

Novo comportamento crítico da singularidade de Yang-Lee

Fernanda Lopes Sá

Novo comportamento crítico da singularidade de Yang-Lee

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

Orientador: Prof. Dr Denis Dalmazi

Guaratinguetá
2011

	Sá, Fernanda Lopes
S111n	Novo comportamento crítico da singularidade de Yang-Lee. / Fernanda Lopes Sá - Guaratinguetá : [s.n.], 2011. 108 f. : il. Bibliografia: f. 101-107
	Tese (doutorado) – Universidade Estadual Paulista, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, 2011. Orientador: Prof. Dr. Denis Dalmaz
	1. Teoria quântica de campos 2. Física estatística I. Título
	CDU 530.145

FERNANDA LOPES SÁ

**ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
“DOUTOR EM FÍSICA”**

PROGRAMA: FÍSICA

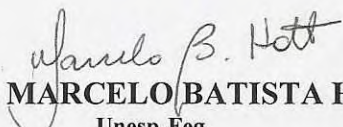
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO


Prof. Dr.ª Silyia Maria Giuliatti Winter
Coordenadora

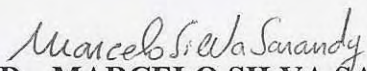
BANCA EXAMINADORA:


Prof. Dr. DENIS DALMAZI
Orientador / Unesp-Feg


Prof. Dr. ÁLVARO DE SOUZA DUTRA
Unesp-Feg


Prof. Dr. MARCELO BATISTA HOTT
Unesp-Feg


Prof. Dr. NELSON AUGUSTO ALVES
USP- Ribeirão Preto


Prof. Dr. MARCELO SILVA SARANDY
UFF-RJ

Abril de 2011

Dados Curriculares

FERNANDA LOPES Sá

NASCIMENTO	30.09.1981 - BARRA MANSA / RJ
FILIAÇÃO	Francisco de Assis Cardoso de Sá Liliana Lopes Sá
2001 - 2005	Bacharelado em Física Departamento de Física - UFJF
2005 - 2007	Mestrado em Física Departamento de Física e Química - FEG/UNESP
2007 - 2011	Doutorado em Física Departamento de Física e Química - FEG/UNESP

Aos meus pais

Agradecimentos

Desejo expressar os meus sinceros agradecimentos:

Aos meus pais, pelo amor e incentivo em todos os momentos.

Ao meu orientador, prof Denis Dalmazi, pela orientação, incentivo e exemplo.

Aos amigos da pós-graduação, as pessoas mais presentes na minha vida nesses últimos seis anos. Em especial para o Rafael, Elias e Luiz Augusto.

Ao meu irmão Guto e a toda minha família, pelo carinho e preocupação.

Aos professores da pós-graduação os quais foram muito importantes para a minha formação.

Aos professores do DFQ e aos meus outros amigos que passaram pela minha vida, fazendo parte dessa jornada.

Este trabalho contou com o apoio financeiro da CAPES.

Sumário

Lista de Figuras	10
Lista de Tabelas	12
1 Introdução	16
2 Zeros da função de partição de sistemas de spins em $D = 1$ via matriz transferência	20
2.1 Introdução	20
2.2 Cálculo exato do expoente σ para $N = 2$	22
2.3 Generalização para modelos de spin com $n > 2$	26
2.4 Cálculo Numérico	28
3 Modelo de Blume-Emery-Griffiths	32
3.1 Cálculo Analítico de $\sigma = -2/3$	32
3.2 Cálculo Numérico de $\sigma = -2/3$	37
3.2.1 Caso I: Modelo BEG com $b = c$	37
3.2.2 Caso II: Modelo BEG com $A = 0$ ($\beta H = \pm i\pi/2$)	44
3.2.3 Caso III: Modelo Blume-Capel ($b = 1$ ou $K = 0$)	48
4 Modelo de Blume-Emery-Griffiths sobre anéis conexos e desconexos	53
4.1 Definição do modelo	53
4.2 Cálculo Numérico	57
4.2.1 Modelo BEG com $b = c$ na rede dinâmica	57
4.2.2 Modelo BEG com $\beta H = \pm i\pi/2$ na rede dinâmica	60
5 Zeros Generalizados do Modelo de Blume-Emery-Griffiths	61
5.1 Zeros Generalizados com $H = 0$ ($A = 2$)	61
5.2 Zeros no plano complexo de x com $A > 2$	65
5.2.1 Caso I: $b \geq 1$	65
5.2.2 Caso II: $b = c$	68

5.3	Zeros no plano complexo de b com $A > 2$	71
5.4	Zeros no plano complexo de c com $A > 2$	73
6	Modelo de Ising de spin 1/2 com interações de segundos vizinhos (Modelo ANNNI)	76
6.1	Definição do modelo	76
6.2	Resultados analíticos	78
6.3	Resultados Numéricos	83
6.4	Modelo ANNNI na rede dinâmica	87
7	Conclusão	89
	Apêndices:	92
A	$\sigma = -2/3$ para um modelo de Potts especial em $D = 1$	92
B	Algoritmo de extrapolação BST	95
C	Obtendo σ a partir de dados experimentais	97
	Referências Bibliográficas	101

Lista de Figuras

- 3.1 A figura mostra os sete zeros de Yang Lee (pontos vermelhos) mais próximos da SEYL (ponto azul). Conforme aumenta-se o tamanho da rede, os zeros ficam mais próximo da singularidade. Cálculo feito para $b = c = 1/10$, $u_E \approx -0.96414 + 0.26537i$ e com $x = (1 + c^2) \sqrt{\frac{(1+c^2)}{27(1-c^2)}} = 0.1963$ 38
- 3.2 Zeros de Yang-Lee para o modelo BEG com $b = c$, utilizando a condição de tripla degenerescência (3.28), à temperaturas $c = 0.1$ (a) e $c = 0.8$ (b). Em ambas figuras nós temos 60 zeros. O zero mais próximo da SEYL é $u_1^\pm \approx -0.96408 \pm 0.26561i$ em (a) e $u_1^+ \approx -0.93576, u_1^- \approx -1.06865$ em (b) 39
- 3.3 Os pontos em vermelho são os zeros de Yang-Lee do modelo BEG com $b = c = 0.6$ e x dado pela expressão (3.28) e os pontos azuis representam a singularidade de Yang-lee $u_E^\pm \approx -0.9987288217 \pm 0.0504057610i$. Na vizinhança deste ponto a densidade linear de zeros diverge com o novo expoente crítico $\sigma = -2/3$ 41
- 3.4 Gráfico de $\ln \Re \Delta u \times \ln N$ (a) e $\ln \Im \Delta u \times \ln N$ (b). A curva sólida corresponde a $\ln(\Delta u(N)) = C_1 \ln(N) + C_2$ com $C_1 \approx 2.995536$ e $C_2 \approx 3.4919$ para (a) e $C_1 \approx 2.995536$ e $C_2 \approx 3.4919$ para (b) 42
- 3.5 Gráfico de $\ln \rho(u) \times \ln N$. A curva sólida corresponde a $\ln \rho(u) = C_1 \ln(N) + C_2$ com $C_1 = y_h - D \approx 1.9817$ e $C_2 \approx -6.6059$ 43
- 3.6 Extrapolação BST para $0.6 \leq w \leq 2.4$ de $y_h^{\Re(\Delta u)}$ (a) e y_h^ρ (b). Na figura (a) utilizamos a parte real dos zeros. Os zeros de Yang-Lee foram calculados para modelo BEG com $b = c = 0.6$ e x dado pela expressão (3.28). 44
- 3.7 Os pontos vermelhos são os zeros de Yang-Lee para o modelo BEG com b e $\tilde{x}$ dados pelas equações (3.34) e (3.35) respectivamente, com $c = 0.6$ (a), $c = \sqrt{2}/2$ (b) e $c = 0.8$ (c), o ponto preto representa a SEYL ($u_E = i$) e usamos $N = 50$ spins. O gráfico ilustra somente a metade dos zeros. 46

3.8	Zeros de Yang-Lee para o modelo BEG com $b = 1$, ou seja Modelo Blume-Capel, utilizando a condição de tripla degenerescência (3.42), com a temperatura $c = 0.3$ (a) e $c = 0.9$ (c). Em ambas figuras foram gerados 100 zeros, mas só foram mostrados os zeros com $\Im u > 0$. As figuras (b) e (d) mostram a vizinhança da SEYL representada pelos pontos azuis, em (a) e (b) vale $u_E = 0.60085 + 0.79936i$ e em (c) e (d) $u_E = -0.71955 + 0.69444i$.	49
3.9	Gráfico de $\ln \Re u \times \ln N$ para $c = 0.3$ (a) e $c = 0.9$ (b). A curva sólida corresponde a $\ln(\Re u(N)) = C_1 \ln(N) + C_2$ com $\tilde{C}_1 = 3.19979$ e $\tilde{C}_2 = 4.50422$ para (a) e $C_1 = 3.07092$ e $C_2 = 1.11983$ para (b)	50
3.10	Extrapolação BST para $0.6 \leq w \leq 2.4$ de y_h^ρ . Os zeros de Yang-Lee foram calculados para BC com $c = 0.3$ (a) e $c = 0.9$ (b) e x dado pela expressão (3.42).	51
4.1	Diagramas de Feynman para Z_4^{nc}	54
4.2	Sobreposição dos zeros de Yang-Lee para o modelo BEG na rede usual (pontos vermelhos) e na rede dinâmica (pontos azuis), com $c = b = 0.6$ (a), $c = b = 0.8$ (b), x é dado pela condição de tripla degenerescência (3.28) e $N = 20$ spins. Os pontos pretos representam a singularidade da ponta de Yang-Lee na figura (a) $u_E^\pm = -0.9987 \pm 0.0504i$ e para a figura (b) $u_E^+ = -0.9359$ e $u_E^- = -1.0694$.	58
5.1	Zeros no plano complexo de x (a), b (b) e c (c) em $H = 0$ ($A = 2$)	62
5.2	Gráfico 3D da solução real para $A^2(c, d)$ na região de domínio compacto: $0 \leq 1/b \leq 1$, $0 \leq c \leq 1$. A função A^2 foi encontrada ao substituir a SEYL (5.12) na condição de tripla degenerescência (5.10).	66
5.3	Zeros no plano complexo de x do modelo BEG com $c = 0.1$, com as condições de tripla degenerescência (5.13) e (5.14) fornecendo $A \approx 2.0049$ e $b \approx 5.05$, os pontos em vermelho representam os zeros da função de partição e os pontos azuis são as SEYL $x_E^\pm \approx 47.6174 \pm 18.2782i$	67
5.4	Ajuste di-log para os zeros no plano complexo de x com $c = 0.1$, $A = \sqrt{4 + 2c^2 - 2c^4} \approx 2.00494$, $b = (1 + c^2)/2c = 5.05$ e $146 \leq N \leq 200$ spins.	68
5.5	Extrapolação BST para $0.2 \leq \omega \leq 3.0$ de $y_\Delta^{\Re \Delta x}$, $y_\Delta^{\Im \Delta x}$, figuras 5.5(a) e 5.5(b), usando as partes real e imaginária dos zeros respectivamente. E y_Δ^ρ , figura 5.5(c). Para os zeros no plano complexo de x com $c = 0.5$, $A \approx 2.09165$ e $b = 1.25$.	70
5.6	Zeros no plano complexo de x , com $N = 40$ spins, $A \approx 2.0045$ e $b = c = 0.8$. Os pontos azuis representam a SEYL $x \approx -0.67$ e $x \approx -4.06$. No lado esquerdo temos $\sigma = -1/2$ e no lado direito $\sigma = -2/3$.	71

5.7	Gráfico 3D para $F(A, c, x)$ no domínio compacto: $0 \leq 1/A \leq 1/2$, $0 \leq c \leq 1$ para $x = 2$	72
5.8	Zeros no plano complexo de b com $N = 60$ spins, $A \approx 2.0046$ e $x = 0.74468$. Os pontos azuis representam a SEYL $b^\pm \approx 0.309435 \pm 0.973399i$	73
5.9	Extrapolação BST para $0.2 \leq \omega \leq 3.0$ de $y_K^{\Re(\Delta b)}$ e y_K^ρ , figuras 5.9(a) e 5.9(b) respectivamente. Em 5.9(b) consideramos a parte real dos zeros no plano complexo de b . Os zeros em b foram calculados para $c = 0.5$ com $x \approx 0.74468$ e $A = \sqrt{V(1 - c^4)} \approx 2.0046$ são obtidos a partir de (5.25) e (5.27) respectivamente.	74
5.10	Gráfico 3D de $G(1/B, b, 1/t) = 0$ em $b = 1$ na região compacta: $0 < B < 1/2$; $0 < t < 1$. O plano azul é $G(1/B, 1, 1/t) = 0$. A função $G(A, b, x)$ é dada pela fórmula (A6) no apêndice de [33]	75
6.1	A linha sólida (tracejada) representa c_+ (c_-) dadas pela equação (6.27)	81
6.2	Gráfico da posição da SEYL em função da variável d^4 , dada pela condição (6.26).	83
6.3	Validade do teorema do círculo para os zeros de Yang-Lee do modelo ANNNI com $N = 60$ spins. As figuras (a), (c) e (e) mostram somente a metade dos zeros ($\Im u > 0$) e as figuras (b), (d) e (f) mostram os zeros mais próximos da SEYL.	84
6.4	Extrapolação BST para $0.1 \leq \omega \leq 3.0$ de $y_h^{\Re(\Delta u)}$ e $y_h^{\Im(\Delta u)}$, na figura 6.4(a) e 6.4(b), usamos a parte real e imaginária dos zeros, respectivamente e y_h^ρ , representado pela figura 6.4(c).	86
6.5	Sobreposição dos zeros de Yang-Lee para o modelo ANNNI na rede usual (pontos vermelhos) e na rede dinâmica (pontos azuis), com $c = 0.1$ e $d \approx 0.4293$, dado pela condição de tripla degenerescência (6.25). Os pontos pretos representam a singularidade da ponta de Yang-Lee $u_E^\pm \approx -0.7708 \pm 0.6370i$	87
C.1	Estrutura cristalina de FeCl_2 . As bolinhas cheias e vazias representam os íons Fe^{2+} e Cl^- , respectivamente. A distância $c = 1.7536\text{nm}$ representa a periodicidade da estrutura e $a = 0.3579\text{nm}$ é o comprimento do vetor da base da camada hexagonal. A distância entre Fe^{2+} e Cl^- adjacentes é dada por: $c/3 - u = 0.138\text{nm}$, com $u = 0.2543c$. Esta figura foi extraída da página 10 do livro “Ising-type Antiferromagnets” [13]	99

Lista de Tabelas

3.1	Primeiro zero de Yang Lee para redes com diferentes números de spins, com $b = c = 0.6$ e x dado pela expressão (3.28). A SEYL é dada por $u_E \approx -0.9987288217 + 0.0504057610i$	40
3.2	Resultado para os ajustes di-log a partir das fórmulas (2.51) ($y_h^{\Re(\Delta u)}$) e (2.48) ($y_h^{\Im(\Delta u)}$) com $L = N$ e $D = 1$ para $b = c$ com $210 \leq N \leq 300$ sítios. .	42
3.3	Resultado para a extrapolação de tamanho finito, obtidos a partir da equação (2.51) para o expoente y_h para o modelo BEG com ($b = c$) com $150 \leq N \leq 250$ spins com temperatura $c = 0.6$ e $c = 0.7$	43
3.4	Resultado para os ajustes di-log a partir das fórmulas (2.51) ($y_h^{\Re(\Delta u)}$), com a parte real dos zeros e (2.48) (y_h^ρ) com $L = N$ e $d = 1$ para $b = c$ com $60 \leq N \leq 150$	47
3.5	Resultado para a extrapolação BST, obtidos a partir das equações (2.51) para o expoente $y_h^{\Re(\Delta u)}$ e (2.48) para o expoente y_h^ρ , para o modelo BEG com b e $\tilde{x}$ dados pelas equações (3.34) e (3.35), para o cálculo utilizamos redes com $150 \leq N \leq 250$ spins e $w = 1$	47
3.6	Resultado para os ajustes di-log a partir das RETF (2.39) ($y_h^{\Re(\Delta u)}$) e (2.46) (y_h^ρ) com $L = N$ e $d = 1$ para o modelo Blume Capel com $96 \leq N \leq 150$ e temperatura $0.3 \leq c \leq 0.9$	51
3.7	Resultado para a extrapolação de tamanho finito, obtidos a partir da equação (2.48) para o expoente y_h para o modelo Blume Capel com $96 \leq N \leq 150$ spins com temperatura $c = 0.3$ e $c = 0.9$	52
4.1	Resultado para o cálculo considerando as relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46), a última linha da tabela representa o valor extrapolado para o expoente y_h para $c = b = 0.6$ e x é dado pela condição de tripla degenerescência (3.28), com $35 \leq N \leq 70$ spins. A extrapolação BST foi realizada considerando $w = 1$	59
4.2	Extrapolação BST do expoente de escala do campo magnético y_h para o modelo BEG com $b = 9c/4(1 + c^2)$ e $\tilde{x} = b\sqrt{3(1 - c^4)}$, a SEYL é dada por $u_E = i(A_E = 0)$	60

- 5.1 Resultado para relações de escala do tamanho finito do plano complexo de x , onde $y_{\Delta}^{\Re(\Delta x)}$ e $y_{\Delta}^{\Im(\Delta x)}$ obtidos a partir de (2.39) usando a parte real e imaginária dos zeros, respectivamente. Enquanto y_{Δ}^{ρ} vem da expressão (2.46). Os zeros são calculados para $146 \leq N \leq 194$ spins em $c = 0.5$, $A \approx 2.09165$ e $b = 1.25$. A última linha vem da extrapolação $N \rightarrow \infty$ através do algoritmo BST com $\omega = 1$ 69
- 6.1 Resultado para os ajustes di-log a partir das fórmulas (2.51) ($y_h^{\Re(\Delta u)}$) e (2.48) (y_h^{ρ}) com $L = N$ e $D = 1$ para $d \approx 0.8680$ com $160 \leq N \leq 240$ 85
- 6.2 Resultados das relações de escala de tamanho finito para os zeros de Yang-Lee, onde $y_h^{\Re(\Delta u)}$ e $y_h^{\Im(\Delta u)}$ são obtidos a partir da equação (2.51) usando a parte real e a parte imaginária dos zeros, respectivamente. Enquanto, y_h^{ρ} foi obtido de (2.48). Os zeros foram calculados para $146 \leq N \leq 188$ spins em $c = 0.5$, $A \approx 1.1031$ e $d = 0.8680$. A última linha representa a extrapolação BST, para $N \rightarrow \infty$, com $w = 1$ 85

Lista de Abreviaturas

ZYL - Zeros de Yang-Lee

SEYL - Singularidade da extremidade de Yang-Lee

RETF - Relação de escala de tamanho finito

Modelo de BEG - Modelo de Blume-Emery-Griffiths

Modelo de BC - Modelo de Blume-Capel

Modelo ANNNI - Modelo de Ising de spin $1/2$ com interações de segundos vizinhos
(axial-next-to-nearest-neighbor-Ising model)

BST - Burlisch-Stoer

TS_1 - Teorema do círculo de Yang-Lee

S_1 - Circunferência de raio 1

SA, F. L. —. 2011. Tese (Doutorado em Física) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2011.

Resumo

No limite termodinâmico, os zeros da função de partição de modelos magnéticos de spins em muitos casos formam curvas contínuas no plano complexo de u , onde $u = e^{H/kT}$, com H sendo o campo magnético externo. Quando a temperatura do sistema for maior que uma temperatura crítica ($T > T_{cr}$), os zeros u_i da função de partição, tenderão a se acumular nas extremidades u_E de tais curvas. A densidade linear de zeros diverge com uma lei de potência $\rho(u) \sim |u - u_E|^\sigma$, onde o expoente σ define uma classe de universalidade que depende somente da dimensão do espaço. O ponto crítico $u = u_E$ é conhecido como singularidade de Yang-Lee.

Para modelos unidimensionais em geral $\sigma = -1/2$, mas quando a matriz de transferência apresentar tripla degenerescência de seus autovalores (condição necessária, mas não suficiente), a densidade dos zeros ρ poderá divergir com $\sigma = -2/3$. Neste trabalho, nós prevemos analiticamente a existência desse novo comportamento crítico para o modelo de Ising de spin $1/2$ com interações de segundos vizinhos (modelo ANNNI) e para o modelo de Blume-Emery-Griffiths e confirmamos numericamente esse fato através de cálculo numérico dos zeros com alta precisão.

Verificamos a existência do novo comportamento crítico para os zeros no plano complexo de outros acoplamentos da hamiltoniana além do campo magnético. Encontramos também $\sigma = -2/3$ para os modelos de spins unidimensionais sobre anéis conexos e desconexos.

Especulamos que uma versão tricrítica da singularidade de Yang-Lee possa estar por trás de um resultado anômalo para o expoente σ obtido na literatura a partir de medições da magnetização a baixas temperaturas no FeCl_2 .

Palavras-chave: Zeros de Yang-Lee; Modelo ANNNI; Modelo BEG; Densidade de zeros; Singularidade da extremidade de Yang-Lee

SA, F. L. —. 2011. Tese (Doutorado em Física) - Faculdade de Engenharia do Campus de Guaratinguetá, Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, 2011.

Abstract

The partition function zeros of magnetic spin models usually form continuous curves on the complex u -plane above the critical temperature ($T > T_{cr}$), where $u = e^{H/kT}$ and H is the external magnetic field. The zeros u_i tend to accumulate at the edges of the zeros curves. The linear density at the edges diverges as a power law $|u - u_E|^\sigma$, where the exponent σ defines a universality class, which depends only on the space dimension.

For the one-dimensional models $\sigma = -1/2$, but when we have the triple degeneracy of the transfer matrix eigenvalues (necessary but not sufficient condition), the linear density can diverge with $\sigma = -2/3$. In this work, we analytically predict the new critical behavior for the spin 1/2 ANNNI (axial-next-to-nearest-neighbor-Ising) model and Blume-Emery-Griffiths model and we numerically confirm the existence of the new critical behavior with $\sigma = -2/3$.

In order to reinforce the existence of the new universality class, we verify the new critical behavior on the complex magnetic field plane and on the complex plane of other couplings in the Hamiltonian. We have found the new behavior $\sigma = -2/3$ also for spin models in a connected and non-connected rings.

We speculate that the tricritical version of the Yang-Lee edge singularity might explain some anomalous experimental result for the exponent σ obtained in the literature from magnetisation data at low temperatures in the FeCl_2 .

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

Capítulo 1

Introdução

As transições de fase de primeira ordem ocorrem quando há descontinuidade na primeira derivada de potenciais termodinâmicos. Nas transições de segunda ordem, tipicamente, as derivadas primeiras são bem comportadas, mas as derivadas segundas divergem para valores específicos de parâmetros intensivos como pressão, temperatura, campo magnético, etc. Tais singularidades são conhecidas como pontos críticos e em suas vizinhanças encontramos leis de potência com expoentes (expoentes críticos) dependentes apenas de algumas características robustas do sistema como a dimensionalidade do espaço e as simetrias envolvidas. Os expoentes críticos definem classes de universalidade [1, 2, 3].

Existem diversos métodos para se estudar transição de fase. Neste trabalho vamos aplicar o método de Yang-Lee [4, 5]. Desde que este método apareceu, ele tem sido empregado basicamente para modelos da mecânica estatística do equilíbrio, mas também na mecânica estatística fora do equilíbrio, vide trabalho de revisão [6].

O método de Yang-Lee é baseado nos zeros da função de partição Z , onde a energia livre ($F \sim \log Z$) deixa de ser uma função analítica. A função de partição é dada pela soma de exponenciais reais para sistemas físicos. Assim, para que ela seja igual a zero, é necessário que pelo menos um parâmetro do sistema seja complexo, como por exemplo, o campo magnético ou sua exponencial $u = e^{\beta H}$. Definindo T_{cr} como sendo a temperatura de transição de fase de segunda ordem, temos que os zeros de Yang-Lee (ZYL) apresentarão comportamentos distintos para os casos $T < T_{cr}$, $T = T_{cr}$ e $T > T_{cr}$. Quando temos $T < T_{cr}$, os ZYL em geral tenderão, no limite termodinâmico a formar uma curva fechada no plano complexo da variável u , é como se os zeros separassem as duas fases do sistema, uma fase representada pela região interna à curva e a outra fase representada pela região externa, neste caso não há acúmulo de zeros em nenhum ponto.

Para $T = T_{cr}$, ponto de transição de fase de segunda ordem, os ZYL tenderão a tocar o eixo real positivo em $u = u_{cr} = e^{\beta H_{cr}}$ no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), definindo uma

densidade linear de zeros próximo ao eixo real positivo $\rho(u) \sim |u - u_{cr}|^\sigma$. Esta densidade tende a zero ($\sigma > 0$) no ponto de transição de segunda ordem $u = u_{cr}$ a medida que nos aproximamos do limite termodinâmico.

Temos um comportamento curioso quando $T > T_{cr}$, os zeros formam curvas abertas de modo que não se pode definir regiões internas e externas a curva, ou seja, há apenas uma fase desordenada. Conforme aumentamos o número de spins da rede os zeros tenderão a se acumular nas extremidades dessas curvas abertas. Os pontos de acúmulo $u = u_E$ são conhecidos por singularidades da extremidade de Yang-Lee (SEYL). A densidade linear dos zeros diverge na vizinhança de u_E na forma de potência, $\rho(u) \sim |u - u_E|^\sigma$, com $\sigma < 0$. Embora $T > T_{cr}$, temos essas leis de potência típicas de transição de segunda ordem. Esse fenômeno foi notado pela primeira vez por Kortman e Griffiths em [7] no modelo de Ising bidimensional para $T > T_{cr}$. A maior contribuição nesse assunto é o trabalho de Fisher [8] que estabeleceu, usando argumentos do grupo de renormalização, que a lei de potência $\rho(u) \sim |u - u_E|^\sigma$, com $\sigma < 0$ para $T > T_{cr}$, tem relação com fenômenos críticos descritos por uma teoria de campos escalares não unitária com vértice de interação $i\phi^3$.

A partir do modelo $i\phi^3$ de [8] o autor de [9], usando técnicas de teoria conforme em $D = 2$, mostrou que $\sigma = -1/6$ na vizinhança da SEYL para modelos bidimensionais. Este resultado estava próximo das estimativas numéricas imprecisas de [7]. Posteriormente o expoente $\sigma = -1/6$ foi verificado para o modelo de Ising 2D numericamente [10, 11] e experimentalmente [12, 13] de forma indireta.

É esse tipo de fenômeno crítico (singularidade da extremidade de Yang-Lee) que estudaremos neste trabalho. Em [8] mostrou-se que a SEYL deve ocorrer em espaços de diferentes dimensões incluindo o caso unidimensional. Nesta tese mostramos que a existência de soluções exatas via matriz transferência em $D = 1$ facilita a busca por novos pontos críticos.

Em geral $\sigma = -1/2$ para modelos unidimensionais, Yang e Lee mostraram esse resultado para o modelo de Ising ($D = 1$) de spin $1/2$ com condições de contorno periódicas em [5]. Para o modelo Potts de Q estados, com $Q \neq 1$ e positivo, novamente encontra-se $\sigma = -1/2$, vide [14], semelhante ao valor encontrado para o modelo do vetor de N -componentes [15]. O resultado se repete para o modelo Blume-Capel [16] e para o modelo Blume-Emery-Griffiths [17]. Nos trabalhos [15, 18] foi argumentado que $\sigma = -1/2$ para sistemas unidimensionais, de forma independente de modelo.

Yang e Lee estudaram os zeros da função de partição considerando o campo magnético complexo e a temperatura real. Por sua vez, Fisher estudou os zeros da função de partição no plano complexo da temperatura mantendo o campo magnético real [19]. Em muitos casos os zeros de Fisher (ZF), no limite termodinâmico, tendem a formar uma curva contínua no plano complexo da temperatura [20]. Fazendo com que eles também se

acumulem na extremidade com $\sigma = -1/2$, vide [14]. O autor de [21] estudou o modelo de Potts de Q estados bidimensional e tridimensional e conjecturou que o expoente de escala do campo magnético é igual ao expoente de escala da temperatura ($y_h = y_T$)¹. Esses expoentes se relacionam com σ da seguinte forma: $\sigma = (D - y_z)/y_z$, com $z = h$ ou T . Esse resultado também foi encontrado para o modelo Blume-Capel unidimensional [16].

Inspirados por [16], nós resolvemos calcular o expoente de escala do campo magnético y_h para modelos de spins unidimensionais com solução via matriz transferência, para isso usamos as relações de escala de tamanho finito (RETF) [22, 23], para os zeros mais próximos da SEYL. Encontramos $y_h = 2$, conseqüentemente $\sigma = -1/2$ para modelos que apresentam dupla degenerescência dos autovalores da matriz transferência. Na mesma situação de dupla degenerescência mas com o campo magnético real e temperatura complexa encontramos $y_T = y_h = 2$, portanto tudo como previsto na literatura. Começamos a especular o que aconteceria com o expoente σ na vizinhança da SEYL quando a matriz transferência fosse triplamente degenerada e encontramos que y_h poderia assumir um valor diferente de 2, no caso $y_h = 3$, ou seja, $\sigma = -2/3$.

Primeiramente começamos a investigar a existência desse novo comportamento para modelos de spin 1. No capítulo 2 descrevemos a técnica analítica e numérica que será aplicada nesta tese. No capítulo 3 consideramos o modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) [24] e seu sub-caso; modelo Blume-Capel (BC) [25]. Em ambos os casos, para valores dos parâmetros do modelo onde há tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência. Provaremos analiticamente que a densidade dos zeros poderá divergir com $\sigma = -2/3$ na vizinhança da SEYL. Nesse capítulo também comprovamos numericamente esse novo comportamento crítico. Estes resultados estão publicados em [17].

A fim de provar a universalidade desse novo expoente crítico σ , vamos considerar no capítulo 4 os efeitos de uma rede dinâmica representada por anéis conexos e desconexos. Os zeros de Yang-Lee nesta nova rede foram estudados em [26, 27, 28, 29, 30, 31]. No trabalho [31] os autores definiram modelos de spin sobre anéis conexos e desconexos a partir de modelos sobre anéis puramente conexos (condições periódicas de contorno). Quando consideramos as condições de tripla degenerescência entre os autovalores da matriz transferência, conseguimos obter o novo comportamento crítico $\sigma = -2/3$ também nessa nova rede. Este resultado é um passo muito importante para a nossa conjectura da existência de uma nova classe de universalidade para o expoente σ . Os resultados apresentados no capítulo 4 foram publicados em [32].

Após confirmarmos a existência desse novo comportamento crítico na vizinhança da SEYL para os zeros de Yang-Lee no plano complexo do campo magnético, resolvemos verificar a hipótese de $y_h = y_T = y_z$ [21]. Para isso calculamos como os zeros nos planos

¹Com $h = H/kT$.

complexos dos outros parâmetros (acoplamentos) do modelo se comportam na vizinhança da SEYL, ou seja, verificamos que o expoente de escala (y_z) dos outros parâmetros do modelo também poderá assumir o valor $y_z = 3$, esses cálculos estão apresentados no capítulo 5 e foram publicados em [33].

Até o momento, havíamos considerado a possibilidade do novo comportamento crítico somente para modelos de spin 1. Para comprovar a universalidade do novo expoente crítico, estudamos, no capítulo 6, o modelo de Ising de spin 1/2 com interações dos segundos vizinhos (modelo ANNNI) [34]. Assim provamos a existência do novo comportamento crítico para modelos de spin 1/2 incluindo interações entre os vizinhos além dos mais próximos e concluímos que o novo comportamento crítico não depende realmente do valor de spin. Esses resultados encontram-se publicados em [35].

Não basta o modelo apresentar tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência para encontrar o novo comportamento crítico, isso será discutido nos capítulos 3, 5 e 6.

No capítulo 7 apresentamos nossas conclusões. É importante salientar que após a publicação de [32], descobrimos o trabalho [36] onde o expoente $\sigma = -2/3$ já aparece num modelo de Potts especial na presença de um campo magnético com duas componentes complexificadas e supondo que os zeros vêm da condição, bastante especial, onde os três autovalores da matriz transferência tenham o mesmo módulo, vide apêndice A.

No apêndice B mostraremos como é feita a extrapolação para o limite termodinâmico utilizando o algoritmo de extrapolação de Burlisch e Stoer [37, 38, 39], do expoente de escala y_z calculado numericamente para redes com o número de spins finito, utilizando as relações de escala de tamanho finito. E no apêndice C descrevemos rapidamente o trabalho de C. Binek [13], o qual permite obter o expoente σ experimentalmente de forma indireta.

Capítulo 2

Zeros da função de partição de sistemas de spins em $D = 1$ via matriz transferência

2.1 Introdução

Podemos escrever a função de partição de um sistema de spins da seguinte forma:

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E(\{S_i\})}, \quad (2.1)$$

com E sendo a hamiltoniana do sistema, N o número de sítios e $\beta = 1/k_B T$. Para modelos unidimensionais, por exemplo,

$$E = - \sum_{i=1}^N [J S_i S_{i+1} + K S_i S_{i+2} + H S_i + \dots], \quad (2.2)$$

onde $-s \leq S_i \leq s$ assume $2s + 1$ valores inteiros ou semi-inteiros para um modelo de spin s , a função de partição Z_N será proporcional a um polinômio em cada uma das variáveis $(e^{\beta J}, e^{\beta K}, e^{\beta H}, \dots)$, onde $J, K, H, \dots$ são constantes de acoplamento. As reticências em (2.2) representam outros possíveis termos de interação ou autointeração entre os spins de cada sítio.

