de tempo podem ser associadas com o tempo de relaxação para o equilíbrio.

Observe que o comportamento do parâmetro de ordem Ω_P é um fator \sqrt{t} vezes a solução da equação da difusão unidimensional em um ponto fixo do espaço [75]. De fato, a expressão para a concentração de um material difusivo devido a mudança de seu potencial químico ao longo da direção x até uma posição x_0 é dada por

$$f(x) = \frac{C}{\sqrt{t}} \exp(-x^2/4Dt), \quad (7.1)$$

onde D é o coeficiente de difusão. Comparando com a forma usada para ajustar Ω_P [Eq. (5.13)]

$$f(t)_{\Omega_P} = A \exp(-\tau/t), \quad (7.2)$$

vemos que se multiplicarmos o parâmetro de ordem de percolação por \sqrt{t}

obtemos a solução da equação da difusão, identificando $x^2/4D$ com τ . O fator \sqrt{t} corresponde ao comprimento de difusão em um caminho aleatório no tempo t . Além disto, a posição fixa x_0 é proporcional a \sqrt{t} , isto é, aproximadamente o comprimento da rede (desde que $\tau \sim L^z$, como já mencionado). Isto relaciona a ocorrência e a intensidade da percolação no tempo t com a probabilidade da existência de um caminho aleatório de tamanho L após t passos de Monte Carlo. Este parâmetro de ordem de percolação foi estudado somente na condição inicial dispersa no modelo de Ising bi e tridimensional.

O comportamento do parâmetro de ordem Ω é similar a uma fração de volume de um sistema de partículas em um processo de nucleação e crescimento [75] em todas as condições iniciais utilizadas. Notamos que tais processos são típicos de transições de fase de primeira ordem, enquanto que a transição física para o modelo de Ising bi e tridimensional é contínua (segunda ordem). Em particular, o comportamento da função de ajuste do parâmetro de ordem de percolação Ω [Eq. (5.15)]

$$g(t)_\Omega = B \{1 - \exp[-(t/\tau')^\eta]\}, \quad (7.3)$$

é observado em transições dinâmicas de fase de primeira ordem fracas, como discutido em [87]. Nesta referência, a dinâmica crítica de um estado meta-estável de um campo escalar foi investigada com uma equação de Langevin (modelo A) [59]. Neste contexto nossos resultados para o parâmetro de ordem Ω ilustrariam que, para a mesma dinâmica[†] fundamental, o comportamento em tempos curtos depende especificamente do observável.

Utilizando a técnica descrita em [63], calculamos através da função de correlação temporal para o modelo de Ising bidimensional o expoente crítico dinâmico $\theta = 0.186(4)$ em uma rede $V = 100^2$ com 30000 histórias, verificando assim o previsto na literatura considerando os erros (veja a Fig. 7.1). Note que este valor para o expoente crítico dinâmico θ está de acordo com o calculado na Tab. 5.1 para o maior volume de rede ($V = 250^2$) e menor m_0 (0.02) estudados.

[†]A dinâmica do algoritmo de banho térmico é englobada no modelo A

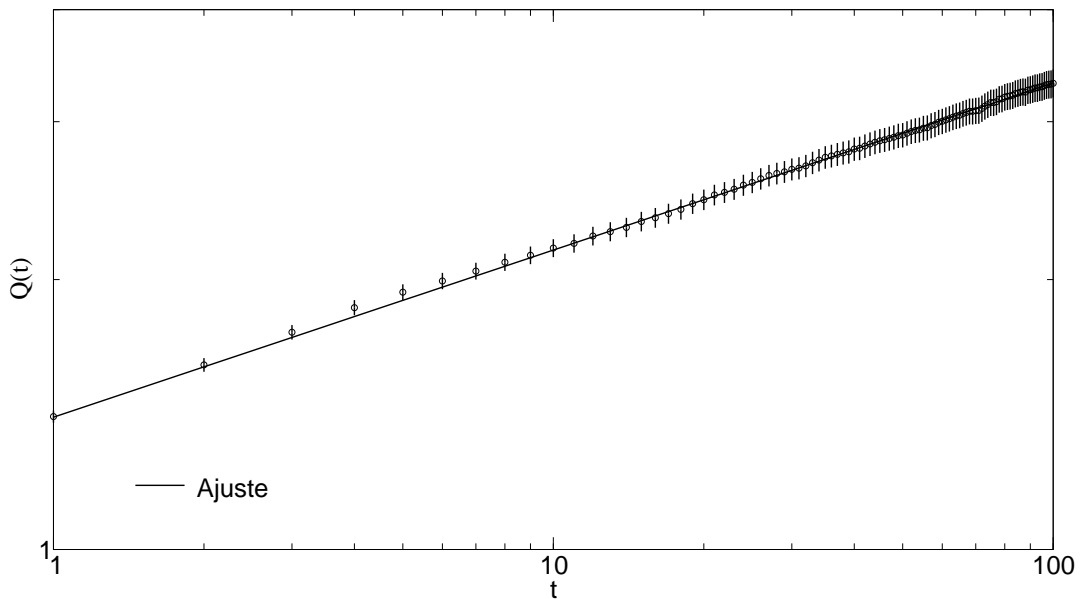


Fig. 7.1: Função de correlação temporal [Eq. (4.40)] para o modelo de Ising bidimensional, em uma rede $V = 100^2$ com 30000 histórias. Resultando em $\theta = 0.186(4)$ com $\chi^2/d.o.f = 0.11$ (o ajuste é dado pela linha sólida na figura).

Demonstra-se assim a eficácia do método desenvolvido em [63], pois para uma rede menor que a utilizada na Tab. 5.1 (e menos histórias) encontramos um valor próximo a $\theta = 0.188(1)$, o qual é apresentado na literatura para o modelo de Ising bidimensional em redes menores (com mais histórias) com o emprego deste método [64]. Por outro lado, não foi possível empregar o método para o parâmetro de ordem Ω , já que o mesmo não apresenta comportamento dado por lei de potência.

Na tentativa de encontrar um comportamento como lei de potência para o parâmetro de ordem de percolação, consideramos o comportamento de Ω com várias condições iniciais diferentes. Na condição inicial concentrada, seção 5.2.2 (pág. 83), mostramos o comportamento de Ω (Fig. 5.10) para redes de Ising bidimensionais. Mesmo favorecendo a existência de um cluster de tamanho significativo nos instantes iniciais, o parâmetro de ordem Ω não evolui como uma lei de potência e sim como um fenômeno de nucleação, que é típico de uma transição de primeira ordem. Seu expoente crítico dinâmico mostra uma escala

tal qual na condição inicial dispersa. No entanto, há um aumento significativo no tempo microscópico. Outra condição inicial testada foi a unidimensional, seção 5.2.3 (pág. 87). Nesta o efeito da região com magnetização inicial m_0 é mais tênue, mas contribui também para o aumento do tempo microscópico. Na condição inicial concentrada, a região reservada com magnetização inicial m_0 causou um aumento no valor de Ω de tal modo que $\Omega \sim M$ nos instantes iniciais (veja a Fig. 5.10). Agora, para a condição inicial unidimensional a presença da região (linhas) aumentou o valor de Ω , mas não o suficiente para comparar-se com a magnetização. Como nas condições iniciais anteriores Ω (Fig. 5.11) também exibe uma evolução típica de um fenômeno de nucleação para a condição inicial unidimensional. Fica evidenciada portanto a robustez do comportamento dinâmico (tipo nucleação) encontrado.

Ao tratar o problema como uma simples percolação de sítios, como detalhado na Sec. 5.2.5, parece ser possível o ajuste de leis de potência para o parâmetro de ordem de percolação em duas dimensões. Embora o expoente crítico dinâmico θ do parâmetro de ordem magnético seja 0.190(2) [64], o valor do expoente crítico para o parâmetro de ordem de percolação, com as mesmas condições iniciais, é de aproximadamente zero (~ 0.05). Claramente, não é esperado que o parâmetro de ordem para a percolação de clusters geométricos seja equivalente à magnetização. Neste caso, os tempos microscópicos para ambas as quantidades são compatíveis [veja a Fig. (5.13)].

Como mencionamos acima, estamos acompanhando uma evolução dinâmica de banho térmico. Nesta dinâmica procuramos os observáveis de percolação com o algoritmo de Hoshen-Kopelman. Outra possibilidade é evoluirmos o sistema com uma dinâmica de clusters. Para tanto devemos utilizar, por exemplo, o algoritmo de Swendsen e Wang[‡] (para mais detalhes veja pág. 44). A característica básica deste algoritmo é a eliminação do *critical slowing down* em simulações numéricas realizadas na temperatura crítica. De fato, nossos testes mostram que os observáveis do sistema vão rapidamente para seu valor

[‡]Outra possibilidade é empregar o algoritmo de Wolff.

de equilíbrio, impossibilitando uma análise de tempos curtos.

Em nossas simulações numéricas para spins contínuos empregando o algoritmo de banho térmico para o modelo $O(4)$ tridimensional, calculamos o expoente crítico dinâmico $\theta = 0.153(2)$ [Eq. (6.60)]. Lembramos que para este modelo estudamos apenas o parâmetro de ordem magnético. Isto demonstra que o parâmetro de ordem deste modelo também apresenta uma lei de potência em tempos curtos. Esta informação é relevante para o entendimento da transição de fase da QCD a temperatura finita com dois sabores de quarks leves, como mencionamos no Cap. 3.

Em um futuro próximo aplicaremos uma análise de tempos curtos para o modelo de spins contínuos $O(4)$, a fim de explorar o comportamento do parâmetro de ordem de percolação Ω . Além de refinarmos a medida do expoente crítico dinâmico θ para o parâmetro de ordem magnético. Como também, calcularmos os demais expoentes críticos dinâmicos deste modelo. Até o momento não existem informações sobre a equivalência dos parâmetros de ordem magnéticos e de percolação neste modelo e nem se esta possível desigualdade influenciaria os modos de Goldstone. Como dito anteriormente, este estudo é de interesse para a compreensão da transição de fase sofrida pela QCD a temperatura finita com dois sabores de quarks leves.

Apêndice A

Grupo de renormalização

O propósito deste apêndice é apresentar a teoria do grupo de renormalização de uma maneira bem simples. Aqui faremos uma aplicação das idéias do grupo de renormalização utilizando o modelo de Ising em uma e duas dimensões. A principal aplicação do grupo de renormalização é a medida dos pontos e expoentes críticos vinculados a certos observáveis termodinâmicos na região crítica. A teoria desenvolvida por Wilson [88] aplica-se a compreensão das transições de fase. No entanto, sua generalidade permite a sua utilização em situações que vão além disto. Neste ponto de vista, grupo de renormalização pode ser visto como uma extensão, e implementação, das idéias de Kadanoff e da chamada *transformação de Kadanoff* [89]. Uma parte considerável deste apêndice inspirou-se na Ref [90].

