

TESE DE DOUTORADO

**Contribuições Analíticas e
Computacionais
para
Modelos Magnéticos
Desordenados**

Octavio Daniel Rodriguez Salmon

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas

Rio de Janeiro

Janeiro 2009

Tese de Doutorado submetida ao Centro Brasileiro
de Pesquisas Físicas (CBPF), sob orientação do
Professor Doutor Fernando Dantas Nobre,
para a obtenção do título de
Doutor em Física por Octavio Daniel Rodríguez Salmon

Agradecimentos

A Deus o Pai do universo;

A minha esposa Jessica, pelo apoio em todos os aspectos;

Ao meu orientador o professor Fernando Dantas Nobre, pela orientação e paciência mediante a qual foi possível a elaboração desta tese;

Ao professor José Ricardo de Souza, pela sua valiosa contribuição em alguns fundamentos teóricos do capítulo 6;

Ao professor Evaldo Curado, pelas boas sugestões nas discussões acadêmicas;

Ao professor Constantino Tsallis, pela motivação para o estudo dos problemas da física estatística;

Aos alunos do grupo de física estatística, particularmente Nuno, Braulio e Silvio, pelo apoio e a colaboração.

Aos professores Carlton Taft, Sergio Duarte, Hélio da Motta, Caio Lewenkopf e Ivan Oliveira, com os quais eu cursei disciplinas no CBPF;

Aos funcionários do CBPF, particularmente Almério e Beth;

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) e ao programa Bolsa Nota 10 da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Rio de Janeiro (FAPERJ), pelo apoio financeiro.

Resumo

Diversos modelos magnéticos desordenados são estudados nesta tese, através de diferentes técnicas de aproximação. Dois modelos de Ising em campos aleatórios, os quais exibem um comportamento multicrítico altamente não trivial, são estudados pela abordagem de campo médio. Uma variedade rica de diagramas de fases é apresentada, com uma ou duas fases ferromagnéticas distintas, linhas de transições contínuas e de primeira ordem, pontos tricríticos, de quarta ordem, pontos críticos terminais, e outros fenômenos multicríticos interessantes. Argumenta-se que um destes modelos é relevante para a compreensão de alguns antiferromagnetos diluídos na presença de um campo externo uniforme, como o composto $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, enquanto que o segundo deles pode ser pertinente para o estudo de alguns sistemas do tipo cristais plásticos. Além disso, um modelo de vidro de spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos, na presença de um campo magnético externo, é investigado em diversos tipos de redes hierárquicas. Neste caso, um atrator do tipo vidro de spins é encontrado, no plano campo magnético contra temperatura, o qual está associado com uma fase a baixas temperaturas, em redes hierárquicas de dimensão fractal em torno de três, assim como em dimensões maiores. As consequências físicas deste atrator são discutidas, dentro do cenário atual do problema de vidro de spins. Finalmente, um modelo de Ising na rede quadrada, com interações competitivas, ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e aleatórias (ferromagnéticas e antiferromagnéticas) entre segundos vizinhos, é analisado. Este modelo é estudado através de uma abordagem de campo efetivo,

assim como por simulações de Monte Carlo. Um diagrama de fases interessante é encontrado, exibindo as fases ferromagnética e super-antiferromagnética, assim como um comportamento não trivial para os expoentes críticos.

Abstract

Several disordered magnetic models are investigated in this thesis, through different approximation techniques. Within a mean-field approach, two random-field Ising models that exhibit a rather nontrivial multicritical behavior are analyzed. A rich variety of phase diagrams is presented, with a single or two distinct ferromagnetic phases, continuous and first-order transition lines, tricritical, fourth-order, critical end points, and many other interesting multicritical phenomena. It is argued that one of these models is relevant for the study of some diluted antiferromagnets in the presence of a uniform external field, like the compound $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, whereas the second one should be pertinent for some plastic-crystal systems. In addition to that, a nearest-neighbor-interaction Ising spin glass, in the presence of an external magnetic field, is studied on different hierarchical lattices. In this case, a spin-glass attractor is found, in the plane magnetic field versus temperature, associated with a low-temperature phase, for hierarchical lattices of fractal dimension around three, as well as for higher dimensions. The physical consequences of this attractor are discussed, in view of the present scenario of the spin-glass problem. Finally, an Ising model with competing ferromagnetic nearest-neighbor interactions and random (ferromagnetic and antiferromagnetic) second-neighbor interactions is considered on a square lattice.