Para N finito a Física está nos zeros de Z_N . De (2.1) podemos notar que a função de partição será uma soma de exponenciais. Então se todos os parâmetros ou acoplamentos $J, K, H, \dots$ forem reais, a função de partição não será igual a zero, assim pelo menos um acoplamento da hamiltoniana deverá ser complexo para termos zeros da função de partição. Quando consideramos somente o campo magnético como complexo [4, 5], temos

os conhecidos zeros de Yang-Lee, mas também podemos considerar somente o acoplamento J/kT como complexo, assim teremos os zeros de Fisher [19]. Se considerarmos o campo magnético e a temperatura reais, com um dos outros acoplamentos complexos ($K, \dots$), chamaremos esses zeros de zeros generalizados [33].

Modelos de spins unidimensionais clássicos com condições periódicas de contorno, $S_i = S_{i+N}$, geralmente são solúveis via matriz transferência. Assim a função de partição ficará:

$$Z_N = \text{Tr} \mathbf{T}^N, \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{T}$ é a matriz transferência. A forma e a dimensão dessa matriz dependerá do modelo a ser tratado. Para o modelo de Ising de spin $1/2$ teremos uma matriz 2×2 , para o modelo de Ising de spin 1 , Potts de 3 estados, Blume-Capel e Blume-Emery-Griffiths a matriz será 3×3 , no modelo de Ising de spin $1/2$ considerando interação entre os segundos vizinhos a matriz será 4×4 , etc.

Podemos então achar a função de partição a partir dos autovalores da matriz transferência ($\mathbf{T}$) de um determinado modelo. Para isso temos que resolver a equação secular:

$$\det (\mathbf{T} - \lambda \mathbf{I}) = 0. \quad (2.4)$$

Em termos dos autovalores da matriz transferência, a função de partição pode ser escrita como:

$$Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N + \dots + \lambda_n^N, \quad (2.5)$$

com λ_i sendo os autovalores da matriz transferência e n a dimensão da matriz $\mathbf{T}$. A equação (2.4) nos fornecerá um polinômio de grau n :

$$\lambda^n + a_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + a_1\lambda + a_0 = 0, \quad (2.6)$$

onde a_r , $r = 0, 1, \dots, n-1$ são funções dos parâmetros do modelo tratado.

A equação (2.6), também pode ser escrita na forma

$$(\lambda - \lambda_n) \dots (\lambda - \lambda_2) (\lambda - \lambda_1) = 0. \quad (2.7)$$

Pela comparação das equações (2.6) e (2.7), encontramos relações entre os autovalores da matriz transferência e os coeficientes da equação secular de n -ésimo grau. Essas relações são conhecidas por teorema de Vieta:

$$a_{n-1} = -(\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n);$$

$$\begin{aligned} a_{n-2} &= \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_1 \lambda_3 + \lambda_1 \lambda_4 + \dots + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_2 \lambda_4 + \dots + \lambda_{n-1} \lambda_n, \\ a_{n-3} &= -(\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_1 \lambda_2 \lambda_4 + \dots + \lambda_{n-2} \lambda_{n-1} \lambda_n); \\ &\vdots \\ a_0 &= (-1)^n \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{n-1} \lambda_n. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Em princípio a função de partição e seus zeros podem ser calculados exatamente de forma analítica para modelos unidimensionais via matriz transferência $\mathbf{T}$ de dimensão $n = 2, 3, 4$, pois nesses casos há solução analítica de (2.6). Porém somente para o modelo de Ising de spin $1/2$ e modelo de Potts de Q estados isso é possível. Nesse último caso isso é possível pois $Q - 1$ autovalores da matriz transferência $\mathbf{T}$ são degenerados e na prática temos que resolver apenas uma equação de segundo grau para encontrar os Q autovalores, vide [14].

2.2 Cálculo exato do expoente σ para $N = 2$

Para exemplificar o que foi mostrado genericamente até agora, vamos resolver o modelo de Ising de spin $1/2$, com condições periódicas de contorno, onde a função de partição do modelo é dada por

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} \exp \left(\beta J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + \beta H \sum_{i=1}^N S_i \right) \quad (2.9)$$

com $S_i = \pm 1$, o acoplamento J define a intensidade de interação entre os primeiros vizinhos e H o campo magnético. Como $-N \leq \sum_{i=1}^N S_i \leq N$ a função de partição será proporcional a um polinômio na variável $u = e^{2\beta H}$:

$$Z_N = u^{-N/2} P_N(u) \quad (2.10)$$

Na variável u teremos N zeros de Yang-Lee (ZYL) para Z_N .

Os ZYL refletem a simetria $\mathcal{Z}_2$: $Z_N(H) = Z_N(-H)$. Assim, se $P_N(u_k) = 0$, o inverso também será zero ($P_N(1/u_k) = 0$). Essa propriedade é muito importante para a demonstração do teorema do círculo (TS1) [5]. Este teorema afirma que os zeros estarão na circunferência de raio 1 ($|u| = 1$) no plano complexo de u , se os acoplamentos entre os vizinhos forem do tipo ferromagnético ($J > 0$), sendo válido em qualquer dimensão espacial e em redes de geometrias diferentes com acoplamentos (ferromagnéticos) além dos primeiros vizinhos.

Podemos escrever a função de partição do modelo de Ising unidimensional de spin $1/2$

como:

$$Z_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N, \quad (2.11)$$

onde $\lambda_{\pm}$ são os autovalores da matriz transferência $\mathbf{T}$

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \exp[\beta(J+H)] & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp[\beta(J-H)] \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Para encontrar os zeros da função de partição (2.11), os autovalores devem obedecer a condição:

$$\lambda_+ = (-1)^{1/N} \lambda_- = \exp \frac{(2k-1)\pi i}{N} \lambda_- \quad , \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad (2.13)$$

$$\lambda_+ \equiv e^{i\varphi_k} \lambda_-. \quad (2.14)$$

Note, para uso posterior, que

$$|\lambda_+| = |\lambda_-|. \quad (2.15)$$

É conveniente introduzir a variável $c = e^{-\beta J}$, pois o intervalo não compacto da temperatura $0 \leq T \leq \infty$ corresponderá ao intervalo compacto $0 \leq c \leq 1$, com $J > 0$. A equação secular (2.4) se torna uma equação de segundo grau:

$$\lambda^2 - \frac{2}{c} \cosh(\beta H) \lambda + \left(\frac{1}{c^2} - c^2 \right) = 0 \quad (2.16)$$

Redefinindo os autovalores $\lambda \rightarrow \frac{1}{c} \lambda$ podemos notar que as equações de Vieta serão

$$\lambda_+ \lambda_- = 1 - c^4 \quad (2.17)$$

$$\lambda_+ + \lambda_- = 2 \cosh(\beta H). \quad (2.18)$$

Assim usando a condição para os zeros (2.13) em (2.17) temos

$$\lambda_{\pm} = \sqrt{1 - c^4} e^{\pm i\varphi_k/2} \quad (2.19)$$

Substituindo (2.19) de volta na equação (2.18) encontramos os valores para o campo

magnético H_k que zera Z_N :

$$\cosh(\beta H_k) = \sqrt{1 - c^4} \cos \frac{(2k - 1)\pi}{2N} \quad (2.20)$$

Como o lado direito da equação (2.20) está entre -1 e 1 temos soluções puramente imaginárias para o campo magnético que definimos como $\beta H_k = i\theta_k/2$, de forma que os zeros de Yang-Lee são dados por $u_k = e^{i\theta_k}$ com

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

Os zeros u_k estão distribuídos sobre um arco de circunferência de raio 1, no plano complexo de u , $|u_k| = 1$, em acordo com TS1. Os zeros com maior valor de $\Re u$ corresponderão a $k = 1$ e $k = N$, eles se localizam no primeiro e no quarto quadrantes respectivamente, nas extremidades do arco de circunferência no plano complexo de u . No limite termodinâmico os zeros se distribuem sobre um arco com $|\theta| > \theta_E$, onde

$$\cos \theta_E = \lim_{N \rightarrow \infty} \cos \theta_1 = 1 - 2c^4 \quad (2.22)$$

Para $|\theta| < \theta_E$ há uma lacuna de zeros. Só para $T \rightarrow 0$ ($c \rightarrow 0$) o arco de circunferência tende a tocar o eixo real positivo em $H = 0$ que é a transição para/ferromagnética trivial do modelo de Ising unidimensional, vide por exemplo [40]. Para $T > 0$ os zeros se acumulam em torno de $\theta = \theta_E$ quando $N \rightarrow \infty$, de acordo com o que foi dito na introdução com $T_{cr} = 0$.

Para estudar a vizinhança do ponto θ_E devemos calcular a densidade linear próxima a ele. Para isso, consideramos que o módulo da variação angular ($d\theta_k$) corresponde ao comprimento do arco de circunferência entre o k -ésimo e o $(k+1)$ -ésimo zero de Yang-Lee no plano complexo de u . Assim podemos calcular a densidade de zeros como sendo o inverso da distância entre dois zeros consecutivos ao longo da curva a qual pertencem. Dividindo por N para normalizar $\int_0^{2\pi} d\theta \rho(\theta) = 1$ teremos de (2.21):

$$\rho(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N|d\theta/2|} = \frac{1}{2\pi} \frac{|\sin \theta/2|}{\sqrt{\sin^2 \theta/2 - \sin^2 \theta_E/2}} \quad (2.23)$$

com $\cos \theta \leq \cos \theta_E$. A expressão (2.23) reproduz o resultado obtido por Yang e Lee em 1952 [5]. Expandindo em torno da extremidade do arco:

$$\sin \frac{\theta}{2} \approx \sin \frac{\theta_E}{2} + \frac{(\theta - \theta_E)}{2} \cos \frac{\theta_E}{2}, \quad (2.24)$$

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

$$\rho(\theta) \sim (\theta - \theta_E)^{-1/2}. \quad (2.25)$$

O expoente σ está relacionado com o fator de escala do campo magnético (y_h) através da relação:

$$\sigma = \frac{D - y_h}{y_h} = \frac{1 - y_h}{y_h}, \quad (2.26)$$

onde D é a dimensão do espaço. É dito na literatura que para $T > T_{cr}$, y_h e consequentemente σ , dependem somente da dimensão do espaço, vide [8]. Este resultado é bastante conhecido. Foi demonstrado em $D = 1$ que $\sigma = -1/2$ para o modelo de Ising de spin $1/2$ [5, 36], para o modelo de Potts de Q estados com $Q > 0$ e $Q \neq 1$ [14], para modelo do vetor de N componentes [15] para o modelo de Blume-Capel [16], para o modelo de Blume-Emery-Griffiths [17]. Foram apresentados em [18] e [16] argumentos independentes do modelo que $\sigma = -1/2$. Foi estudado também o expoente de escala y_t relacionado a temperatura. Neste caso os zeros estão no plano complexo de $z = e^{\beta J}$ e são conhecidos por zeros de Fisher, como já foi mencionado, estes zeros também tendem a formar uma curva contínua no limite termodinâmico [20] e, considerando N grande, temos os zeros divergindo na vizinhança da SEYL, com expoente crítico $\sigma = -1/2$ [16], ou seja, parece que $y_h = y_t = 2$ em $D = 1$.

Uma maneira alternativa de se calcular o expoente $\sigma = -1/2$ é considerar as relações de escala de tamanho finito (RETF) “Finite size scaling relations” [22, 23] para os zeros. Elas seguem [22] do grupo de renormalização. Introduzindo a variável:

$$A \equiv e^{\beta H} + e^{-\beta H} = 2 \cosh(\beta H) \quad (2.27)$$

e considerando a condição (2.14), as relações (2.17) e (2.18) se tornam:

$$\lambda_-^2 e^{i\varphi} = 1 - c^4, \quad (2.28)$$

$$\lambda_- (1 + e^{i\varphi}) = A(\varphi). \quad (2.29)$$

Combinando essas equações podemos eliminar λ_- e encontramos uma equação par em φ para $A(\varphi)$:

$$A(\varphi) = (1 + \cos(\varphi)) \sqrt{1 - c^4} \quad (2.30)$$

O ponto de transição de fase de segunda ordem se localiza pela coincidência dos dois maiores autovalores [41, 42]. Como $\lambda_2 = e^{i\varphi}\lambda_1$ e temos só dois autovalores, isso significa que a SEYL está em $\varphi = 0$. Por hipótese, para N finito a menor fase $\varphi_1 = \frac{\pi}{N}$, vide (2.13), deve corresponder ao zero mais próximo da SEYL, isso tem se confirmado numericamente. Assim podemos fazer uma expansão em série de Taylor para o zero mais próximo da singularidade de Yang-Lee, para N grande, e encontramos¹:

$$\begin{aligned} A_1 &= A(\varphi)|_{\varphi=\frac{\pi}{N}} = \left[A(0) + \varphi \frac{dA}{d\varphi} \Big|_{\varphi=0} + \frac{\varphi^2}{2!} \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \Big|_{\varphi=0} + \frac{\varphi^3}{3!} \frac{d^3 A}{d\varphi^3} \Big|_{\varphi=0} + \dots \right]_{\varphi=\pi/N} \\ &= A(0) + \frac{\pi^2}{2N^2} \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \Big|_{\varphi=0} + \frac{\pi^3}{24N^4} \frac{d^4 A}{d\varphi^4} \Big|_{\varphi=0} + \dots, \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde $A(\varphi = 0) = A(0) = A_E$ é a localização da singularidade de Yang-Lee (SEYL).

Por outro lado, sabemos que o zero mais próximo da SEYL obedece a relação de escala de tamanho finito (RETF) [22, 23]:

$$A_1[N] = A_1[L] = A_1[\infty] + \frac{C_1}{L^{y_h}} + \dots = A_1[\infty] + \frac{C_1}{N^{y_h}} + \dots, \quad (2.32)$$

Onde $N = L^D$, sendo $D = 1$ e reticências são as correções na relação de escala de tamanho finito. Usamos colchetes em (2.32) para a dependência em N e parênteses em (2.31) para a dependência em φ , ou seja, $A_1[\infty] = A(0)$. Este fato pode parecer inconsistente, mas são apenas nomenclaturas diferentes, tanto o ∞ e o 0 representam o valor da variável A na singularidade da extremidade de Yang-Lee.

Usando (2.30) obtemos (2.31) para o modelo de Ising de spin $1/2$ unidimensional. Comparando (2.31) com (2.32) concluímos que $y_h = 2$ e substituindo em (2.26) temos $\sigma = -1/2$.

Assim, provamos analiticamente de duas maneiras distintas que $\sigma = -1/2$ para o modelo de Ising de spin $1/2$. Utilizaremos a segunda maneira para determinar y_h e σ para modelos com mais de dois autovalores ($n > 2$).

2.3 Generalização para modelos de spin com $n > 2$

Como já foi dito anteriormente, nem sempre é trivial resolver a equação (2.6), nem mesmo obter σ analiticamente e de forma exata para um modelo de spin unidimensional. Assim vamos generalizar os resultados obtidos para o modelo de Ising de spin $1/2$, para modelos unidimensionais que possuam matriz transferência $T_{n \times n}$ com $n > 2$.

¹Note que $A_1 = u_1 + 1/u_1$ onde $u_1 = u(\varphi_1)$. Portanto podemos obter o primeiro zero de cada uma das extremidades $u_1^\pm$ a partir de A_1 .

Na prática, quando o número N de spins for grande, em geral os zeros aparecem quando temos pelo menos dois autovalores iguais em módulo, vide (2.14) e maiores que os outros autovalores da matriz transferência:

$$\lambda_2 = e^{i\varphi} \lambda_1, \quad (2.33)$$

$$|\lambda_2| = |\lambda_1| > |\lambda_i|, \quad i = 3, 4, \dots, n. \quad (2.34)$$

Isto nos leva a reescrever a função de partição para N grande da seguinte forma:

$$Z_n = \lambda_1^N \left[1 + e^{iN\varphi} + \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right)^N + \dots + \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^N \right] \approx \lambda_1^N (1 + e^{iN\varphi}). \quad (2.35)$$

Teremos zeros quando:

$$\varphi = (2k - 1) \frac{\pi}{N}, \quad k = 1, \dots, N. \quad (2.36)$$

Os zeros do modelo a ser tratado estarão distribuídos no plano complexo de $z = e^{\beta K}$, com K sendo o acoplamento presente na hamiltoniana que assumirá valores complexos: No caso do modelo de Ising de spin 1/2 usamos $K = H$. Os zeros poderão formar diferentes curvas, mas para modelos unidimensionais os zeros não tendem a tocar o semi-eixo real positivo para $T > 0$, fazendo com que eles se acumulem em um determinado ponto, esse ponto é SEYL.

De forma análoga ao que foi feito para o modelo de Ising de spin 1/2, vamos considerar $\lambda_2 = e^{i\varphi} \lambda_1$ e as equações (2.8). Podemos notar que teremos n equações com n incógnitas $(\varphi, \lambda_1, \lambda_3, \dots, \lambda_n)$. Combinando as equações (2.8) podemos eliminar $\lambda_1, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ e encontrar uma relação que dependa somente de φ . Assim teremos a equação:

$$F(\varphi, a_0, a_1, \dots, a_{n-1}) = 0 \quad (2.37)$$

Ao substituir $a_i[z(\varphi)]$ em (2.37) teremos uma relação análoga a (2.30), que nos dará informações sobre $z(\varphi)$ em torno de $\varphi = 0$, assim como (2.30) nos deu $A(\varphi)$ e indiretamente $u(\varphi)$ ao inverter a relação $A(\varphi) = u(\varphi) + u^{-1}(\varphi)$. De derivadas sucessivas de (2.37) com relação a φ calculadas em $\varphi = 0$ construiremos uma expansão em série de Taylor, para N grande, para o zero mais próximo da SEYL,

$$z = z(\varphi) \Big|_{\varphi=\frac{\pi}{N}} = \left[z(0) + \varphi \frac{dz}{d\varphi} \Big|_{\varphi=0} + \frac{\varphi^2}{2!} \frac{d^2 z}{d\varphi^2} \Big|_{\varphi=0} + \frac{\varphi^3}{3!} \frac{d^3 z}{d\varphi^3} \Big|_{\varphi=0} + \dots \right]_{\varphi=\pi/N}$$

$$= z(0) + \frac{\pi}{N} \frac{dz}{d\varphi} \Big|_{\varphi=0} + \frac{\pi^2}{2N^2} \frac{d^2z}{d\varphi^2} \Big|_{\varphi=0} + \frac{\pi^3}{6N^3} \frac{d^3z}{d\varphi^3} \Big|_{\varphi=0} + \dots \quad (2.38)$$

onde $z(\varphi = 0) = z(0)$ é a singularidade de Yang-Lee. Esta equação é análoga a relação (2.31) para $A(\varphi)$ do modelo de Ising de spin 1/2.

Assim como (2.30) é par pela troca de $\varphi \leftrightarrow -\varphi$, a equação (2.37) também terá simetria $\varphi \leftrightarrow -\varphi$ pois as equações (2.8) são invariantes a troca de $(\varphi, \lambda_1) \rightarrow (-\varphi, e^{i\varphi} \lambda_1)$ e será par em φ .

Generalizando as RETF (2.32) temos:

$$z_1[N] = z_1[L] = z_1[\infty] + \frac{C_1}{N^{y_z}} + \dots, \quad (2.39)$$

onde $z_1[\infty]$ é a singularidade de Yang-Lee e y_z é o expoente de escalonamento da variável z e C_1 uma constante independente do número de spins $N = L^D = L$. No caso de $z = e^{\beta H}$ ele é conhecido como y_h , vide (2.32). Este expoente está relacionado com σ via $\sigma = \frac{D-y_z}{y_z}$, com D sendo a dimensão do espaço de forma análoga a (2.26)

Assim, ao calcular (2.38) podemos compará-la com a relação (2.39) e então podemos encontrar os expoentes y_z e σ .

Para o modelo de Ising não encontramos dificuldades para a realização dos cálculos analíticos, vide seção 2.2. A medida que considerarmos modelos que possuam mais acoplamentos na hamiltoniana. Notamos que mais complicado é o cálculo analítico e numérico do expoente crítico na vizinhança da SEYL.

Os coeficientes $a_0, a_1, \dots, a_{n-1}$ dependem dos parâmetros da hamiltoniana ($e^{\beta H}$, $e^{\beta J}$, $e^{\beta K}$, ...), fazendo com que eles possam depender da variável $z = z(\varphi)$: $a_i = a_i[z(\varphi)]$. Portanto ao substituir $a_i[z(\varphi)]$ em (2.37) e derivando-a em relação a φ , em $\varphi = 0$, encontraremos informações sobre $d^j z / d\varphi^j|_{\varphi=0}$. O menor valor de j tal que $d^j z / d\varphi^j|_{\varphi=0}$ seja não nula nos leva a y_z .

2.4 Cálculo Numérico

Neste trabalho vamos calcular também y_z e σ numericamente para diferentes modelos de spins unidimensionais com e sem condições periódicas de contorno. Vamos tratar zeros que não estejam na circunferência de raio 1 e zeros cujas posições não possam ser calculadas analiticamente.

Para calcular os zeros de um modelo de spin, podemos utilizar a função de partição (2.5) ou utilizar uma fórmula alternativa [31, 32], dada por:

$$Z_N = -N \left[\ln \left(\sum_{r=0}^n (-1)^r a_{n-r} g^r \right) \right]_{g^N}, \quad (2.40)$$

onde $(-1)^r a_{n-r}$ correspondem aos coeficientes a_r da equação secular, com $a_n = 1$, g é uma variável arbitrária real (parâmetro de contagem) e $[f(g)]_{g^N}$ é o termo de potência g^N da expansão de Taylor da função $f(g)$ em $g = 0$. Esta função pode ser facilmente testada para N pequeno e ao comparar com (2.5) nos fornece os mesmos resultados. Como exemplo, vamos considerar o modelo de Ising de spin 1/2. A equação secular do modelo é dada por:

$$\lambda^2 - a_1 \lambda + a_0 = 0 \quad (2.41)$$

com $a_0 = \lambda_+ \lambda_-$ e $a_1 = \lambda_+ + \lambda_-$ dados por (2.17) e (2.18) respectivamente. Calculando Z_1 e Z_2 a partir da equação (2.40) temos:

$$Z_1 = -a_1 = \lambda_+ + \lambda_- \quad (2.42)$$

$$Z_2 = -2 \left(a_0 - \frac{a_1^2}{2} \right) = -2 \left[\lambda_+ \lambda_- - \frac{(\lambda_+ + \lambda_-)^2}{2} \right] = \lambda_+^2 + \lambda_-^2 \quad (2.43)$$

Assim, as equações (2.42) e (2.43) reproduzem a função de partição (2.11) para $N = 1$ e $N = 2$ do modelo de Ising de spin 1/2. Usaremos a fórmula alternativa (2.40) como ponto de partida nos cálculos numéricos dos zeros porque ela é computacionalmente mais eficiente que a equação (2.5).

Sabendo a posição dos zeros, podemos analisar como os zeros se comportam na vizinhança da SEYL. Para isso podemos fazer dois tipos de análise. A primeira utilizando os dois zeros mais próximos da SEYL. Assim, para N grande, supomos que os zeros estejam sobre uma certa curva. Assumindo que o comprimento da curva entre dois zeros consecutivos seja, próximo às extremidades do arco, aproximadamente igual a:

$$|dz_k| = |z_1 - z_2|, \quad (2.44)$$

obtemos a densidade no ponto médio, $\bar{z}_k = (z_{k+1} + z_k) / 2$, como inverso da distância entre os zeros, vide [44]. Normalizando temos próximo a singularidade:

$$\rho(N) = \frac{1}{N|z_1(N) - z_2(N)|}. \quad (2.45)$$

Assim podemos calcular numericamente a densidade próxima a SEYL a partir dos dois primeiros zeros da extremidade do arco. Com auxilio da RETF para a densidade linear dos zeros [22, 23]:

$$\rho(N) = C_2 L^{y_z - D} + \dots = C_2 N^{(y_z - D)/D} + \dots, \quad (2.46)$$

onde C_2 é uma constante independente do número de spins e as reticências são correções de escala de tamanho finito. Então, é possível obter $(y_z - D)/D$ a partir da curva $\rho(N)$. O ajuste di-log

$$\ln \rho(z_{12}) = C_1 \ln N + C_2, \quad (2.47)$$

com $z_{12} = (z_1 + z_2)/2$ e diferentes tamanhos de rede (N) nos fornece uma reta com coeficiente angular $C_1 = (y_z - D)/D = y_z - 1$ que confirma a relação de escala (2.46). Seguindo [23] podemos obter um resultado numérico mais preciso para y_z a partir da razão de densidades para redes de tamanhos sucessivos. Do termo dominante de (2.46) deduz se:

$$y_z^\rho(N_a) = 1 + \left(\ln \frac{N_{a+1}}{N_a} \right)^{-1} \ln \left(\frac{\rho(N_{a+1})}{\rho(N_a)} \right) \quad (2.48)$$

De forma análoga a (2.47) e (2.48) podemos obter y_z numericamente a partir da relação de escala (2.39):

$$\ln \Re(\Delta z) = \tilde{C}_1 \ln N + \tilde{C}_2 L, \quad (2.49)$$

$$\ln \Im(\Delta z) = \bar{C}_1 \ln N + \bar{C}_2 L, \quad (2.50)$$

$$y_z^E(N_a) = - \left(\ln \frac{N_{a+1}}{N_a} \right)^{-1} \ln \left(\frac{\Delta z_1(N_{a+1})}{\Delta z_1(N_a)} \right), \quad (2.51)$$

onde $\tilde{C}_1$, $\tilde{C}_2$, $\bar{C}_1$ e $\bar{C}_2$ são independentes do tamanho da rede (N) e os coeficientes angulares $\tilde{C}_1$ e $\bar{C}_1$ resultam em $-y_z$. Além disso definimos $\Delta z[N_a] = z[\infty] - z_1[N_a]$. Como veremos mais tarde, se a reta tangente à curva de zeros próxima a $z_E = z(\varphi = 0)$ tiver inclinação menor que 45° é natural que (2.49) dê resultados mais precisos do que (2.50) e vice-versa para inclinações menores que 45° .

Para calcular y_z com $N \rightarrow \infty$ utilizamos o algoritmo de extrapolação Burlisch-Stoer

(BST) [37, 38, 39], vide apêndice B. A extrapolação BST possui um parâmetro livre w que depende de como $N \rightarrow \infty$. A extrapolação é do tipo:

$$y_z(N) = y_z(\infty) + \frac{s_1}{N^w} + \frac{s_2}{N^{2w}} + \dots \quad (2.52)$$

O algoritmo BST substitui a sequência original $y_z(N_a)$ por uma sequência de razões de polinômios de convergência mais rápida que a relação original $y_z(N)$. Seguindo [38] podemos determinar w de forma que a incerteza da extrapolação seja minimizada. A incerteza é calculada como sendo duas vezes a diferença das duas últimas extrapolações antes do cálculo final que fornece y_z [38], vide apêndice B. Devemos testar alguns w diferentes, a fim de encontrar o que nos forneça resultado mais estável.

Capítulo 3

Modelo de Blume-Emery-Griffiths

Neste capítulo vamos procurar o comportamento crítico na vizinhança da singularidade de Yang-Lee diferente do usual $\sigma = -1/2$. Para isso, vamos considerar o modelo de spin 1 Blume-Emery-Griffiths unidimensional. Escolhemos esse modelo por ele englobar outros casos, como o modelo de Ising de spin 1, o modelo de Potts de 3 estados e o modelo Blume-Capel, vide [43].

Na seção 3.1 vamos deduzir analiticamente o valor do expoente de escala do campo magnético y_h . Este cálculo será feito a partir da comparação entre a RETF (2.39) com a expansão de Taylor, para um número grande de spins, do zero mais próximo da SEYL.

É possível obter $y_h \neq 2$ ($\sigma \neq -1/2$). Para que isso ocorra é necessário que a matriz transferência seja triplamente degenerada. Assim, na seção 3.2, vamos calcular relações entre os parâmetros da hamiltoniana, a partir da equação secular do modelo BEG, que forneça tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência. Deste modo, consideraremos alguns casos especiais do modelo BEG e calcularemos numericamente os zeros da função de partição. Ajustando curvas às relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46) poderemos determinar o expoente de escala y_h numericamente.

3.1 Cálculo Analítico de $\sigma = -2/3$

Blume, Emery e Griffiths (BEG) [24] estudaram a separação de fase da mistura líquida de He^3 e He^4 . Esse modelo apresenta duas transições de fase diferentes, uma que separa o He^3 do He^4 e uma transição superfluida ocorre na fase rica em He^4 . Eles utilizaram um modelo de spin 1 para descrever essas transições. Estudamos esse modelo mais detalhadamente na minha dissertação de mestrado, vide [43].

A hamiltoniana do modelo é dada por:

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} [JS_i S_j + KS_i^2 S_j^2] - \sum_{i=1}^N [\Delta (1 - S_i^2) + HS_i], \quad (3.1)$$

onde H é o campo magnético, Δ e K são associados com o momento de quadrupolo $\langle S_i^2 \rangle$ e a interação quártica entre os spins $\langle S_i^2 S_j^2 \rangle$ mais próximos respectivamente, com N sendo o número de spins e $S_i = 0, \pm 1$.

A função de partição (2.1) para o modelo BEG ficará:

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}=0,\pm 1} e^{-\beta E}. \quad (3.2)$$

Considerando o modelo unidimensional com condições periódicas de contorno, teremos a solução via matriz transferência, assim a função de partição se torna:

$$Z_N(h, T) = \text{Tr} \mathbf{T}^N \quad (3.3)$$

onde T é a matriz transferência dada por

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \frac{b}{c} \frac{1}{u} & \sqrt{\frac{x}{u}} & \frac{c}{b} \\ \sqrt{\frac{x}{u}} & x & \sqrt{xu} \\ \frac{c}{b} & \sqrt{xu} & \frac{b}{c} u \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

com

$$u \equiv e^{-\beta H}, \quad b \equiv e^{\beta K}, \quad (3.5)$$

$$x \equiv e^{\beta \Delta}, \quad c \equiv e^{-\beta J}. \quad (3.6)$$

Para o modelo BEG, a equação (2.5) se traduz em:

$$Z_N = \frac{1}{c^N} (\lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N), \quad (3.7)$$

com λ_i ($i = 1, 2, 3$) soluções da equação secular normalizada:

$$\lambda^3 - a_2 \lambda^2 + a_1 \lambda - a_0 = 0, \quad (3.8)$$

onde

$$a_0 = b \tilde{x} (1 - c^2) [b (1 + c^2) - 2c], \quad (3.9)$$

$$a_1 = b^2 (1 - c^4) + A \tilde{x} (b - c), \quad (3.10)$$

$$a_2 = \tilde{x} + Ab, \quad (3.11)$$

e

$$A = 2 \cosh(\beta H) = \left(u + \frac{1}{u}\right), \quad \tilde{x} \equiv cx \quad (3.12)$$

Neste capítulo vamos considerar que somente o acoplamento relacionado ao campo magnético será complexo e todos os outros serão reais ($K, \Delta, J \in \mathbb{R}$), portanto teremos os zeros $u_k = e^{\beta H_k}$, $k = 1, \dots, 2N$, conhecidos por zeros de Yang-Lee (ZYL).

Nem sempre conseguimos calcular analiticamente a posição exata dos ZYL para modelos unidimensionais, como foi feito no capítulo anterior para o modelo de Ising de spin 1/2. Para o modelo BEG, o cálculo se torna muito complicado visto que a_0, a_1, a_2 dependem dos parâmetros da hamiltoniana de forma complicada, vide (3.9)-(3.11). Portanto, é necessário fazer algumas considerações para encontrar os ZYL.