A.1 Modelo de Ising unidimensional

A aplicação do grupo de renormalização consiste em diminuir o número de graus de liberdade na rede, ou seja, realizar a soma de alguns spins. Para ficar mais claro, vamos escrever a função partição para o modelo de Ising com N spins,

$$\mathcal{Z}(N, K) = \sum_{\{S\}} \exp\left\{K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j\right\}, \quad (\text{A.1})$$

sendo $K = J\beta$. Esta expressão também pode ser escrita como

$$\mathcal{Z}(N, K) = \sum_{\{S\}} e^{K(S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + \dots + S_{N-1} S_N)} \quad (\text{A.2})$$

$$= \sum_{\{S\}} e^{K(S_1 S_2 + S_2 S_3)} e^{K(S_3 S_4 + S_4 S_5)} \dots e^{K(S_{N-2} S_{N-1} + S_{N-1} S_N)} \quad (\text{A.3})$$

lembrando que cada spin de Ising pode ter apenas valores ± 1 . Se somarmos todos os valores possíveis de todos os spins pares, teremos

$$\mathcal{Z}(N, K) = \sum_{S_1, S_3, \dots} \{ [e^{K(S_1 + S_3)}] \times [e^{-K(S_1 + S_3)}] \} \dots \quad (\text{A.4})$$

Esta nova função de partição é para um modelo de Ising com $N/2$ spins e uma possível constante de acoplamento K . Se este reescalonamento é possível, podemos obter, em princípio, uma relação de recorrência na qual calculamos $\mathcal{Z}(N, K)$ a partir de um sistema com outra constante de acoplamento. Então procuramos uma função de K , $f(K)$ e uma nova constante K' tais que:

$$e^{K(S_i + S_j)} + e^{-K(S_i + S_j)} = f(K) e^{K' S_i S_j}, \quad (\text{A.5})$$

para todo $S_i, S_j = \pm 1$. Desta forma teríamos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(N, K) &= \sum_{\{S\}} [f(K) e^{K' S_1 S_3}] \dots \\ &= [f(K)]^{N/2} \mathcal{Z}(N/2, K'), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

que seria a desejada relação de recorrência. Esta transformação é conhecida como transformação de Kadanoff. Precisamos determinar agora K' e $f(K)$.

Utilizando a condição $S_i, S_j = \pm 1$ na Eq. (A.5), temos

$$\begin{cases} e^{2K} + e^{-2K} = f(K) e^{K'} & , S_i = S_j \\ 2 = f(K) e^{-K'} & , S_i \neq S_j \end{cases}, \quad (\text{A.7})$$

este sistema é solúvel correspondendo a

$$K' = \frac{1}{2} \ln \{ \cosh(2K) \}, \quad (\text{A.8})$$

$$f(K) = 2\sqrt{\cosh(2K)}, \quad (\text{A.9})$$

ou

$$K = \frac{1}{2} \cosh^{-1}(e^{2K'}), \quad (\text{A.10})$$

$$f(K) = 2e^{K'}. \quad (\text{A.11})$$

A energia livre de Helmholtz pode ser escrita como

$$F = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{N} \ln(\mathcal{Z}), \quad (\text{A.12})$$

no ensemble canônico [91]. Aqui vamos considerar

$$\ln(\mathcal{Z}) = Ng(K). \quad (\text{A.13})$$

Usando a Eq. (A.6), temos

$$\begin{aligned} \ln(\mathcal{Z}) &= \frac{N}{2} \ln(f(K)) + \ln(\mathcal{Z}(N/2, K')) = Ng(K) \\ &\vdots \\ g(K) &= \frac{1}{2} \ln(f(K)) + \frac{1}{2}g(K'), \text{ sendo } g(K') = \frac{2}{N} \ln(\mathcal{Z}(N/2, K')) \\ g(K') &= 2g(K) - \ln\{2\sqrt{\cosh(2K)}\}, \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

onde usamos $f(K) = 2\sqrt{\cosh(2K)}$, ou

$$g(K) = \frac{1}{2}g(K') + \frac{1}{2}[\ln(2) + K']. \quad (\text{A.15})$$

As Eqs. (A.8) e (A.14) são resultados diretos do grupo de renormalização em espaço real [17].

A aplicação sucessiva das equações do grupo de renormalização pode ser representada por um diagrama de fluxo. Cada iteração feita com a Eq. (A.10), a partir de um $K \ll 1$, leva a valores maiores de K , ou seja: com um determinado K' (0.01, por exemplo) calculamos K ($= 0.1003$). Este novo valor de K passa a ser K' , que será usado para calcular K e assim podemos construir a Tab. A.1, extraída de [90] e [92]. Desta forma, o diagrama de fluxo leva a um valor infinito de K . Mas se usarmos a Eq. (A.8) partindo de um $K \sim \infty$, o processo de iteração nos guiará a $K \sim 0$. Isto indica que não temos um valor crítico de K no modelo de Ising unidimensional. Estes dois valores finais de K (0 e ∞) são os camados pontos fixos. Para K igual a zero (respectivamente ∞) a rede é desordenada (ordenada). Quando a rede é ordenada cada região dela é igual às demais, independentemente do tamanho da escala escolhida. Para a rede desordenada este argumento também é válido. Esta invariância de escala é uma

K	grupo de renormalização, $g(K)$	valor exato
0.01	$\ln(2)$	0.693197
0.100334	0.698147	0.698172
0.327447	0.745814	0.745827
0.636247	0.883204	0.883210
0.972709	1.106299	1.106302
1.316710	1.386078	1.386080
1.662637	1.697968	1.697968
2.009049	2.026876	2.026877
2.355582	2.363536	2.364537
2.702146	2.706633	2.706634

Tab. A.1: Valores de $g(K)$ para o modelo de Ising unidimensional. O valor exato é calculado com $\mathcal{Z} = (2 \cosh(J\beta))^N$, veja [90] e [92].

constatação direta dos pontos fixos do grupo de renormalização. Em um sistema que exibe uma transição de fase de segunda ordem, estes pontos fixos não serão tão simples, pois deve haver uma convergência a um dado ponto crítico (K_c). Para exemplificar, vamos utilizar o modelo de Ising bidimensional.

A.2 Modelo de Ising bidimensional

A partir da rede bidimensional, definimos duas novas redes, uma com os spins que serão contados (bolinhas cinzas na Fig. A.1), e outra com os que não serão contados (bolinhas pretas na Fig. A.1). Assim, esta nova rede pode ser vista como uma rotação de 45° da rede original. A função de partição pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z} &= \sum_{\{S\}} \dots [e^{KS_5(S_1+S_2+S_3+S_4)}] [e^{KS_6(S_2+S_7+S_8+S_3)}] \dots \quad (\text{A.16}) \\
 &= \sum_{\text{restantes}} \dots [e^{K(S_1+S_2+S_3+S_4)} + e^{-K(S_1+S_2+S_3+S_4)}]
 \end{aligned}$$

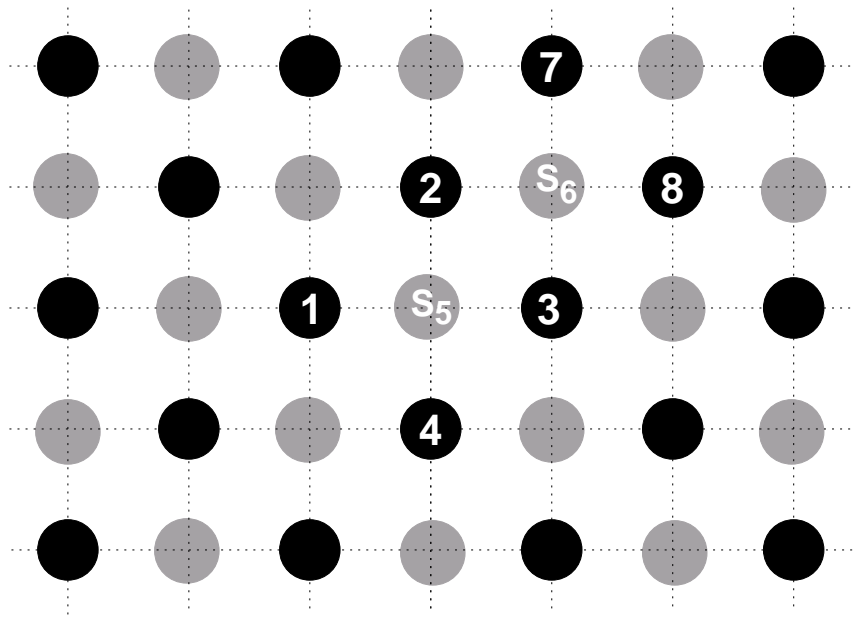


Fig. A.1: Novas redes de Ising bidimensional. Em vermelho(preto) os spins que seramento contados(não contados).

$$\times [e^{K(S_2 + S_7 + S_8 + S_3)} + e^{-K(S_2 + S_7 + S_8 + S_3)}] \dots \quad (\text{A.17})$$

Intuitivamente, escrevemos a transformação de Kadanoff

$$e^{K(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)} + e^{-K(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)} = f(K)e^{K'(S_1S_2 + S_1S_4 + S_2S_3 + S_3S_4)}, \quad (\text{A.18})$$

mas temos quatro possibilidades

$$\begin{aligned} S_1 = S_2 = S_3 = S_4 = \pm 1 \\ S_1 = S_2 = S_3 = -S_4 = \pm 1 \\ S_1 = S_2 = -S_3 = -S_4 = \pm 1 \\ S_1 = -S_2 = S_3 = -S_4 = \pm 1, \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

o que deixa claro que precisamos de mais fatores K_s na transformação de Kadanoff. Uma possibilidade é definir

$$\begin{aligned} e^{K(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)} + e^{-K(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)} \\ = f(K) \exp\left[\frac{K_1}{2}(S_1S_2 + S_2S_3 + S_3S_4 + S_4S_1) \right. \\ \left. + K_2(S_1S_3 + S_2S_4) + K_3(S_1S_2S_3S_4)\right]. \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Usando as Eqs. (A.19 e A.20), chegamos ao sistema de equações

$$e^{4K} + e^{-4K} = f(K)e^{2K_1+2K_2+K_3} \quad (\text{A.21})$$

$$e^{2K} + e^{-2K} = f(K)e^{-K_3} \quad (\text{A.22})$$

$$2 = f(K)e^{-2K_2+K_3} \quad (\text{A.23})$$

$$2 = f(K)e^{-2K_1+2K_2+K_3}, \quad (\text{A.24})$$

que tem como solução

$$K_1 = \frac{1}{4} \ln\{\cosh(4K)\} \quad (\text{A.25})$$

$$K_2 = \frac{1}{8} \ln\{\cosh(4K)\} \quad (\text{A.26})$$

$$K_3 = \frac{1}{8} \ln\{\cosh(4K)\} + \frac{1}{2} \ln\{\cosh(2K)\} \quad (\text{A.27})$$

$$f(K) = 2 \cosh^{\frac{1}{2}}(2K) \cosh^{\frac{1}{8}}(4K). \quad (\text{A.28})$$

Podemos agora generalizar a função de partição e obter

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(K, N) = & [f(K)]^{N/2} \left[\sum_{N/2} \exp\{K_1 \sum'_{ij} S_i S_j \right. \\ & \left. + K_2 \sum''_{lm} S_l S_m + K_3 \sum'''_{pqrs} S_p S_q S_r S_s \right], \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

onde \sum' é a soma dos pares de primeiros vizinhos, \sum'' significa a soma sobre todos os primeiros vizinhos próximos na rede com $N/2$ spins e \sum''' é a soma sobre todo o conjunto dos quatro vizinhos em torno do spin.