Such a model is studied through both an effective-field theory, as well as Monte Carlo simulations. An interesting phase diagram is found, exhibiting both ferromagnetic and superantiferromagnetic phases, as well as a nontrivial critical-exponent behavior.

Abreviaturas utilizadas nesta tese

AF: Antiferromagnética (fase antiferromagnética)

AT: Almeida e Thouless (1978)

DP: Distribuição de probabilidades

EA: Edwards e Anderson (1975)

EFT: do inglês, “effective-field theory”

F: Ferromagnética (fase ferromagnética)

GR: Grupo de renormalização

MC: Monte Carlo

MK: Migdal e Kadanoff (1976)

P: Paramagnética (fase paramagnética)

RFIM: do inglês, “random-field Ising model”

RH: Rede hierárquica

RKKY: Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (1954, 1956, 1957)

RPA: do inglês, “random-phase approximation”

SAF: Super-antiferromagnética (fase super-antiferromagnética)

SK: Sherrington e Kirkpatrick (1975)

TCM: Teoria de campo médio

VS: Vidro de spins

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Fundamentos teóricos	7
2.1	Modelagem do ordenamento magnético	7
2.2	hamiltonianos clássicos de spin	13
2.3	Aproximação de campo médio	14
2.4	Transições de fases	17
2.5	Expoentes críticos	19
2.6	Teoria de Landau	22
2.7	Teoria de Landau para pontos tricríticos	27
2.8	Teoria do grupo de renormalização e hipótese de escala	30
2.8.1	Exemplo : O modelo de Ising unidimensional em uma cadeia linear	32
2.8.2	Teoria geral linearizada do Grupo de Renormalização	38
2.8.3	Hipótese de escala	40
2.9	Vidros de spins	46
2.10	Mecânica estatística dos vidros de spins	49
2.11	O modelo Sherrington-Kirkpatrick	54

2.11.1	Análise da estabilidade da solução em simetria entre réplicas	58
2.11.2	Física da quebra de simetria entre réplicas	61
3	Vidros de spins em redes hierárquicas sob ação de um campo magnético externo	65
3.1	Redes hierárquicas	65
3.2	O procedimento de grupo de renormalização para o modelo de Edwards-Anderson	71
3.3	Vidro de spins de Ising sob ação de um campo magnético externo em redes do tipo Migdal-Kadanoff	77
3.4	Atrator vidro de spins no modelo de Edwards-Anderson com campo magnético em redes hierárquicas de dimensão fractal próximo a três	85
3.5	Conclusões	92
4	Modelo de Ising na presença de campo aleatório com distribuição contínua*	93
4.1	Introdução	93
4.2	O modelo	98
4.3	Diagramas de fases	102
4.3.1	Fronteiras críticas para temperaturas finitas	105
4.3.2	Fronteiras críticas em temperatura nula	117
4.4	Conclusões	122
5	Sistemas tipo Ising interagentes na presença de campos magnéticos	

aleatórios	124
5.1 Dois sistemas do tipo Ising interagentes na presença de campos externos aleatórios	127
5.1.1 Análise em temperatura nula para o caso dos campos descorrelacionados	134
5.1.2 Diagramas de fases em temperatura finita para o caso dos campos descorrelacionados	137
5.2 Conclusões e perspectivas	141
6 Modelo de Ising na rede quadrada com interações competi- tivas	145
6.1 Introdução	145
6.2 Técnica do operador diferencial	150
6.2.1 Modelo $J_1 - J_2$ com acoplamentos de segundos vizinhos aleatórios segundo a técnica do operador diferencial . .	155
6.3 Modelo $J_1 - J_2$ com acoplamentos de segundos vizinhos aleatórios segundo a técnica de Monte Carlo	174
6.3.1 Metodologia de cálculo	174
6.3.2 Resultados	179
6.4 Conclusões	184
7 Conclusões	186
A Termos das relações de recorrência da rede hierárquica ponte de Wheatstone tridimensional	198