Sabemos que quando N é grande, os autovalores da matriz transferência devem obedecer as condições (2.33) e (2.34), [14, 45, 46]. Portanto, de (2.35) podemos encontrar a posição dos ZYL da função de partição do modelo BEG, fazendo uma expansão em série de Taylor, na vizinhança do ponto $\varphi = \pi/N$, vide (2.36). Ao considerar que $A = A(\varphi) = u(\varphi) + 1/u(\varphi)$, a posição exata dos zeros da função de partição do modelo BEG se torna:

$$u^\pm(\varphi_k) = \frac{1}{2} \left[A(\varphi_k) \pm \sqrt{A(\varphi_k)^2 - 4} \right]. \quad (3.13)$$

Conforme explicado no capítulo 2, para encontrarmos $A(\varphi)$ deve-se tomar o teorema de Vieta (2.8) para um sistema com três incógnitas $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$:

$$a_0 = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \quad (3.14)$$

$$a_1 = \lambda_1 \lambda_2 + \lambda_2 \lambda_3 + \lambda_3 \lambda_1 \quad (3.15)$$

$$a_2 = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \quad (3.16)$$

Substituindo a equação ($\lambda_2 = e^{i\varphi} \lambda_1$) nas equações acima e eliminando λ_3 , chega-se às relações:

$$a_1 = \lambda_1 a_2 (1 + e^{i\varphi}) - \lambda_1^2 (1 + e^{i\varphi} + e^{i2\varphi}), \quad (3.17)$$

$$a_0 = \lambda_1^2 a_2 e^{i\varphi} - \lambda_1^3 (e^{i\varphi} + e^{i2\varphi}). \quad (3.18)$$

As relações (3.17) e (3.18) só dependem de λ_1 e φ , assim podemos eliminar λ_1 e chegar

em uma relação que só depende de φ , análoga a (2.37), [16, 17]:

$$\begin{aligned} F(A, c, x, b, \varphi) &= a_0^2 (1 + 2 \cos \varphi)^3 + 4 \cos^2 \frac{\varphi}{2} (a_1^3 + a_0 a_2^3) - a_1^2 a_2^2 \\ &- 2 (1 + 2 \cos \varphi) (2 + \cos \varphi) a_0 a_1 a_2 = 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

Ao substituir as equações (3.9)-(3.11) em (3.19), encontra-se uma equação quártica em $A = A(\varphi)$. Voltando com essa função em (3.8), o módulo de dois autovalores serão sempre iguais, de acordo com a condição (2.33), mas como já foi citado anteriormente, os autovalores encontrados nem sempre obedecem a condição (2.34), fazendo com que ela tenha que ser sempre verificada.

Nota-se que a equação (3.19) é simétrica em $\varphi \rightarrow -\varphi$, essa simetria é consequência de $\lambda_1 \rightleftharpoons \lambda_2$ nas equações (3.14)-(3.16), que nos leva à simetria $\varphi \rightarrow -\varphi$, após eliminação de λ_3 e λ_1 . Agora devemos resolver a equação (3.19) e encontrar a solução apropriada $A(\varphi_1)$. Expandindo o resultado para $N \rightarrow \infty$ e com essa expansão de volta em (3.13) podemos obter uma expansão de Taylor para $u(\varphi_1)$. Comparando com a equação (2.39) encontra-se o expoente y_h analiticamente. A menos do ponto especial onde $A(0) = \pm 2$, a expansão em $1/N$ para $A(\varphi_1)$ e $u(\varphi_1)$ é muito semelhante, vide (3.13).

Trabalharemos com $A(\varphi_1)$. Embora a solução exata para a equação (3.19) seja complicada, visto que teremos um polinômio de grau quatro em $A(\varphi_1)$, é conveniente calcular uma expansão para $A(\varphi)$ em torno de $\varphi = 0$, análogo ao que foi feito em (2.38)

$$A(\varphi_1) = A(0) + \varphi_1 \left. \frac{dA}{d\varphi} \right|_{\varphi=0} + \frac{\varphi_1^2}{2!} \left. \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=0} + \frac{\varphi_1^3}{3!} \left. \frac{d^3 A}{d\varphi^3} \right|_{\varphi=0} + \dots \quad (3.20)$$

O menor valor de j tal que a derivada $d^j A/d\varphi^j$ em $\varphi = 0$ seja não nula nos fornecerá o valor de y_h . Quando comparando a equação (3.20) com (2.39), nos levará a $y_h = j$ e $\sigma = (1 - j)/j$. Para determinar j , considera-se as primeiras derivadas em relação a φ das equações (3.17)-(3.18), em $\varphi = 0$:

$$[\tilde{x}(b - c) - b\lambda_1] \frac{dA}{d\varphi} = (e^{i\varphi} - 1) \frac{\partial \lambda_1}{\partial \varphi} [(2 + e^{i\varphi}) \lambda_1 - a_2] \quad (3.21)$$

Admitindo que $\partial \lambda_1 / \partial \varphi$, em $\varphi = 0$, é bem comportada, então o lado direito da equação (3.21) desaparece em $\varphi = 0$, logo

$$[\tilde{x}(b - c) - b\lambda_1]_{\varphi=0} \left. \frac{dA}{d\varphi} \right|_{\varphi=0} = 0. \quad (3.22)$$

O lado esquerdo da equação (3.22) será zero se considerarmos $\lambda_1 = \tilde{x}(b - c)/b$. Substituindo essa relação na equação secular (3.8), encontramos uma condição especial para $\tilde{x}$,

dada por:

$$\tilde{x} = \frac{(1 - c^2) b^2}{|b - c|}. \quad (3.23)$$

Temos uma segunda possibilidade para a igualdade (3.22) ser verdadeira. Ao considerar $\tilde{x} \neq \frac{(1-c^2)b^2}{|b-c|}$, temos $(dA/d\varphi)_{\varphi=0} = 0$. Com isso, teremos que verificar a segunda derivada em relação a φ das equações (3.17) e (3.18) para que possamos tirar alguma conclusão, assim, usando $(dA/d\varphi)_{\varphi=0} = 0$ deduz-se:

$$\begin{aligned} & [\tilde{x}(b - c) - b\lambda_1]_{\varphi=0} \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \Big|_{\varphi=0} = \\ & 2ie^{i\varphi} [\lambda_1 (2e^{i\varphi} - 1) - \lambda_3] \frac{\partial \lambda_1}{\partial \varphi} - (e^{i\varphi} - 1) (\lambda_1 e^{i\varphi} - \lambda_3) \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Assumindo que $\partial \lambda_1 / \partial \varphi$ e $\partial^2 \lambda_1 / \partial \varphi^2$ em $\varphi = 0$ são bem comportadas, então em $\varphi = 0$ a equação (3.24) se torna:

$$[\tilde{x}(b - c) - b\lambda_1]_{\varphi=0} \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \Big|_{\varphi=0} = 2i(\lambda_1 - \lambda_3) \frac{\partial \lambda_1}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} \quad (3.25)$$

Se os autovalores da matriz transferência não apresentarem tripla degenerescência ($\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$) e $\tilde{x} \neq \frac{(1-c^2)b^2}{|b-c|}$, então termos $(d^2 A/d\varphi^2)_{\varphi=0} \neq 0$. Ao substituir este resultado e $(dA/d\varphi)_{\varphi=0} = 0$ na equação (3.20) e sabendo que $A = u + 1/u$, podemos compará-la com a equação (2.39) e concluirmos que $y_h = 2$ e $\sigma = -1/2$. Este é o resultado usual e já provado para vários modelos, como Ising [4], Blume-Capel [16], Blume-Emery-Griffiths [17] e outros.

Sabemos que $\sigma = -1/2$ é um expoente crítico universal, típico de transição de segunda ordem, só devendo depender da dimensão do espaço, mas ao analisarmos a equação (3.25), podemos perceber que se considerarmos que os autovalores da matriz transferência são triplamente degenerados ($\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$), o lado direito da equação (3.25) será zero. Consequentemente, se $\tilde{x} \neq \frac{(1-c^2)b^2}{|b-c|}$ teríamos $d^2 A/d\varphi^2|_{\varphi=0} \neq 0$, assim $j = 2 = y_h$, com $\sigma = -1/2$ mesmo com $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$.

Uma outra situação, seria considerar que (3.23) não é válida, então a terceira derivada em relação a φ das equações (3.17) e (3.18) deverá ser calculada. Admitindo $dA/d\varphi = d^2 A/d\varphi^2 = 0$, em $\varphi = 0$ tem-se:

$$\lambda_1 [\tilde{x}(b - c) - b\lambda_1]_{\varphi=0} \frac{d^3 A}{d\varphi^3} \Big|_{\varphi=0} =$$

$$3i \left(\lambda_1 - 2i \frac{\partial \lambda_1}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} \right) \left(3\lambda_1 - \lambda_3 - 2i \frac{\partial \lambda_1}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} \right) \frac{\partial \lambda_1}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} - \left[3i \left(\lambda_1 - 2i \frac{\partial \lambda_1}{\partial \varphi} \Big|_{\varphi=0} \right) (\lambda_1 - \lambda_3) \right] \frac{\partial^2 \lambda_1}{\partial \varphi^2} \Big|_{\varphi=0}. \quad (3.26)$$

Considerando novamente que $(\partial \lambda_1 / \partial \varphi)_{\varphi=0}$ e $(\partial^2 \lambda_1 / \partial \varphi^2)_{\varphi=0}$ sejam bem comportadas, o lado direito da equação (3.26) não é automaticamente zero para $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$, assim ao substituirmos $dA/d\varphi|_{\varphi=0} = d^2A/d\varphi^2|_{\varphi=0} = 0$, com $(d^3A/d\varphi^3)_{\varphi=0} \neq 0$ na equação (3.20), podemos compará-la com (2.39), assim concluímos que $y_h = 3$ e $\sigma = -2/3$. Este resultado é muito interessante, pois conseguimos mostrar analiticamente a possibilidade de um novo expoente crítico $\sigma = -2/3$, diferente do valor universal $\sigma = -1/2$. Essa é uma nova classe de universalidade que só aparece quando os autovalores da matriz transferência do modelo BEG forem triplamente degenerados [17, 32].

3.2 Cálculo Numérico de $\sigma = -2/3$

O próximo passo será provar numericamente a existência desse novo expoente crítico $\sigma = -2/3$. Para isso devemos encontrar uma relação entre as equações (3.14)-(3.16) que nos forneça $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$.

De (3.14)-(3.16) temos que $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = a_2/3$ se

$$a_1 a_2 - 9a_0^2 = 0, \quad 3a_1 - a_2^2 = 0. \quad (3.27)$$

Para o modelo de Ising de spin 1, $b = x = 1$, não temos nenhuma temperatura real para o qual ocorra a tripla degenerescência dos autovalores. O mesmo acontece para o modelo de Potts de 3 estados $b = 1/c^3$ e $\tilde{x} = u/c^3$, mas existem casos interessantes onde ocorre a tripla degenerescência. Vamos tratar aqui o modelo BEG com $b = c$ ($K = -J$), $A = 0$ ($\beta H = \pm i\pi/2$) e o modelo de Blume-Capel ($b = 1$), apresentados nas subseções (3.2.1), (3.2.2) e (3.2.3) respectivamente.

3.2.1 Caso I: Modelo BEG com $b = c$

Por possuir muitos parâmetros (u, c, x, b) o modelo BEG é complicado de se trabalhar. Para simplificar os cálculos vamos considerar $b = c$ ($K = -J$). Então podemos achar uma relação entre os parâmetros do modelo que forneça a tripla degenerescência dos autovalores e implique em alguma simplificação. Para $b = c$ a equação (3.19) deixa de ser quártica e passa a ser cúbica em $A(\varphi)$. Ao substituir as equações (3.9)-(3.11) em (3.27),

podemos encontrar um valor para a variável x , dependente somente da temperatura (c):

$$x = x(c) = (1 + c^2) \sqrt{\frac{(1 + c^2)}{27(1 - c^2)}} \quad (3.28)$$

e a posição exata da singularidade de Yang-Lee será:

$$A_E = \frac{2(4c^2 - 5)}{1 + c^2} x(c). \quad (3.29)$$

Então para qualquer $0 \leq c < 1$, existe um $x(c)$ real positivo que fornece tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência (3.4).

A singularidade da extremidade de Yang-Lee, dada pela equação (3.29), é o ponto no plano complexo de u onde os zeros tendem a acumular. Para exemplificar, vide ponto azul na figura 3.1(a). Conforme aumentamos o tamanho da rede, os zeros do modelo (pontos vermelhos) se aproximam da SEYL, como mostra a figura 3.1(b).

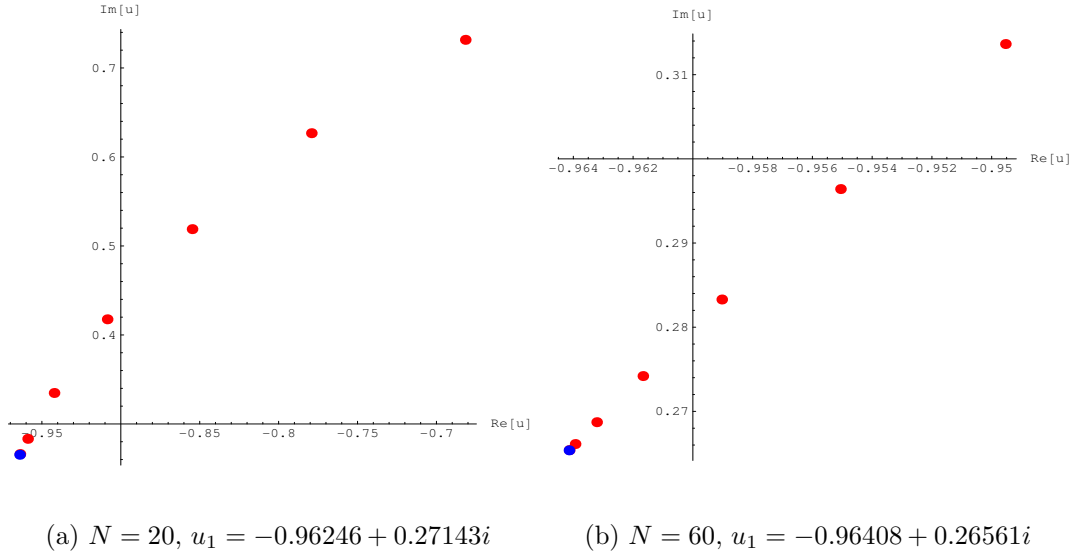


Figura 3.1: A figura mostra os sete zeros de Yang Lee (pontos vermelhos) mais próximos da SEYL (ponto azul). Conforme aumenta-se o tamanho da rede, os zeros ficam mais próximo da singularidade. Cálculo feito para $b = c = 1/10$, $u_E \approx -0.96414 + 0.26537i$ e com $x = (1 + c^2) \sqrt{\frac{(1+c^2)}{27(1-c^2)}} = 0.1963$.

A SEYL sempre estará na circunferência de raio 1 para $0 \leq c \leq \sqrt{2}/2$ e estará no eixo real negativo para $\sqrt{2}/2 < c < 1$, como mostra a figura 3.2. A quantidade $c = \sqrt{2}/2$ fornece $A = -2$ e sabemos que $-2 \leq A \leq 2$ implica em $|u| = 1$, logo como $A < -2$ para $c > \sqrt{2}/2$ já era de se esperar que os zeros saíssem da circunferência de raio 1,

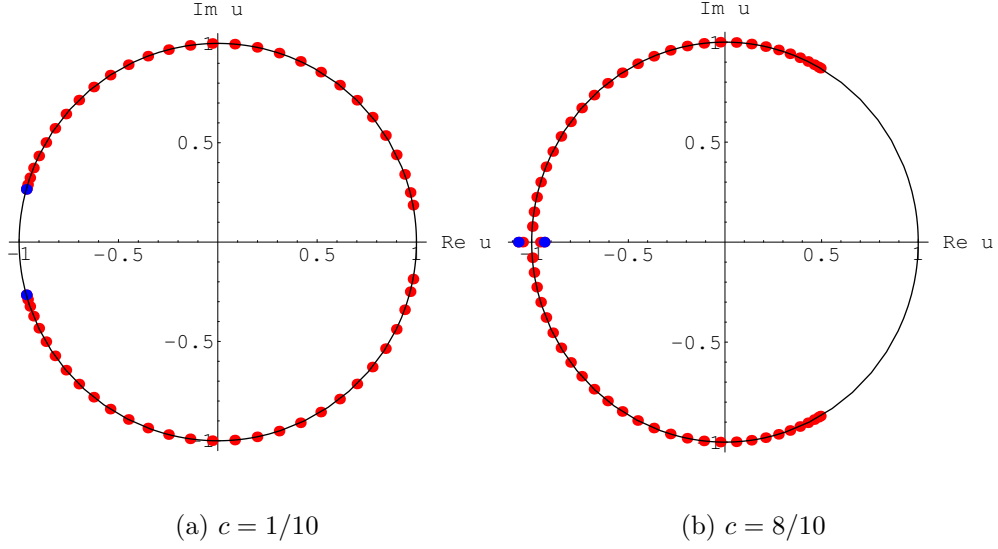


Figura 3.2: Zeros de Yang-Lee para o modelo BEG com $b = c$, utilizando a condição de tripla degenerescência (3.28), à temperaturas $c = 0.1$ (a) e $c = 0.8$ (b). Em ambas figuras nós temos 60 zeros. O zero mais próximo da SEYL é $u_1^\pm \approx -0.96408 \pm 0.26561i$ em (a) e $u_1^+ \approx -0.93576, u_1^- \approx -1.06865$ em (b)

portanto $c = \sqrt{2}/2$ é o limite da validade do TS1 para o caso de tripla degenerescência dos autovalores, com $b = c$. É típico de modelo de spin que os zeros tendam a sair da circunferência $|u| = 1$ assim que o acoplamento ferromagnético J se enfraqueça, isto é, $J \rightarrow 0^+$ que corresponde a $c = e^{-\beta J} \rightarrow 1^-$.

Os zeros do modelo BEG podem ser encontrados através da função de partição (2.40), que será deduzida posteriormente no capítulo 4 [31, 32]. Então, a função de partição (3.2) pode ser reescrita como:

$$Z_N = -Nc^{-N}[f(g)]_{g^N} = -Nc^{-N} [\ln (1 - a_2g + a_1g^2 - a_0g^3)]_{g^N}, \quad (3.30)$$

onde g é uma variável real arbitrária (parâmetro de contagem) e $[f(g)]_{g^N}$ é o termo de potência g^N da expansão de Taylor da função $f(g)$ em torno de $g = 0$.

Para saber como os zeros se comportam perto da singularidade de Yang-Lee, pode-se fazer dois tipos de análise, a primeira é aumentando o tamanho da rede e perceber como os zeros se aproximam da SEYL, para isso utilizamos a relação de escala de tamanho finito (2.39) e a outra forma é analisar como a densidade linear dos zeros diverge na extremidade do arco a qual eles pertencem, vide RETF (2.46).

Na prática, foram utilizadas redes com $N_a = 150 + 10(a - 1)$ spins, com $1 \leq a \leq 8$. Os zeros foram obtidos a partir do software MATHEMATICA 4.0. Acredita-se que tenha

N	u_1
150	$-0.998728407 + 0.050413964i$
160	$-0.998728476 + 0.050412602i$
170	$-0.998728530 + 0.050411525i$
180	$-0.998728574 + 0.050410663i$
190	$-0.998728609 + 0.050409965i$
200	$-0.998728638 + 0.050409393i$
210	$-0.998728662 + 0.050408921i$
220	$-0.998728682 + 0.050408527i$

Tabela 3.1: Primeiro zero de Yang Lee para redes com diferentes números de spins, com $b = c = 0.6$ e x dado pela expressão (3.28). A SEYL é dada por $u_E \approx -0.9987288217 + 0.0504057610i$.

uma precisão de pelo menos 30 dígitos, pois as equações para o cálculo dos zeros foram testadas em um caso onde se conhece exatamente a posição dos zeros: $\tilde{x} = c(3 - c^2)^2/2$ e $b = c(3 - c^2)/2$, que implica em $A_k = -2 - 2i(1 - c^2) \sin[2\pi(1 + 3k)]$, $k = 0, \dots, N-1$. Além disso, retornando os zeros obtidos numericamente no polinômio exato Z_N , vide (3.7), checamos que o resultado final para Z_N é nulo a menos de termos da ordem de 10^{-30} pelo menos. Como por exemplo, achamos os zeros da função de partição via (3.30) para $b = c = 0.1$, x dado pela condição (3.28) e $N = 80$, escolhemos um zero qualquer fornecido para o sistema, ao substituírmos esses valores na equação secular podemos encontrar os autovalores (λ_i), ao substituí-los na equação $Z_N = \lambda_1^{80} + \lambda_2^{80} + \lambda_3^{80}$, encontramos $Z_N = 0$ com precisão de 10^{-44} . Evidentemente para medir a precisão do resultado temos que normalizar Z_N com relação ao maior autovalor $|\lambda^{max}|$ e calcular $Z_N/|\lambda_i^{min}|^N$. No caso do nosso exemplo temos que o módulo dos autovalores são $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 0.2072$ e $|\lambda_3| = 0.0495$, assim a nossa precisão é dada por $[(-0.2057 - 0.0245i)^{80} + (-0.2057 + 0.0245i)^{80} + (-0.0492 - 0.0059i)^{80}]/(-0.2057 + 0.0245i)^{80} = 0.0 \times 10^{-44} + 0.0 \times 10^{-44}i$.

Foi calculado o expoente y_h para a função de partição com $b = c = 0.6$ e x dado pela expressão (3.28). Para este modelo os zeros estão no círculo unitário, como mostra a figura 3.3. A tabela 3.1 mostra como o primeiro zero se aproxima de $u_E \approx -0.9987288217 + 0.0504057610i$ conforme aumentamos o número de spins.

Utilizando a função NonLinearFit do Mathematica e a tabela 3.1, fizemos um ajuste dlog para as expressões (2.39) e (2.46). A função usada para o ajuste da expressão (2.39) foi $\ln(\Delta u(N)) = C_1 \ln(N) + C_2$. Para fazer esse ajuste considera-se somente a parte real ou imaginária dos zeros. Para a parte real encontramos $-C_1 = y_h \approx 2.95683$ e $C_2 = \ln(u_E(\infty)) \approx 0.50636$, com erro percentual máximo de 0.02% e para a parte imaginária $-C_1 = y_h \approx 2.995536$ e $C_2 \approx 3.4919$, com erro percentual máximo¹ de 0.04%.

¹Definimos erro percentual para um ajuste $y = f(x)$, onde foram utilizados os pares (y_i, x_i) , com

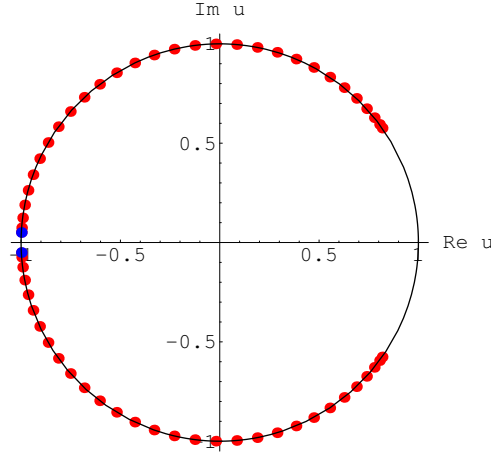


Figura 3.3: Os pontos em vermelho são os zeros de Yang-Lee do modelo BEG com $b = c = 0.6$ e x dado pela expressão (3.28) e os pontos azuis representam a singularidade de Yang-lee $u_E^\pm \approx -0.9987288217 \pm 0.0504057610i$. Na vizinhança deste ponto a densidade linear de zeros diverge com o novo expoente crítico $\sigma = -2/3$.

como mostra a figura 3.4. Na figura 3.4 os pontos cheios corresponde a parte real (3.4(a)) ou imaginária (3.4(b)) dos zeros e a curva sólida corresponde a $\ln(\Delta u(N)) = C_1 \ln(N) + C_2$.

Para encontrar y_h a partir da equação (2.46) fizemos um ajuste utilizando a função $\ln \rho(u) = C_1 \ln(N) + C_2$. A densidade próxima a extremidade do arco foi obtida da seguinte forma: $\rho\left(\frac{u_1+u_2}{2}\right) = 1/(N|u_1 - u_2|)$, obtida via (2.45). O resultado obtido pelo ajuste foi $C_1 = y_h - 1 \approx 1.9817$ e $C_2 \approx -6.6059$, com erro percentual máximo de 34%. O ajuste para a densidade em geral é menos preciso quando comparado com o ajuste feito através da equação (2.39).

De acordo com a nossa discussão, esperávamos $y_h = 3$ para todas as temperaturas, mas podemos notar na tabela 3.2 que quando temos $c = \sqrt{2}/2$ ($A_E = -2$) os ajustes de log de (2.39) e (2.46) resultam em valores muito diferentes de $y_h = 3$. Para $0.1 \leq c \leq 0.5$ os resultados são semelhantes, para $c = 0.7$ a incerteza aumenta indicando a proximidade da temperatura $c = \sqrt{2}/2$ que tira os zeros do círculo unitário. A região em torno de $c = \sqrt{2}/2 \approx 0.707$ ($A_E = -2$) é conhecida como região de cruzamento (“crossover”) pois o ponto $A_E = -2$ é um ponto especial, vide (3.13), para $A_E = -2 + c_1 \varphi^3 + \dots$ em (3.13), temos que $u_E \approx -1 + \sqrt{c_1} \varphi^{3/2}$ e como $\varphi \sim \varphi_1 \sim \pi/N$ temos $y_h = 3/2$ em acordo com a tabela 3.2, porém para $\sqrt{2}/2 < c < 1$ e $c > \sqrt{2}/2$ esperamos $y_h = 3$.

Alguns resultados para (2.51) e (2.48) extrapolados para $N \rightarrow \infty$ são mostrados na tabela 3.3. Para esse cálculo utilizamos o algoritmo de extrapolação Burlisch-Stoer (BST)

$i = 1, \dots, p$, como sendo $(d\%)_i = 100\% \times (f(x_i) - y_i)/y_i$, para $i = 1, \dots, p$

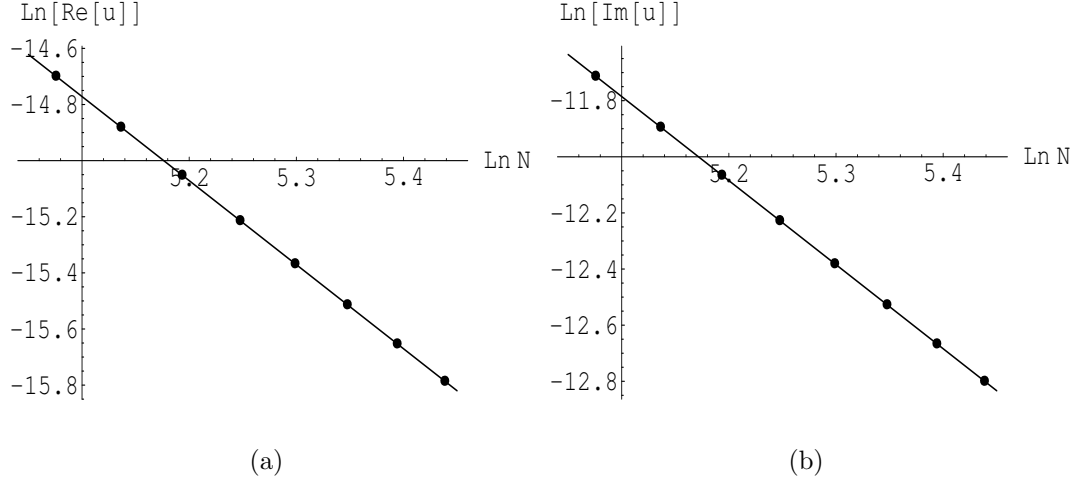


Figura 3.4: Gráfico de $\ln \Re \Delta u \times \ln N$ (a) e $\ln \Im \Delta u \times \ln N$ (b). A curva sólida corresponde a $\ln(\Delta u(N)) = C_1 \ln(N) + C_2$ com $C_1 \approx 2.995536$ e $C_2 \approx 3.4919$ para (a) e $C_1 \approx 2.995536$ e $C_2 \approx 3.4919$ para (b)

c	$y_h^{\Re(\Delta u)}$	$10^{-9} \chi^2$	$y_h^{\Im(\Delta u)}$	$10^{-8} \chi^2$
0.1-0.5	2.997	3.5	2.989	4.0
0.6	2.997	3.5	2.987	8.3
0.7	2.88	3.2×10^4	2.094	3.2×10^4
$\sqrt{2}/2$	1.498	0.9	1.494	1.3
0.8	3.000	3.3	2.989	2.3
0.9	2.997	3.5	2.989	3.8

Tabela 3.2: Resultado para os ajustes di-log a partir das fórmulas (2.51) ($y_h^{\Re(\Delta u)}$) e (2.48) ($y_h^{\Im(\Delta u)}$) com $L = N$ e $D = 1$ para $b = c$ com $210 \leq N \leq 300$ sítios.

[37, 38]. Na extrapolação BST temos que determinar o parâmetro livre w de forma que a incerteza, fórmula (B.6) do apêndice B, da extrapolação seja minimizada. Testamos valores para $0.6 \leq w \leq 2.4$, como mostra ² a figura 3.6 e podemos concluir que $w = 1$ nos fornece o melhor resultado, então usaremos $w = 1$ em todos os cálculos de extrapolação do modelo.

Uma maneira analítica de obter $y_h = 3$ é considerar $b = c$ na equação (3.19), a equação se torna cúbica em $A = A(\varphi)$, escolhendo $x = x(c)$ dado por (3.28) e $c = 0.4$ por exemplo, pode-se achar as soluções de (3.19): $A_i(\varphi)$, $i = 1, 2, 3$, as expressões são um

²As barras de erros são calculadas a partir da fórmula (B.6) do apêndice B.

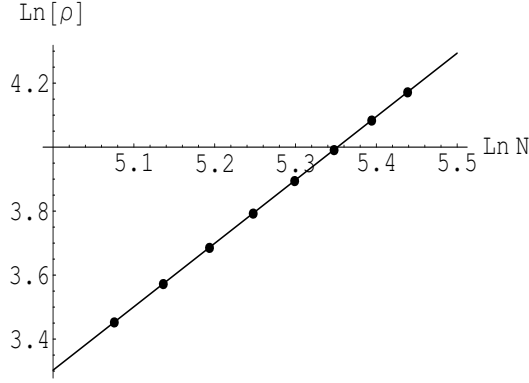


Figura 3.5: Gráfico de $\ln \rho(u) \times \ln N$. A curva sólida corresponde a $\ln \rho(u) = C_1 \ln(N) + C_2$ com $C_1 = y_h - D \approx 1.9817$ e $C_2 \approx -6.6059$

N_a	$y_h^{(\Re(\Delta u))}(c = 0.6)$	$y_h^{(\Re(\Delta u))}(c = 0.7)$
150	2.994996525509	2.99467534638
160	2.995281141031	2.99499652509
170	2.995535103561	2.99528114103
180	2.995763114227	2.99553510356
190	2.995968959202	2.99576311422
200	2.996155722047	2.99596895920
210	2.996325939525	2.99615572204
∞	3.000000000000(2)	3.000000000000(1)

Tabela 3.3: Resultado para a extrapolação de tamanho finito, obtidos a partir da equação (2.51) para o expoente y_h para o modelo BEG com $(b = c)$ com $150 \leq N \leq 250$ spins com temperatura $c = 0.6$ e $c = 0.7$

pouco complicadas, mas expandindo na vizinhança de $\varphi = 0$ temos:

$$A_1(\varphi) = \frac{829}{900} \sqrt{\frac{29}{7}} - \frac{9\sqrt{203}}{400} \varphi^2 + \frac{\sqrt{203}}{1440} \varphi^4 + O(\varphi^6), \quad (3.31)$$

$$A_2(\varphi) = -\frac{218}{225} \sqrt{\frac{29}{7}} - \frac{1}{75} \sqrt{\frac{203}{3}} \varphi^3 - \frac{\sqrt{203}}{450} \varphi^4 + O(\varphi^5), \quad (3.32)$$

$$A_3(\varphi) = A_2(-\varphi). \quad (3.33)$$

Podemos notar que não é necessário que a simetria $\varphi \rightarrow -\varphi$ da equação (3.19) nos forneça soluções sempre pares, como é mencionado pelos autores [16]. A solução $A_1(\varphi)$,

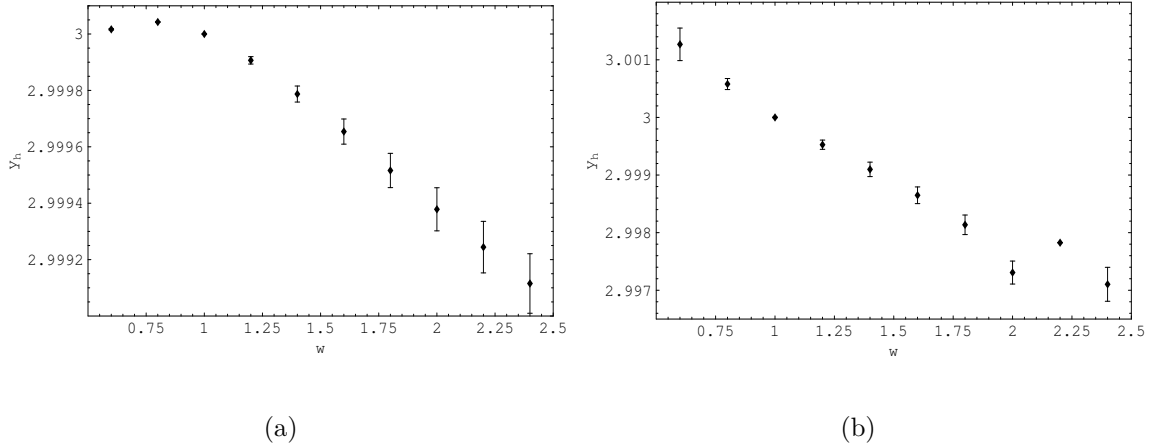


Figura 3.6: Extrapolação BST para $0.6 \leq w \leq 2.4$ de $y_h^{\Re(\Delta u)}$ (a) e $y_h^{\Im}$ (b). Na figura (a) utilizamos a parte real dos zeros. Os zeros de Yang-Lee foram calculados para modelo BEG com $b = c = 0.6$ e x dado pela expressão (3.28).

nos fornece a singularidade na extremidade do arco com $\Re(u) > 0$ (vide figura 3.3 que é semelhante ao caso $c = 0.4$) com $y_h = 2$ e $\sigma = -1/2$. Calculamos numericamente através das equações (2.51) e (2.48) e realmente encontramos $y_h \approx 2$. A solução $A_3(\varphi)$ não é uma singularidade verdadeira. Pois ao substituirmos $b = c$, x dado pela equação (3.28) e as soluções $A_i(\varphi)$ na equação cúbica (3.8) podemos calcular os autovalores da matriz transferência (3.4). Percebemos que as soluções $A_1(\varphi)$ e $A_2(\varphi)$ fornecem o módulo de dois autovalores iguais e maiores que o terceiro, já a solução $A_3(\varphi)$ fornece $|\lambda_3| > |\lambda_1| = |\lambda_2|$ o que não levará a um zero de (3.7). A solução A_2 implica em $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$ em torno de $\varphi = 0$. Note que a simetria $\varphi \rightarrow -\varphi$ de (3.19) é preservada nas soluções $A_i(\varphi)$, não sendo necessário uma simetria em cada solução separadamente.