A nova função de partição, devido à sua complexidade, não pode ser usada em cálculos de grupo de renormalização. Então precisamos eliminar de alguma forma K_2 e K_3 . Para tanto, lançamos mão de aproximações. A aproximação mais simples é definir $K_2 = K_3 = 0$, o que implica em

$$K_1 = \frac{1}{4} \ln\{\cosh(4K)\} \quad (\text{A.30})$$

$$\mathcal{Z}(K, N) = (f(K))^{N/2} \mathcal{Z}(K_1, N/2) \quad (\text{A.31})$$

$$g(K') = 2g(K) - \ln\{2 \cosh^{1/2}(2K) \cosh^{1/8}(4K)\}, \quad (\text{A.32})$$

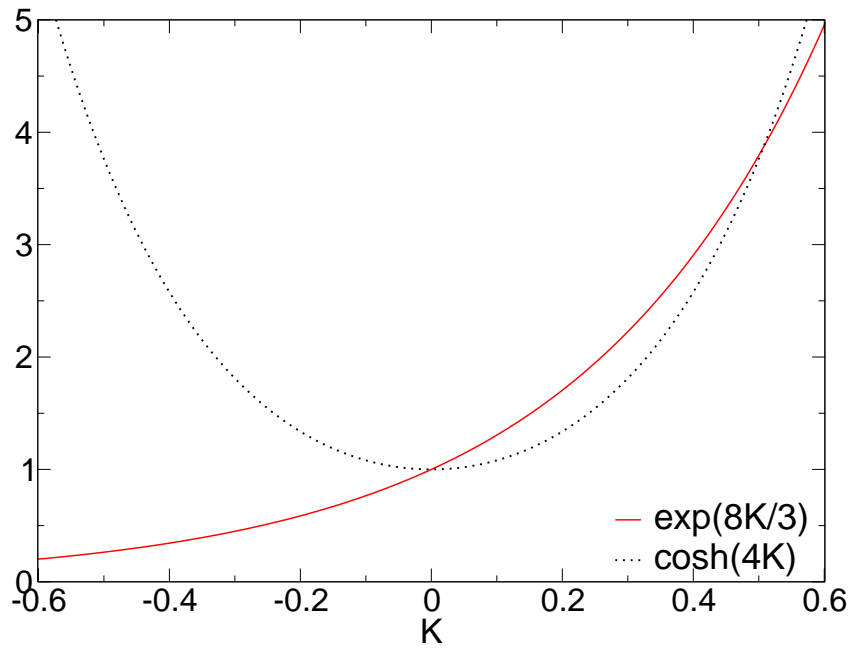


Fig. A.2: Gráfico das Eqs. (A.32) e (A.34), K_c é a intersecção das duas curvas, que ocorre em $K = 0.50698$.

ou seja, o mesmo resultado que para o modelo de Ising unidimensional, que não apresenta transição de fase. Outra possibilidade é aproximar o termo de K_2 . Como K_1 e K_2 são positivos, ambos favorecem o alinhamento dos spins, então pode-se retirar K_2 aumentando K_1 , de modo que a tendência ao alinhamento seja mantida. Para fazer isto, consideremos a energia da rede com todos os spins alinhados

$$E = -\frac{N}{\beta}(K_1 + K_2), \quad K_3 = 0, \quad (\text{A.33})$$

pois, em uma rede com $N/2$ spins, temos N primeiros vizinhos e N segundos vizinhos próximos. Definimos

$$K' = K_1 + K_2 = \frac{3}{8} \ln\{\cosh(4K)\}. \quad (\text{A.34})$$

As Eqs. (A.32) e (A.34) são equações do grupo de renormalização. Um gráfico da Eq. (A.34) mostra que existe um valor crítico K_c , que pode ser calculado pela intersecção (para K não nulo) das duas curvas (como é visto na Fig. A.2) resultando em $K_c = 0.50698$. Este valor pode ser comparado ao obtido pela

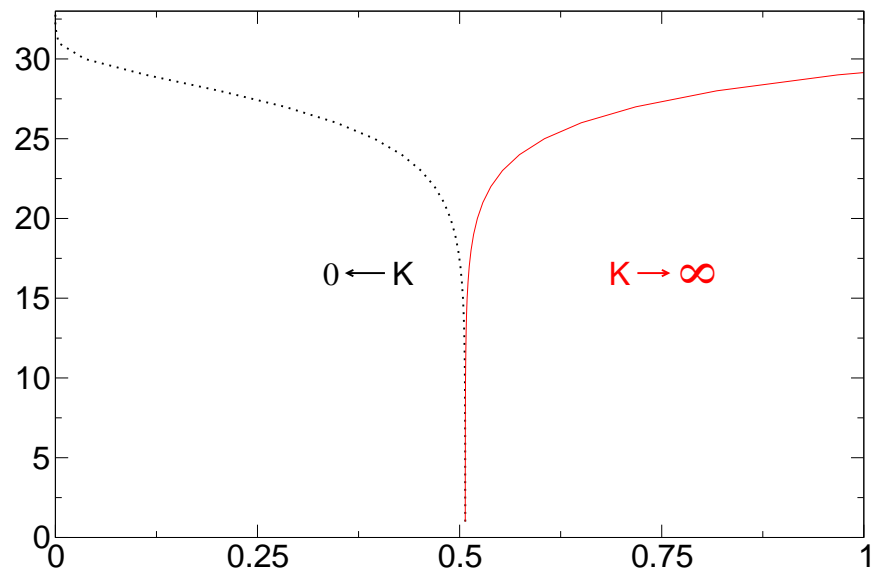


Fig. A.3: Gráfico da Eq. (A.34), onde as evoluções da relação de recorrência partiram de $K = 0.50697$ (linha tracejada) e $K = 0.50699$ (linha contínua). Demonstrando assim o valor crítico K_c .

solução exata $K_c = 0.44069$ [35]. O diagrama de fluxo para o modelo de Ising bidimensional mostra que realmente existe um valor crítico de K . Se aplicarmos a relação de recorrência [Eqs. (A.34)] para K menor mas muito próximo a K_c , K convergirá a zero. No entanto, se K for maior mas muito próximo a K_c , a convergência leva a K infinito. Isto pode ser visto na Fig. A.3, onde usamos $K = 0.50698(1)$.

Apêndice B

Algoritmo de Hoshen-Kopelman

Como mencionamos no Cap. 3, quando estamos identificando os clusters em uma rede, podemos nos deparar com situações nas quais temos que escolher qual o valor (ou rótulo) deve ser colocado em um determinado sítio. O algoritmo de Hoshen-Kopelman é a melhor forma de identificarmos os clusters. Aqui descrevemos o seu funcionamento através de um exemplo adotando a percolação de sítios. Lembrando que, neste ponto de vista sempre que dois sítios primeiros vizinhos forem do mesmo tipo, um elo é colocado entre eles com probabilidade 1.

Suponhamos que temos a seguinte rede de sítios não periódica:

```
1 1 0 1
0 1 0 0
1 1 0 1
0 1 1 1
```

Para implementar a rotina descrita no Cap. 3 (pág. 43), varremos a rede da esquerda para a direita comparando os vizinhos superior e anterior. Vamos guardar a rede de cluster em outra rede. Precisamos também de um vetor auxiliar, o seu uso ficará claro a seguir.

O primeiro sítio da rede inicial, denotada por $ri(i, j)$ tem o valor 1 e não possui vizinhos. Ele é o nosso primeiro candidato a cluster — a rede de cluster será denotada por $cl(i, j)$ — assim, $cl(1, 1) = 1$. Vamos fazer $n(1) = 1$, onde $n(i * j)$ é o vetor auxiliar. O próximo sítio a ser analisado é o $ri(1, 2)$, o

seu vizinho esquerdo é ocupado. Então, ele deve receber o mesmo rótulo, ou seja, $cl(1, 2) = 1$. Não implementamos mudança alguma no vetor auxiliar, este será útil apenas quando encontrarmos um novo cluster ou uma ambigüidade, como veremos a seguir. Agora, o sítio $ri(1, 4)$ está isolado, então temos um novo cluster: $cl(1, 4) = 2$ e $n(2) = 2$. Seguindo na segunda linha da rede temos $ri(2, 2)$ ocupado com o vizinho superior também ocupado, logo $cl(2, 2) = 1$. Na terceira linha da rede, $ri(3, 1)$ está isolado, assim sendo, $cl(3, 1) = 3$ e $n(3) = 3$. No próximo sítio temos a primeira ambigüidade, devemos fazer $cl(3, 2)$ igual ao menor valor entre os valores dos seus vizinhos, assim $cl(3, 2) = \min[cl(3, 1), cl(2, 2)] = 1$. Neste momento atualizamos o valor do vetor auxiliar $n(3)$, que é igual a 3 passa a ser $n(3) = 1$. Note que o valor do vetor foi atualizado permanecendo com o menor valor comparando $n(1)$ e $n(3)$, ou seja $n(3) = \min[n(1), n(3)] = 1$. Seguindo na linha, fazemos $cl(3, 4) = 4$ com $n(4) = 4$, pois $ri(3, 4)$ está isolado. Na última linha, $cl(4, 2) = 1$ e $cl(4, 3) = 1$. Em $ri(4, 4)$ temos mais uma ambigüidade, fazemos então $cl(4, 4) = \min[cl(4, 3), cl(3, 4)] = 1$ e $n(4) = 1$. Com isto terminamos a varredura da rede e podemos escrever a rede de cluster e o vetor auxiliar:

$$\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

$$n(1) = 1, \quad n(2) = 2, \quad n(3) = 1, \quad n(4) = 1 \quad .$$

Em percolação de sítios não podemos ter sítios vizinhos com rótulos diferentes. Para corrigir a rede de clusters usamos o vetor auxiliar que é conhecido como o vetor que contém o *rótulos dos rótulos*. Agora varremos a rede atribuindo o valor do vetor ao respectivo cluster, ou seja, o cluster identificado pelo número 2 receberá o valor de $n(2)$ e assim por diante, ao final teremos a

rede de clusters

$$\begin{array}{cccc} 1 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \end{array},$$

aqui, temos um cluster percolante que se estende da primeira a última linha identificado com o rótulo 1 e um cluster isolado com o rótulo 2.

Em rede maiores a utilidade do vetor auxiliar é mais significativa. Podemos ao final da formação de uma determinada rede de clusters ter as seguintes componentes para vetor auxiliar:

$$n(1) = 1, \quad n(2) = 2, \quad n(3) = 2, \quad n(4) = 3, \quad n(5) = 4, \quad n(6) = 6.$$

Logo, devemos agir de uma maneira recursiva,

$$\begin{aligned} n(3) = 2 \text{ e } n(2) = 2 & \quad \therefore n(3) = 2, \\ n(4) = 3 \text{ e } n(3) = 2 \text{ e } n(2) = 2 & \quad \therefore n(4) = 2, \\ n(5) = 4 \text{ e } n(4) = 3 \text{ e } n(3) = 2 \text{ e } n(2) = 2 & \quad \therefore n(5) = 2, \\ n(6) = 6 & \quad \therefore n(6) = 3. \end{aligned}$$

Por definição, os rótulos dos clusters devem ser estabelecido de uma maneira crescente, por isto, $n(6) = 3$. No exemplo acima não precisamos fazer uma atualização deste tipo. Geralmente isto só ocorre em grandes redes.