Capítulo 1

Introdução

Um dos temas dominantes da física desde meados do século XIX tem sido a compreensão dos estados condensados da matéria. Isto começou com o estudo de sistemas simples, tais como a descrição de Van der Waals da transição líquido-gás e a aproximação de campo médio para explicar o ferromagnetismo. Nestes sistemas, os fenômenos críticos ocorrem de tal forma que a uma dada pressão (P_c), ou temperatura (T_c), mudanças estruturais e/ou no tipo de ordenamento acontecem no sistema [1, 2, 3]. Uma das pedras angulares da teoria dos fenômenos críticos é o conceito de universalidade, o qual estabelece que os valores de algumas quantidades, tais como os expoentes críticos, não dependem dos detalhes microscópicos do sistema, mas apenas de poucos parâmetros, tais como a dimensionalidade e a simetria do parâmetro de ordem. Ao longo do desenvolvimento da teoria dos fenômenos críticos, foram investigados gradualmente sistemas mais complexos, ao introduzir aleatoriedade (desordem) nas interações e nos campos do sistema, e neste contexto os conceitos de universalidade ficam menos claros [4, 5, 6, 7, 8].

Por exemplo, segundo a hipótese de universalidade, o alcance das interações é irrelevante desde que estas sejam finitas, então, por exemplo, ao adicionar acoplamentos entre segundos vizinhos a um sistema de spins cujas interações são inicialmente entre primeiros vizinhos, sem introduzir efeitos de competição entre estas interações, não deveria mudar qualitativamente seu comportamento crítico. No entanto, quando as interações entre segundos vizinhos competem com aquelas entre spins primeiros vizinhos, podemos ter uma mudança no comportamento crítico do sistema. De maneira análoga, para sistemas magnéticos desordenados cujas interações obedecem a uma dada distribuição de probabilidades, uma questão em aberto no momento diz respeito a uma possível quebra de universalidade associada à diferentes distribuições de probabilidades para estas interações.

A introdução da desordem num determinado modelo apresenta tanto desafios nas suas abordagens analíticas, quanto dificuldades na implementação de algoritmos computacionais para a obtenção dos resultados. Por exemplo, no estudo do magnetismo descrito pelo modelo de Ising com acoplamentos ferromagnéticos entre spins primeiros vizinhos, o problema tem sido resolvido exatamente para uma e duas dimensões [9, 10]¹, sendo o mesmo modelo em três dimensões até agora não resolvido [1, 2, 3, 11]. No entanto, neste último caso, os métodos de aproximações, como por exemplo, as simulações de Monte Carlo [12, 13] têm fornecido resultados satisfatórios [14, 15, 16]. Contudo, ao incorporar campos magnéticos aleatórios no modelo de Ising

¹Este último sem a presença de um campo magnético externo.

ferromagnético, embora o mesmo tenha sido resolvido para interações de alcance infinito, ou seja, na aproximação de campo médio [17], seus resultados são polêmicos quando se considera interações de curto alcance [18, 19], essencialmente devido a efeitos de tamanho finito inerentes às simulações computacionais [20]. Por conseguinte, novos algoritmos que tentam reduzir o custo computacional, os quais têm sido desenvolvidos para o modelo de Ising puro, ainda apresentam limitações quando são aplicados a sistemas com desordem. Portanto, métodos analíticos que levam em conta interações de curto alcance, tais como o grupo de renormalização, são recursos também utilizados para investigar o comportamento real do sistema [22].

Dentro dos sistemas desordenados podemos destacar como de grande interesse os sistemas do tipo vidros de spins, os quais estão na categoria de sistemas cuja complexidade tem requerido um esforço considerável para a sua compreensão. Visando o seu entendimento, testes experimentais habilidosos foram realizados e pesquisadores teóricos têm proposto uma grande variedade de modelos e novos conceitos. O resultado destes trabalhos tem sido de grande impacto, não só em outras áreas da física, mas também em outros campos, tais como a computação, matemática, biologia e economia [4, 5, 7]. No ano de 1975, Edwards e Anderson (EA) [23] propuseram um hamiltoniano de spins introduzindo desordem nas ligações, sendo esta a primeira tentativa teórica para descrever qualitativamente uma nova fase chamada de vidro de spins. A correspondente teoria de campo médio formulada em termos de um modelo que considera interações aleatórias de alcance infinito entre spins,