3.2.2 Caso II: Modelo BEG com $A = 0$ ($\beta H = \pm i\pi/2$)

Na seção anterior, calculamos uma condição de tripla degenerescência quando temos $b = c$. Vimos que com esses parâmetros o modelo BEG apresentava dois acúmulos de zeros diferentes, no primeiro e no quarto quadrantes do gráfico de $\Re u \times \Im u$, com a densidade de zeros divergindo com $\sigma = -1/2$, o segundo acúmulo ocorre no segundo e no terceiro quadrantes do gráfico, com os zeros divergindo com $\sigma = -2/3$.

Resolvemos agora estudar um caso especial onde escolhemos a posição da singularidade de Yang-Lee, ou seja, $A_E = 0$, isto é, $\beta H = \pm i\pi/2$, assim manipulando as equações que

nos fornecem tripla degenerescência (3.27) encontramos:

$$b = \frac{9c}{4(1+c^2)}, \quad (3.34)$$

$$\tilde{x} = b\sqrt{3(1-c^4)} = \frac{9c}{4} \sqrt{\frac{3(1-c^2)}{(1+c^2)}}. \quad (3.35)$$

A equação (3.26) permite $y_h = 2$, para $\tilde{x} = \frac{(1-c^2)b^2}{|b-c|}$, ou seja, $d^3A/d\varphi^3 \neq 0$, vide lado esquerdo de (3.24). Substituindo $\tilde{x} = \frac{(1-c^2)b^2}{|b-c|}$ em (3.35) e usando (3.34) encontramos que $c = \sqrt{2}/2$.

Então, mesmo que tenhamos tripla degenerescência dos autovalores com b e $\tilde{x}$ dados pelas equações (3.34) e (3.35) respectivamente, podemos ter $y_h \neq 3$ se $c = \sqrt{2}/2$.

Substituindo as equações (3.34), (3.35) e $c = \sqrt{2}/2$ na equação secular (3.8), encontramos os três autovalores da matriz transferência (3.4).

$$\lambda_1 = \frac{\tilde{x}(b-c)}{b} = \frac{3}{4\sqrt{2}}, \quad (3.36)$$

$$\lambda_2 = \frac{3}{4\sqrt{2}} \left[1 + A + \sqrt{A(A+2)} \right], \quad (3.37)$$

$$\lambda_3 = \frac{3}{4\sqrt{2}} \left[1 + A - \sqrt{A(A+2)} \right], \quad (3.38)$$

fazendo $\lambda_1 = e^{i\varphi}\lambda_2$, temos que $A = -1 + \cos\varphi$ e os três autovalores terão o mesmo valor absoluto pois $\lambda_3 = e^{i\varphi}\lambda_1$, assim

$$Z_N = \frac{1}{c^N} [\lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N] = \frac{\lambda_1^N}{c^N} [1 + 2\cos N\varphi] \quad (3.39)$$

Portando para $Z_N = 0$ temos a posição exata dos $2N$ zeros ³ de Yang-Lee

$$\varphi_k = 2\pi \frac{(3k+1)}{3N} \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (3.40)$$

Temos a singularidade de Yang-Lee quando $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$, com $\varphi = 0$, portanto, a posição do zero mais próximo da SEYL é $\varphi_0 = \frac{2\pi}{3N}$. Invertendo a relação $u + 1/u = A_0 =$

³Considere que em (3.13) temos duas possibilidade de sinal.

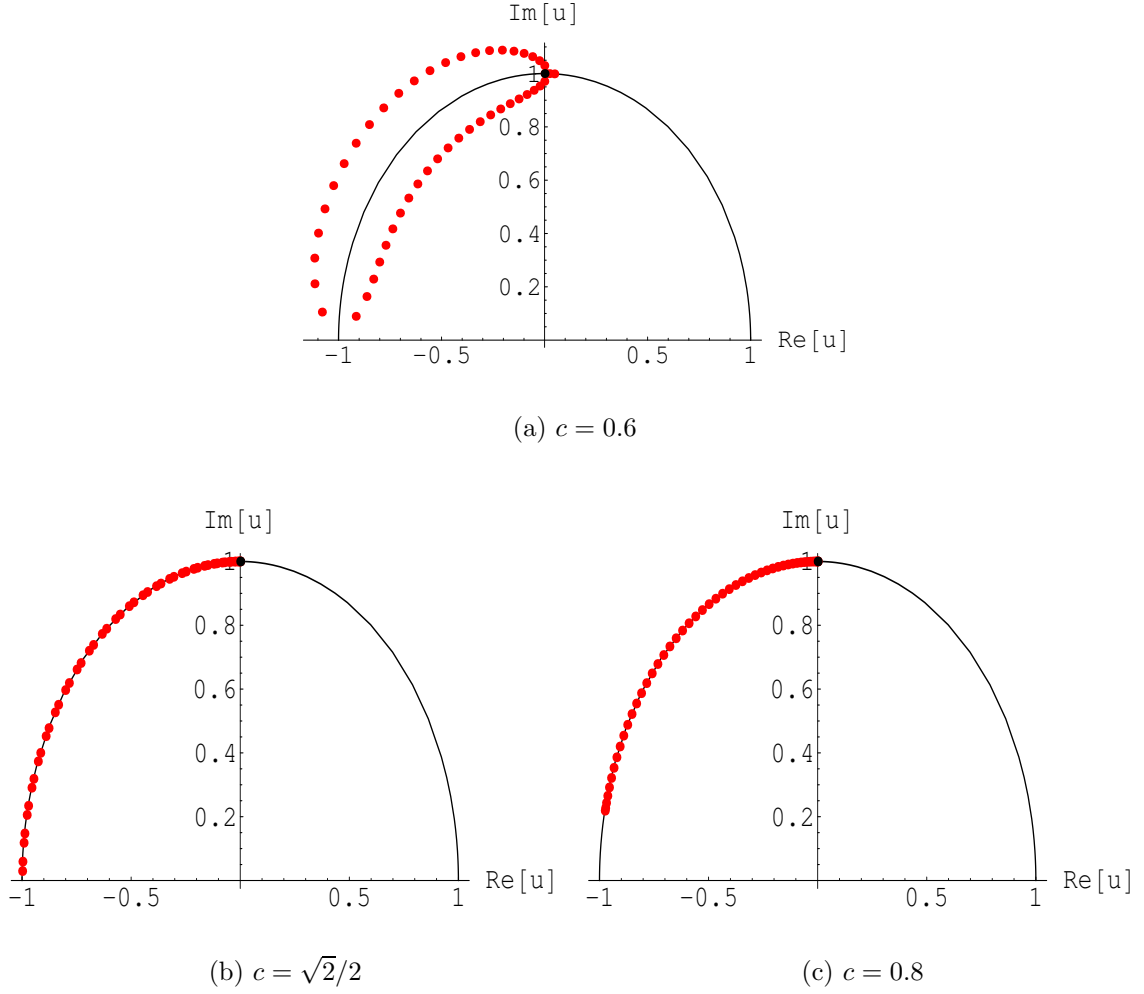


Figura 3.7: Os pontos vermelhos são os zeros de Yang-Lee para o modelo BEG com b e $\tilde{x}$ dados pelas equações (3.34) e (3.35) respectivamente, com $c = 0.6$ (a), $c = \sqrt{2}/2$ (b) e $c = 0.8$ (c), o ponto preto representa a SEYL ($u_E = i$) e usamos $N = 50$ spins. O gráfico ilustra somente a metade dos zeros.

$1 + \cos \varphi_k$ nós podemos encontrar uma expansão para N grande para o zero mais próximo da SEYL e o seu complexo conjugado, em $c = \sqrt{2}/2$:

$$\begin{aligned}
 u_1^\pm(N) &= \frac{1}{2} \left[A_0 \pm \sqrt{A_0^2 - 4} \right] \\
 &= \pm i - \frac{1}{4} \left(\frac{2\pi}{3N} \right)^2 + \left(\frac{1}{48} \mp \frac{i}{32} \right) \left(\frac{2\pi}{3N} \right)^4 + \dots \quad (3.41)
 \end{aligned}$$

Comparando esse resultado com a equação (2.39) temos que $y_h = 2$ e $\sigma = -1/2$ para o caso de tripla degenerescência, na temperatura especial $c^* = \sqrt{2}/2$ e $A = -2$.

Após análise do caso especial $c = \sqrt{2}/2$ que permitiu solução exata, mantivemos a

c	$y_h^{(\Re(\Delta u))}$	desvio percentual	y_h^ρ	desvio percentual
0.3	3.044	3.0%	3.164	0.83%
0.4	3.051	3.6%	3.195	1.37%
0.5	3.067	5.0%	3.27	3.33%
0.6	3.120	10.2%	3.601	4.11%
$\sqrt{2}/2$	1.999	0.001%	2.272	3.48%
0.8	2.922	4.8%	2.771	0.79%
0.9	2.967	1.9%	2.89	0.16%

Tabela 3.4: Resultado para os ajustes di-log a partir das fórmulas (2.51) ($y_h^{(\Re(\Delta u))}$), com a parte real dos zeros e (2.48) (y_h^ρ) com $L = N$ e $d = 1$ para $b = c$ com $60 \leq N \leq 150$.

c	$y_h^{(\Re(\Delta u))}$	y_h^ρ
0.3	3.00000000000(4)	3.000000000(3)
0.4	3.0000000000(2)	3.00000000(1)
0.5	3.0000000000(3)	3.0000000(2)
0.6	3.0000000000(4)	3.0011(4)
$\sqrt{2}/2$	2.000000000000000(9)	2.00000000000000(6)
0.8	3.00000000000(7)	3.0000000(1)
0.9	3.0000000000000(2)	3.0000000000(7)

Tabela 3.5: Resultado para a extrapolação BST, obtidos a partir das equações (2.51) para o expoente $y_h^{(\Re(\Delta u))}$ e (2.48) para o expoente y_h^ρ , para o modelo BEG com b e $\tilde{x}$ dados pelas equações (3.34) e (3.35), para o cálculo utilizamos redes com $150 \leq N \leq 250$ spins e $w = 1$.

SEYL em $A = 0$, mas mudamos a temperatura c .

Fizemos o ajuste para os zeros próximos da SEYL para as temperaturas $c = 0.6$ (figura 3.7(a)), $c^* = \sqrt{2}/2$ (figura 3.7(b)) e $c = 0.8$ (figura 3.7(c)). A SEYL estará sempre na circunferência de raio 1 $u_E = \pm i$.

Fizemos o ajuste di-log para $0.3 \leq c \leq 0.9$ como mostra a tabela 3.4. Para fazer a extrapolação para $N \rightarrow \infty$, do valor de y_h , através do algoritmo BST, utilizamos novamente as expressões (2.51) e (2.48), e escolhemos $w = 1$, que minimiza a incerteza do valor extrapolado. Os resultados estão ilustrados na tabela 3.5.

3.2.3 Caso III: Modelo Blume-Capel ($b = 1$ ou $K = 0$)

Agora vamos procurar o novo comportamento crítico para o caso $K = 0$ ($b = 1$). Este caso especial é um submodelo do BEG e é conhecido como modelo de Blume-Capel [25]. Substituindo as equações (3.9)-(3.11) e $b = 1$ em (3.27) chegamos a uma equação para $\tilde{x} = \tilde{x}(c)$ e outra para a singularidade de Yang-Lee A_E :

$$\tilde{x}(c) = \left\{ 1 - 8c + 10c^2 + 10c^3 - 9c^4 + 3(1 - c^2) \left[(P + Q)^{1/3} + R(P + Q)^{-1/3} \right] \right\}^{1/2} \quad (3.42)$$

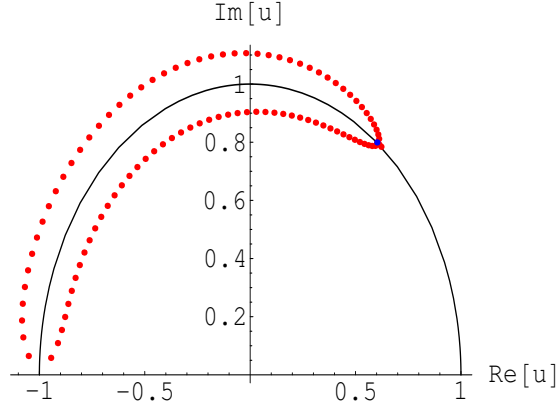
$$A_E = \frac{\tilde{x} [(1 + c)(5 - 15c + 5c^2 + 3c^3) + \tilde{x}^2]}{(1 + c)(1 + c^2) + \tilde{x}^2(2 - 3c)}, \quad (3.43)$$

com $P = \sqrt{c^3(1 + c - c^2)(1 - 3c - c^2)^2}$, $Q = c^2(5 - 36c + 95c^2 - 90c^3 + 27c^4)$ e $R = c(9c^3 - 20c^2 + 10c - 1)$.

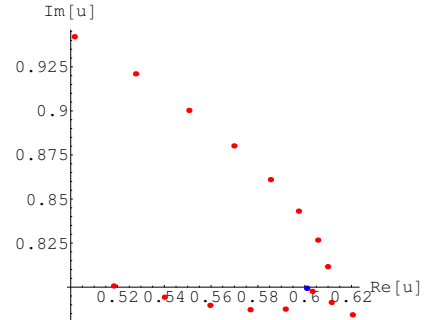
Para $0 < c < 1$ a função $\tilde{x}$ dada por (3.42) estará sempre entre $+1$ e $+2$, pode-se dizer que graficamente $\tilde{x} \approx 1 + c$ e a posição da singularidade de Yang-Lee A_E estará sempre entre -2 e $+2$ garantindo que esteja no círculo de raio 1. A maioria dos zeros se encontra fora do S_1 . Os zeros sobre o S_1 tendem a formar um pequeno arco, onde no lado direito calculamos a singularidade e encontramos σ usual ($\sigma = -1/2$) e o novo comportamento se encontra no acúmulo de zeros do lado esquerdo do círculo, como mostra a figura 3.8 (pontos pretos). Não existe singularidade para os zeros que estão fora do círculo. O cálculo para a nova singularidade foi feito utilizando as equações (2.39) e (2.46). Fazendo o ajuste di-log para a equação (2.49) e considerando $N_a = 96 + (a - 1)6$ spins, com $a = 0, \dots, 8$ obtivemos os resultados para $c = 0.3$ e $c_0.9$. Para $c = 0.3$ encontramos $-\tilde{C}_1 = 3.19979$, $\tilde{C}_2 = 4.50422$, com $\chi^2 = 5.03 \times 10^{-9}$ e para $c = 0.9$ obtivemos $-\tilde{C}_1 = 3.07092$, $\tilde{C}_2 = 1.11983$ e $\chi^2 = 0.48 \times 10^{-9}$, como mostra a figura 3.9. A tabela (3.6) mostra mais resultados para os ajustes di-log para $0.3 \leq c \leq 0.9$ a partir de (2.49) e (2.47).

Na figura (3.10) aparecem os resultados de extrapolação BST via equação (2.48) $N_a = 96 + (a - 1)6$ spins com $1 \leq a \leq 10$ e a última linha da tabela (3.7) ilustra o resultado da extrapolação BST utilizando a equação (2.51) para $c = 0.3$ e $c = 0.9$, com $w = 1$. Podemos notar que $y_h = 3$ em ambos os casos, com o resultado para $c = 0.3$ com precisão um pouco pior, comparada com o resultado para $c = 0.9$. Isso ocorre pois a baixas temperaturas temos um número menor de zeros na circunferência de raio 1, como mostra a figura 3.8. Na figura 3.10(a) podemos perceber que em torno de $w = 1$ temos $dy_\Delta/dw \approx 0$, mostrando uma estabilidade para extrapolação nessa região.

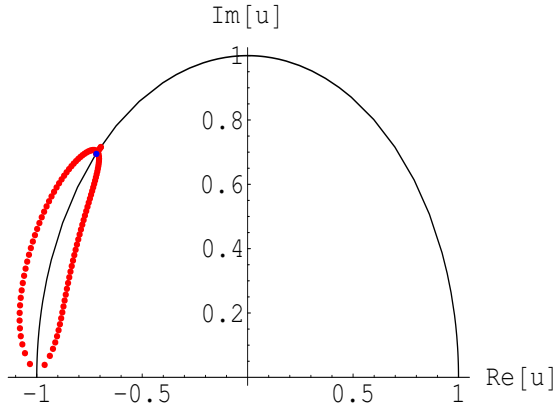
Concluimos que quando existe a possibilidade de um modelo apresentar tripla degenerescência dos autovalores de sua matriz transferência, aparentemente uma nova classe



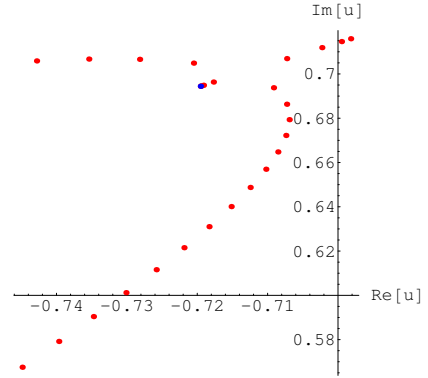
(a) $c = 3/10$



(b) $c = 3/10$



(c) $c = 9/10$



(d) $c = 9/10$

Figura 3.8: Zeros de Yang-Lee para o modelo BEG com $b = 1$, ou seja Modelo Blume-Capel, utilizando a condição de tripla degenerescência (3.42), com a temperatura $c = 0.3$ (a) e $c = 0.9$ (c). Em ambas figuras foram gerados 100 zeros, mas só foram mostrados os zeros com $\Im u > 0$. As figuras (b) e (d) mostram a vizinhança da SEYL representada pelos pontos azuis, em (a) e (b) vale $u_E = 0.60085 + 0.79936i$ e em (c) e (d) $u_E = -0.71955 + 0.69444i$.

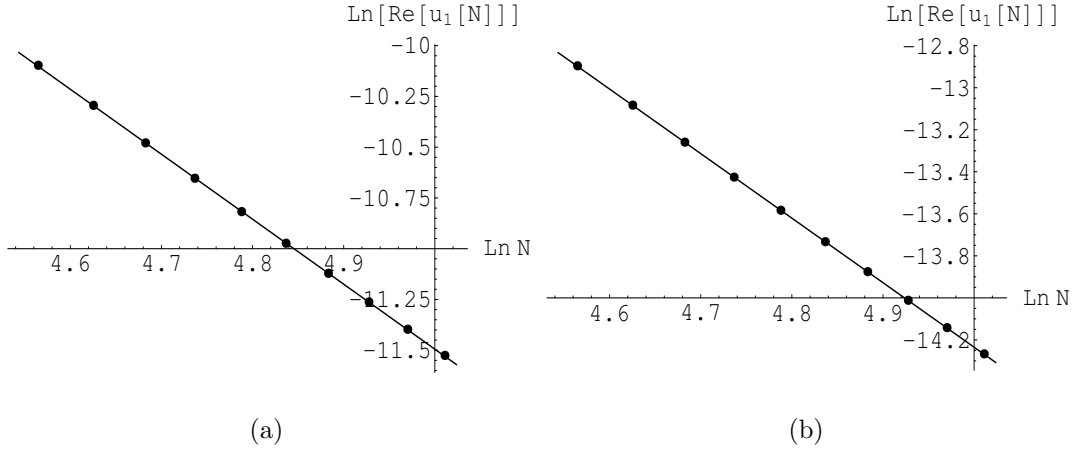


Figura 3.9: Gráfico de $\ln \Re u \times \ln N$ para $c = 0.3$ (a) e $c = 0.9$ (b). A curva sólida corresponde a $\ln(\Re u(N)) = C_1 \ln(N) + C_2$ com $\tilde{C}_1 = 3.19979$ e $\tilde{C}_2 = 4.50422$ para (a) e $C_1 = 3.07092$ e $C_2 = 1.11983$ para (b)

de universalidade da singularidade de Yang-Lee pode aparecer. A fim de comprovar essa nova universalidade, nos capítulos seguintes vamos explorar mais o modelo BEG, calculando os zeros no plano complexo de outros parâmetros e considerando o modelo na rede dinâmica. Também mostramos esse novo comportamento para o modelo ANNNI de spins $1/2$. Os resultados comprovam a universalidade de $\sigma = -2/3$ em $D = 1$.

c	$y_h^{\Re(\Delta u)}$	$10^{-9}\chi_{\Re[u]}^2$	y_h^ρ	$10^{-8}\chi_\rho^2$
0.3	3.200	5.03	4.612	3.10
0.4	3.148	2.52	3.795	2.10
0.5	3.119	1.51	3.561	0.72
0.6	3.100	1.00	3.442	0.36
0.7	3.088	0.76	3.370	0.22
0.8	3.078	0.58	3.320	0.15
0.9	3.071	0.48	3.285	0.11

Tabela 3.6: Resultado para os ajustes di-log a partir das RETF (2.39) ($y_h^{\Re(\Delta u)}$) e (2.46) (y_h^ρ) com $L = N$ e $d = 1$ para o modelo Blume Capel com $96 \leq N \leq 150$ e temperatura $0.3 \leq c \leq 0.9$.

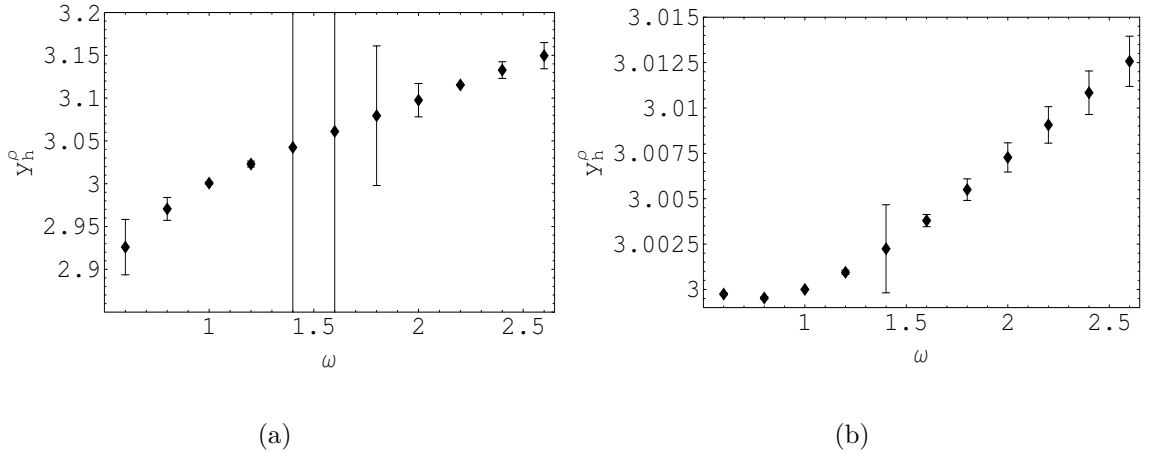


Figura 3.10: Extrapolação BST para $0.6 \leq w \leq 2.4$ de y_h^ρ . Os zeros de Yang-Lee foram calculados para BC com $c = 0.3$ (a) e $c = 0.9$ (b) e x dado pela expressão (3.42).

N_a	$y_h^\rho(c = 0.3)$	$y_h^\rho(c = 0.9)$
96	6.65138835174	3.36602639165
102	5.40615603620	3.33723696161
108	4.85302919346	3.31271060187
114	4.52543971437	3.29155556642
120	4.30452579272	3.27311462040
126	4.14377246532	3.25689223008
132	4.02074088023	3.24250742353
138	3.92311802198	3.22966230906
144	3.84352213555	3.21812047991
∞	3.001(1)	3.00000(8)

Tabela 3.7: Resultado para a extrapolação de tamanho finito, obtidos a partir da equação (2.48) para o expoente y_h para o modelo Blume Capel com $96 \leq N \leq 150$ spins com temperatura $c = 0.3$ e $c = 0.9$

Capítulo 4

Modelo de Blume-Emery-Griffiths sobre anéis conexos e desconexos

Neste capítulo vamos apresentar uma fórmula alternativa, de origem diagramática, para a função de partição de um modelo de spin sobre anéis conexos e desconexos, que foi obtida em [31] para o modelo Blume-Capel e no caso geral (independente do modelo) em [32]. Neste caso o modelo de spin estará sobre anéis conexos e desconexos. A idéia para essa abordagem teve origem na quantização da gravitação em duas dimensões [47, 48] e em técnicas de teoria de campos como expansões em diagramas de Feynman [26, 27].

Trabalhos como [32, 43] mostram que o comportamento crítico na vizinhança da SEYL para modelos de spins sobre anéis conexos e desconexos é semelhante ao comportamento crítico para sistemas na rede sobre anéis conexos com condições periódicas de contorno.

4.1 Definição do modelo

Em teoria de campos é conveniente usar uma correspondência entre integrais e gráficos, considerando as integrais gaussianas [49]:

$$\langle \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_n} \rangle \equiv \frac{\int d^p \phi \, \phi_{\mu_1} \phi_{\mu_2} \dots \phi_{\mu_n} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^p (\phi_{\mu} M_{\mu\nu} \phi_{\nu})}}{\int d^p \phi \, e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^p (\phi_{\mu} M_{\mu\nu} \phi_{\nu})}}, \quad (4.1)$$

onde $d^p \phi = d\phi_1 d\phi_2 \dots d\phi_p$ e M é uma matriz $p \times p$, real, simétrica e definida positiva, de forma que assegure a convergência da integral. Admitindo então, a inversa M^{-1} , cada variável ϕ_{μ_j} (campo) é integrado sobre o eixo real de $-\infty$ a ∞ .

A função de partição do modelo BEG sobre um anel conexo é dada por:

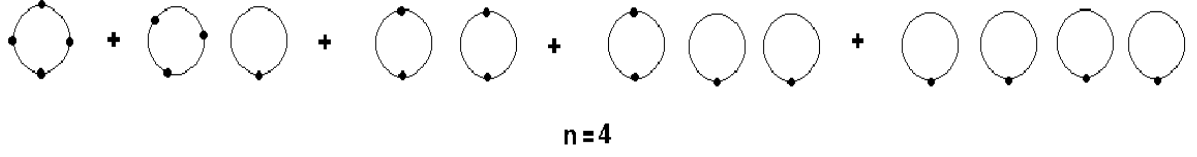


Figura 4.1: Diagramas de Feynman para Z_4^{nc}

$$Z_N = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E_{BEG}} = \sum_{\{S_i\}} \exp \beta \left\{ \sum_{\langle i,j \rangle} [J S_i S_j + K S_i^2 S_j^2] + \sum_{i=1}^N [\Delta (1 - S_i^2) + H S_i] \right\} \quad (4.2)$$

Para definir a função de partição do modelo BEG na rede dinâmica, ou seja, sobre anéis conexos e desconexos, vide mais detalhes em [32, 43].

Vamos definir uma expansão em diagramas de Feynman. Para isso nós vamos introduzir os campos ϕ_+ , ϕ_- , ϕ_0 , que representam os estados $S_i = +1, -1, 0$. Cada vértice do diagrama corresponderá a um sítio da rede, de cada vértice sairão duas linhas, essas linhas ligarão um vértice a outro e correspondem a propagadores na teoria de campos. Cada sítio com spin $S_i = +1, -1, 0$ é associado aos vértices de interação de acordo com os dois últimos termos do argumento da exponencial (4.2).

Nesta tese, trataremos somente modelos que possuem apenas dois vizinhos mais próximos. Assim de cada vértice sairão somente duas linhas, ou seja, só aparecem termos quadráticos nos campos.

Introduzindo uma constante de acoplamento g , cuja potência fará o papel de número de sítios, ou vértices, podemos definir a função geratriz dos anéis conexos e não conexos Z_N^{nc} como coeficientes da série diagramática abaixo:

$$G(H, \Delta, K, J, g) = \sum_{N=0}^{\infty} g^N Z_N^{nc}, \quad (4.3)$$

$$G(H, \Delta, K, J, g) = \frac{\int d\phi_+ d\phi_- d\phi_0 e^{-\frac{1}{2}[\phi_a M_{ab} \phi_b - g(e^{\beta H} \phi_+^2 + e^{-\beta H} \phi_-^2 + e^{\beta \Delta} \phi_0^2)]}}{\int d\phi_+ d\phi_- e^{-\frac{1}{2}[\phi_a M_{ab} \phi_b]}}. \quad (4.4)$$

Os índices $a, b = +, -, 0$ estão sendo somados, ou seja, $\phi_a M_{ab} \phi_b = \phi^T M \phi$, com M uma matriz simétrica M_{ab} 3×3 , determinada a partir dos pesos de Boltzmann das conexões

entre os spins (“links”) para $h = 0$ e $l = 0$, ou seja,

$$M_{ab}^{-1} = \langle \phi_a \phi_b \rangle = \tilde{k} e^{\beta J S_a S_b + \beta K S_a^2 S_b^2}, \quad (4.5)$$

ou seja, o propagador $\langle \phi_a \phi_b \rangle$ representa as linhas que ligam o spin S_a ao S_b e $\tilde{k}$ é uma constante de proporcionalidade arbitrária.

Definindo a constante de proporcionalidade $\tilde{k}$ de forma conveniente, chegamos a:

$$G(H, \Delta, K, J, g) = \frac{\int d\phi_+ d\phi_- d\phi_0 e^{-S_g}}{\int d\phi_+ d\phi_- d\phi_0 e^{-S_{g=0}}}, \quad (4.6)$$

onde

$$\begin{aligned} S_g &= \frac{1}{2} \{ A (\phi_+^2 + \phi_-^2) + 2B\phi_+\phi_- + D [E\phi_0^2 + 2\phi_0(\phi_+ + \phi_-)] \} \\ &+ \frac{g}{2} (e^h \phi_+^2 + e^{-h} \phi_-^2 + e^l \phi_0^2), \end{aligned} \quad (4.7)$$

com $A = -1 + \frac{b}{c}$, $B = 1 - cb$, $D = b(c - \frac{1}{c})$ e $E = -b(c + \frac{1}{c})$. As expressões (4.3), (4.6) e (4.7) definem a representação integral da função de partição Z_N^{nc} do modelo BEG sobre anéis conexos e desconexos. Calculando as integrais gaussianas (4.6) e redefinindo $g \rightarrow \tilde{k}\tilde{g}$ temos:

$$G(H, \Delta, K, J, \tilde{g}) = \frac{1}{[P_3(\tilde{g})]^{1/2}}, \quad (4.8)$$

onde

$$\begin{aligned} P_3(\tilde{g}) &= 1 - (2Ab + \tilde{x})\tilde{g} + [b^2(1 - c^4) + 2A\tilde{x}(b - c)]\tilde{g}^2 \\ &- b\tilde{x}(1 - c^2)(b - 2c + bc^2)\tilde{g}^3. \end{aligned} \quad (4.9)$$

O polinômio (4.9) obtido via interpretação diagramática é equivalente à equação cúbica (3.8), com $\tilde{g} = 1/\lambda$, obtida a partir da matriz de transferência (3.4). Da equação (4.3) podemos escrever:

$$Z_N^{nc} = \frac{1}{\tilde{k}^N} \left\{ [P_3(\tilde{g})]^{-1/2} \right\}_{\tilde{g}^N}. \quad (4.10)$$

De teoria de campos, sabemos que de uma expansão diagramática, podemos extrair

os diagramas conexos [50], tirando o logaritmo da função geratriz:

$$\ln G = \sum_{N=1}^{\infty} \tilde{g}^N \frac{Z_N}{2N}. \quad (4.11)$$

Invertendo a equação (4.11), usando (4.8) temos Z_N do modelo BEG-1D usual (um anel conexo).

$$Z_N = (2N) (\ln G)_{\tilde{g}^N} \equiv -N [\ln P_3(\tilde{g})]_{\tilde{g}^N}. \quad (4.12)$$

Para $N = 4$ sítios (vértices), Z_4 corresponde ao primeiro diagrama a esquerda da figura (4.1). A função (4.12) coincide com a função de partição para o modelo BEG sobre anéis conexos (3.7), comparamos a localização dos zeros das duas funções partição para valores baixos de N , com c , b e x fixos, checamos a uma precisão de 96 dígitos.

A relação (4.12) se tornou muito importante, já que é a partir dela que calcularemos numericamente todos os zeros do modelo BEG usual, uma vez que ela é computacionalmente muito mais eficiente que (3.7).