Apêndice C

Algoritmo para o modelo $O(4)$

Na simulação do modelo $O(4)$, devemos ter cuidados especiais na elaboração do código numérico, principalmente se desejamos empregar o algoritmo de clusters. As idéias fundamentais desta elaboração podem sere vistas em [93]. Certos detalhes, que serão descritos abaixo, devem sere respeitados. Um deles diz respeito ao número de dimensões da rede, pois este modelo apresenta transição de fase apenas quando tratado em dimensão maior ou igual a três (e sem a presença de um campo magnético externo).

O primeiro passo é gerar um vetor em quatro dimensões com suas coordenadas uniformemente distribuidas dentro de uma hiperesfera de raio unitário. Existem algumas formas distintas para fazermos isto. Abaixo descreveremos as testadas e a empregada nesta tese. Podemos definir um vetor tridimensional (modelo de Heisenberg) unitário definindo dois ângulos.

$$\begin{aligned}x_1 &= \cos(\theta) \sin(\varphi) \\x_2 &= \sin(\theta) \sin(\varphi) \\x_3 &= \cos(\theta),\end{aligned}\tag{C.1}$$

sendo que θ varia entre $[0, \pi)$ e φ entre $[0, 2\pi)$. Uma extensão desta idéia para o modelo $O(4)$ seria

$$x_1 = \cos(\theta) \sin(\varphi) \sin(\phi)\tag{C.2}$$

$$x_2 = \sin(\theta) \sin(\varphi) \sin(\phi)\tag{C.3}$$

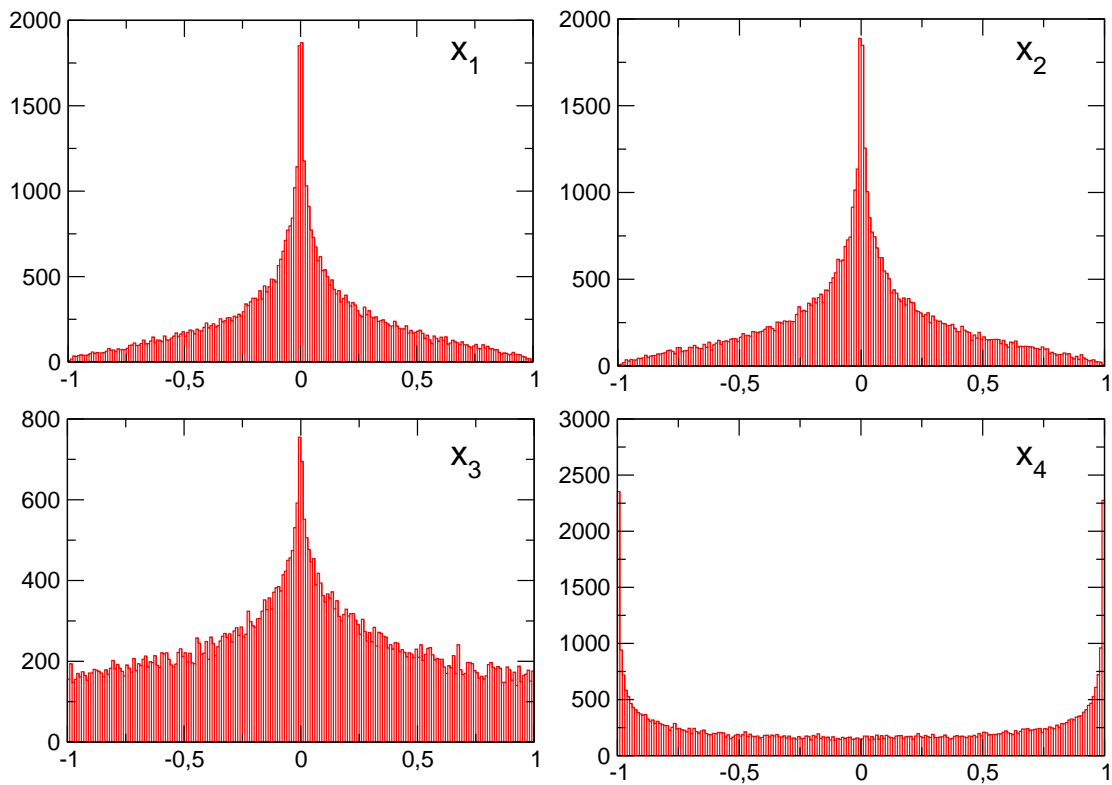


Fig. C.1: Histograma das componentes do vetor \vec{x} usando as Eq. (C.2 - C.5).

$$x_3 = \cos(\theta) \sin(\phi) \quad (\text{C.4})$$

$$x_4 = \cos(\phi), \quad (\text{C.5})$$

com ϕ variando entre $[0, 2\pi)$. Mas, se olharmos a distribuição das componentes deste vetor, notamos que não há uma uniformidade nos valores sorteados para x_1, x_2, x_3 e x_4 (veja Fig. C.1). Então, o que nos pareceu mais simples, foi sortear vetores aleatórios dentro de um hipercubo

$$x_1 = 2 * \text{rand}() - 1 \quad (\text{C.6})$$

$$x_2 = 2 * \text{rand}() - 1 \quad (\text{C.7})$$

$$x_3 = 2 * \text{rand}() - 1 \quad (\text{C.8})$$

$$x_4 = 2 * \text{rand}() - 1, \quad (\text{C.9})$$

guardar aqueles que caíssem dentro de uma hiperesfera inscrita dentro do

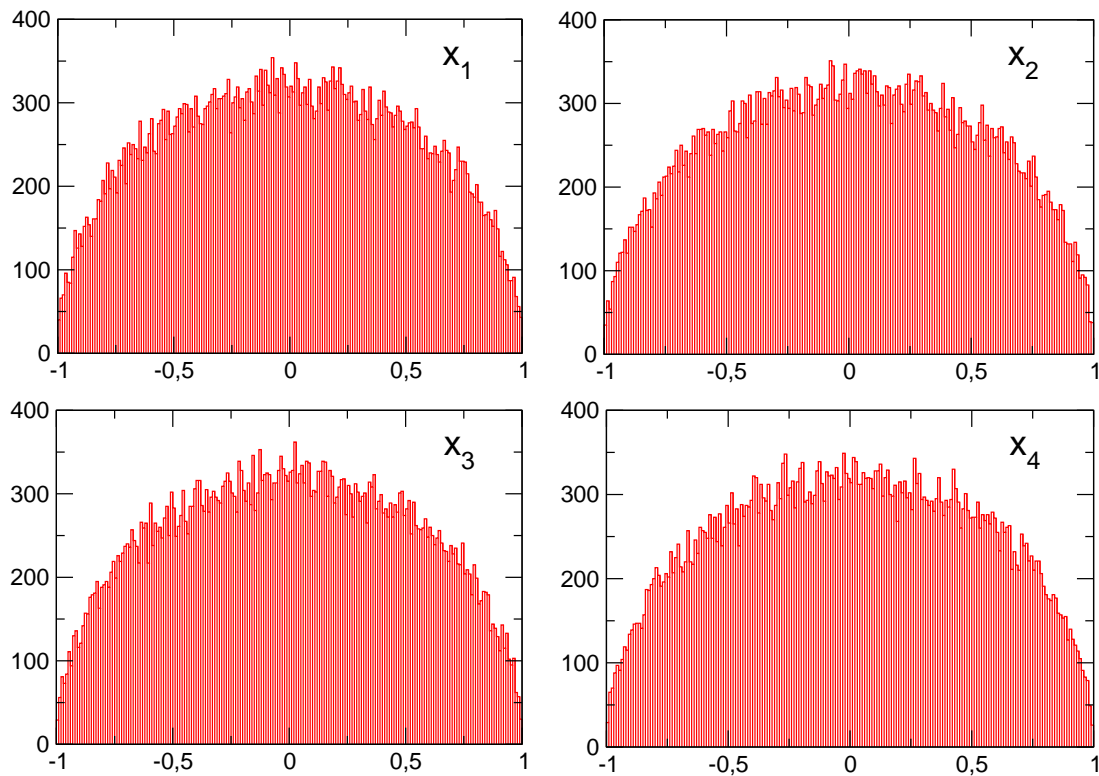


Fig. C.2: Histograma das componentes do vetor \vec{x} usando as Eq. (C.6 - C.9).

hipercubo, ou seja, aqueles com

$$R = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2},$$

e depois normalizá-los para raio unitário. No entanto, mesmo este método apresentando uma distribuição uniforme (veja a Fig. C.2), ele mostrou-se lento, pois usava quatro números aleatórios na geração de um vetor $O(4)$.

O método que melhor se adequou é conhecido como método de *Marsaglia* [73]. Neste método, escolhemos dois números aleatórios uniformemente distribuídos entre $[-1,1]$

$$x_1 = 2 * rand() - 1$$

$$x_2 = 2 * rand() - 1.$$

(C.10)

Se $r_1 = x_1^2 + x_2^2 \leq 1$, eles são guardados. Logo após isso sorteamos mais dois

números

$$x_3 = 2 * rand() - 1$$

$$x_4 = 2 * rand() - 1.$$

(C.11)

Repetimos o teste de aceitação para $r_2 = x_3^2 + x_4^2 \leq 1$. Tendo estes quatro números em mãos, determinamos as componentes do vetor $O(4)$.

$$x_1 \rightarrow x_1 \tag{C.12}$$

$$x_2 \rightarrow x_2 \tag{C.13}$$

$$x_3 \rightarrow x_3 \sqrt{\frac{1-r_1}{r_2}} \tag{C.14}$$

$$x_4 \rightarrow x_4 \sqrt{\frac{1-r_1}{r_2}}. \tag{C.15}$$

Pelo histograma das componentes vemos que elas estão bem distribuídas, (veja a Fig. C.3). O método é consideravelmente mais rápido que a rejeição a partir do hipercubo.