Para achar a função de partição para o modelo BEG na rede dinâmica devemos exponenciar a relação (4.11) e substituir na equação (4.3).

$$Z_N^{nc} = [G]_{g^N} = [e^{\ln G}]_{g^N} = \left\{ \exp \left[\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(\tilde{k}g)^m}{2m} Z_m \right] \right\}_{g^N}. \quad (4.13)$$

Expandindo para qualquer N .

$$\begin{aligned} Z_N^{nc} &= \tilde{k}^N \left[\exp \left(\frac{gZ_1}{2} + \frac{g^2Z_2}{4} + \dots + \frac{g^NZ_N}{2N} \right) \right]_{g^N} \\ &= \tilde{k}^N \left[\frac{Z_N}{2N} + \frac{Z_1Z_{N-1}}{4(N-1)} + \dots + \frac{Z_1^N}{2^NN!} \right]. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Assim temos a função de partição sobre anéis conexos e desconexos, Z_N^{nc} , como função de funções de partição da rede sobre anéis usuais (conexos) Z_j com $1 \leq j \leq N$. Embora cada Z_j seja solúvel via matriz transferência: $Z_j = \lambda_1^j + \lambda_2^j + \lambda_3^j$ não há uma fórmula simples para Z_N^{nc} . Chamaremos a rede sobre anéis conexos de rede estática e a que inclui anéis desconexos de rede dinâmica pois há uma soma sobre diagramas além da soma sobre os spins e desta forma a própria rede passa a ser um grau de liberdade.

Para exemplificar podemos escrever a função de partição sobre anéis conexos e desconexos para $N = 4$ dada pela figura 4.1, a menos de um fator multiplicativo:

$$Z_4^{nc} \approx \frac{Z_4}{8} + \frac{Z_3 Z_1}{12} + \frac{Z_2^2}{16} + \frac{Z_2 Z_1^2}{16} + \frac{Z_1^4}{384}. \quad (4.15)$$

4.2 Cálculo Numérico

A não existência de uma fórmula simples para a função de partição na rede dinâmica Z_N^{nc} como a função de partição na rede estática $\lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N$, não nos habilita ao uso de técnicas analíticas, como expansão em Taylor e $\lambda_2 = e^{i\varphi} \lambda_1$, para obter o expoente de escala y_z e σ .

Devíamos esperar que a posição dos zeros na rede dinâmica fosse bastante diferente da posição na rede estática, uma vez que comparando a função de partição sobre anéis conexos e desconexos (4.14), com a função de partição na rede estática (3.7) podemos notar que Z_N será proporcional a um polinômio de grau $2N$ na variável $u = e^{\beta H}$. Assim, a adição de polinômio pode mudar a posição dos zeros na rede dinâmica de forma inesperada, quando comparado com a posição dos zeros na rede estática.

Entretanto vimos em trabalhos anteriores, vide [43, 31], que a posição dos zeros na rede sobre anéis conexos e desconexos tende a colapsar com os zeros da rede estática quando aumentamos o número de spins da rede, como mostra a figura 4.2. Embora não seja claro a partir de (4.14) que Z_N^{nc} seja proporcional a Z_N quando $N \rightarrow \infty$.

De qualquer forma a coincidência entre os zeros na rede dinâmica (anéis conexos e desconexos) com os zeros na rede estática (anéis conexos) no limite termodinâmico, sugere verificar se os zeros sobre anéis conexos e desconexos também possuem o novo comportamento crítico na vizinhança da singularidade da extremidade com $\sigma = -2/3$.

Para isso vamos considerar os mesmos casos especiais que apresentam o novo comportamento crítico para o modelo BEG na rede sobre anéis usuais (estática) com $b = c$ ($K = -J$) e $A = 0$ ($\beta H = \pm i\pi/2$), apresentados nas subseções 3.2.1 e 3.2.2 respectivamente, mas agora para a rede dinâmica.

4.2.1 Modelo BEG com $b = c$ na rede dinâmica

Consideraremos o modelo BEG na rede dinâmica, com $b = c$, A função de partição do modelo é dada pela equação (4.10). Assim ao resolver $Z_N^{nc} = 0$ encontramos seu zeros. A coincidência entre os zeros de Z_N^{nc} e Z_N para $N \rightarrow \infty$ sugere considerar as condições de tripla degenerescência (3.29) e (3.28), encontradas na subseção 3.2.1 para o modelo BEG na rede usual e verificar se também encontraremos o novo comportamento crítico para a rede dinâmica. A equação (3.29) nos fornece a posição da singularidade de Yang-Lee e (3.28) é a condição para que x forneça tripla degenerescência da matriz transferência (3.4),

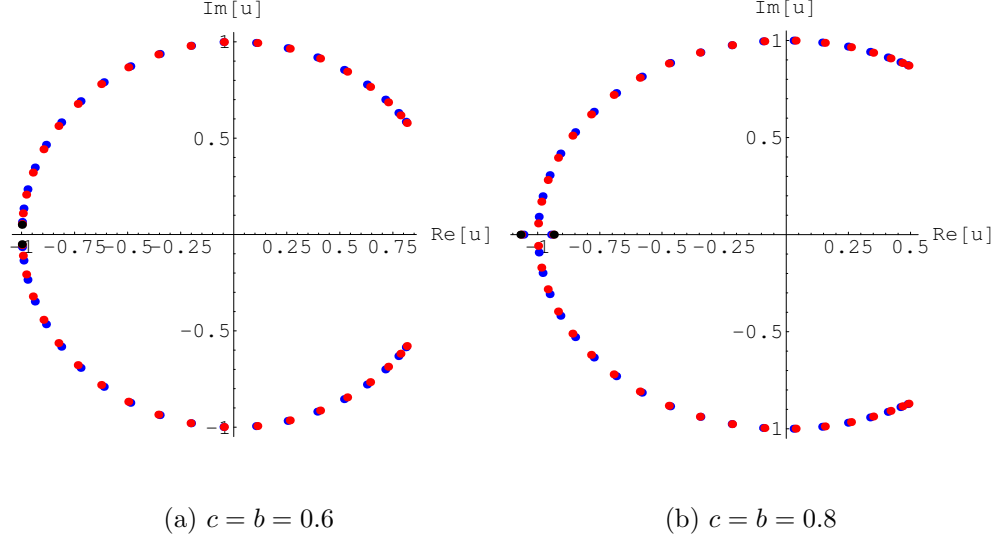


Figura 4.2: Sobreposição dos zeros de Yang-Lee para o modelo BEG na rede usual (pontos vermelhos) e na rede dinâmica (pontos azuis), com $c = b = 0.6$ (a), $c = b = 0.8$ (b), x é dado pela condição de tripla degenerescência (3.28) e $N = 20$ spins. Os pontos pretos representam a singularidade da ponta de Yang-Lee na figura (a) $u_E^\pm = -0.9987 \pm 0.0504i$ e para a figura (b) $u_E^+ = -0.9359$ e $u_E^- = -1.0694$.

tanto a relação (3.29) quanto (3.28) são dependentes somente da temperatura. A figura 4.2 mostra a sobreposição dos zeros na rede usual e na rede dinâmica para $b = c = 0.6$.

Para estudar tais zeros, consideramos rede com $N_a = 30 + 5(a - 1)$ spins, com $1 \leq a \leq 9$ na rede usual utilizamos a relação (4.12) e na rede dinâmica (4.10). Assim vamos calcular o expoente y_h para os casos $c = b = 0.6$ (figura 4.2(a)) e $c = b = 0.8$ (figura 4.2(b)).

Para o caso da função de partição com $c = b = 0.6$ e x dado pela condição (3.28), temos que os zeros estarão na circunferência de raio 1 e a SEYL estará no primeiro e no quarto quadrante do gráfico de $\Re[u] \times \Im[u]$, vide figura 4.2(a). Fizemos um ajuste di-log das relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46), utilizando as funções $\ln \Delta u = C_1 \ln(N) + C_2$ e $\ln[\rho(u)] = C_1 \ln(N) + C_2$, respectivamente. Para o ajuste da expressão (2.39) utilizamos a parte real dos zeros e encontramos $-C_1 = y_h \approx 2.9820$ para o modelo BEG sobre anéis conexos e $-C_1 = y_h \approx 2.9257$ para o modelo BEG sobre anéis conexos e desconexos, com a qualidade dos ajustes $\chi^2 = 3.01 \times 10^{-6}$ e $\chi^2 = 4.99 \times 10^{-5}$ respectivamente.

Já para o ajuste da expressão (2.46) obtivemos $y_h \approx 2.7202$, com $\chi^2 = 2.95 \times 10^{-3}$ para a rede estática e $y_h \approx 2.5413$, com $\chi^2 = 5.80 \times 10^{-3}$ para a rede dinâmica. Os ajustes di-logs indicam que (2.51) e (2.48) podem ser válidas para a rede dinâmica.

Novamente vamos considerar as relações de escala de tamanho finito (2.51) e (2.48) e assim, podemos extrapolar o resultado para $N \rightarrow \infty$ utilizando o algoritmo de extrapolação BST. Extrapolamos para $N \rightarrow \infty$ o valor de y_h nas duas redes com $w = 1$. Os resultados obtidos encontram-se na última linha da tabela 4.1. Podemos perceber que tanto para o ajuste di-log quanto para a extrapolação BST, a diferença do valor encontrado para y_h é muito pequena entre as redes estática e dinâmica. Além disso os valores extrapolados mesmo a partir de redes pequenas com até $N = 70$ sítios estão bem próximos de $y_h = 3$ ($\sigma = -2/3$).

N_a	$y_h^{\Re(\Delta u)}$ (rede estática)	$y_h^{\Re(\Delta u)}$ (rede dinâmica)	$y_h^{(\rho)}$ (rede estática)	$y_h^{(\rho)}$ (rede dinâmica)
35	2.97510731866	2.89766874308	2.49109930	2.23635987
40	2.97836516118	2.91080567705	2.60522311	2.37704914
45	2.98086672935	2.92094298586	2.69027694	2.49044731
50	2.98284853972	2.92900538603	2.75335770	2.58036013
55	2.98445768031	2.93557211492	2.80035769	2.65114845
60	2.98579024017	2.94102477794	2.83573320	2.70686151
65	2.98691210164	2.94562514119	2.86270779	2.75089518
70	2.98786959317	2.94955881191	2.88356973	2.78594498
∞	3.00000000000(5)	3.00000000000(3)	2.998(1)	2.994(9)

Tabela 4.1: Resultado para o cálculo considerando as relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46), a última linha da tabela representa o valor extrapolado para o expoente y_h para $c = b = 0.6$ e x é dado pela condição de tripla degenerescência (3.28), com $35 \leq N \leq 70$ spins. A extrapolação BST foi realizada considerando $w = 1$.

Fizemos os mesmos cálculos, só que agora consideramos $c = b = 0.8$, neste caso alguns zeros se encontram fora da circunferência de raio 1, inclusive a SEYL, que se encontra no eixo real negativo. Investigamos o comportamento dos zeros na vizinhança da SEYL, fazendo o ajuste di-log das relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46). Para o ajuste di-log da equação (2.39) $y_h \approx 2.9880$ para os zeros na rede estática e $y_h \approx 2.9531$ para os zeros na rede dinâmica, com a qualidade do ajuste $\chi^2 = 6.42 \times 10^{-8}$ e $\chi^2 = 1.9519 \times 10^{-6}$ para a rede estática e dinâmica respectivamente.

Considerando o algoritmo de extrapolação BST, encontramos para a extrapolação da relação (2.51) encontramos $y_h \approx 3.000000(2)$ para a rede usual e $y_h \approx 2.99999(8)$ para a rede dinâmica e para a relação (2.48) encontramos $y_h \approx 2.996(5)$ para a rede usual e $y_h \approx 3.01(2)$ para a rede dinâmica.

Esses resultados nos mostram que também teremos o novo comportamento crítico $\sigma = -2/3$ para o modelo BEG na rede dinâmica, ao comparar os resultados obtidos para a rede usual e para a dinâmica podemos notar que existe uma diferença muito pequena entre os resultados numéricos de y_h .

Observe que os valores que apresentamos para $b = c = 0.6$ e $b = c = 0.8$, inclusive a tabela 4.1, não foram publicados nos trabalhos [17, 32, 33, 35] e são originais desta tese.

4.2.2 Modelo BEG com $\beta H = \pm i\pi/2$ na rede dinâmica

Calculamos os zeros nas diferentes redes para o modelo BEG com $\beta H = \pm i\pi/2$, esse caso já foi estudado na rede usual na subseção 3.2.2 do capítulo 3. Verificamos que novamente os zeros, das duas redes, tendem a colapsar quando $N \rightarrow \infty$. Sabemos que na rede usual, $y_h = 3$ quando consideramos as condições de tripla degenerescência $b = 9c/4(1+c^2)$ e $\tilde{x} = b\sqrt{3(1-c^4)}$ para qualquer temperatura $0 \leq c \leq 1$ tal que $c \neq \sqrt{2}/2$. Para o caso especial $c = \sqrt{2}/2$, temos o valor usual $y_h \approx 2$. Calculamos para diferentes c o valor extrapolado para y_h e encontramos $y_h \approx 3$, para $c \neq \sqrt{2}/2$ e $y_h \approx 2$ para $c = \sqrt{2}/2$, vide tabela 4.2. Novamente encontramos uma diferença pequena entre os valores encontrados para y_h na rede estática e dinâmica, vide tabelas 4.1 e 4.2. Repetimos estes cálculos para o modelo Blume-Capel e encontramos resultados semelhantes. Acreditamos que o modelo BEG sobre anéis conexo e desconexos exibe o mesmo comportamento que o modelo BEG na rede usual.

c	$y_h^{\Re(\Delta u)}(\infty)$ (rede estática)	$y_h^{\Re(\Delta u)}(\infty)$ (rede dinâmica)
0.1	3.0000000000(2)	3.0000000001(8)
0.65	3.00(1)	3.00(2)
$\sqrt{2}/2$	2.00000000(1)	1.999999999999(4)
0.75	3.0000(1)	3.0000(4)
0.9	3.0000000(3)	3.0000000(6)

Tabela 4.2: Extrapolação BST do expoente de escala do campo magnético y_h para o modelo BEG com $b = 9c/4(1+c^2)$ e $\tilde{x} = b\sqrt{3(1-c^4)}$, a SEYL é dada por $u_E = i(A_E = 0)$.

Capítulo 5

Zeros Generalizados do Modelo de Blume-Emery-Griffiths

No capítulo 3 estudamos os zeros do modelo Blume-Emery-Griffiths no plano complexo $u = e^{\beta H}$, os conhecidos zeros de Yang-Lee. Neste caso os outros acoplamentos da hamiltoniana do modelo BEG são reais ($J, K, \Delta \in \mathfrak{R}$). Motivados pelo autor de [21], que conjecturou que o expoente de escala do campo magnético assume o mesmo valor que o expoente de escala para a temperatura na vizinhança da SEYL, ou seja, $y_h = y_t$. Nós vamos considerar o campo magnético real e um dos demais parâmetros da hamiltoniana (3.1) complexo, ou seja um dos três acoplamentos (J, K, Δ) será complexo [33]. Se considerarmos o acoplamento J complexo, com $H, K, \Delta \in \mathfrak{R}$, os zeros estão no plano complexo de $c = e^{-\beta J}$, e são conhecidos por zeros de Fisher [19]. Quando o acoplamento K ou Δ for complexo, com os outros acoplamentos reais, teremos os zeros no plano complexo de $b = e^{\beta K}$ ou $x = e^{\beta \Delta}$, respectivamente, que chamaremos de zeros generalizados.

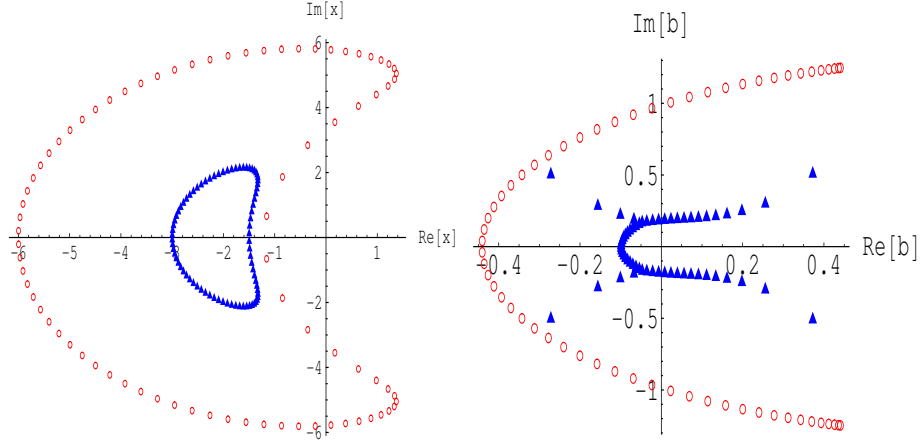
Sabemos que, no geral, os zeros formam curvas no plano complexo ao qual eles pertencem, como foi visto no capítulo anterior para os zeros de Yang-Lee, o mesmo acontecerá para os zeros no plano complexo das variáveis (c, b, x) , como mostram a figura 5.1. Iremos perceber que os zeros irão se acumular na vizinhança de um determinado ponto (SEYL).

Uma vez calculado o expoente de escala y_h , podemos verificar se a hipótese de [21] continua sendo válida para o novo expoente de escala $y_h = 3$.

Neste capítulo vamos considerar diferentes situações a fim de encontrar o novo expoente σ para a densidade linear próximo a SEYL dos diferentes zeros.

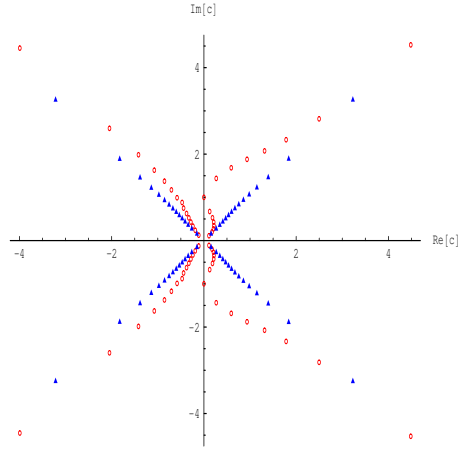
5.1 Zeros Generalizados com $H = 0$ ($A = 2$)

Nesta seção vamos procurar a existência do novo comportamento crítico $\sigma = -2/3$. Para os zeros nos diferentes planos complexos x, b e c a campo magnético nulo ($H = 0$),



(a) Zeros no plano complexo de x com $(b, A) = (1, 2)$ para $N = 80$ spins com $c = 0.5$ (triangulos azuis) e $c = 0.2$ (círculos vermelhos).

(b) Zeros no plano complexo de b com $(x, A) = (1, 2)$ para $N = 60$ spins com $c = 0.1$ (triangulos azuis) e $c = 0.6$ (círculos vermelhos).



(c) Zeros no plano complexo de c com $(b, A) = (1, 2)$ para $N = 60$ spins em $x = 0.1$ (triangulos azuis) e $x = 1.0$ (círculos vermelhos)

Figura 5.1: Zeros no plano complexo de x (a), b (b) e c (c) em $H = 0$ ($A = 2$)

os zeros nesses planos são exemplificados pelas figuras 5.1(a), (b) e (c), respectivamente. Note na figura (5.1(c)) os zeros se aproximam do eixo real positivo $\Re c$ em $c = 0$, isto é um indicativo da transição de fase trivial a $T = 0$, típica de modelos de spin unidimensionais com interação de curto alcance.

Para o caso do campo magnético nulo ($A = 2$) temos que a equação secular (3.8) pode ser resolvida fornecendo uma fórmula simples para os autovalores:

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left[R \pm \sqrt{S} \right], \quad (5.1)$$

$$\lambda_3 = b(1 - c^2), \quad (5.2)$$

com $R = xc + b(1 + c^2)$ e $S = [xc - b(1 + c^2)]^2 + 8xc^2$ ¹ Considerando as condições de tripla degenerescência (3.27) temos:

$$xc = b(1 - 3c^2), \quad (5.3)$$

$$2bc^3 = -(1 - 3c^2). \quad (5.4)$$

Substituindo (5.1) em $\lambda_+ = e^{i\varphi}\lambda_-$, encontramos:

$$[xc - b(1 + c^2)]^2 + 4xc^2(1 + \cos \varphi) + 2xb(1 + c^2)(1 - \cos \varphi) = 0 \quad . \quad (5.5)$$

Análogo ao que foi feito no capítulo 2, vamos considerar os zeros no plano complexo de x , assim temos que $z(\varphi) = x(\varphi)$ e as equações (5.3) e (5.4), nos fornecem que a singularidade da ponta (SEYL) estará localizada no eixo real negativo do plano complexo de x :

$$x_E = -\frac{(1 - 3c^2)^2}{2c^4}. \quad (5.6)$$

Pois, a variável c satisfaz $1/\sqrt{3} < c < 1$, já que $b = (3c^2 - 1)/(2c^3)$ deverá ser positivo ($K \in \Re$).

Sabemos que o zero mais próximo a SEYL obedece a relação de escala de tamanho finito, vide (2.39) e vamos supor que há uma expansão em série de Taylor para N grande em torno de $\varphi = 0$, dependendo do conhecimento das derivadas de $d^j x/d\varphi^j$ em $\varphi = 0$.

Assim, ao considerar as derivadas da equação (5.5), em $\varphi = 0$, conseguimos informações sobre $d^j x/d\varphi^j|_{\varphi=0}$. Substituindo as derivadas em (2.38) podemos compará-la com (2.39) e assim determinar y_{Δ} .

¹Note que tem um erro de impressão em [33].

A primeira derivada de (5.5) leva a

$$(1 - bc) \left. \frac{dx}{d\varphi} \right|_{\varphi=0} = 0, \quad (5.7)$$

se $b \neq 1/c$ temos $dx/d\varphi|_{\varphi=0} = 0$. Usando esse resultado e as equações de tripla degenerescência (5.3) e (5.4), da segunda derivada de (5.5), em $\varphi = 0$, temos:

$$\left. \frac{d^2x}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=0} = \frac{1 - c^2}{4c}. \quad (5.8)$$

Desde que $\left. \frac{dx^2}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=0} \neq 0$, de (2.39) encontramos $y_\Delta = 2$, que implica no expoente crítico usual $\sigma = -1/2$. Se considerarmos $\lambda_+ = e^{i\varphi}\lambda_3$ também encontraremos $\sigma = -1/2$. Portanto, só poderemos ter o novo expoente crítico $\sigma = -2/3$ para um campo magnético diferente de zero ($A > 2$), vamos investigar esse caso na seção 5.2.

Agora nós vamos considerar os zeros no plano complexo de b com $H = 0$ ($A = 2$), isto é, K será complexo, com $\Delta, J \in \mathfrak{R}$. Analisando a condição de tripla degenerescência (5.3) podemos perceber que b_E será um número real negativo para $0 < c < 1/\sqrt{3}$ e real positivo para $1/\sqrt{3} < c < 1$. Consequentemente, somente o intervalo de temperatura $1/\sqrt{3} < c < 1$, fornecerá SEYL, nessa faixa teremos K puramente imaginário. O intervalo $0 < c < 1/\sqrt{3}$, equivale a b_E real positivo, este fato indica uma transição de fase física e sabemos que não ocorre esse tipo de transição em modelos unidimensionais com interação de curto alcance. Assim para termos a SEYL para os zeros no plano complexo de b em $H = 0$, a temperatura deverá satisfazer $1/\sqrt{3} < c < 1$. Por outro lado, as equações (5.3) e (5.4) fornecem $x = -2b_E^2c^2 < 0$, o que não é possível para $\Delta \in \mathfrak{R}$. Portanto, nós não poderemos encontrar o novo comportamento crítico para $H \neq 0$.

Uma situação similar ocorre para os zeros de Fisher com $H = 0$, combinando as condições de tripla degenerescência (5.3) e (5.4) teremos a SEYL no plano complexo de c ,

$$c_E = \sqrt{-\frac{x}{2b^2}}, \quad (5.9)$$

que será puramente imaginária com $x, b \in \mathfrak{R}$, voltando com esse resultado na condição (5.3) encontramos que b também deverá ser puramente imaginário. Portanto, não teremos o novo comportamento crítico neste caso.

Concluimos que não teremos o novo comportamento crítico ($\sigma \neq -1/2$) para zeros generalizados do modelo BEG quando $H = 0$, pois as relações de tripla degenerescência (5.3) e (5.4) não nos possibilita encontrar condições para a validade dos parâmetros do modelo. Nas próximas seções estudaremos as distribuições dos zeros generalizados nos

diferentes planos complexos de z para $H \neq 0$, a fim de procurar o novo comportamento crítico.

5.2 Zeros no plano complexo de x com $A > 2$

5.2.1 Caso I: $b \geq 1$

Para procurar o novo comportamento crítico para a densidade dos zeros próxima a SEYL no plano complexo de x , as condições de tripla degenerescência (3.27), implicam para A arbitrário em:

$$x^2 c^2 + b^2 A^2 + A(x c)(3 c - b) = 3b^2(1 - c^4), \quad (5.10)$$

$$x^2 c^2 A(b - c) + A^2(x c)b(b - c) + Ab^3(1 - c^4) = x c b(1 - c^2) [8 b(1 + c^2) - 18 c] \quad (5.11)$$

Das equações (5.10) e (5.11) podemos encontrar a singularidade da extremidade no plano complexo de x :

$$x_E(A, b, c) = \frac{A b^2 [A^2(b - c) - (4b - 3c)(1 - c^4)]}{c [A^2(b - c)(2b - 3c) + 18 b c(1 - c^2) - 8b^2(1 - c^4)]} \quad . \quad (5.12)$$

Desde que o denominador de x_E seja diferente de zero, podemos substituir a equação x_E em (5.10) e encontramos uma equação cúbica para A^2 como função de b e c . Ao resolver essa equação descobrimos que somente uma solução será real, as outras duas serão em geral complexas. Fizemos um gráfico 3D da solução real de $A^2(c, b)$ na região compacta $0 \leq (1/b) \leq 1$ com $0 \leq c \leq 1$, vide gráfico 5.2. Este gráfico mostra que $0 \leq A^2 \leq 2$. Como a variável do campo magnético $H \in \mathfrak{R}$, temos que $A = (e^{\beta H} + e^{-\beta H}) > 2$, assim concluímos que os zeros do modelo BEG no plano complexo de x não exibirão o novo comportamento crítico próximo a SEYL, com $b \geq 1$ ($K \geq 0$).

Por outro lado, podemos impor que tanto o numerador quanto o denominador da equação (5.12) sejam nulos, assim podemos encontrar condições para o campo magnético H e para o acoplamento K , dependentes somente da temperatura:

$$A = \sqrt{4 + 2 c^2(1 - c^2)} \quad , \quad (5.13)$$

$$b = \frac{1 + c^2}{2 c} \quad . \quad (5.14)$$

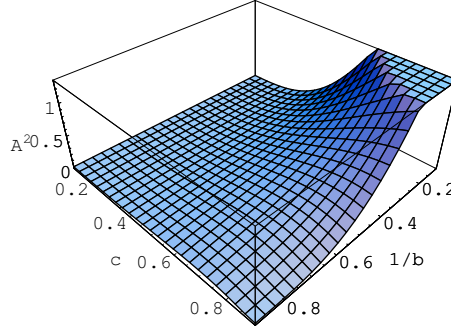


Figura 5.2: Gráfico 3D da solução real para $A^2(c, d)$ na região de domínio compacto: $0 \leq 1/b \leq 1$, $0 \leq c \leq 1$. A função A^2 foi encontrada ao substituir a SEYL (5.12) na condição de tripla degenerescência (5.10).

Com estas equações encontramos uma condição aceitável para $2 < A \leq 3\sqrt{2}/2$ ($0 < H/k_B T \lesssim 0.35$) e $b > 1$. Este caso não inclui o modelo Blume-Capel ($b = 1$). Substituindo as equações (5.13) e (5.14) em (5.10) descobrimos a localização da SEYL do plano complexo de x :

$$x_E^\pm = \frac{1}{2c^2} \sqrt{\frac{1+c^2}{2}} \left[(1-5c^2)\sqrt{2-c^2} \pm 3c(1-c^2)\sqrt{3}i \right] . \quad (5.15)$$

As condições (5.13), (5.14) e (5.15) nos garante que para qualquer temperatura finita teremos um par de acoplamentos reais (K, H) , que nos possibilita encontrar a SEYL $x_E = e^{\beta\Delta}$, tais que $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$. Para confirmar que $x_E^\pm$ corresponde a singularidade da ponta temos que estudar a vizinhança de $x_E^\pm$. Substituindo (5.13) e (5.14) na condição (3.19), nós obtivemos um polinômio de grau 4 em $x(\varphi)$, resolvendo esta equação perturbativamente em $\varphi = 0$. Temos uma solução da forma:

$$x_I(\varphi) = x_E^+ + c_3(c)\varphi^3 + c_4(c)\varphi^4 + \dots , \quad (5.16)$$

onde c_3 e c_4 são coeficientes complicados dependentes somente da temperatura. Verificamos que para $0 \leq c \leq 1$ os coeficientes c_3 e c_4 nunca se anulam. Para a segunda solução temos $x_{II}(\varphi) = x_I^*(\varphi)$. Colocando de volta as relações (5.13), (5.14) e (5.16) na equação secular do modelo BEG (3.8), podemos encontrar os autovalores λ_a , $a = 1, 2, 3$ perturbativamente na vizinhança de $\varphi = 0$. Fazendo o gráfico do módulo das soluções $|\lambda_i(\varphi)| \times \varphi$ temos que $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ em $\varphi = 0$ com $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$ na vizinhança de $\varphi = 0$. Como

x_E^+ e $x_E^- = (x_E^+)^*$ são as singularidades da ponta, podemos comparar (5.16) com a relação de escala de tamanho finito (2.39) e assim determinamos $y_\Delta = 3$ e $\sigma = -2/3$.

Ainda restam duas soluções perturbativas da equação (3.19) com as condições (5.13), (5.14): $x_{III}(\varphi) = x_I(-\varphi)$ e $x_{IV}(\varphi) = x_{II}(-\varphi)$, que estão de acordo com a simetria $\varphi \rightarrow -\varphi$ da equação (3.19). Ao substituir essas novas soluções, junto com as condições (5.13) e (5.14) na equação (3.8), encontramos $|\lambda_1| = |\lambda_2| < |\lambda_3|$, assim $x_{III}(\varphi)$ e $x_{IV}(\varphi)$ não descrevem a vizinhança da singularidade da ponta $x_E^\pm$ ao longo de uma curva dos zeros da função de partição.

Para testar numericamente os resultados acima, vamos considerar $c = 0.1$, assim as equações (5.13) e (5.14), equivalem a $A \approx 2.0049$ e $b \approx 5.05$, com a singularidade da ponta dada pela equação (5.15): $x_E^\pm \approx 47.6174 \pm 18.2782i$, os zeros foram calculados a partir da equação (3.30) e estão ilustrados na figura 5.3.