Sabendo como gerar a rede inicial de spins $O(4)$, podemos dar o próximo passo: mapear o modelo $O(4)$ no algoritmo de clusters, que é bem estabelecido para o modelo de Ising. Para tanto, procedemos da seguinte forma: para um dado valor de temperatura, realizamos N varreduras na rede. Em cada varredura, utilizamos o método de Marsaglia para gerar um vetor $O(4)$, \vec{n} ; o produto escalar deste vetor com cada vetor da rede servirá como peso para estabelecer a rede de spins de Ising e os elos entre estes. Se o produto escalar for positivo, o spin de Ising será definido como *up* ou 1, se for negativo será *down* ou -1, a probabilidade de se colocar um elo entre spins de Ising do mesmo tipo, agora será

$$p_{i,j} = 1 - \exp\{-2\beta|\vec{S}_i \cdot \vec{n}||\vec{S}_j \cdot \vec{n}|\}. \tag{C.16}$$

No algoritmo de clusters, é necessário refletir cada cluster, e conseqüentemente cada spin de Ising que pertence a este cluster, com probabilidade 1/2. Aqui, em

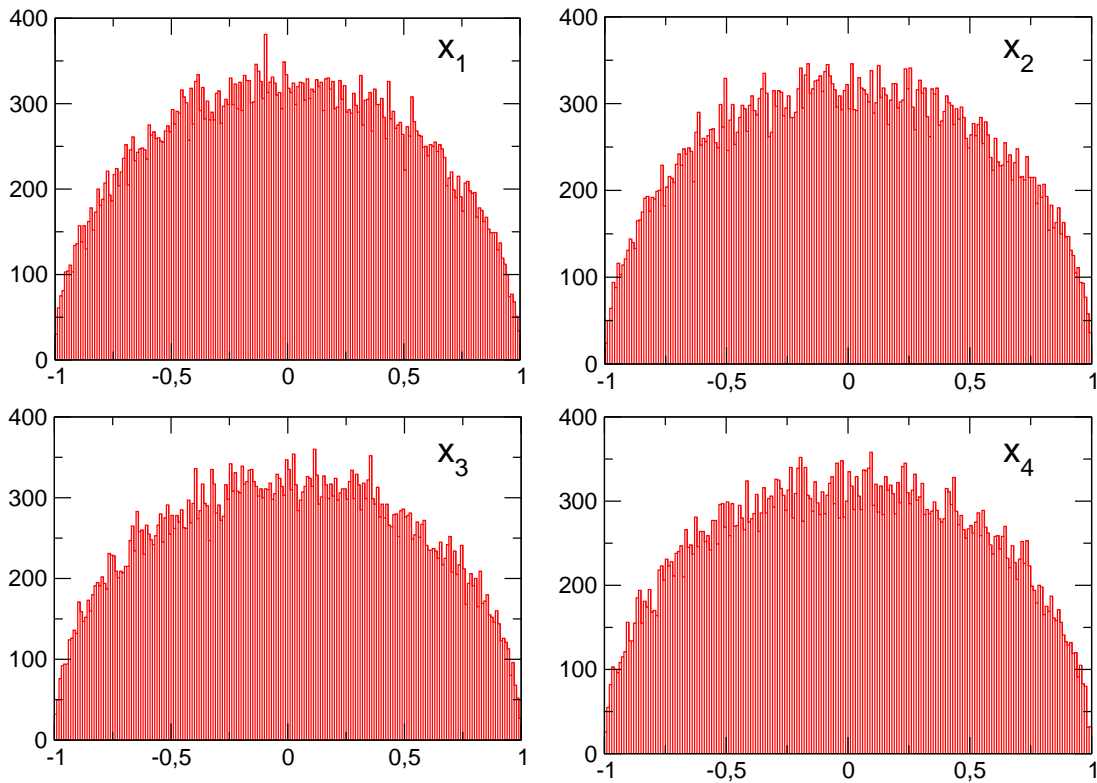


Fig. C.3: Histograma das componentes do vetor \vec{x} usando as Eq. (C.12 - C.15).

cada varredura temos uma rede de spins de Ising diferente, logo o procedimento adequado será refletir os spins de $O(4)$ (em relação ao plano definido pelas direções ortonormais a \vec{n}), para que a informação se propague de uma varredura a outra. Isto é feito usando um projetor. Se o cluster é refletido, cada componente paralela do spin $O(4)$ com o vetor \vec{n} será refletida. Para isto fazemos

$$\vec{S}_i \rightarrow \vec{S}_i - 2 (\vec{S}_i \cdot \vec{n}) \vec{n}. \quad (\text{C.17})$$

Como foi dito no Cap. 6, a ação de um campo externo no modelo $O(4)$ é de grande importância para a detecção dos bósons de Goldstone. A implementação numérica se dá de uma maneira diferente da utilizada em algoritmos locais, onde o campo externo entra como mais um termo na função que minimiza a energia. Da mesma forma que em cada varredura determinamos um vetor \vec{n} que é utilizado pra determinar a rede de spins de Ising, também é feito o produto escalar $\vec{n} \cdot \vec{h}$, onde \vec{h} é um vetor unitário. Se este produto for maior que zero,

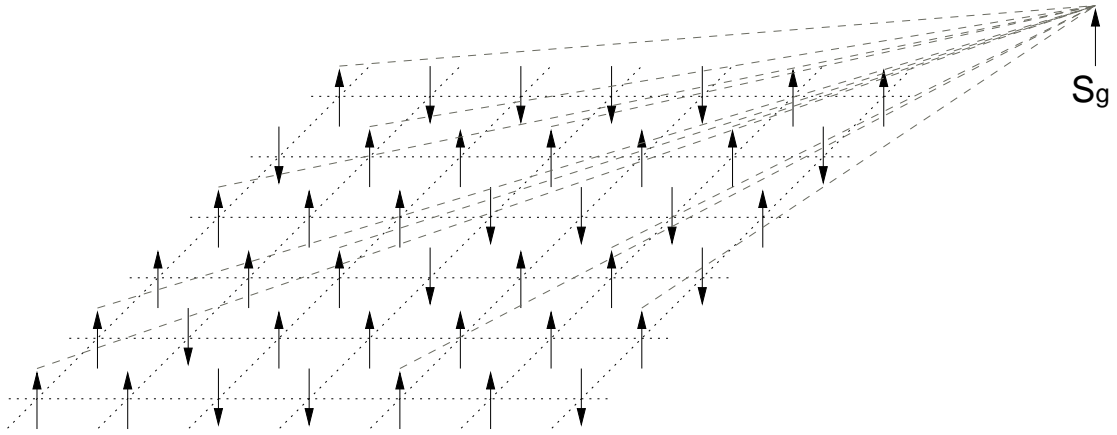


Fig. C.4: Esquema de elos entre os spins da rede e o spin fantasma.

dizemos que um *spin fantasma* S_g (spin de Ising) é up, ou 1; ao contrário será down, ou -1. Após já termos formado todos os clusters, varremos a rede mais um vez e tentamos ligar cada spin da rede de Ising com o spin fantasma. Este elo é posto com probabilidade [10, 49]

$$p_i = 1 - \exp\{-2\beta|H(\vec{h} \cdot \vec{n})||\vec{S}_i \cdot \vec{n}|\}. \quad (\text{C.18})$$

sendo H a intensidade do campo externo. Um esquema deste procedimento para uma rede bidimensional é mostrado na Fig. C.4. Desta forma construímos um cluster fantasma. Este deve ser refletido com probabilidade $1/2$. Se isto ocorrer, o campo magnético também é refletido através de um projetor

$$\vec{h} \rightarrow \vec{h} - 2(\vec{h} \cdot \vec{n})\vec{n}. \quad (\text{C.19})$$

Resumindo, após definirmos a rede inicial de spins $O(4)$, usando o método de Marsaglia, realizamos N varreduras para uma dada temperatura. Em cada uma destas escolhemos um vetor aleatório de quatro dimensões, \vec{n} . Realizamos o produto escalar deste vetor com o spin de $O(4)$ em cada sítio da rede. Assim, montamos a rede de Ising que será tratada pelo algoritmo de cluster com a probabilidade de se colocar elos modificada pela Eq. (C.16). Após rotularmos todos os clusters, devemos colocar elos [usando a Eq. (C.19)] entre os spins da rede e o spin fantasma para formarmos um cluster fantasma. Para que o

embebimento seja ergódico, devemos refletir cada cluster, inclusive o fantasma, e seus respectivos spins de $O(4)$ e campo externo. Para fazer isto, usamos os projetores acima [Eqs. (C.17) e (C.19)].

Como para o caso do modelo de Ising, os clusters podem ser usados para a análise de percolação. Para a evolução de tempos curtos das variáveis de spins, por outro lado, usamos o algoritmo de banho térmico descrito em [15].

Apêndice D

Detalhes de contas do capítulo 6

D.1 Tensor suscetibilidade

Definindo o tensor suscetibilidade [32].

$$\chi_{\alpha\beta} \equiv -\frac{\partial^2 f}{\partial H_\alpha \partial H_\beta} \quad (\text{D.1})$$

$$\equiv -\frac{\partial M_\alpha}{\partial H_\beta} \quad (\text{D.2})$$

onde f é a energia livre por unidade de volume, M_α a componente da magnetização na direção α e M_β a componente do campo na direção β . O tensor suscetibilidade descreve com a α -ésima componente da magnetização muda devida a β -ésima componente do campo magnético. Como o hamiltoniano do modelo $O(4)$ carrega a simetria do modelo, a energia livre por unidade de volume não pode depender da direção do campo magnético. Então

$$f = f(H), \quad (\text{D.3})$$

sendo

$$H = |H| = \left(\sum_{\alpha=1}^4 H_\alpha^2 \right)^{1/2}. \quad (\text{D.4})$$

Então, diferenciando a Eq. (D.1), utilizando a propriedade

$$\frac{\partial}{\partial H_\alpha} = \frac{\partial H}{\partial H_\alpha} \frac{\partial}{\partial H} = \frac{H_\alpha}{H} \frac{\partial}{\partial H}. \quad (\text{D.5})$$

temos

$$\chi_{\alpha\beta} = -\frac{\partial}{\partial H_\alpha} \left[\frac{H_\beta}{H} \frac{\partial}{\partial H} \right]$$

$$\begin{aligned}
 &= -\delta_{\alpha\beta} \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial H} - H_\beta \frac{\partial f}{\partial H} \frac{\partial}{\partial H_\alpha} \frac{1}{H} - \frac{H_\beta}{H} \frac{\partial}{\partial H_\alpha} \frac{\partial f}{\partial H} \\
 &= -\delta_{\alpha\beta} \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial H} - \frac{H_\beta H_\alpha}{H^3} \frac{\partial f}{\partial H} - \frac{H_\beta H_\alpha}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} \\
 \chi_{\alpha\beta} &= -\frac{H_\beta H_\alpha}{H^2} \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} - \frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial H} \left[\delta_{\alpha\beta} - \frac{H_\alpha H_\beta}{H^2} \right]. \tag{D.6}
 \end{aligned}$$

De onde tira-se

$$\chi_{\parallel} \equiv \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} = \frac{\partial M}{\partial H} \tag{D.7}$$

$$\chi_{\perp} \equiv -\frac{1}{H} \frac{\partial f}{\partial H} = \frac{M}{H} \tag{D.8}$$

D.2 Método de Gell-Mann-Levy para cálculos de correntes

Gell-Mann e Levy encontraram um método rápido e eficiente para determinarmos as correntes conservadas para uma lagrangiana, quando nesta efetuamos um transformação local nos campos contidos na lagrangiana do sistema. A partir de uma lagrangiana $\mathcal{L}(\phi_r, \partial_\mu \phi_r)$, podemos transformar os campos como

$$\phi'_r \rightarrow \phi'_r = \phi_r - i\epsilon_\nu(x) F_r^\nu(\phi), \tag{D.9}$$

sendo que desta forma a transformação será local, pois ϵ depende da posição x , em uma transformação global, ϵ é uma constante. Desta forma, a lagrangiana é modificada como

$$\begin{aligned}
 \delta\mathcal{L} &= \mathcal{L}(\phi'_r, \partial_\mu \phi'_r) - \mathcal{L}(\phi_r, \partial_\mu \phi_r) \\
 &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_r} (-i\epsilon_\nu(x) F_r^\nu(\phi)) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial\phi_r)} \partial_\mu [-i\epsilon_\nu(x) F_r^\nu(\phi)] \\
 &= \partial_\mu \left[-i\epsilon_\nu(x) F_r^\nu(\phi) \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial\phi_r)} \right], \tag{D.10}
 \end{aligned}$$

onde usamos a equação de Euler-Lagrange, e que pode ser reescrita como

$$\delta\mathcal{L} = \mathcal{J}^{\nu\mu}(x) \partial_\mu \epsilon_\nu(x) + \epsilon_\nu(x) \partial_\mu \mathcal{J}^{\nu\mu}(x), \tag{D.11}$$

sendo

$$\mathcal{J}^{\nu\mu}(x) = -i\epsilon_\nu(x) F_r^\nu(\phi) \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial\phi_r)} \tag{D.12}$$

a corrente. Se esta é conservada, ou seja,

$$\partial_\mu \mathcal{J}^{\nu\mu}(x) = 0, \quad (\text{D.13})$$

dizemos que a transformação não quebrou a simetria da lagrangiana. No entanto, uma transformação local como a feita acima quebra a simetria de qualquer lagrangiana, como veremos a seguir.