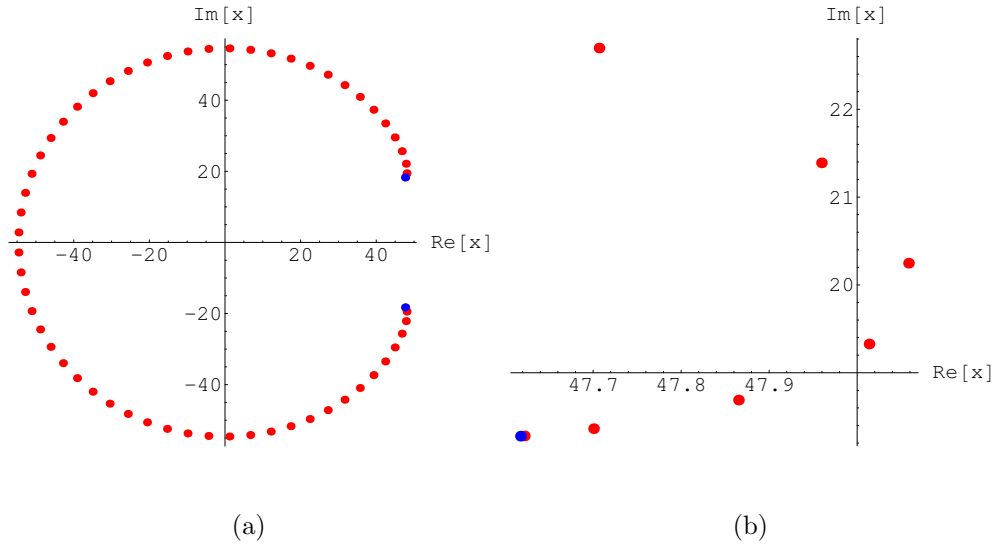
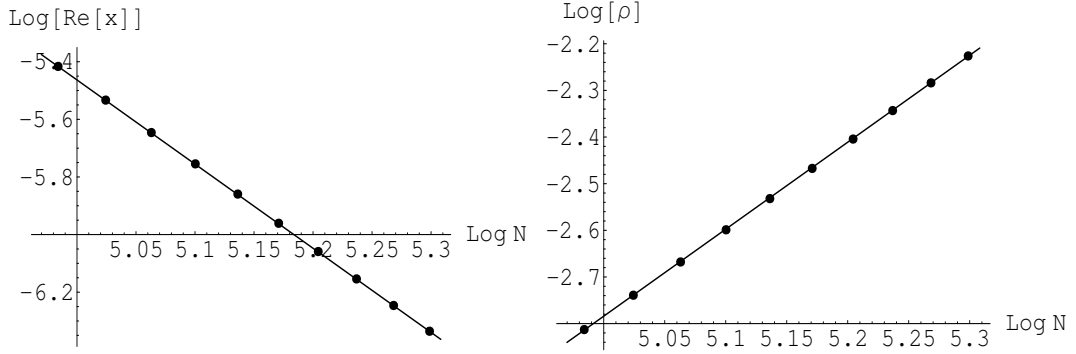


Figura 5.3: Zeros no plano complexo de x do modelo BEG com $c = 0.1$, com as condições de tripla degenerescência (5.13) e (5.14) fornecendo $A \approx 2.0049$ e $b \approx 5.05$, os pontos em vermelho representam os zeros da função de partição e os pontos azuis são as SEYL $x_E^\pm \approx 47.6174 \pm 18.2782i$

Para esse modelo utilizamos redes com $N_a = 96 + 8(a - 1)$ spins, com $1 \leq a \leq 10$. Com isso podemos calcular o expoente y_Δ fazendo um ajuste di-log das relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46). Utilizando a função $\ln(\Delta x(N)) = C_1 \ln(N) + C_2$ para o ajuste da relação (2.39) encontramos $y_\Delta^{\Re(\Delta x)} = 2.92$ com a qualidade desse ajuste sendo $\chi_{\Re(\Delta x)}^2 = 2.4 \times 10^{-6}$, como mostra a figura 5.4(a). Fazendo o ajuste di-log da relação (2.46) encontramos $y_\Delta^{(\rho)} = 2.86$, com $\chi_\rho^2 = 1.1 \times 10^{-5}$, como mostra a figura 5.4(b). Para o ajuste da função (2.39) utilizamos a parte real dos zeros, mas também poderíamos ter



(a) Ajuste di-log da expressão (2.39):
 $\ln \Re \Delta x = 9.144 - 2.921 \ln N$

(b) Ajuste di-log da expressão (2.46):
 $\ln \rho = -12.109 + 1.865 \ln N$

Figura 5.4: Ajuste di-log para os zeros no plano complexo de x com $c = 0.1$, $A = \sqrt{4 + 2c^2 - 2c^4} \approx 2.00494$, $b = (1 + c^2)/2c = 5.05$ e $146 \leq N \leq 200$ spins.

usado a parte imaginária, neste caso teríamos $y_{\Delta}^{\Im(\Delta x)} = 3.20$.

Para estimar melhor nossos resultados podemos considerar agora $c = 0.5$ nas condições de tripla degenerescência (5.13) e (5.14), ou seja, $A \approx 2.09165$ e $b = 1.25$, respectivamente. Fazendo a extrapolação para $N \rightarrow \infty$ utilizando o algoritmo de extrapolação BST encontramos resultados da última linha da tabela 5.1. Calculamos $y_{\Delta}(N \rightarrow \infty)$ com diferentes w e percebemos que $w = 1$ minimiza a incerteza da extrapolação, como mostra a figura 5.5 e novamente em torno de $w = 1$, temos $dy_{\Delta}/dw \approx 0$, mostrando uma certa robustez da extrapolação nessa região.

Portanto, podemos encontrar o novo comportamento crítico $\sigma = -2/3$ a qualquer temperatura para os zeros no plano complexo de x para A e b dados pelas condições (5.13) e (5.14), respectivamente.

5.2.2 Caso II: $b = c$

Quando $K < 0$, temos que $0 \leq b < 1$. Como o acoplamento K se torna antiferromagnético, esta região se torna bastante complicada, assim trataremos somente um caso especial quando $b = c$ ($K = -J$). Assim a posição da SEYL (5.12) se torna:

$$x_E = -\frac{c(1 + c^2)A}{2(5 - 4c^2)} \quad , \quad (5.17)$$

onde

N_a	$y_{\Delta}^{\Re(\Delta x)}$	$y_{\Delta}^{\Im(\Delta x)}$	y_{Δ}^{ρ}
146	3.10133044891	2.99588879678	2.99600020199
152	3.01549349028	3.00078875052	3.00394303145
158	2.99975357781	3.00013117592	3.00142420892
164	3.00000931233	3.00000002796	2.99998815842
170	3.00000082339	2.9999999922	3.00000000500
176	3.00000000315	2.9999999980	3.00000000598
182	3.00000000106	3.00000000005	3.00000000517
188	2.9999999928	3.00000000000	2.9999999999
∞	3.00000000000(9)	3.00000000000(3)	3.00000000000(8)

Tabela 5.1: Resultado para relações de escala do tamanho finito do plano complexo de x , onde $y_{\Delta}^{\Re(\Delta x)}$ e $y_{\Delta}^{\Im(\Delta x)}$ obtidos a partir de (2.39) usando a parte real e imaginária dos zeros, respectivamente. Enquanto y_{Δ}^{ρ} vem da expressão (2.46). Os zeros são calculados para $146 \leq N \leq 194$ spins em $c = 0.5$, $A \approx 2.09165$ e $b = 1.25$. A última linha vem da extrapolação $N \rightarrow \infty$ através do algoritmo BST com $\omega = 1$.

$$A = \frac{2(5 - 4c^2)}{3} \sqrt{\frac{1 + c^2}{3(1 - c^2)}} \equiv A(c) \quad (5.18)$$

Com $\sqrt{2}/2 < c < 1$ temos $A > 2$ de (5.18), consequentemente $x_E < 0$. O acoplamento Δ deverá ser puramente imaginário. Assim, vamos estudar a vizinhança de (5.17) para encontrar y_{Δ} . Usando (5.18) na equação (3.19), com $b = c$ encontramos uma equação cúbica para $x(\varphi)$ para uma dada temperatura. Como exemplo podemos considerar $c = 0.8$. Assim temos as soluções:

$$x_I(\varphi) = -\frac{142\sqrt{123} + 61\sqrt{366}}{675} + \frac{9}{200}\sqrt{\frac{183}{2}}\varphi^2 + \mathcal{O}(\varphi^4) \quad , \quad (5.19)$$

$$x_{II}(\varphi) = -\frac{41}{225}\sqrt{\frac{41}{3}}\left(1 + \frac{3\sqrt{3}\varphi^3}{14} + \mathcal{O}(\varphi^4)\right) \quad , \quad (5.20)$$

$$x_{III}(\varphi) = x_{II}(-\varphi) \quad . \quad (5.21)$$

O que está de acordo com a simetria da equação (3.19), $\varphi \rightarrow -\varphi$. A quantidade $x_{II}(\varphi = 0) = x_{III}(\varphi = 0)$ coincide com as relações (5.17) e (5.18) em $c = 0.8$. Substituindo $x_{II}(\varphi)$ na equação secular (3.8) nós podemos obter uma expansão para os autovalores da matriz transferência com $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ em $\varphi = 0$ e $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$ em sua vizinhança. Assim, x_E dada por (5.17) é uma SEYL verdadeira. Comparando a equação (5.20) com a relação de escala de tamanho finito (2.39) temos $y_{\Delta} = 3$ e $\sigma = -2/3$. Agora se substituirmos

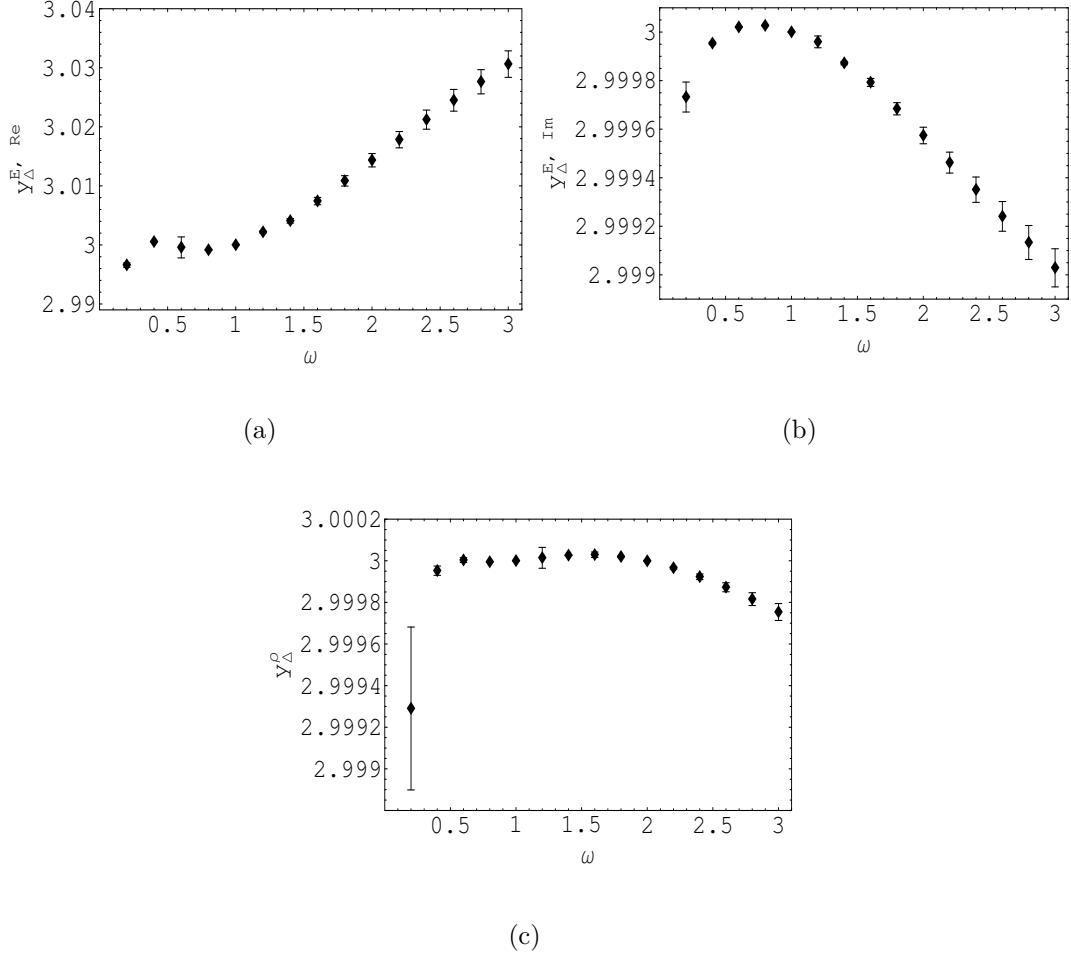


Figura 5.5: Extrapolação BST para $0.2 \leq \omega \leq 3.0$ de $y_{\Delta}^{\Re \Delta x}$, $y_{\Delta}^{\Im \Delta x}$, figuras 5.5(a) e 5.5(b), usando as partes real e imaginária dos zeros respectivamente. E y_{Δ}^{ρ} , figura 5.5(c). Para os zeros no plano complexo de x com $c = 0.5$, $A \approx 2.09165$ e $b = 1.25$.

$x_{III}(\varphi)$ na equação secular (3.8) novamente, encontramos $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ em $\varphi = 0$, mas $|\lambda_1| = |\lambda_2| < |\lambda_3|$ em sua vizinhança, portanto $x_{III}(\varphi)$ não representa a SEYL verdadeira. Já a solução $x_I(\varphi)$ descreve a singularidade usual ($y_{\Delta} = 2$ e $\sigma = -1/2$) na SEYL. Assim, para $c = 0.8$, temos $A = A(c) \approx 2.0045$ (ou $|H|/k_B T = 0.067$). A SEYL do lado direito ($x \approx -0.67$), vide figura 5.6, implica em $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$, enquanto a SEYL do lado esquerdo ($x \approx -4.06$) nós temos $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$. Resultados semelhantes ocorrem para outras temperaturas na faixa $\sqrt{2}/2 < c < 1$.

Verificamos que os zeros no plano complexo de x obedecem as relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46). Além disso, encontramos o novo comportamento crítico próximo a SEYL ($\sigma = -2/3$) tanto para o caso de $b > 1$ e $b < 1$. Para isso precisamos encontrar relações entre os parâmetros do modelo que pelo menos nos forneçam tripla

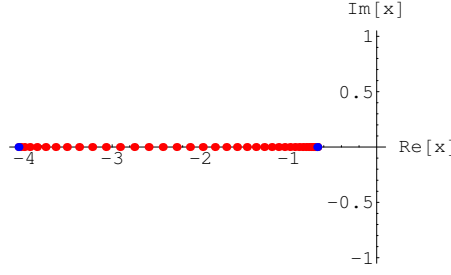


Figura 5.6: Zeros no plano complexo de x , com $N = 40$ spins, $A \approx 2.0045$ e $b = c = 0.8$. Os pontos azuis representam a SEYL $x \approx -0.67$ e $x \approx -4.06$. No lado esquerdo temos $\sigma = -1/2$ e no lado direito $\sigma = -2/3$.

degenerescência dos autovalores da matriz transferência, embora essas não sejam condições suficientes, similar ao que ocorre para os zeros de Yang-Lee, vide capítulo 3.

5.3 Zeros no plano complexo de b com $A > 2$

Nesta seção vamos tratar os zeros no plano complexo de b , assim podemos considerar as condições de tripla degenerescência (5.10) e (5.11), que levam a uma função para $b = b(A, c, x)$:

$$b = \frac{f_2(A, c, x)}{f_1(A, c, x)} \quad (5.22)$$

com

$$f_2(A, c, x) = x \left\{ Ac [2A^2 - 9(1 - c^4)]^2 + [A^2 - 4(1 - c^4)] [A^2 - 6(1 - c^4)] x \right\} \quad (5.23)$$

e

$$f_1(A, c, x) = \left\{ -c [A^2 - 3(1 - c^4)] [A^4 - 18A^2(1 - c^2) + 54(1 - c^2)^2(1 + c^2)] \right. \\ \left. + Ax [A^2 - 4(1 - c^4)] [A^2 - 9(1 - c^4)] \right\}. \quad (5.24)$$

Voltando com a equação (5.22) na equação (5.10) e supondo que $f_1(A, c, x)$ nunca será nula, nós terminamos com uma expressão $F(A, c, x) = 0$. Fazendo um gráfico 3D da função $F(A, c, x)$, no domínio compacto $2D$: $0 \leq 1/A \leq 1/2$, $0 \leq c \leq 1$ para uma lista do parâmetro x tal que $0.01 \leq x \leq 4.01$, como por exemplo vide figura 5.7 com $x = 2$, nós percebemos que $F(A, c, x) > 0$. Portanto não há um indício de novo comportamento crítico ($\sigma = -2/3$) para os zeros na vizinhança da SEYL, no plano complexo de b para

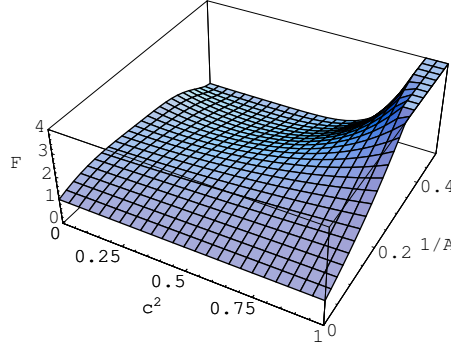


Figura 5.7: Gráfico 3D para $F(A, c, x)$ no domínio compacto: $0 \leq 1/A \leq 1/2$, $0 \leq c \leq 1$ para $x = 2$

$f_1(A, c, x) \neq 0$ e $f_2(A, c, x) \neq 0$.

Se considerarmos $f_1(A, c, x) = 0$ encontramos:

$$x = -\frac{A [2A^2 - 9(1 - c^4)]^2}{[A^2 - 4(1 - c^4)][A^2 - 6(1 - c^4)]} \quad , \quad (5.25)$$

onde

$$A = \sqrt{V(1 - c^4)} \quad (5.26)$$

pode ser obtido ao substituir (5.25) no numerador de (5.22), fazendo $f_2(A, c, x) = 0$. A quantidade V pode ser determinada ao resolver a equação de quarto grau:

$$V^4(1 + c^2) - V^3(15 + 13c^2) + 8V^2(10 + 7c^2) - 9V(9c^2 + 19) + 108 = 0 \quad . \quad (5.27)$$

Duas das soluções de (5.27) resultam em valores complexos de V para temperaturas finitas ($0 \leq c \leq 1$), ao substituir essas soluções complexas em (5.26) encontramos A fora do limite suposto anteriormente. Para a terceira solução de (5.27) teremos $A \in \mathbb{R}$, com $A < 2$. Estas três soluções correspondem a campos magnéticos complexos, entretanto uma das soluções de (5.27) terá $A > 2$. Esta solução fornecerá uma faixa de validade para o campo magnético muito pequena, $2 < A < 2.13$ ($|H|/k_B T \leq 0.36$). Usando tal solução em (5.25) e (5.26) encontramos x e A , respectivamente, voltando com essas soluções na equação (3.19) encontramos um polinômio de grau 6 para $b(\varphi)$.

Todas as soluções obtidas na vizinhança de $\varphi = 0$ aparecem em pares complexo conjugados, como esperado. Substituindo as soluções na equação secular (3.8), nós pode-

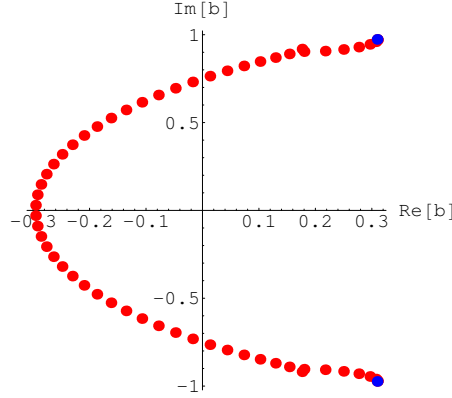


Figura 5.8: Zeros no plano complexo de b com $N = 60$ spins, $A \approx 2.0046$ e $x = 0.74468$. Os pontos azuis representam a SEYL $b^\pm \approx 0.309435 \pm 0.973399i$

mos encontrar $\lambda_i(\varphi)$, $i = 1, 2, 3$ na vizinhança de $\varphi = 0$. Para o par de acoplamento $b_1(\varphi), b_2(\varphi)$, onde $b_2(\varphi) = b_1^*(\varphi)$, temos o caso de dupla degenerescência $\lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_3$ em $\varphi = 0$, correspondendo a SEYL com $\sigma = -1/2$. As outras quatro soluções $b_3(\varphi) = b_5(\varphi)$ e $b_4(\varphi) = b_6(\varphi)$, com $b_4(\varphi) = b_3^*(\varphi)$, levam a tripla degenerescência em $\varphi = 0$ e $|\lambda_1(\varphi)| = |\lambda_2(\varphi)| > |\lambda_3(\varphi)|$ na vizinhança de $\varphi = 0$, o que significa que teremos $\sigma = -2/3$.

Concluindo, a situação é similar aos zeros no plano complexo de x para o caso de $b \geq 1$. Ou seja, também há uma pequena faixa do campo magnético real onde encontramos o novo comportamento crítico $\sigma = -2/3$ na vizinhança da SEYL no plano complexo de b .

Nossos resultados numéricos confirmam $y_K = 3$ ($\sigma = -2/3$) para os zeros no plano complexo de b . Como exemplo consideramos $c = 0.5$, as relações de tripla degenerescência (5.25) e (5.26) implicam em $x \approx 0.74468$ e $A \approx 2.0046$, respectivamente, vide figura 5.8. Os resultados para o ajuste das relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46) fornecem $y_K \approx 2.95$ e $y_K \approx 3.04$, respectivamente. Ao fazer a extrapolação utilizando o algoritmo BST, encontramos $y_K \approx 3$, a melhor escolha para o parâmetro w está novamente em torno de $w = 1$, como mostra a figura 5.9.

5.4 Zeros no plano complexo de c com $A > 2$

Agora vamos investigar a possibilidade de encontrar o novo comportamento crítico no plano complexo de c , com os outros acoplamentos da hamiltoniana do modelo BEG reais ($K, \Delta, H \in \mathbb{R}$). As condições de tripla degenerescência (5.10) e (5.11) envolvem a variável c de forma complicada. Mas é possível combiná-las e deduzir uma equação quadrática

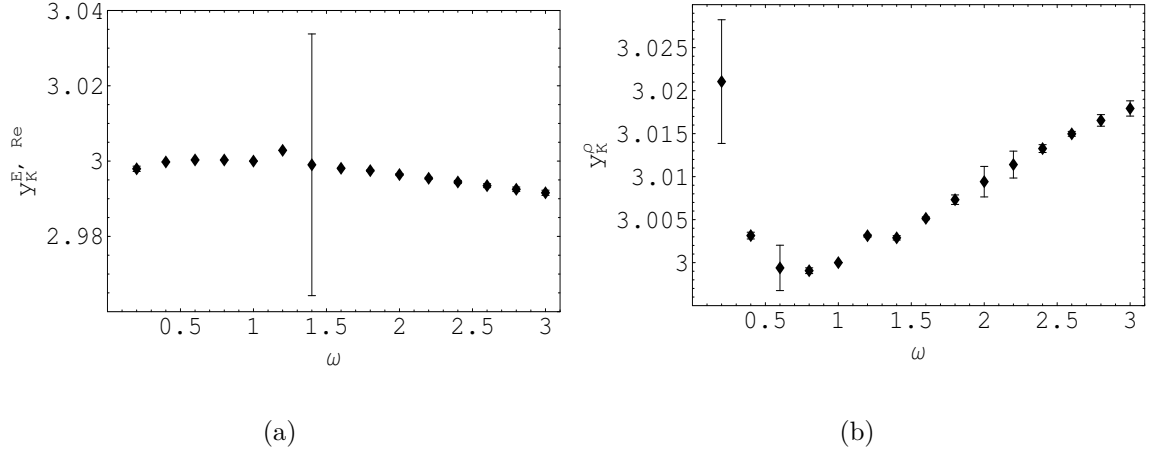


Figura 5.9: Extrapolação BST para $0.2 \leq \omega \leq 3.0$ de $y_K^{\Re(\Delta b)}$ e y_K^ρ , figuras 5.9(a) e 5.9(b) respectivamente. Em 5.9(b) consideramos a parte real dos zeros no plano complexo de b . Os zeros em b foram calculados para $c = 0.5$ com $x \approx 0.74468$ e $A = \sqrt{V(1 - c^4)} \approx 2.0046$ são obtidos a partir de (5.25) e (5.27) respectivamente.

para a SEYL c_E que fornece $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ vide apêndice de [33]. Esta é,

$$l_0 + l_1 c_E + l_2 c_E^2 = 0 \quad , \quad (5.28)$$

com $l_i = l_i(A, b, x)$, $i = 0, 1, 2$ polinômios dados no apêndice de [33]. Em particular l_2 é um polinômio cúbico na variável $A = 2 \cosh(\beta H)$. Com $l_2 \neq 0$, podemos encontrar uma restrição, independente de c , para a condição de tripla degenerescência.

$$G(A, b, x) = 0 \quad , \quad (5.29)$$

onde o polinômio $G(A, b, x) = P_{12}(A, b, x) = \sum_{m=0}^{12} g_m x^m$ de grau 12 em x possui coeficientes complicados $g_m = g_m(A, b)$. Investigamos $G(A, b, x)$ para alguns valores $b = b_j = j/10$ com $j = 1, 2, \dots, 99, 100$. Como $A > 2$ e $x > 0$ é conveniente introduzir as variáveis $B = 1/A$ e $t = 1/x$. Assim podemos fazer um gráfico 3D, que nos revela que $B^{12} G(1/B, b_j, x) > 0$ na região compacta: $0 < B < 1/2$; $0 < x < 1$. Da mesma forma, podemos plotar $B^{12} t^{12} G(1/B, b_j, 1/t) > 0$ na região complementar $0 < B < 1/2$; $0 < t < 1$. Um exemplo está ilustrado na figura 5.10 obtidas para o modelo de Blume-Capel $b = 1$. Concluimos que a restrição $G(A, b, x) = 0$ não é satisfeita para $l_2 \neq 0$.

O caso $l_2(A, b, x) = 0$ também leva a incoerências, como mostra o apêndice de [33].

Resumindo, nós não encontramos nenhum zero de Fisher com o novo comportamento ($\sigma = -2/3$) quando consideramos os outros acoplamentos reais H, Δ e $\beta K_j = \ln(j/10)$ com $j = 1, 2, \dots, 99, 100$. Em particular, $j = 10$ corresponde ao modelo Blume-Capel.

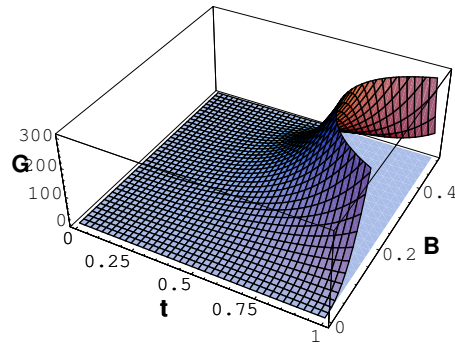


Figura 5.10: Gráfico 3D de $G(1/B, b, 1/t) = 0$ em $b = 1$ na região compacta: $0 < B < 1/2$; $0 < t < 1$. O plano azul é $G(1/B, 1, 1/t) = 0$. A função $G(A, b, x)$ é dada pela fórmula (A6) no apêndice de [33]

Capítulo 6

Modelo de Ising de spin 1/2 com interações de segundos vizinhos (Modelo ANNNI)

Nos capítulos anteriores encontramos um novo comportamento crítico próximo a SEYL quando a matriz transferência do modelo BEG apresenta tripla degenerescência dos seus autovalores. Até o momento só procuramos o novo expoente crítico para modelos de spin 1, então para comprovarmos a universalidade do novo expoente devemos considerar outros valores de spin como $s = 1/2$. Neste capítulo vamos considerar o modelo de Ising de spin 1/2 unidimensional com interações de segundos vizinhos [34]. Ele é um modelo de spin 1/2 relativamente fácil de se trabalhar e sua matriz transferência fornecerá 4 autovalores, nos possibilitando obter o novo comportamento crítico $\sigma = -2/3$.

6.1 Definição do modelo

O modelo de Ising de spin 1/2 unidimensional com interações de segundos vizinhos (ANNNI- Axial next to nearest neighbour Ising Model), foi introduzido por Fisher e Selke em [34]. A energia e a função de partição são dadas por:

$$E = -J \sum_i S_i S_{i+1} - K \sum_i S_i S_{i+2} - H \sum_i S_i, \quad (6.1)$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E}, \quad (6.2)$$

onde $S_i = \pm 1$, J e K são constantes de acoplamento entre os primeiros vizinhos e os vizinhos mais próximos além dos primeiros vizinhos, respectivamente e H é o campo magnético. O modelo é caracterizado pela interação competitiva entre os acoplamentos $J > 0$ (ferromagnético) e $K < 0$ (antiferromagnético) e possui aplicações (em $D = 1$) na descrição de alguns materiais magnéticos e ferroelétricos, vide artigo de revisão [51].

Aqui admitimos que J e K são números reais arbitrários e somente H pode assumir valores complexos. Para simplificar o problema, vamos introduzir a notação:

$$c = e^{-\beta J}, \quad d = e^{\beta K}, \quad u = e^{-2\beta H}, \quad A = u + 1/u = 2 \cosh(2\beta H). \quad (6.3)$$

A temperatura é dada em termos do acoplamento dos primeiros vizinhos, assim a faixa de $0 \leq T < \infty$ corresponde $0 \leq c \leq 1$ para $J > 0$ (ferromagnético) ou $c \geq 1$ se $J < 0$ (antiferromagnético). Da mesma forma $-\infty < K \leq 0$ implica $0 \leq d \leq 1$ enquanto $0 \leq K < \infty$ fornece $d \geq 1$.

Com condição de contorno periódica, o modelo pode ser resolvido via matriz transferência ($\mathbf{T}$), de (6.2) temos:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \frac{du}{c} & \frac{1}{du} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & cdu & \frac{1}{du} \\ \frac{u}{d} & \frac{cd}{u} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{u}{d} & \frac{d}{cu} \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

Podemos determinar a função de partição como função dos autovalores (λ_i) da matriz de transferência (6.4):

$$Z_N = \text{Tr} \mathbf{T}^N = (\lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N + \lambda_4^N). \quad (6.5)$$

Redefinindo $\lambda \rightarrow (1/c)\lambda$, a equação secular, $\det(T - \lambda I)$, nos leva a equação quártica abaixo, de onde poderemos obter os autovalores λ_i :

$$\lambda^4 - a_3\lambda^3 + a_2\lambda^2 - a_1\lambda + a_0 = 0, \quad (6.6)$$

com

$$a_0 = - \left(\frac{1}{d^2} - d^2 \right)^2, \quad (6.7)$$

$$a_1 = dc \left(\frac{1}{d^2} - d^2 \right) \sqrt{A + 2}, \quad (6.8)$$

$$a_2 = d^2 \left(\frac{1}{c^2} - c^2 \right), \quad (6.9)$$

$$a_3 = \frac{d}{c} \sqrt{A+2}. \quad (6.10)$$

A simetria $\mathcal{Z}_2$ ($H \rightarrow -H$) de Z_N está explícita no fator $\sqrt{A+2} = e^{\beta H} + e^{-\beta H}$, presentes em a_1 e a_3 . Podemos notar que temos o modelo de Ising de spin 1/2, quando $D = 1$, e assim teremos somente dois autovalores não nulos, vide (6.6)-(6.8).

6.2 Resultados analíticos

Como nos exemplos anteriores, para número grande de spins, encontramos os zeros impondo que dois autovalores da matriz transferência possuam o mesmo módulo e que este seja maior que o módulo dos outros dois restantes ($|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_i|$, $i = 3, 4$). Para N grande, a contribuição de λ_3 e λ_4 pode ser desconsiderada e assim novamente a função de partição pode ser simplificada para:

$$Z_N \approx \lambda_1^N (1 + e^{iN\varphi}) \quad (6.11)$$

Novamente o primeiro zero será dado por $\varphi_1 = \frac{\pi}{N}$, vide (2.35) e (2.36).

Considerando o teorema de Vieta (2.8) para quatro incógnitas e já admitindo a condição ($\lambda_2 = e^{i\varphi} \lambda_1$), temos:

$$a_0 = \lambda_1^2 \lambda_3 \lambda_4 e^{i\varphi}, \quad (6.12)$$

$$a_1 = \lambda_1 \lambda_3 \lambda_4 (1 + e^{i\varphi}) + \lambda_1^2 (\lambda_4 + \lambda_3) e^{i\varphi}, \quad (6.13)$$

$$a_2 = \lambda_1^2 e^{i\varphi} + \lambda_1 (\lambda_3 + \lambda_4) (1 + e^{i\varphi}) + \lambda_3 \lambda_4, \quad (6.14)$$

$$a_3 = \lambda_1 (1 + e^{i\varphi}) + \lambda_3 + \lambda_4. \quad (6.15)$$

Nas equações (6.12)-(6.15) temos quatro variáveis diferentes: λ_1 , λ_3 , λ_4 e φ . Assim, podemos achar uma relação análoga a relação (2.37) calculada no capítulo 2, que dependa somente de φ , vide¹ [5]:

¹Uma expressão semelhante apareceu anteriormente em [16], mas contém erros de impressão

$$\begin{aligned}
F(A, c, d, \varphi) = & 44 a_0^3 - 7 a_1^4 + 34 a_0 a_1^2 a_2 - 28 a_0^2 a_2^2 - 2 a_1^2 a_2^3 + 6 a_0 a_2^4 - 40 a_0^2 a_1 a_3 \\
& + 6 a_1^3 a_2 a_3 - 24 a_0 a_1 a_2^2 a_3 + 34 a_0^2 a_2 a_3^2 + a_1^2 a_2^2 a_3^2 - 2 a_0 a_2^3 a_3^2 - 2 a_1^3 a_3^3 \\
& + 6 a_0 a_1 a_2 a_3^3 - 7 a_0^2 a_3^4 + 2 \{ 40 a_0^3 - a_0^2 (24 a_2^2 + 34 a_1 a_3 - 29 a_2 a_3^2 \\
& + 6 a_3^4) + a_0 [a_1^2 (29 a_2 - 2 a_3^2) + a_2^3 (4 a_2 - a_3^2) \\
& + a_1 a_2 a_3 (-19 a_2 + 5 a_3^2)] - a_1^2 [6 a_1^2 + a_2^3 + a_1 (-5 a_2 a_3 + a_3^3)] \} \cos(\varphi) \\
& + 2 \{ 31 a_0^3 + a_1^3 (-3 a_1 + a_2 a_3) + a_0 [a_2^4 + a_1^2 (18 a_2 - a_3^2) \\
& + a_1 a_2 a_3 (-8 a_2 + a_3^2)] - a_0^2 (16 a_2^2 - 18 a_2 a_3^2 \\
& + 3 (8 a_1 a_3 + a_3^4)) \} \cos(2\varphi) + (40 a_0^3 - 2 a_1^4 + 14 a_0 a_1^2 a_2 - 16 a_0^2 a_2^2 \\
& - 26 a_0^2 a_1 a_3 - 2 a_0 a_1 a_2^2 a_3 + 14 a_0^2 a_2 a_3^2 - 2 a_0^2 a_3^4) \cos(3\varphi) \\
& + (20 a_0^3 + 2 a_0 a_1^2 a_2 - 4 a_0^2 a_2^2 - 8 a_0^2 a_1 a_3 + 2 a_0^2 a_2 a_3^2) \cos(4\varphi) \\
& + (8 a_0^3 - 2 a_0^2 a_1 a_3) \cos(5\varphi) + 2 a_0^3 \cos(6\varphi) = 0. \tag{6.16}
\end{aligned}$$

Interpretamos essa equação como uma equação cúbica em $A = A(\varphi)$. Assim, ao voltarmos com $A(\varphi)$ para a equação secular (6.6), teremos sempre o módulo de dois autovalores iguais, de acordo com a condição $\lambda_1 = e^{i\varphi} \lambda_2$, mas esses autovalores nem sempre terão o módulo maior que os demais, fazendo com que essa condição tenha que ser sempre verificada [16, 17]. A equação (6.16) também nos fornece $\lambda_1 = \lambda_2$ quando $\varphi = 0$ (o ponto onde ocorre a transição de segunda ordem).

Podemos notar que a equação (6.16) é simétrica em $\varphi \rightarrow -\varphi$, essa simetria é consequência de $\lambda_1 \rightleftharpoons \lambda_2$ como já foi observado antes. Isto se torna explícito quando temos $(\varphi, \lambda_1) \rightarrow (-\varphi, e^{i\varphi} \lambda_1)$ em (6.12)-(6.15)

Para estudar a singularidade da extremidade de Yang-Lee (SEYL) faremos o cálculo análogo ao feito no capítulo 3, assim vamos considerar a primeira derivada de (6.16) em relação a φ e as equações (6.12)-(6.15), em $\varphi = 0$ e assim obtemos:

$$(\lambda_1 - \lambda_3)^3 (\lambda_1 - \lambda_4)^3 (\lambda_3 - \lambda_4)^2 \lambda_1 d \left[c \left(\frac{1}{d^2} - d^2 \right) + \frac{\lambda_1^2}{c} \right] \frac{dA}{d\varphi} \Big|_{\varphi=0} = 0. \tag{6.17}$$

Com relação ao termo entre colchetes em (6.17), dado que $\lambda_1 = \lambda_2$ em $\varphi = 0$ e usando $\lambda_1^2 = c^2 (d^2 - \frac{1}{d^2})$ na equação secular (6.6), encontramos a condição:

$$(d^4 - 1) (c^4 - 1) = 0. \tag{6.18}$$

Como sabemos que d e c são números positivos, vide (6.3), então a relação (6.18) só será zero se $c = 1$, ou seja $T \rightarrow \infty$, ou quando $d = 1$ onde retornamos ao modelo de Ising

de spin $1/2$, com $\sigma = -1/2$. Então sem perda de generalidade admitimos de agora em diante:

$$\lambda_1^2 \neq c^2 \left(d^2 - \frac{1}{d^2} \right). \quad (6.19)$$

Das equações (6.17) e (6.19) temos:

$$\left. \frac{dA}{d\varphi} \right|_{\varphi=0} = 0 \quad , \quad \text{se } \lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_i, i = 3, 4 \text{ e } \lambda_3 \neq \lambda_4. \quad (6.20)$$

Utilizando as relações (6.12)-(6.15) e (6.20) na segunda derivada de (6.16) em $\varphi = 0$ temos:

$$\left\{ 2d \left[c \left(\frac{1}{d^2} - d^2 \right) + \frac{\lambda_1^2}{c} \right] \left. \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=0} + \lambda_1^2 (\lambda_1 - \lambda_3) (\lambda_1 - \lambda_4) \right\} = 0. \quad (6.21)$$

Assim

$$\left. \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=0} \neq 0 \quad , \quad \text{se } \lambda_1 = \lambda_2 \neq \lambda_i, i = 3, 4 \text{ e } \lambda_3 \neq \lambda_4. \quad (6.22)$$

Então de (6.20) e (6.22) podemos concluir que $y_h = 2$ quando nós temos apenas dupla degenerescência dos autovalores, mas poderá haver mudanças em y_h se mais do que um autovalor for degenerado, ou seja, duas dupla degenerescências ($\lambda_1 = \lambda_2$ e $\lambda_3 = \lambda_4$) e/ou tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência (6.4), $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_i$, $i = 3$ ou 4 , já que as equações (6.17) e (6.21) serão automaticamente nulas. Em particular, $\left. \frac{d^2 A}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=0}$ poderá ser igual a zero, fazendo com que possa existir um novo comportamento crítico.

Em busca de um novo comportamento crítico, obteremos uma condição que nos forneça $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$, manipulando as equações (6.6) e (6.12)-(6.15). Assim encontramos as relações:

$$18a_1^2 - 14a_1a_2a_3 + 3a_1a_3^3 - a_2^2a_3^2 + 4a_2^3 = 2a_0(8a_2 - 3a_3^2) \quad (6.23)$$

$$9[12(a_1^2 - a_1a_2a_3) + 3a_1a_3^3 - a_2^2a_3^2] + 32a_2^3 = 0, \quad (6.24)$$

combinando e simplificando as duas equações temos:

$$d^8(8d^4 - 9)(1 - c^4)^2 + 108c^4(1 - d^4)^2 = 0, \quad (6.25)$$

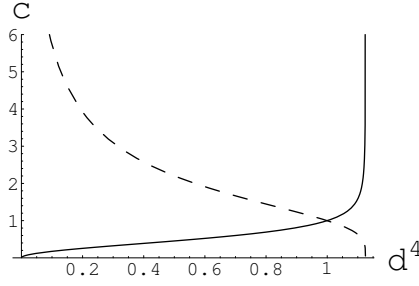


Figura 6.1: A linha sólida (tracejada) representa c_+ (c_-) dadas pela equanção (6.27)

$$A = \frac{2(8d^4 - 7)}{8d^4 - 9}. \quad (6.26)$$

Supondo que c e d sejam números reais positivos, podemos perceber de (6.25) que só teremos tripla degenerescência se $0 < d < (9/8)^{1/4}$. De (6.25) temos somente duas possibilidades para c em função de d :

$$c_{\pm}(d) = \left[\frac{(1 - 2/3 d^4)^{3/2} \pm (d^4 - 1)}{(1 - 2/3 d^4)^{3/2} \mp (d^4 - 1)} \right]^{1/4}. \quad (6.27)$$

A equação (6.25) é invariante por inversão $c \rightarrow 1/c$, e de fato $c_-(d) = 1/c_+(d)$. Na figura (6.1) plotamos $c_{\pm}(d^4)$, podemos notar que $c_+ = c_- = 1$ em $d=1$. A função $c_+(d)$ diverge em $d = (9/8)^{1/4}$ enquanto $c_-(d)$ é nula nesse ponto, assim teremos $0 \leq c_+(d) \leq 1$ para $0 \leq d \leq 1$ e $0 \leq c_-(d) \leq 1$ para $1 \leq d \leq (9/8)^{1/4}$. Ao inserir a solução $c_+(d)$ na equação (6.16), que é cúbica em A , e expandindo o resultado em torno $\varphi = 0$ temos três soluções:

$$\begin{aligned} A_1(\varphi) &= \frac{2d^{12} - 40d^8 + 117d^4 - 81}{d^{12}} - \frac{9(d^4 - 1)(2d^4 - 9)(2d^4 - 3)}{4d^{12}} \varphi^2 \\ &+ \frac{(d^4 - 1)\{3645 + 2d^4[-1944 + d^4(297 + 64d^4)]\}}{216d^{12}} \varphi^4 + \mathcal{O}(\varphi^6), \end{aligned} \quad (6.28)$$

$$\begin{aligned} A_2(\varphi) &= \frac{2(8d^4 - 7)}{8d^4 - 9} + \frac{32i(d^4 - 1)\sqrt{2d^4 - 3}}{9(8d^4 - 9)} \varphi^3 - \frac{8(d^4 - 1)}{27} \varphi^4 \\ &- \frac{2i(d^4 - 1)(8d^4 - 9)}{81\sqrt{2d^4 - 3}} \varphi^5 + \mathcal{O}(\varphi^6), \end{aligned} \quad (6.29)$$

$$\begin{aligned}
A_3(\varphi) = & \frac{2(8d^4 - 7)}{8d^4 - 9} - \frac{32i(d^4 - 1)\sqrt{2d^4 - 3}}{9(8d^4 - 9)}\varphi^3 - \frac{8(d^4 - 1)}{27}\varphi^4 \\
& + \frac{2i(d^4 - 1)(8d^4 - 9)}{81\sqrt{2d^4 - 3}}\varphi^5 + \mathcal{O}(\varphi^6),
\end{aligned} \tag{6.30}$$

As soluções (6.28), (6.29) e (6.30) refletem a simetria $\varphi \rightarrow -\varphi$ de (6.16)

Para testar essas soluções substituímos $c = c_+(d)$ e cada um dos $A_i(\varphi)$ em (6.6), assim calculamos os quatro autovalores da matriz transferência ($\lambda_i(\varphi)$), considerando valores para $0 < d < (9/8)^{1/4}$. Percebemos que $A_1(\varphi)$ fornece somente dupla degenerescência dos autovalores ($\lambda_1 = \lambda_2$) em $\varphi = 0$. Já as soluções $A_2(\varphi)$ e $A_3(\varphi)$ satisfazem a condição de tripla degenerescência, em $\varphi = 0$. Usando $A_3(\varphi)$ verificamos que $|\lambda_1(\varphi)| = |\lambda_2(\varphi)| < |\lambda_i(\varphi)|$, $i = 3, 4$ na vizinhança de $\varphi = 0$, então essa solução não nos fornece os zeros de Yang-Lee. Já $A_2(\varphi)$ nos fornece $|\lambda_1(\varphi)| = |\lambda_2(\varphi)| > |\lambda_i(\varphi)|$, $i = 3, 4$ na vizinhança de $\varphi = 0$, levando a zeros de Yang-Lee próximos da singularidade da ponta $A_2(0)$. Assim, podemos concluir que teremos o novo comportamento crítico, $j = 3 = y_h$ ($\sigma = -2/3$), para a densidade dos zeros próxima a singularidade da ponta, quando $A = A_2(\varphi)$.

Retornando para a segunda possibilidade $c = c_-(d) = 1/c_+(d)$, esta solução nos leva ao resultado usual do comportamento crítico $j = 2 = y_h$ ($\sigma = -1/2$), podemos perceber que a equação (6.16) tem a simetria de $c \rightarrow 1/c$, mas a equação (6.6) não a possui. Se considerarmos $A_1(\varphi)$ na equação secular (6.6) vamos obter $\lambda_1 = \lambda_2$ em $\varphi = 0$ e $|\lambda_1(\varphi)| = |\lambda_2(\varphi)| > |\lambda_i(\varphi)|$, $i = 3, 4$ na vizinhança de $\varphi = 0$, fornecendo assim zeros de Yang-Lee, com o comportamento crítico com $j = 2 = y_h$ ($\sigma = -1/2$). Já as soluções $A_2(\varphi)$ e $A_3(\varphi)$ levam a $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ em $\varphi = 0$, mas com $|\lambda_1(\varphi)| = |\lambda_2(\varphi)| < |\lambda_i(\varphi)|$, $i = 3, 4$ na vizinhança de $\varphi = 0$, ou seja, não temos zeros de Yang-Lee. Em resumo, $c = c_-(d)$ não leva a $\sigma = -2/3$.

Para o caso de tripla degenerescência, a localização da singularidade da ponta de Yang-Lee é dada pela equação (6.26), podemos fazer um gráfico de $A \times d^4$, vide figura 6.2, nota-se que para $0 < d < 1$, temos $-2 < A < 1.5$, lembrando que $A = 2 \cosh \beta H$, isto significa H puramente imaginário, e a SEYL estará sempre na S_1 , com o comportamento crítico nas extremidades do arco de circunferência dado por $\sigma = -2/3$.

Podemos pensar que novos comportamentos críticos seguem sempre de degenerescência dos autovalores, já que $\sigma = -2/3$ só aparece quando temos $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$, então para termos $j > 3$, por exemplo, $j = 4$, teríamos que ter $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4$. Neste caso, manipulamos as equações (6.12)-(6.15) encontramos que para termos um coeficiente d real, o valor c seria complexo, não estando de acordo com as nossas premissas. Então, para termos um novo comportamento crítico é necessário, porém não suficiente, que tenhamos múltiplas degenerescências dos autovalores da matriz transferência.

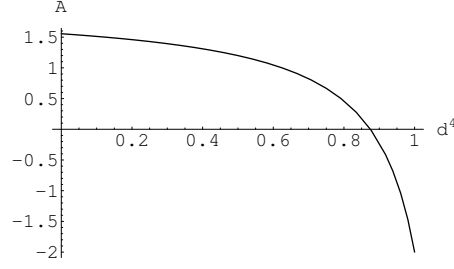


Figura 6.2: Gráfico da posição da SEYL em função da variável d^4 , dada pela condição (6.26).

6.3 Resultados Numéricos

Os zeros da função de partição para um anel com N sítios (spins) são obtidos numericamente com ajuda do software Mathematica a partir de uma expressão analítica para Z_N . Nem sempre é fácil encontrar uma forma analítica para os zeros, como é encontrado no modelo de Ising unidimensional [4]. Então para encontrar os zeros deveríamos usar a expressão (6.5), mas por questão de tempo computacional usaremos a expressão análoga a (4.12) com $P_4(\lambda) \equiv \lambda^4 - a_3\lambda^3 + a_2\lambda^2 - a_1\lambda + a_0 = 0$ e a função de partição sobre um anel conexo (condição periódica de contorno), dada por.

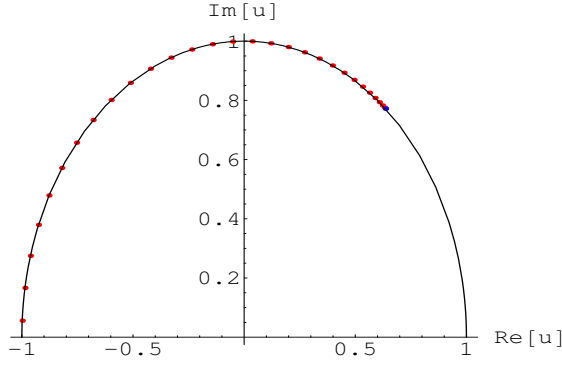
$$Z_N = -N \left\{ \ln [g^4 P_4(1/g)] \right\}_{g^N} = -N \left[\ln (1 - a_3g + a_2g^2 - a_1g^3 + a_0g^4) \right]_{g^N}. \quad (6.31)$$

Então, primeiramente estudamos a posição dos zeros para o modelo. Percebemos que há uma relação entre os parâmetros c e d , para a validade do teorema do círculo, ou seja, quando o acoplamento ferromagnético J for suficientemente maior em módulo que o antiferromagnético K , os zeros estarão na circunferência de raio 1 (S_1), caso contrário, os zeros começam a deixar a S_1 a partir da ponta do arco em que eles se encontram.

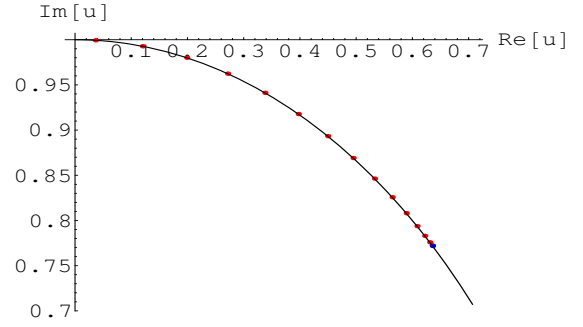
Estudando esse tipo de comportamento, começamos a especular que a relação entre c e d correspondente ao ponto limite de validade do teorema do círculo poderia ser fornecida pela relação de tripla degenerescência (6.25).

Se escolhermos $0 < d < 1$, podemos encontrar $c^* = c_+(d)$ que nos fornece $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$, e os zeros estariam todos na circunferência de raio 1, como mostra a figura 6.3(c), se aumentarmos o módulo do acoplamento ferromagnético J ($c < c^*$) os zeros continuarão na circunferência, como mostra a figura 6.3(a), e se diminuirmos o módulo do acoplamento J ($c > c^*$) os zeros começam a deixá-la, vide figura 6.3(e).

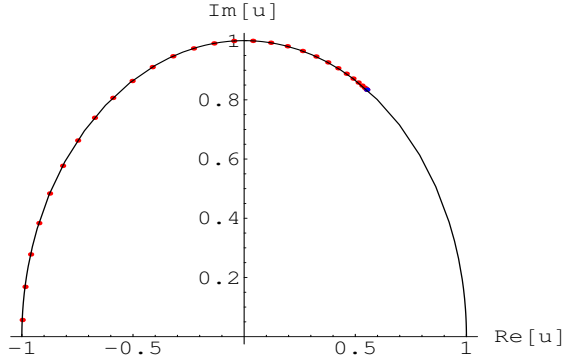
Agora vamos estudar o comportamento dos zeros na vizinhança da SEYL u_E . Para o caso de tripla degenerescência, com $c = 0.5$ teremos $d \approx 0.8680$ e a SEYL está localizada



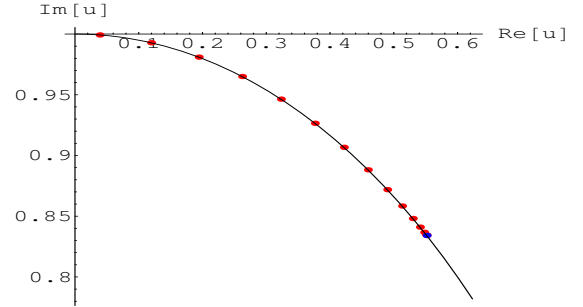
(a) $c = 0.48$, $d \approx 0.8680$ e $u_E \approx 0.6358 \pm 0.7718i$ (ponto azul)



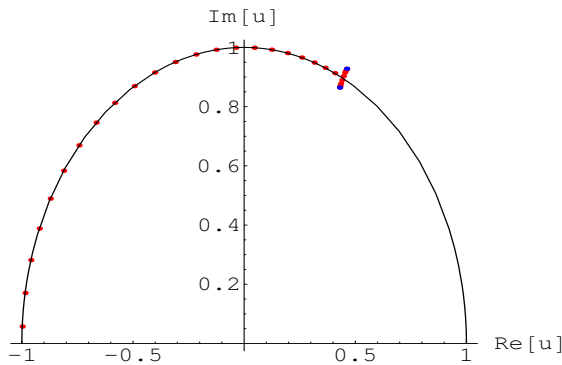
(b) $c = 0.48$, $d \approx 0.8680$ e $u_E \approx 0.6358 \pm 0.7718i$ (ponto azul)



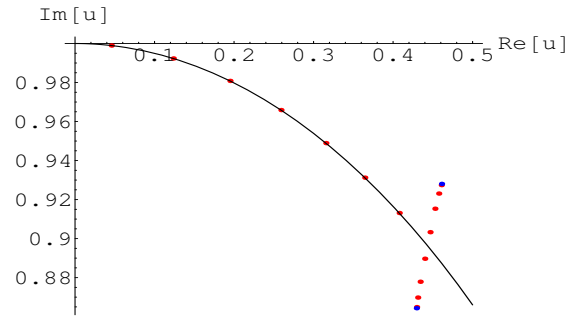
(c) $c = 0.5$, $d \approx 0.8680$ e $u_E \approx 0.5516 \pm 0.8341i$ (ponto azul)



(d) $c = 0.5$, $d \approx 0.8680$ e $u_E \approx 0.5516 \pm 0.8341i$ (ponto azul)



(e) $c = 0.52$, $d \approx 0.8680$ e $u_E \approx 0.4609 \pm 0.9280i$ (ponto azul)



(f) $c = 0.52$, $d \approx 0.8680$ e $u_E \approx 0.4609 \pm 0.9280i$ (ponto azul)

Figura 6.3: Validade do teorema do círculo para os zeros de Yang-Lee do modelo ANNNI com $N = 60$ spins. As figuras (a), (c) e (e) mostram somente a metade dos zeros ($\Im u > 0$) e as figuras (b), (d) e (f) mostram os zeros mais próximos da SEYL.

c	$y_h^{\Re(\Delta u)}$	$10^9 \chi_{(1)}^2$	y_h^ρ	$10^8 \chi_{(2)}^2$
0.48	2.0028	1.29×10^{-11}	2.0341	70.3
0.50	2.9960	9.30	2.9866	9.02
0.52	1.9535	1.78×10^{-5}	1.9958	31.3

Tabela 6.1: Resultado para os ajustes di-log a partir das fórmulas (2.51) ($y_h^{\Re(\Delta u)}$) e (2.48) (y_h^ρ) com $L = N$ e $D = 1$ para $d \approx 0.8680$ com $160 \leq N \leq 240$.

N_a	$y_h^{\Re(\Delta u)}$	$y_h^{\Im(\Delta u)}$	y_h^ρ
146	2.99681706529	2.99681501344	2.98931030180
152	2.99992562986	2.99992987236	2.99975763263
158	2.99999861874	2.99999627020	2.99996768156
164	2.99999999428	3.00000013488	3.00000485181
170	2.99999999957	3.00000000012	3.00000006989
176	3.00000000003	2.99999999999	2.99999999966
182	3.00000000000	3.00000000000	3.00000000002
188	3.00000000000	3.00000000000	3.00000000000
∞	3.00000000000(1)	3.00000000000(3)	3.00000000000(1)

Tabela 6.2: Resultados das relações de escala de tamanho finito para os zeros de Yang-Lee, onde $y_h^{\Re(\Delta u)}$ e $y_h^{\Im(\Delta u)}$ são obtidos a partir da equação (2.51) usando a parte real e a parte imaginária dos zeros, respectivamente. Enquanto, y_h^ρ foi obtido de (2.48). Os zeros foram calculados para $146 \leq N \leq 188$ spins em $c = 0.5$, $A \approx 1.1031$ e $d = 0.8680$. A última linha representa a extrapolação BST, para $N \rightarrow \infty$, com $w = 1$.

em $u_E \approx 0.5516 \pm 0.8341i$. Neste caso, tanto os zeros quanto a SEYL estão na circunferência de raio 1. Fizemos o ajuste di-log utilizando as relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46), os resultados encontrados estão na tabela 6.1. Podemos perceber que quando os parâmetros obedecem as condições de tripla degenerescência, temos $y_h \approx 3$, caso contrário, teremos o valor usual ($y_h \approx 2$). Utilizando a condição de tripla degenerescência (6.25), repetimos os cálculos para diferentes temperaturas, e encontramos $y_h \approx 3$.

Para obter o valor de y_h , para $N \rightarrow \infty$, vamos utilizar o algoritmo de extrapolação BST, assim calculamos a sequência de $y_h(N_a)$ a partir das fórmulas (2.51) e (2.48), vide tabela 6.2. O parâmetro livre w da extrapolação BST foi testado para $0.1 \leq w \leq 3$ e novamente encontramos que $w = 1$ minimiza o desvio da extrapolação, e nessa região $dy_h/dw \approx 0$. A figura 6.4 ilustra esses fatos. O resultado da extrapolação com $w = 1$ pode ser visto na última linha da tabela 6.2.

Constatamos que o novo comportamento crítico para os zeros do modelo ANNNI na

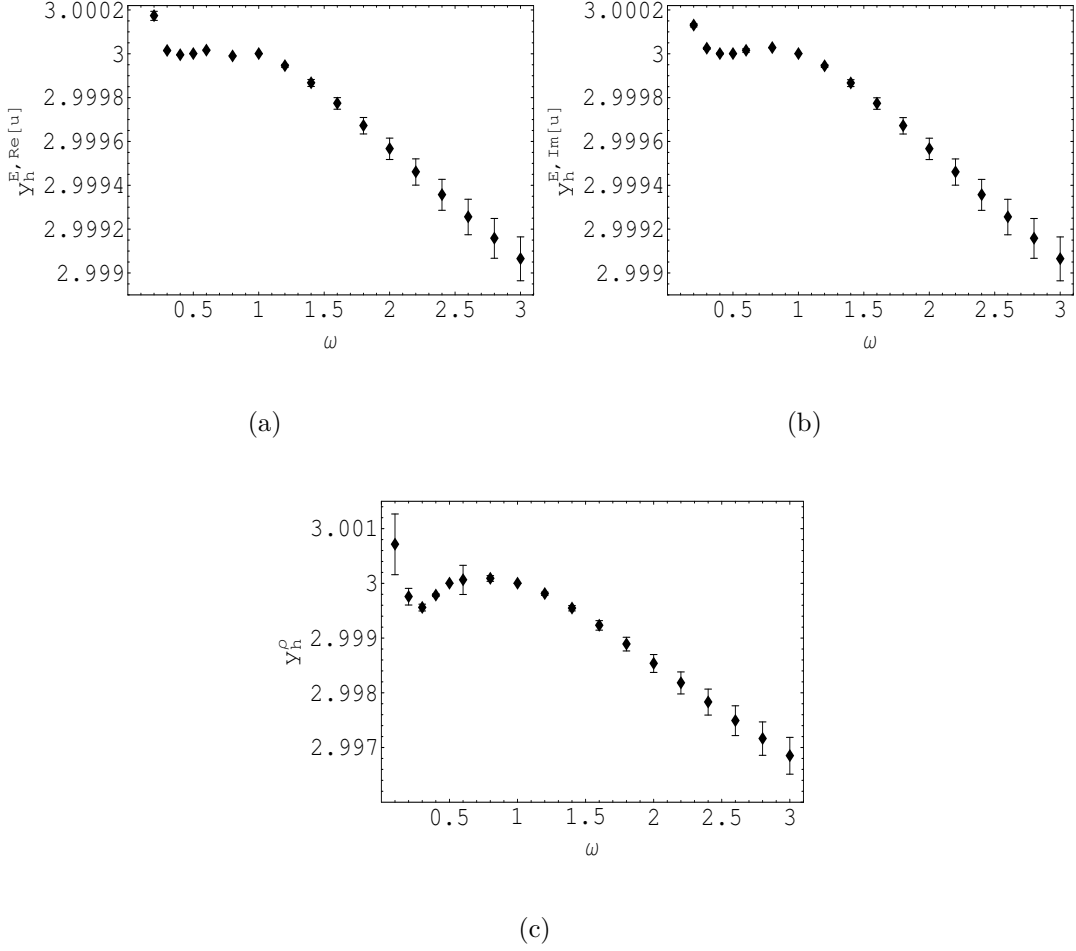


Figura 6.4: Extrapolação BST para $0.1 \leq \omega \leq 3.0$ de $y_h^{\Re(\Delta u)}$ e $y_h^{\Im(\Delta u)}$, na figura 6.4(a) e 6.4(b), usamos a parte real e imaginária dos zeros, respectivamente e y_h^ρ , representado pela figura 6.4(c).

vizinhança da SEYL, ocorre também no ponto de tripla degenerescência, esse resultado é importante já que nos capítulos anteriores havíamos encontrado $\sigma = -2/3$ apenas para modelos de spins $s = 1$. Isso nos mostra que podemos encontrar $\sigma = -2/3$ para modelos de spins $1/2$. Ou seja, o novo comportamento crítico não está relacionado ao valor do spin. É importante enfatizar que para encontrar $\sigma \neq -1/2$ é necessária a tripla degenerescência, mas não é uma condição suficiente, ou seja, temos que encontrar soluções válidas no espaço físico dos parâmetros do modelo.

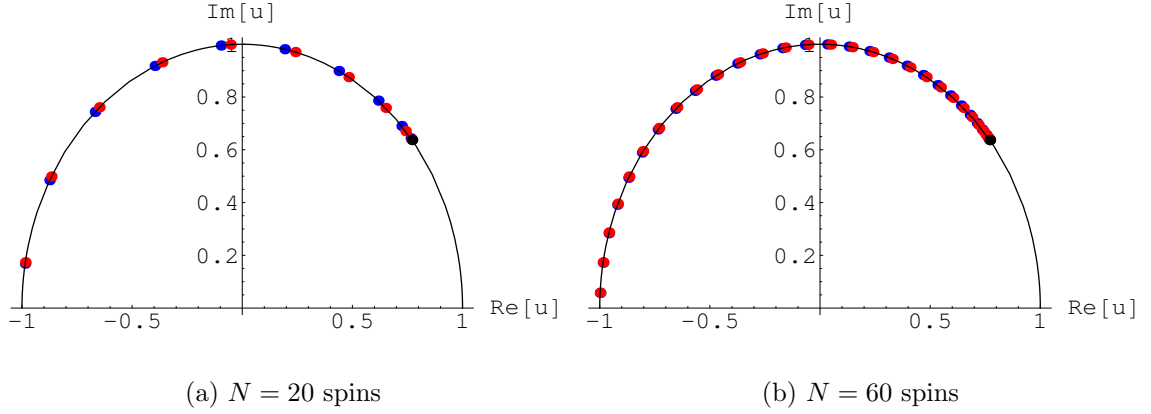


Figura 6.5: Sobreposição dos zeros de Yang-Lee para o modelo ANNNI na rede usual (pontos vermelhos) e na rede dinâmica (pontos azuis), com $c = 0.1$ e $d \approx 0.4293$, dado pela condição de tripla degenerescência (6.25). Os pontos pretos representam a singularidade da ponta de Yang-Lee $u_E^\pm \approx -0.7708 \pm 0.6370i$.

6.4 Modelo ANNNI na rede dinâmica

Sabemos que a função de partição de um modelo de spins na rede dinâmica composta por anéis conexos e desconexos é dada pela expressão (4.14). Uma fórmula análoga a essa expressão é dada pela expressão (4.10), esta expressão é para o modelo BEG onde temos um modelo de spin 1, representado por três campos ϕ_+ , ϕ_- e ϕ_0 correspondendo aos estados $+1, -1, 0$. Generalizando esta equação para o modelo ANNNI teremos:

$$Z_N^{nc} = \frac{1}{\tilde{k}^N} \left\{ \sqrt{\frac{1}{P_4}} \right\}_{g^N} \quad (6.32)$$

com $P_4(g) = 1 - a_3g + a_2g^2 - a_1g^3 + a_0g^4 = 0$, onde $P_4(1/\lambda) = 0$ é equivalente a equação secular (6.6) do modelo ANNNI.

É surpreendente que as conexões (propagadores) entre os vizinhos além dos mais próximos possa ser incluída na fórmula (6.32) que tem interpretação diagramática com vértices (sítios) de apenas duas linhas. Nós comparamos a posição dos zeros calculada a partir da expressão (4.14) com a posição fornecida por (6.32) e a diferença entre as posições dos zeros é da ordem de 10^{-131} .

Novamente verificamos que quando aumentamos o número de spins na rede os zeros da rede dinâmica e da estática tendem a se sobreporem, como mostra a figura 6.5.

Então estudamos a vizinhança da SEYL, para verificar se os zeros do modelo ANNNI sobre anéis conexos e desconexos também possuem o novo comportamento crítico quando

nós temos tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência. Consideramos redes com $N_a = 30 + 5(a - 1)$ spins, com $1 \leq a \leq 9$, tanto para a rede usual, quanto para a rede dinâmica. Calculamos o expoente y_h de forma análoga aos capítulos anteriores, considerando a condição de tripla degenerescência (6.25) e $c = 0.1$. Os resultados para o ajuste di-log das relações de escala de tamanho finito (2.39) e (2.46) foram: $y_h^{\Re(\Delta u)} \approx 2.9737$ e $y_h^\rho \approx 2.9056$ para a rede estática e $y_h^{\Re(\Delta u)} \approx 2.9065$ e $y_h^\rho \approx 2.8330$ para a rede dinâmica.

Podemos perceber que os valores encontrados para y_h para a rede dinâmica são bem próximos dos valores encontrados para a rede estática, semelhante ao que ocorre para o modelo BEG, vide capítulo 4. Assim, esperamos encontrar o novo comportamento crítico para os zeros na rede dinâmica do modelo ANNNI.

Os resultados desta subseção não foram submetidos a publicação. Temos dificuldade em explicar porque a fórmula (6.32) funciona bem para interações além dos vizinhos mais próximos. Além disso, tecnicamente o tempo de computação dos zeros é muito maior e o número máximo de sítios ainda é baixo.

Capítulo 7

Conclusão

Neste trabalho estudamos modelos unidimensionais de spins sobre anéis conexos (condições periódicas de contorno) e desconexos. Para $T > 0$ temos que os modelos não apresentam uma transição de fase de segunda ordem tradicional, mas exibem um acúmulo de zeros na chamada singularidade da extremidade de Yang-Lee. A densidade linear de zeros na vizinhança na SEYL diverge com o expoente crítico σ típico de transição de segunda ordem, esse expoente assume, em geral, o valor de $\sigma = -1/2$ para modelos unidimensionais e é argumentado na literatura que ele pertence a uma classe de universalidade.

No capítulo 3 mostramos analiticamente a possibilidade de termos $\sigma \neq -1/2$ quando a matriz transferência do modelo BEG apresenta tripla degenerescência de seus autovalores. Neste caso temos $\sigma = -2/3$. Confirmamos esse resultado numericamente para alguns casos especiais do modelo BEG, para os zeros no plano complexo de $u = e^{\beta H}$. Estes resultados estão publicados em [17].