D.2.1 Aplicação

Lagrangianas escalares

Sejam ϕ_1 e ϕ_2 dois campos escalares de massas iguais.

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} [(\partial_\mu \phi_1)(\partial^\mu \phi_1) + (\partial_\mu \phi_2)(\partial^\mu \phi_2)] - \frac{1}{2} m^2 [\phi_1^2 + \phi_2^2], \quad (\text{D.14})$$

podemos tratar estes campos como coordenadas e a lagrangiana como uma função no plano 1 – 2. Desta forma, podemos girar este sistema de coordenadas na direção 3, para tanto usamos uma matriz de rotação $SO(2)$

$$\begin{pmatrix} \phi'_1 \\ \phi'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\beta) & -\sin(\beta) \\ \sin(\beta) & \cos(\beta) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.15})$$

Se escolhermos uma rotação infinitesimal ($\beta \ll 1$), os campos se transformam como

$$\begin{cases} \phi_1 \rightarrow \phi'_1 = \phi_1 - \epsilon \phi_2 \\ \phi_2 \rightarrow \phi'_2 = \phi_2 + \epsilon \phi_1 \end{cases}, \quad (\text{D.16})$$

de onde definimos

$$\begin{cases} \delta \phi_1 \equiv -\epsilon \phi_2 \\ \delta \phi_2 \equiv \epsilon \phi_1 \end{cases}. \quad (\text{D.17})$$

Se $\mathcal{L}(\phi_1, \phi_2)$ é invariante sob a transformação acima (Eq. (D.16))

$$\delta \mathcal{L} \equiv \mathcal{L}(\phi'_1, \phi'_2) - \mathcal{L}(\phi_1, \phi_2) = 0, \quad (\text{D.18})$$

então

$$\delta\mathcal{L} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_1)}\delta(\partial_\mu\phi_1) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_2)}\delta(\partial_\mu\phi_2) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_1}\delta\phi_1 + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_2}\delta\phi_2 \quad (\text{D.19})$$

e usando a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_i} - \partial_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_i)} \right) = 0, \quad (\text{D.20})$$

reescrevemos a Eq. (D.19) como

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_1)}(\partial\delta\phi_1) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_2)}(\partial_\mu\delta\phi_2) \\ &+ \left[\partial_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_1)} \right) \right] \delta\phi_1 + \left[\partial_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_2)} \right) \right] \delta\phi_2, \\ &= \partial_\mu \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_1)}\delta\phi_1 + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_2)}\delta\phi_2 \right) \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

onde também usamos $\delta(\partial\phi_i) = (\partial\delta\phi_i)$ e, com a definição (D.17) chegamos a:

$$\partial_\mu \left[-\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_1)}\phi_2 + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_2)}\phi_1 \right] \epsilon = 0. \quad (\text{D.22})$$

Mas

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_1)} = \frac{1}{2}(\partial^\mu\phi_1) \quad (\text{D.23})$$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\phi_2)} = \frac{1}{2}(\partial^\mu\phi_2), \quad (\text{D.24})$$

ou seja,

$$0 = \epsilon \partial_\mu [(\partial^\mu\phi_2)\phi_1 - (\partial^\mu\phi_1)\phi_2]. \quad (\text{D.25})$$

Neste momento, verificamos que existe um vetor (corrente)

$$\mathcal{J}^{\mu 3} = (\partial^\mu\phi_2)\phi_1 - (\partial^\mu\phi_1)\phi_2 \quad (\text{D.26})$$

que é conservado

$$\partial_\mu \mathcal{J}^{\mu 3} = 0. \quad (\text{D.27})$$

Note que a transformação (D.16) é local, o que não quebra a simetria da lagrangiana.

Se estendermos estes cálculos para rotações nos demais planos, obteremos que a corrente conservada para a lagrangiana

$$\mathcal{L}_1 = \frac{1}{2} \left[(\partial_\mu \vec{\phi})(\partial^\mu \vec{\phi}) + (\partial_\mu \sigma)(\partial^\mu \sigma) \right] - \frac{1}{2} m^2 [\phi^2 + \sigma^2] \quad (\text{D.28})$$

sob uma rotação (veja Eq. (6.33))

$$\vec{\phi}' \rightarrow \vec{\phi} = \vec{\phi}' + \vec{\epsilon} \times \vec{\phi}', \quad (\text{D.29})$$

é

$$\mathcal{J}^{\mu a} = (\vec{\phi}' \times \partial^\mu \vec{\phi}')^a. \quad (\text{D.30})$$

No entanto, na lagrangiana acima, podemos transformar os campos como

$$\begin{cases} \vec{\phi}' \rightarrow \phi' = \phi + \vec{\eta} \sigma \\ \sigma' \rightarrow \sigma' = \sigma - \vec{\eta} \cdot \vec{\phi}' \end{cases}, \quad (\text{D.31})$$

e, usando o mesmo critério para a sua invariância, temos

$$\begin{aligned} 0 = \delta \mathcal{L} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{\phi}} \delta \vec{\phi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \vec{\phi})} \partial_\mu (\delta \vec{\phi}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \sigma} \delta \sigma + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \sigma)} \partial_\mu (\delta \sigma) \\ &= \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \vec{\phi})} \delta \vec{\phi} \right] + \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \sigma)} \delta \sigma \right] \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \partial_\mu [(\partial^\mu \vec{\phi}) \delta \vec{\phi}] + \partial_\mu [(\partial^\mu \sigma) \delta \sigma] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \partial_\mu \{(\partial^\mu \vec{\phi}) \cdot (\vec{\eta} \sigma)\} - \partial_\mu \{(\partial^\mu \sigma) (\vec{\eta} \cdot \vec{\phi}')\} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \{ [\partial_\mu (\partial^\mu \vec{\phi}) \cdot \vec{\eta} \sigma + (\partial^\mu \vec{\phi}) \cdot \vec{\eta} (\partial_\mu \sigma) - \partial_\mu (\partial^\mu \sigma) \vec{\eta} \cdot \vec{\phi}' - (\partial^\mu \sigma) \vec{\eta} \cdot (\partial_\mu \vec{\phi}')] \} \\ &= \frac{1}{2} \vec{\eta} \cdot \{ \sigma \partial_\mu (\partial^\mu \vec{\phi}) - \vec{\phi}' \partial_\mu (\partial^\mu \sigma) \}, \end{aligned} \quad (\text{D.32})$$

mas

$$\sigma \partial_\mu (\partial^\mu \vec{\phi}) = \partial_\mu (\sigma \partial^\mu \vec{\phi}) - (\partial^\mu \vec{\phi}) \cdot (\partial_\mu \sigma) \quad (\text{D.33})$$

$$\vec{\phi}' \partial_\mu (\partial^\mu \sigma) = \partial_\mu (\vec{\phi}' \cdot \partial^\mu \sigma) - (\partial_\mu \vec{\phi}') \cdot (\partial^\mu \sigma), \quad (\text{D.34})$$

que, substituindo acima, resulta em

$$0 = \frac{1}{2} \vec{\eta} \cdot \partial_\mu (\sigma \partial^\mu \vec{\phi} - \vec{\phi} \partial^\mu \sigma), \quad (\text{D.35})$$

desta forma, concluímos que a corrente é

$$\mathcal{J}^{\mu a} = \sigma \partial^\mu \phi^a - \phi^a \partial^\mu \sigma, \quad \text{sendo } a = 1, 2, 3. \quad (\text{D.36})$$

Lagrangianas vetoriais

Seja u e d campos fermiônicos de massas m_u e m_d . A lagrangiana para este modelo é

$$\mathcal{L} = \bar{u}(i \not{\partial} - m_u)u + \bar{d}(i \not{\partial} - m_d)d, \quad (\text{D.37})$$

que pode ser reescrita como

$$\mathcal{L}_3 = \bar{\Psi}(-i \not{\partial} - m)\Psi \quad (\text{D.38})$$

se definirmos

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \quad m \equiv \frac{1}{2}(m_0 I + \delta m \tau^3) = \begin{pmatrix} m_u & 0 \\ 0 & m_d \end{pmatrix}, \quad \bar{\Psi} \equiv (\bar{u} \quad \bar{d}) \quad (\text{D.39})$$

sendo $m_0 = m_u + m_d$, $\delta m = m_u - m_d$,

$$\tau^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \text{ e } I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.40})$$

Para calcularmos a corrente conservada da lagrangiana acima (Eq. (D.38)), vamos impor uma mudança local no campo $\bar{\Psi}$

$$\Psi' = \Psi - \frac{i}{2}(\vec{\tau} \cdot \vec{\epsilon}(x))\Psi \quad \rightarrow \quad \delta\Psi = -\frac{i}{2}(\vec{\tau} \cdot \vec{\epsilon}(x))\Psi. \quad (\text{D.41})$$

Para que a Eq. (D.38) seja invariante sob a transformação acima, é preciso que $\delta\mathcal{L} = 0$, então

$$0 = \delta\mathcal{L} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Psi}\delta\Psi + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\bar{\Psi}}\delta\bar{\Psi} + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\Psi)}\delta(\partial_\mu\Psi), \quad (\text{D.42})$$

e usando as equações de Euler-Lagrange para a lagrangiana de Dirac (Eq. (D.38))

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Psi)} \right] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial_\mu \Psi} = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Psi)} = i\bar{\Psi}\gamma^\mu \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial_\mu \Psi} = -i\partial_\mu \bar{\Psi}\gamma^\mu + m\bar{\Psi} \end{cases} \quad (\text{D.43})$$

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{\Psi})} \right] - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial_\mu \bar{\Psi}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{\Psi})} = -i\gamma^\mu \Psi \\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial_\mu \bar{\Psi}} = i\gamma^\mu \partial_\mu \bar{\Psi} - m\Psi \end{cases} \quad (\text{D.44})$$

temos

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Psi)} \right] \delta\Psi + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Psi)} \partial_\mu(\delta\Psi) + [i\gamma^\mu \partial_\mu - m]\Psi \delta\bar{\Psi} = 0. \quad (\text{D.45})$$