Sabemos que no limite termodinâmico, os zeros de uma rede dinâmica (sobre anéis conexos e desconexos) tendem a se sobrepor aos zeros em uma rede estática (rede usual, sobre um anel conexo). Assim, no capítulo 4 estudamos com sucesso a possibilidade de encontrar o novo comportamento crítico também para a rede dinâmica, esse resultado reforça a nossa hipótese de uma nova classe de universalidade para σ , esses resultados foram publicados em novembro de 2008, no artigo [32].

Após analisar os zeros de Yang-Lee do modelo BEG no plano complexo de u , resolvemos considerar o campo magnético real e somente um dos outros acoplamentos complexos. Chamamos esses zeros de generalizados. Eles podem ser encontrados no plano complexo de $x = e^{\beta \Delta}$, $b = e^{\beta K}$ e $c = e^{\beta J}$ e estão ilustrados nas seções 5.2, 5.3 e 5.4, respectivamente. Nessas seções encontramos condições entre os parâmetros da hamiltoniana do modelo BEG para que os autovalores da matriz transferência fossem triplamente degenerados. Para os zeros no plano complexo de x e b , conseguimos encontrar relações de tripla degenerescência entre os parâmetros da hamiltoniana do modelo BEG, que estão

de acordo com o espaço físico dos parâmetros do modelo, nesses casos a densidade dos zeros na vizinhança da SEYL diverge com $\sigma = -2/3$. Porém para os zeros no plano complexo de c (conhecidos como zeros de Fisher), não conseguimos condições de tripla degenerescência dentro da validade do espaço físico dos parâmetros, ou seja, neste caso não teremos ponto tricrítico, vide [33]. É importante salientar que após a publicação de [33] notamos que já havia um trabalho [36], onde $\sigma = -2/3$ também foi encontrado, mas sob condições especiais em modelo de Potts de 3 estados e sem nenhuma comprovação numérica.

Para o modelo de spin 1 vimos que, se a matriz transferência for triplamente degenerada, é possível encontrar o novo comportamento crítico para os zeros na vizinhança da SEYL, para comprovar a nova classe de universalidade do expoente σ consideramos, no capítulo 6, um modelo de spin 1/2 (o modelo ANNNI). Este modelo nos fornece quatro autovalores da matriz transferência, ao deduzir as condições de tripla degenerescência, encontramos novamente a densidade divergindo com $\sigma = -2/3$ na vizinhança da SEYL, ou seja, novamente temos um novo expoente crítico σ quando houver tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência. Poderíamos ainda obter $\sigma \neq -1/2$ e $\sigma \neq -2/3$ a princípio (pontos multicríticos). Para isso teríamos que encontrar uma condição de tetra degenerescência dos autovalores, mas ao manipular os parâmetros do modelo, percebemos que não é possível encontrar outro valor para σ , pois os acoplamentos teriam valores fora do espaço físico dos parâmetros. Estes resultados foram publicados no artigo [35].

Ao estudar a validade do teorema do círculo de Yang-Lee para o modelo ANNNI, conjecturamos que a condição de tripla degenerescência dos autovalores da matriz transferência também nos fornece a relação entre os parâmetros $c = e^{-\beta J}$ e $d = e^{\beta K}$ que garante os zeros na S_1 , ou seja, para um dado valor $0 < d < 1$, encontramos um c^* que nos fornece $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$, com os zeros na S_1 . Ao considerar $c < c^*$ os zeros da função de partição continuam na S_1 , mas quando $c > c^*$ uma fração dos zeros começa a deixá-la.

Um resultado original ainda não publicado desta tese, foi apresentado na seção 6.4 do capítulo 6. Calculamos os zeros da função de partição do modelo ANNNI na rede dinâmica, ou seja, sobre anéis conexos e desconexos, e encontramos que as conexões com os segundos vizinhos continuam tendo interpretação diagramática com vértices de apenas duas linhas. Verificamos também que, usando as condições de tripla degenerescência, os zeros na vizinhança da SEYL também divergem com $\sigma = -2/3$.

Pode parecer sem sentido estudar modelos de spins unidimensionais com interação de curto alcance, já que de acordo com o teorema de van Hove [52] e com o argumento de Landau [53], eles não apresentam transição de fase física para $T > 0$. Mas ao provar a existência de uma nova classe de universalidade para o expoente σ , dada sua relação com o expoente crítico $\delta(\sigma = 1/\delta)$ em $T = T_{cr}$ e $D > 1$, poderíamos conjecturar a existência

de novos comportamentos tricríticos em dimensões mais altas ($D > 1$).

Acreditamos que possa existir uma generalização da teoria de campos escalar $i\varphi^3$ de Fisher [8] que comporte a tricriticalidade. Consequentemente poderíamos generalizar o trabalho de J. Cardy [9] em $D = 2$ para essa nova teoria e calcular σ com técnicas de teoria conforme.

Por último, como σ em $D = 2$ pode ser obtido indiretamente a partir de dados experimentais da magnetização [13], especulamos que talvez exista uma relação entre um valor exótico obtido experimentalmente para σ em [13] e uma possível tricriticalidade da singularidade de Yang-Lee em $D = 2$, vide apêndice C.

Apêndice A

$\sigma = -2/3$ para um modelo de Potts especial em $D = 1$

No artigo [36], Mittag e Stephen estudaram o comportamento dos zeros próximos à singularidade de Yang-Lee para o modelo de Potts de três estados unidimensional. A principal motivação desse trabalho foi estudar um ponto especial, onde os três autovalores da matriz transferência possuem o mesmo valor $\tilde{\lambda}_1 = \tilde{\lambda}_2 = \tilde{\lambda}_3 = 1$ (normalização de [36]).

Eles notaram que quando os spins se acoplam com um campo magnético com dois componentes H_A e H_B e ambos são complexos, a densidade linear dos zeros passa a divergir com $\sigma = -2/3$ na vizinhança da SEYL.

No modelo de Potts cada spin de uma rede regular de N sítios pode assumir 3 valores: $S_i = 1, 2, 3$. Em [36] foi usada a seguinte hamiltoniana:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (1 - \delta_{S_i, S_j}) - \sum_{i=1}^N (\delta_{S_{i,1}} H_A + \delta_{S_{i,2}} H_B) \quad (\text{A.1})$$

com a função de partição:

$$Z_N = \Delta_3^{N/3} P_N \quad (\text{A.2})$$

onde

$$P_N = \tilde{\lambda}_1^N + \tilde{\lambda}_2^N + \tilde{\lambda}_3^N \quad (\text{A.3})$$

$$\Delta_3 = \frac{(1 - c^2)^2 (c^2 + 2)}{c^6} \quad (\text{A.4})$$

com $c = e^{-\beta J}$ como definimos anteriormente, $\tilde{\lambda}_i$ são os autovalores normalizados da matriz

transferência satisfazendo a equação secular.

$$\tilde{\lambda}^3 - 3p_1\tilde{\lambda}^2 + 3p_2r\tilde{\lambda} - 1 = 0 \quad (\text{A.5})$$

com

$$p_1 = \frac{1}{\Delta_3^{1/3}}(u_A + u_B + (u_A u_B)^{-1})$$

$$p_2 = \frac{1}{\Delta_3^{1/3}}(u_A^{-1} + u_B^{-1} + (u_A u_B)^{-1}) \quad (\text{A.6})$$

$$r = \frac{1 - c^2}{c^2 \Delta_3^{1/3}} \quad (\text{A.7})$$

onde $u_{A,B} = e^{\beta H_{A,B}}$. H_A e H_B são os campos magnético complexos, que formam um espaço quadridimensional.

Para o caso de apenas um componete do campo magnético ($H_B = 0$ e $h = H_A/k_B T$) pode-se definir a magnetização por spin:

$$M = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} \ln Z_N \quad (\text{A.8})$$

A partir da descontinuidade de M ao longo da curva de zeros temos a densidade de zeros:

$$\rho(h) = \frac{1}{2\pi} |M(h_+) - M(h_-)| \quad (\text{A.9})$$

com $Z_N = \Delta^{N/3}(\tilde{\lambda}_1^N + \tilde{\lambda}_2^N + \tilde{\lambda}_3^N)$, a partir da equação secular (A.5) e sua derivada $\partial/\partial h$ obtem-se (análogo a fórmula (7.4) de [36])

$$\rho \sim \left| \frac{\tilde{\lambda}_3 + r}{(\tilde{\lambda}_1 - \tilde{\lambda}_3)(\tilde{\lambda}_2 - \tilde{\lambda}_3)} \right| \quad (\text{A.10})$$

onde $\tilde{\lambda}_i$ são raízes de (A.5). Os autores de [36] consideraram a região no espaço dos parâmetros do modelo de Potts onde $|\tilde{\lambda}_1| = |\tilde{\lambda}_2| = |\tilde{\lambda}_3| = 1$ que requer:

$$3p_1 = 3p_2^* r = \tilde{\lambda}_1 + \tilde{\lambda}_2 + \tilde{\lambda}_3 \quad (\text{A.11})$$

Estudando as relações de recorrência entre funções de partição Z_N e Z_{N-1} do modelo de Potts, os autores de [36] afirmam que a superfície, lembrando que p_1 e p_2 são números complexos independentes (espaço de 4 dimensões), definida por $p_1 = 1$ e $p_2 r = 1$ é

um ponto fixo instável das relações de recorrência entre Z_N e Z_{N-1} . Eles estudaram a vizinhança desse ponto:

$$3p_1 = 3 - \delta_1; \quad 3p_2r = 3 + \delta_2 \quad (\text{A.12})$$

com δ_1 e δ_2 pequenos, de volta em (A.5) obtem-se:

$$(\tilde{\lambda} - 1)^3 + \delta_1 \tilde{\lambda}^2 + \delta_2 \tilde{\lambda} = 0 \quad (\text{A.13})$$

Assumindo que $\tilde{\lambda} = 1 + \varepsilon$, chega-se a relação:

$$\varepsilon \approx [-(\delta_1 + \delta_2)]^{1/3} \quad (\text{A.14})$$

ou seja,

$$\tilde{\lambda} \approx 1 + (-1)^{1/3} \delta^{1/3} \quad (\text{A.15})$$

com $\delta = \delta_1 + \delta_2$.

Consequentemente temos as raízes $\tilde{\lambda}_1 \approx 1 - \delta^{1/3}$, $\tilde{\lambda}_2 \approx 1 - e^{i2\pi/3} \delta^{1/3}$ e $\tilde{\lambda}_3 \approx 1 - e^{i4\pi/3} \delta^{1/3}$. De volta em (A.10) temos:

$$\rho \sim \frac{1}{\delta^{2/3}} \quad (\text{A.16})$$

Como, de (A.12), temos δ_1 e δ_2 proporcionais a $(u_A - u_A^E)$ e $(u_B - u_B^E)$, com isso Mittag e Stephen, calcularam o novo expoente crítico $\sigma = -2/3$ na vizinhança do ponto tricrítico. $\tilde{\lambda}_1 = \tilde{\lambda}_2 = \tilde{\lambda}_3 = 1$ ao longo de zeros especiais que satisfazem $|\tilde{\lambda}_1| = |\tilde{\lambda}_2| = |\tilde{\lambda}_3| = 1$.

Poderia-se imaginar que $\sigma = -2/3$ só ocorre ao longo de zeros satisfazendo a condição de mesmo módulo $|\tilde{\lambda}_1| = |\tilde{\lambda}_2| = |\tilde{\lambda}_3|$, o que não é verdade. Como temos mostrado ao longo dos trabalhos [17, 32, 33, 35] basta que $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_k|$ com $k \neq 1, 2$ e que $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3$ para que se tenha a possibilidade de $\sigma = -2/3$.

Apêndice B

Algoritmo de extrapolação BST

Para estudar esse tipo de extrapolação vamos considerar o algoritmo proposto por Burlisch e Stoer (BST) [37, 38, 39].

Primeiramente consideramos uma sequência de valores h_N ($N = 0, 1, 2, \dots, k-1$) convergindo para zero com $N \rightarrow \infty$, como exemplo temos $h_N = 1/N$, onde N é o tamanho do sistema finito.

Vamos definir $y(h)$ como sendo uma expansão:

$$y_z\left(\frac{1}{N}\right) = y_z(\infty) + a_1 \frac{1}{N^w} + a_2 \frac{1}{N^{2w}} + \dots \quad (\text{B.1})$$

onde w é um parâmetro real positivo e $a_1, a_2, \dots$ são constantes independentes de N . O objetivo é obter um valor extrapolado para $y(0)$ a partir de uma sequência original finita: $y[N]$, $N = 0, 1, 2, \dots, k-1$. O método pode ser descrito esquematicamente através do diagrama abaixo que ilustra o caso em que $k = 4$.

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & y_0^{(0)} \\ & & & & & & y_1^{(0)} \\ & & & & & & y_2^{(0)} \\ & & & & & & y_3^{(0)} \\ & & & & & & y_0^{(1)} \\ & & & & & & y_1^{(1)} \\ & & & & & & y_2^{(1)} \\ & & & & & & y_0^{(2)} \\ & & & & & & y_1^{(2)} \\ & & & & & & y_0^{(3)} \end{array} \quad (\text{B.2})$$

Cada coluna $y_m^{(N)}$ representa uma sequência finita. O índice inferior numera as sequências

finitas (colunas) de forma que a sequência original é dada por $m = 0$, ou seja,

$$y_{-1}^{(N)} = 0 \quad N = 0, 1, 2, \dots, k-1 \quad (\text{B.3})$$

$$y_0^{(N)} = y[N] \quad N = 0, 1, 2, \dots, k-1 \quad (\text{B.4})$$

As próximas sequências (colunas) com $k-1, k-2, \dots, 1$ elementos, são obtidas das relações de recorrência abaixo e de (B.3) e (B.4).

$$y_m^{(N)} = y_{m-1}^{(N+1)} - \left(y_{m-1}^{(N+1)} - y_{m-1}^{(N)} \right) \left[\left(\frac{1/N}{1/(N+m)} \right)^w \left(1 - \frac{y_{m-1}^{(N+1)} - y_{m-1}^{(N)}}{y_{m-1}^{(N+1)} - y_{m-2}^{(N+1)}} \right) - 1 \right]^{-1} \quad (\text{B.5})$$

com w sendo um parâmetro livre. Esse algoritmo aproxima a função $y[N]$ dada por (B.1) por uma sequência de razões polinomiais, onde o grau do polinômio no denominador é maior ou igual ao do polinômio do numerador. Usando esse algoritmo de extrapolação, temos que a sequência $y_1^{(N)}$ converge mais rápido que a sequência original $y_0^{(N)} = y[N]$ e assim por diante.

No final do algoritmo identificamos a entrada única da última coluna ($y_3^{(0)}$ no exemplo (B.2)) com resultado final $y(\infty)$. Quando realizamos os cálculos podemos determinar a incerteza da extrapolação (barra de erros nos gráficos desta tese, como 3.6) a partir da penúltima coluna:

$$\Delta y = 2 \left| y_{k-2}^{(i+1)} - y_{k-2}^{(i)} \right| \quad (\text{B.6})$$

No exemplo (B.2) temos $\Delta y = 2 \left| y_2^{(1)} - y_2^{(0)} \right|$. Escolhemos w de forma que minimize Δy .

Nessa tese y fará o papel do expoente de escala y_z .

Apêndice C

Obtendo σ a partir de dados experimentais

Algumas propriedades de certas substâncias ferromagnéticas podem ser descritas por modelos de spin.

Para fazer a conexão entre os zeros de um modelo de spin, com o comportamento termodinâmico de um sistema, escrevemos a energia livre a partir da função de partição, para o modelo de Ising temos $Z_N = e^{N\beta H} \prod_{k=1}^N (u - u_k)$ logo:

$$F = -NH - \frac{1}{\beta} \sum_{k=1}^N \ln(u - u_k) \quad (\text{C.1})$$

com¹ $u = u_k = e^{i\theta_k}$ os zeros da função partição. No limite termodinâmico a distribuição discreta se torna uma função contínua da densidade de zeros $\rho(\theta)$ no intervalo entre θ e $\theta + d\theta$. Cada zero $u_k = e^{i\theta_k}$ deverá ser acompanhado do seu complexo conjugado $e^{-i\theta_k} = 1/u_k$. Devido a simetria $\mathcal{Z}_2$, ($H \rightarrow -H$) temos:

$$\frac{F}{N} = -H - \frac{1}{\beta} \int_0^\pi \rho(\theta) \ln [(u - e^{i\theta})(u - e^{-i\theta})] d\theta \quad (\text{C.2})$$

Com isso podemos calcular a magnetização derivando a relação (C.2) em relação ao campo magnético:

$$M(u) = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = 1 + 4u \int_0^\pi \rho(\theta) \frac{u - \cos \theta}{u^2 - 2u \cos \theta + 1} d\theta \quad (\text{C.3})$$

Esta relação é importante pois podemos relacionar a magnetização, que é uma grandeza mensurável, com alta precisão para sistemas magnéticos, com a densidade de zeros no

¹Para o modelo de Ising puro vale o teorema do círculo de Yang-Lee $|u_k| = 1$

plano complexo do campo magnético. Assim pode-se obter experimentalmente a densidade de zeros $\rho(\theta)$. Usando a relação:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \cos n\theta \tilde{u}^{-n} = \frac{\tilde{u}(\tilde{u} - \cos \theta)}{\tilde{u}^2 - 2\tilde{u} \cos \theta + 1} \quad (\text{C.4})$$

Substituindo (C.4) em (C.3), pode-se escrever a magnetização de forma mais simples:

$$M(u) = 1 + 2\pi \sum_{n=1}^{\infty} \rho_n u^n \quad (\text{C.5})$$

com $\rho_n = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi d\theta \rho(\theta) \cos(n\theta)$ sendo o n -ésimo coeficiente de Fourier da série de cossenos de $\rho(\theta)$. Para obter a densidade de zeros em relação a magnetização, vamos considerar a expressão (C.5) e escrever:

$$f(r, \theta) = \frac{M(re^{i\theta}) + M(re^{-i\theta})}{2} = 1 + \pi \sum_{n=1}^{\infty} r^n (e^{in\theta} + e^{-in\theta}) \rho_n \quad (\text{C.6})$$

tomando o limite de $r \rightarrow 1^-$ da função (C.6) temos:

$$\lim_{r \rightarrow 1^-} f(r, \theta) = 1 + 2\pi \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos n\theta - a_0 \right) \quad (\text{C.7})$$

com $a_0 = 1/2\pi$. Logo

$$\lim_{r \rightarrow 1^-} \frac{M(re^{i\theta}) + M(re^{-i\theta})}{2} = 2\pi \sum_{n=0}^{\infty} \rho_n \cos n\theta = 2\pi \rho(\theta) \quad (\text{C.8})$$

Assim encontramos a relação conhecida entre a densidade de zeros e a magnetização, vide [7, 13]:

$$\rho(\theta) = \frac{1}{4\pi} \lim_{r \rightarrow 1^-} [M(re^{i\theta}) + M(re^{-i\theta})] = \frac{1}{2\pi} \lim_{r \rightarrow 1^-} \text{Re} M(re^{i\theta}) \quad (\text{C.9})$$

Quando um sistema magnético encontra-se na temperatura crítica $T = T_{cr}$ a magnetização vai a zero com $H^{1/\delta}$, para H pequeno, ou seja $M \sim \theta^{1/\delta}$. Mas quando $T > T_{cr}$ a densidade $\rho(u)$ depende da lacuna dos zeros, portanto temos que conhecer o ângulo onde se encontra a SEYL $u_E = e^{i\theta_E}$. Com isso, define-se a variável $\tau = \tanh(\beta H) = (1-u)/(1+u)$ e depois de algumas considerações e manipulações [7] temos:

$$M \sim \tau(u_E^2 - u^2)^\sigma \quad (\text{C.10})$$

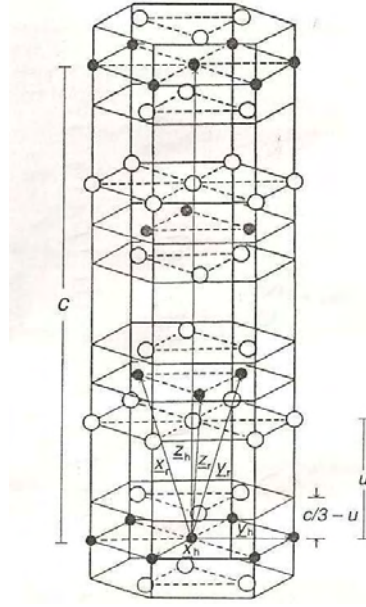


Figura C.1: Estrutura cristalina de FeCl_2 . As bolinhas cheias e vazias representam os íons Fe^{2+} e Cl^- , respectivamente. A distância $c = 1.7536\text{nm}$ representa a periodicidade da estrutura e $a = 0.3579\text{nm}$ é o comprimento do vetor da base da camada hexagonal. A distância entre Fe^{2+} e Cl^- adjacentes é dada por: $c/3 - u = 0.138\text{nm}$, com $u = 0.2543c$. Esta figura foi extraída da página 10 do livro “Ising-type Antiferromagnets” [13]

Assim relaciona-se os expoentes σ e δ na criticalidade. Tais expoentes são ditos universais. Portanto, uma mudança no expoente σ pode indicar uma descontinuidade na magnetização do sistema para $D > 1$.

C. Binek em [12, 13] estudou o mapeamento de uma estrutura cristalina de FeCl_2 , vide figura C.1, no modelo de Ising bidimensional. Pode-se mapear uma estrutura 3D em um sistema bidimensional, pois acima de uma determinada temperatura (T^*) as correlações ferromagnéticas dentro da camada hexagonal de Fe^{2+} dominam as interações relevantes para o alinhamento magnético.

Mediu-se a variação da magnetização em função do campo magnético para temperaturas acima de $T > T^*$. A partir daí fez um gráfico dos dados experimentais $M \times H$. Com isso ele encontrou a melhor função $M(H)$ que se ajusta aos dados experimentais. Substituindo a função $M(H)$ encontrada através do ajuste numérico na equação (C.9) encontra-se $\rho(\theta)$. Fazendo o ajuste di-log dessa relação pode-se encontrar σ a partir da inclinação da reta.

Binek encontrou $\sigma = -0.15 \pm 0.02$ para diferentes temperaturas entre $49K < T < 53K$ (próximo a $\sigma = -1/6 = -0.166$, que é o resultado de [9]), note que $T > T^* = 23,7K$. Mas para uma temperatura em especial ($T = 34K$) ele encontrou um valor para σ menor

que o usual ($\sigma = -0.365$). Ele argumentou que essa diferença pode ter ocorrido devido a proximidade à temperatura T^* , ou seja, as flutuações antiferromagnéticas começavam a influenciando o sistema.

Nós especulamos que existe uma outra explicação para esse valor anômalo do expoente crítico σ . Como Binek também encontrou um $\sigma \leq \sigma_{usual}$, poderíamos supor que essa mudança estaria relacionada com algum ponto tricrítico do sistema, da mesma forma que encontramos ($\sigma = -2/3 < \sigma_{usual} = -1/2$) para modelos unidimensionais. O fenômeno da tricriticalidade pode ocorrer também em $D = 2$.

Referências Bibliográficas

- [1] C. Domb. **The Critical Point: A Historical Introduction To The Modern Theory Of Critical Phenomena**. Taylor and Francis, 1996.
- [2] R. A. SALINAS. **Introdução a Física Estatística**. 2ed. São Paulo: Edusp, 1999. 464p.
- [3] K. HUANG. **Statistical Mechanics**. 2ed. John Wiley & Sons, 1987. 493p.
- [4] C. N. YANG; T. D. LEE. Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of Condensation. **Physical Review**, v. 87, n.3, p. 404-409, ago.,1952.
- [5] T. D. LEE; C. N. YANG. Statistical theory of equations of state and phase transitions. II. Lattice gas and Ising model. **Physical Review**, v. 87, n.3, p. 410-419, ago.,1952.
- [6] I. BENA; M. DROZ; A. LIPOWSKI. Statistical mechanics of equilibrium and nonequilibrium phase transitions: The Yang-Lee formalism. **International Journal of Modern Physics B**, v. 19, p. 4269-4329, jan., 2005.
- [7] P. J. KORTMAN; R.B.GRIFFITHS. Density of zeros on the Lee-Yang circle for two Ising Ferromagnets. **Physical Review Letters**, v.27, n.21, p. 1439-1442, nov.,1971.

- [8] M. FISHER. Yang-Lee Edge Singularity and ϕ^3 Field Theory. **Physical Review Letters**. v. 40, p. 1610-1613, jun., 1978.
- [9] J. L. CARDY. Conformal Invariance and the Yang-Lee Edge Singularity in Two Dimensions. **Physical Review Letters**. v. 54, p. 1354-1356, jan., 1985.
- [10] V. MATVEEV; R. SCHROCK. Complex-temperature properties of the two-dimensional Ising model for nonzero magnetic field. **Physical Review E**, v. 53, p. 254 jul., 1996.
- [11] S. Y. KIM. Density of the Fisher zeros for the three-state and four-state Potts models. **Physical Review E**, v. 70, p. 016110, jul., 2004.
- [12] C. BINEK. Density of Zeros on the Lee-Yang Circle Obtained from Magnetization Data of a Two-Dimensional Ising Ferromagnet. **Physical Review Letters**, v. 81, p. 5644, abr., 1998.
- [13] C. BINEK. **Ising-type Antiferromagnets**. Springer-Verlag, Berlin (2003).
- [14] Z. GLUMAC; K. UZELAC. The partition function zeros in the one-dimensional q-state Potts model. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 27, p. 7709-7718, out., 1994.
- [15] D. A. KURTZE. The Yang-Lee edge singularity in one-dimensional Ising and N-vector models. **Journal of Statistical Physics**, v. 30, p. 15-35, jan., 1983.
- [16] R. G. GHULGHAZARYAN; K. G. SARGSYAN; N. S. ANANIKIAN. Partition function zeros of the one-dimensional Blume-Capel model in transfer matrix formalism. **Physical Review E** v. 76, p. 021104-1 - 021104-9, ago., 2007.
- [17] D. DALMAZI; F. L. SÁ. Critical behavior at edge singularities in one-dimensional spin models. **Physical Review E**, v. 78, p. 031138 2008.

- [18] M. FISHER. Yang-Lee Edge Behavior in One-Dimensional Systems. **Supplement of the Progress of Theoretical Physics**. v. 69, p. 14-29, ago., 1980.
- [19] M. FISHER. **Lectures in Theoretical Physics Statistical Physics, Weak Interactions, Field Theory Volume VIIC**. University of Colorado Press, Boulder, 1965.
- [20] T. M. BISKUP; C. BORGS; J.T.CHAYES; L.J. KLEINWQKS; R. KOTECY General Theory of Lee-Yang Zeros in Models with First-Order Phase Transitions. **Physical Review Letters** v. 84, p. 4794, Maio., 2000.
- [21] S. Y. KIM. Partition function zeros of the Q-state Potts model on the simple-cubic lattice. **Nuclear Physics B**, v. 637, p. 409-426 jan., 2002.
- [22] C. ITZYKSON; R. B. PEARSON; J. B. ZUBER. Distribution of zeros in Ising and gauge models. **Nuclear Physics B**, v. 220, p. 415-433, set., 1983.
- [23] R. J. CRESWICK; S. Y. KIM. Finite-size scaling of the density of zeros of the partition function in first- and second-order phase transitions. **Physical Review E**, v. 70, p. 2418-2422, set., 1997.
- [24] M. BLUME; V. EMERY; R. GRIFFITHS. Ising Model for the λ transition and phase separation in He^3-He^4 Mixtures. **Physical Review A**, v. 4, n. 3, p. 1071-1077 , set., 1971.
- [25] M. BLUME. Theory of the First-Order Magnetic Phase Change in UO_2 . **Physical Review**, v. 141, p. 517-524, jan., 1966; H. W. CAPEL. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. **Physica**, v. 32, p. 966-988, maio, 1966.

- [26] M. STAUDACHER. The Yang-Lee edge singularity on a dynamical planar random surface. **Nuclear Physics B**, v. 336, p. 349-362, nov., 1989.
- [27] J. AMBJORN; K. N. ANAGNOSTOPOULOS; U. MAGNEA. Complex zeros of the 2d Ising model on dynamical random lattices. **Nuclear Physics B - Proceedings Supplements**, v. 63, p. 751-753, jan., 1998.
- [28] L. C. ALBUQUERQUE, N. A. ALVES, D. DALMAZI. Yang-Lee zeros of the Ising model on random graphs of non planar topology. **Nuclear Physics B**, v. 580, p. 739-756, mai., 2000.
- [29] L. C. ALBUQUERQUE; D. DALMAZI. Yang-Lee zeros of two- and three-state Potts model defined on ϕ^3 Feynman diagrams. **Physical Review E**, v. 67, p. 67-74, jun., 2003.
- [30] D. A. JOHNSTON. The Yang-Lee edge singularity on Feynman diagrams. **Journal of Physics A: Mathematical General**, v. 31, p. 5641-5648, jan., 1998.
- [31] L. ALMEIDA; D. DALMAZI. The Yang-Lee zeros of the 1D Blume-Capel model on connected and non connected rings. **Journal of Physics A: Mathematical General**, v. 38, p. 6863-6877, ago., 2005.
- [32] D. DALMAZI; F. L. SÁ. The Yang-Lee Singularity in spin models on connected and non-connected rings. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 41, p. 5050002, dez., 2008.
- [33] D. DALMAZI; F. L. SÁ. Generalized partition function zeros of 1D spin models and their critical behavior at the edge singularities. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 43, p. 255002-255022, mai., 2010.

- [34] M. E. FISHER; W. SELKE. Infinitely Many Commensurate Phases in a Simple Ising Model. **Physical Review Letters**, v.44 , I.23, p. 1502-1505, jun.,1980.
- [35] D. DALMAZI; F. L. SÁ. Unusual Yang-Lee edge singularity in the one-dimensional axial-next-to-nearest-neighbor Ising model. **Physical Review E**, v. 82, p. 051108 nov. 2010.
- [36] L. MITTAG; M. J. STEPHEN. Yang Lee zeros of the Potts Model. **Journal of Statistical Physics**, v. 35, p. 303-320, dec., 1983.
- [37] R. BULIRSCH; J. STOER. Bemerkungen zur Romberg-Integration. **Numerische Mathematik**, v. 6, p. 6-16, dec., 1964.
- [38] M. HENKEL; G. SCHUTZ. Finite-lattice extrapolation algorithms. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 21, p. 2617-2633, set., 1987.
- [39] N. A. ALVES; J. R. D. FELICIO; U. H. E. HANSMANN. Partition function zeros and leading order scaling correction of the 3D Ising model from multicanonical simulation. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 33, p. 7489, out. 2000.
- [40] R. J. BAXTER. **Exactly solved models in statistical mechanics**. London; New York: Academic Press, 1982. 486p.
- [41] E. N. LASSETTRE; J. P HOWE. Thermodynamic Properties of Binary Solid Solutions on the Basis of the Nearest Neighbor Approximation. **Journal of Chemical Physics**, v. 9, p. 747-754, ago., 1941.
- [42] J. ASHKIN; W. E. LAMB The Propagation of Order in Crystal Lattices. **Physical Review**, v. 141, p. 159-178, set., 1943;
- [43] Sá F.L. Posição e densidade dos zeros de Yang-Lee do modelo Blume-Emery-Griffiths unidimensional sobre anéis conexos e desconexos

http://www.dominionpublico.gov.br/pesquisa/DetailObraForm.do?select_action=&co_obra=82784

- [44] S. Y. KIM. Density of Yang-Lee zeros e Yang-Lee edge singularity for the antiferromagnetic Ising model. **Nuclear Physics B**, v. 705, p. 504-520, jan., 2005.
- [45] T. S. NIELSEN; P. C. HEMMER. Zeros of the Grand Partition Function of a Hard-Core Lattice Gas. **Journal of Chemical Physics**, v. 46, p. 2640-2643, 1967.
- [46] Katsura S., Ohminami P.C. Distribution of zeros of the partition function for the one dimensional Ising models. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, v. 5, p. 95-103, jan., 1972.
- [47] V. A. KAZAKOV. Ising model on a dynamical planar random lattice: Exact solution. **Physics Letters A**, v. 119, n. 3 p. 140-144, dez., 1986.
- [48] D. V. BOULATOV; V. A. KAZAKOV. The Ising model on a random planar lattice: The structure of the phase transition and the exact critical exponents. **Physics Letters B**, v. 186, p. 379-384, mar., 1987.
- [49] D. BESSIS; C. ITZYKSON; J. ZUBER. Quantum Field Theory Techniques in Graphical Enumeration. **Advances in Applied Mathematics**, v. 1, p. 109-157, jan., 1980.
- [50] L. H. HYDER. **Quantum Field Theory**. Cambridge; Cambridge Univesity Press, 1986. 493p.
- [51] W. SELKE. The ANNNI model — Theoretical analysis and experimental application. **Physics Reports**, v. 170, I.4, p. 213-264, nov. 1988
- [52] L. VAN HOVE. Sur L'intégrale de Configuration Pour Les Systèmes De Particules à Une Dimension. **Physica**, v. 16, p. 137, fev., 1950.

- [53] E. M. LIFSHITZ; L. D. LANDAU. **Statistical Physics**. 3ed. Butterworth Heinemann, 1951. 539p.