No entanto, o último termo à esquerda da equação acima é a equação de movimento para a lagrangiana de Dirac que é nula, logo podemos agrupar os termos restantes

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Psi)} \delta\Psi \right] = 0 \quad (\text{D.46})$$

e usando a Eq. (D.41)

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{2} \partial_\mu (\bar{\Psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \cdot \vec{\epsilon}(x) \Psi) \\ &= \frac{1}{2} [(\partial_\mu \bar{\Psi}) \gamma^\mu \vec{\tau} \cdot \vec{\epsilon}(x) + \bar{\Psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \cdot (\partial_\mu \vec{\epsilon}(x)) \Psi + \bar{\Psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \cdot \vec{\epsilon}(x) (\partial_\mu \Psi)], \end{aligned} \quad (\text{D.47})$$

substituindo os resultados das equações de movimento no primeiro (Eq. (D.44)) e no terceiro (Eq. (D.43)) termo chegamos a

$$\frac{1}{2} \bar{\Psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \cdot (\partial_\mu \vec{\epsilon}(x)) \Psi + \frac{i}{2} m \Psi \bar{\Psi} \vec{\tau} \cdot \vec{\epsilon}(x) - \frac{i}{2} m \Psi \bar{\Psi} \vec{\tau} \cdot \vec{\epsilon}(x) = 0. \quad (\text{D.48})$$

Desta forma

$$\frac{1}{2} \bar{\Psi} \vec{\tau} \gamma^\mu \Psi \cdot \partial_\mu \vec{\epsilon}(x) = 0, \quad (\text{D.49})$$

e conseqüentemente, podemos definir uma corrente

$$\mathcal{J}^{\mu a} = \frac{1}{2} \bar{\Psi} \gamma^\mu \tau^a \Psi \quad (\text{D.50})$$

cuja divergência é

$$\begin{aligned} \partial_\mu \mathcal{J}^{\mu a} &= \frac{1}{2} (\partial_\mu \bar{\Psi} \gamma^\mu \tau^a \Psi + \bar{\Psi} \gamma^\mu \tau^a \partial_\mu \Psi) \\ &= \frac{i}{2} (\bar{\Psi} m \tau^a \Psi - \bar{\Psi} \tau^a m \Psi) \\ &= \frac{i}{2} \bar{\Psi} [m, \tau^a] \Psi, \end{aligned} \quad (\text{D.51})$$

onde usaram-se as equações de movimento. Note que, pela definição de m , este comutador só será zero (corrente conservada) para $a = 3$, as outras componentes resultam em correntes proporcionais a δm . Então, a corrente só será conservada se $\delta m (= m_u - m_d) = 0$, ou seja, se os dois férmions tiverem a mesma massa.

Outra transformação possível é

$$\Psi' \rightarrow \Psi' = \Psi - i \frac{\vec{\eta} \cdot \vec{\tau}}{2} \gamma_5 \Psi, \quad (\text{D.52})$$

que substituindo na Eq. (D.42) resulta em

$$\begin{aligned} 0 = \delta \mathcal{L} &= \partial_\mu [i \bar{\Psi} \gamma^\mu (-i \frac{\vec{\eta} \cdot \vec{\tau}}{2} \gamma_5 \Psi)] \\ &= \frac{1}{2} \partial_\mu [\bar{\Psi} \gamma^\mu (\vec{\eta} \cdot \vec{\tau}) \gamma_5 \Psi] \\ &= \frac{1}{2} \{ \partial_\mu \bar{\Psi} \gamma^\mu (\vec{\eta} \cdot \vec{\tau}) + \bar{\Psi} \gamma^\mu (\partial_\mu \vec{\eta}) \cdot \vec{\tau} \gamma_5 \Psi + \bar{\Psi} \gamma^\mu (\vec{\eta} \cdot \vec{\tau}) \gamma_5 \partial_\mu \Psi \}. \end{aligned} \quad (\text{D.53})$$

Usando as equações de movimento (Eqs. (D.43) e (D.44)), temos

$$0 = \delta \mathcal{L} = \frac{1}{2} \bar{\Psi} \gamma^\mu \vec{\tau} \gamma_5 \Psi \cdot \partial_\mu \vec{\eta}, \quad (\text{D.54})$$

de onde tiramos a corrente

$$\mathcal{J}^{\mu a} = \frac{1}{2} \bar{\Psi} \gamma^\mu \tau^a \gamma_5 \Psi, \quad \text{sendo } a = 1, 2, 3. \quad (\text{D.55})$$

Referências

- [1] http://www.bnl.gov/bnlweb/pubaf/pr/PR_display.asp?prID=05-38.
- [2] T-P. Cheng e L-F. Li, *Gauge Theory of Elementary Particle Physics*, Oxford Science Publications, 1984.
- [3] Anais do *International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2006)*, **PoS LAT2006: 011, 2006** e anos anteriores.
- [4] A. Bazavov, B. A. Berg e A. Velytsky, *Phys. Rev.* **D74** (2006) 014501.
- [5] S. Fortunato e H. Satz, *Phys. Lett.* **B475** (2000) 311; H. Satz, *Comp. Phys. Comm.* **147** (2002) 46.
- [6] W. G. Wanzeller, G. Krein e T. Mendes, *AIP Conf. Proc.* **739** (2005) 608; W. G. Wanzeller, T. Mendes e G. Krein, *Braz. J. Phys.* **36** (2006) 657; W. G. Wanzeller, T. Mendes e G. Krein, *Phys. Rev.* **E74** (2006) 051123.
- [7] S. Wenzel et. al, *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005) 051601.
- [8] D. Stauffer e A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, 1992.
- [9] A. Coniglio e W. Klein, *J. Phys.* **A13** (1980) 2775.
- [10] C. M. Fortuin e P. W. Kasteleyn, *Physica* **57** (1972) 536.
- [11] W. G. Wanzeller, *Estudo de Percolação de Clusters de Monte Carlo para o Modelo de Ising Bidimensional*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física Teórica, 2003, IFT-D.002/03.

- [12] W. G. Wanzeller, A. Cucchieri, T. Mendes e G. Krein, *Braz. J. Phys.* **34** (2004) 247.
- [13] R. J. Glauber, *J. Math. Phys.* **1** (1963) 215.
- [14] G. Baym, *Physica* **A96** (1979) 131.
- [15] S. Fortunato, *J. Phys.* **A36** (2003) 4269.
- [16] B. Zheng, *Int. J. Mod. Phys.* **B12** (1998) 1419.
- [17] Th. Niemeijer e J. M. J. Van Leeuwen, *Phase Transition and Critical Phenomena, Vol. 6*, editado por C. Domb e M. S. Green.
- [18] H. K. Janssen, B. Schaub e B. Schmittmann, *Z. Phys.* **B73** (1989) 539.
- [19] J. B.-. Zhang et. al. *Phys. Lett.* **A262** (1999) 226.
- [20] L. Schülke e B. Zheng, *Phys. Lett.* **A215** (1986) 81.
- [21] Z. B. Li e B. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 3396.
- [22] Y. Gündüç e M. Aydin, *Physica* **A323** (1996) 265.
- [23] S. Digal, E. Laermann e H. Satz, *Eur. Phys. J.* **C18** (2001) 583.
- [24] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, *J. Phys* **C5** (1972) L124.
- [25] J. Engels e T. Mendes, *Nucl. Phys.* (Proc. Suppl.) **B83-84** (2000) 700; J. Engels e T. Mendes, *Nucl. Phys.* **B572** (2000) 289.
- [26] M. E. Peskin, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Harper Collins Publishers, 1995.
- [27] U. M. Heller, PoS **LAT2006** (2006) 011 [*hep-lat/0610114*].
- [28] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 1996.

- [29] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*, Edusp, 2001.
- [30] E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford Science Publications, 1971.
- [31] J. J. Binney et al., *The Theory of Critical Phenomena — An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford Science Publications, 1992.
- [32] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison-Wesley Publications Company, 1992.
- [33] E. A. Guggenheim, *J. Chem. Phys.* **13** (1945) 253.
- [34] L. Onsager, *Phys. Rev. Lett.* **65** (1944) 177.
- [35] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, 1987.
- [36] K. Rajagopal e F. Wilczek, *Nucl. Phys.* **B399** (1993) 395.
- [37] P. Weiss, *J. Phys.* **6** (1907) 661.
- [38] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Oxford Science Publications, 1991.
- [39] B. Svetitsky, *Phys. Rep.* **132** (1986) 1.
- [40] S. Fortunato, *Percolation and Deconfinement in SU(2) Gauge Theory*, tese de doutorado, Universidade de Bielefeld, 2000, *hep-lat/0012006*.
- [41] W. Greiner e J. Reinhardt, *Quantum Electrodynamics*, Springer, 1994.
- [42] H. J. Rothe, *Lattice Gauge Theories: An Introduction*, World Scientific, 1997.
- [43] K. G. Wilson, *Phys. Rev.* **D10** (1974) 24.
- [44] P. Flory, *J. Am. Chem. Soc.* **63** (1941) 3083; W. H. Stockmayer *J. Chem. Phys.* **11** (1943) 45.

- [45] D. Stauffer, *Phys. Rep.* **54** (1979) 1.
- [46] G. Grimmett, *Percolation*, Springer, 1999.
- [47] P. M. C. de Oliveira, R. A. Nóbrega e D. Stauffer, *Braz. J. Phys.* **33** (2003) 616.
- [48] P. Blanchard et al., *J.Phys.* **A33** (2000) 8603.
- [49] R. Swendsen e J-S. Wang, *Phys. Rev Lett.* **58** (1987) 1.
- [50] F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54** (1982) 235.
- [51] J. Hoshen e R. Kopelman, *Phys. Rev.* **B14** (1976) 3438.
- [52] K. Binder e D. W. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*, Springer, 1997.
- [53] H. Hinrichsen, *Adv. Phys.* **49** (2000) 815 [*cond-mat/0001070*].
- [54] S. R. Broadbent e J. M. Hammersley, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **53** (1957) 629.
- [55] F. Grenn e F. Karsch, *Nucl. Phys.* **B238** (1984) 297.
- [56] J. Kertész, *Physica* **A161** (1989) 58.
- [57] H. Satz e F. Fortunato, *Phys. Lett.* **B509** (2001) 189.
- [58] C. Scherer, *Métodos Computacionais da Física*, Ed. Livraria da Física, 2005.
- [59] P. C. Hohenberg e B. I. Halperin, *Rev. Mod. Phys.* **49** (1977) 435.
- [60] I. A. Hadjiagapiou, A. Malakis e S. S. Martinos *Physica* **A372** (2003) 439;
Physica **A356** (2005) 563.
- [61] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **58** (1977) 1142.
- [62] L. Zhibiling, L. Schülke e B. Zheng, *Phys. Rev.* **E53** (1996) 2940.

- [63] T. Tomé e M. J. de Oliveira, *Phys. Rev.* **E58** (1998) 4242.
- [64] T. Tomé, C. S. Simões e J. R. D. de Felício, *Mod. Phys. Lett.* **B15** (2001) 1141.
- [65] R. da Silva, N. A. Alves e J. R. Drugowich de Felício, *Phys. Lett.* **A298** (2002) 325.
- [66] P. Grassberger, *Physica* **A214** (1995) 547.
- [67] B. Zheng, *Physica* **A283** (2000) 80.
- [68] A. M. Ferrenberg e D. P. Landau, *Phys. Rev.* **B44** (1991) 5081.
- [69] C. Morningstar, *The Monte Carlo Method in Quantum Field Theory*, *hep-lat/0702020*.
- [70] S. Weinzierl, *Introduction to Monte Carlo Methods*, *hep-ph/0006269*.
- [71] D. P. Landau e K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2000.
- [72] A. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms*, <http://citeseer.ist.psu.edu/sokal96monte.html>.
- [73] F. Vesely, *Computational Physics, An Introduction*, Kluwer Academics, 2000.
- [74] K. Okano, L. Schülke, K. Yamagishi e B. Zheng, *Nucl. Phys.* **B485** (1997) 727.
- [75] R. H. Doremus, *Rates of Phases Transitions*, Academic Press, 1985.
- [76] A. W. Joshi, *Elements of group theory for physicists*, J. Wiley & Sons, 1977.
- [77] D. J. Wallace e R. K. P. Zia, *Phys. Rev.* **B12** (1975) 5340.
- [78] K. Kanaya e S. Kaya, *Phys. Rev.* **D51** (1995) 2404.

- [79] M. Chaichian e N. F. Nelipa, *Introduction to Gauge Field Theories*, Springer, 1984.
- [80] F. Mandl e G. Shaw, *Quantum Field Theory*, John Wiley & Sons, 1984.
- [81] I. J. R. Aitchison, *An Informal Introduction to Gauge Field Theories*, Cambridge University Press, 1982.
- [82] A. Cucchieri e T. Mendes, *J. Phys.* **A38** (2005) 4561.
- [83] D. Toussaint, *Phys. Rev.* **D55** (1997) 55.
- [84] T. Mendes, *Braz. J. Phys.* **37** (2007) 597.
- [85] M. D'Elia, A. Di Giacomo and C. Pica, *Phys. Rev.* **D72** (2005) 114510.
- [86] D. Stauffer, *Physica* **A186** (1992) 197; F. Yaşa e M. Aydin, *Physica* **A255** (1998) 430;
- [87] M. Gleiser, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 3495.
- [88] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **55** (1983) 583.
- [89] L. Kadanoff, *Physics* **2** (1966) 263; *Phys. Rev. Lett.* **34** (1975) 1005; L. Kadanoff e A. Houghton, *Phys. Rev.* **B11** (1975) 377.
- [90] D. Chandler, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, Oxford University Press, 1987.
- [91] S. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, Edusp, 1997.
- [92] L. Kadanoff e H. J. Maris, *Am. J. Phys.* **46** (1978) 652.
- [93] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 361; I. Dimitrovic et al., *Nucl. Phys.* **B350** (1991) 893.

Relação das Figuras

2.1	Esquema da transição de fase sofrida por um fluido.	8
2.2	Medida da curva de coexistência para oito fluidos.	12
2.3	Esquema da transição de fase e do parâmetro de ordem do modelo de Ising	14
2.4	Solução da equação transcendental (2.26)	20
2.5	Soluções para a energia livre de Landau, Eq. (2.43)	25
3.1	Esboço do parâmetro de ordem da QCD, o loop de Polyakov, na transição de confinamento/desconfinamento	36
3.2	Exemplos de percolação uni e bidimensional	37
3.3	Função degrau, probabilidade de percolação	38
3.4	Esquema do algoritmo de Swendsen e Wang	43
3.5	Percolação isotrópica e direcionada	45
3.6	Esquema da implementação da percolação direcionada	46
3.7	Percolação dirigida de elos em 1+1 dimensões	48
3.8	Linha de Kertész da percolação	51
4.1	Comportamento ilustrativo da magnetização em tempos curtos	67
5.1	Valores calculados para M , Ω_P e Ω	76
5.2	Valores calculados para M , Ω_P e Ω no modelo de Ising 3d	77
5.3	Ajustes dos parâmetros de ordem Ω_P e Ω . Caso bidimensional com magnetização dispersa	78
5.4	Ajustes dos parâmetros de ordem Ω_P e Ω . Caso tridimensional para $V = 64^3$ e $m_0 = 0.02$ com condição inicial dispersa	79

5.5	Ajuste de $\tau(L)$. Caso bi e tridimensional do modelo de Ising	82
5.6	Ajuste de $\tau'(L)$. Caso bi e tridimensional do modelo de Ising	83
5.7	Comparação qualitativa entre Ω e $\bar{\Omega}$ para $V = 100^2$ e $m_0 = 0.02$	84
5.8	Comportamento da magnetização de acordo com o tamanho da região concentrada	85
5.9	Comportamento de Ω de acordo com o tamanho da região concentrada	86
5.10	Curvas da magnetização e Ω . Magnetização inicial concentrada. Caso bidimensional	87
5.11	Curvas da magnetização e Ω . Magnetização inicial unidimensional.	89
5.12	Medida do expoente crítico dinâmico z através da Eq. (4.44) para o parâmetro de ordem magnético no modelo de Ising bidimensional	91
5.13	Curvas da magnetização e Ω para o caso bidimensional do modelo de Ising. Percolação de clusters geométricos.	92
5.14	Curvas de Ω para as diversas distribuições	93
5.15	Estatística da magnetização para diferentes condições iniciais. Caso bidimensional.	94
5.16	Estatística da magnetização para diferentes condições iniciais. Caso tridimensional.	95
5.17	Comparação do comportamento da magnetização de acordo com o número de amostras utilizadas no modelo de Ising bidimensional	96
6.1	Potenciais	102
6.2	Onda de spins	107
6.3	Comportamento da magnetização para o modelo $O(4)$ em tempos curtos.	110
6.4	Comportamento função de correlação temporal para o modelo de spins contínuos $O(4)$	111
6.5	Comparação do comportamento da magnetização de acordo com o número de amostras utilizadas no modelo de spins contínuos $O(4)$ tridimensional	113

7.1	Comportamento função de correlação temporal para o modelo de Ising bidimensional	117
A.1	Rotação na rede de Ising bidimensional	124
A.2	Gráfico das Eqs. (A.32) e (A.34)	126
A.3	Gráfico da relação de recorrência para o modelo de Ising bidimensional	127
C.1	Histograma das componentes do vetor angular	132
C.2	Histograma das componentes do hipercubo	133
C.3	Histograma das componentes do vetor $O(4)$ usando o método de Marsaglia	135
C.4	Esquema do spin fantasma	136

Relação das Tabelas

2.1	Expoentes críticos estáticos para o modelo de Ising	17
4.1	Valores numéricos de expoentes críticos estáticos e dinâmicos. . .	66
5.1	Valores do expoente crítico dinâmico θ	77
5.2	Ajustes para Ω_P com a Eq. (5.14).	80
5.3	Ajustes para Ω com a função $B \{1 - \exp(-t/\tau')^\eta\}$	81
5.4	Ajustes para a magnetização ($A t^\theta$). Condição inicial concentrada.	88
5.5	Ajustes para Ω com a Eq. (5.15). Condição inicial unidimensional.	88
5.6	Ajustes para M com uma lei de potência. Condição inicial unidimensional.	90
6.1	Expoente crítico dinâmico θ para o modelo $O(4)$	109
A.1	Valores de $g(K)$ para o modelo de Ising unidimensional.	123

Índice Alfabético

- aproximação de campo médio, 18
 - campo efetivo de Weiss, 19
- bóson de Goldstone, 34
- cluster
 - algoritmo, 41
 - definição, 37
 - percolante, 37
- coarse-graining, 26
 - magnetização coarse grained, 26
- compressibilidade isotérmica, 10
- comprimento de correlação , 23
- condensado quiral, 18, 108
- cone de disseminação, 48
- constante de Boltzmann, 9, 14, 28, 41, 49, 57, 73
- critical slowing down, 60
- difusão , 78
- dinâmica de Kawasaki, 58
- distribuição de Boltzmann, 57, 73
- energia livre de Helmholtz, 15, 61
- equação
 - de estado dos gases ideais, 9
 - de Euler-Lagrange, 141
 - de Fokker-Planck, 56
 - de Langevin, 56
- expansão de acoplamento forte, 50
- expoentes críticos dinâmicos
 - λ , 64
 - θ , 63, 77, 89
 - x_0 , 60
 - y , 64, 90
 - z , 60, 89, 90
- expoentes críticos estáticos
 - $\alpha, \beta, \delta, \eta, \gamma, \nu$, 16
 - definição , 11
 - lei de Fisher, 17
 - lei de Griffiths, 17
 - lei de Josephson, 17
 - lei de Rushbrooke, 17
 - lei de Widom, 17
 - do modelo $O(4)$, 99
- fórmulas de Newton-Cotes, 68
- fogo em florestas, 36
- grupo de renormalização, 120
- hamiltoniano
 - do modelo de Ising , 18, 41
 - do modelo de Ising , 13
 - do modelo $O(4)$, 17, 109

- efetivo, 27
- índices de Lorentz, 32
- lagrangiana
 - Dirac, 144
 - QED, 32
- Landau
 - critério de Ginzburg, 28
 - energia livre, 24
 - expoente crítico β , 24
 - expoente crítico δ , 25
 - expoente crítico γ , 25
 - parâmetros fenomenológicos, 24
 - Teoria de, 24
- lei de escala
 - magnetização , 52
 - suscetibilidade, 52
- liberdade assintótica, 31
- linha de Kertész, 50
- linha pseudo-crítica, 52
- loop de Polyakov, 35, 49
- método de Monte Carlo, 68
- matrizes de Dirac, 32, 103
- matrizes de Gell-Mann, 33
- matrizes de Pauli, 33, 103
- Modelo
 - $O(4)$, 97
 - de Heisenberg, 131
 - de Glauber, 58
 - de Ising, 60
- números aleatórios, 68
- nucleação , 79
- onda de spins, 106
- opalescência crítica, 10
- parâmetro de ordem
 - fluido, 9
 - geométrico, 92
 - modelo de Ising, 13, 63
 - percolação, Ω , 40, 78, 79, 90
 - percolação, Ω_p , 39, 79
- PCAC, 104
- plasma de quarks e glúons, 31
- pressão do cluster percolante, 39
- probabilidade de percolação , 37
- processo estocástico, 58
- relação de recorrência
 - modelo de Ising $d=1$, 121
 - modelo de Ising $d=2$, 127
- ruído, 55
 - branco, 56
- Schrödinger
 - equação de, 100
- spin fantasma, 50, 136
- temperatura crítica
 - temperatura de Curie, 13
 - campo médio, 21
 - Modelo $O(4)$, 99
- temperatura reduzida, 16, 22, 52, 60

-
- tensor eletromagnético, 32
- teorema
- de Coleman, 100
 - de Goldstone, 100
 - de Mermim-Wagner, 106
- teorema da flutuação-dissipação , 57
- transformação de Kadanoff, 121
- universalidade, 12
- variável estocástica, 55
- variância, 68, 71
- vetor $O(4)$ de Marsaglia, 133

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](#)