proposta por Sherrington e Kirkpatrick (SK) [24] (modelo SK), proporciona uma solução exata complexa, a qual é razoavelmente compreendida atualmente [4, 5, 6, 7, 25, 26]. Contudo, seus resultados para explicar sistemas reais, definidos a partir de interações de curto alcance, são polêmicos por apresentarem incompatibilidades com algumas simulações computacionais [27]. Até o momento, duas abordagens teóricas têm surgido como principais candidatas para descrever a fase de vidro de spins. A primeira delas foi proposta por Parisi, denominada de “quebra de simetria entre réplicas” [5, 26]; esta é baseada na solução exata do modelo SK, onde a existência de uma multiplicidade de estados de energia mínima a baixas temperaturas é predita, assim como uma linha de transição na presença de um campo externo denominada de “linha de Almeida-Thouless” (AT) [25]. A segunda abordagem é chamada de “Modelo de Gotas”, proposta por Fisher e Huse [28], a qual prevê para baixas temperaturas em dimensões finitas, um único estado de energia mínima, relacionado a um outro por uma simetria de inversão global dos spins do hamiltoniano. Neste último caso, a presença de um campo externo elimina quaisquer ordenamento, e então, a linha de Almeida-Thouless não poderia existir para dimensões finitas. Desta maneira, a compreensão da natureza da fase vidro de spins em baixas dimensões não é satisfatória até o presente momento.

Um grande esforço tem sido empregado tanto no estudo do problema do modelo de Ising com campo aleatório, quanto no estudo dos vidros de spins de Ising, de tal maneira que grandezas de interesse já são conhecidas satisfatoriamente, como por exemplo, suas dimensões críticas inferiores, que geralmente

dividem as características essenciais dos diagramas de fases obtidos em dimensões abaixo e acima da mesma. Tal como já foi mencionado, um ponto interessante diz respeito ao estudo de como o comportamento do sistema pode ser afetado ao se modificar a forma da distribuição dos campos e dos acoplamentos. Também, levar em conta os efeitos de possíveis campos de anisotropia pode enriquecer a criticalidade do sistema, uma vez que paradigmaticamente, a introdução destes campos pode gerar pontos multicríticos no diagrama de fases original ².

Sendo o estudo destes tópicos mencionados acima de grande interesse teórico e computacional, a presente tese abrange o estudo da desordem em modelos magnéticos de tipo Ising, considerando interações de diversos tipos de alcance, assim como diferentes distribuições nos acoplamentos e nos campos. Consequentemente, diferentes fases e tipos de transição serão analisadas, utilizando a aproximação de campo médio, a técnica do campo efetivo do operador diferencial, o grupo de renormalização em redes hierárquicas, e simulações de Monte Carlo em redes de Bravais. No capítulo seguinte, será feita uma revisão teórica dos conceitos fundamentais para o estudo dos fenômenos críticos, nos modelos a serem investigados nesta tese. No capítulo III o modelo de EA será investigado em redes hierárquicas na abordagem de grupo de renormalização, levando em conta os efeitos produzidos por campos aleatórios externos na fase de vidro de spins em diversas dimensões fractais. No capítulo IV o modelo de Ising será estudado na aproximação de campo médio, in-

²Como exemplo, podemos citar o modelo de Blume-Capel, o qual é representado por um hamiltoniano clássico do tipo Ising com spin 1, e que apresenta um ponto tricrítico ao incluir-se um campo de anisotropia [29].

cluindo um campo aleatório obedecendo uma distribuição contínua bastante geral, cujos resultados serão comparados com aqueles obtidos anteriormente para uma distribuição discreta (distribuição trimodal). No Capítulo V o estudo de um modelo que consiste em dois sistemas de spins de Ising interagentes, cada um sob ação de campos aleatórios externos, será apresentado na aproximação de campo médio. Diversos pontos críticos foram encontrados nos diferentes diagramas de fases obtidos variando a razão entre a intensidade do campo aleatório aplicado e a constante de acoplamento entre os dois sistemas. No capítulo VI o modelo de Ising na rede quadrada com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e interações aleatórias entre segundos vizinhos será investigado. Esta componente de aleatoriedade produz uma competição entre as fases ferromagnética e super-antiferromagnética a baixas temperaturas. O modelo é estudado através da aproximação do operador diferencial e pelo método de Monte Carlo. Neste último método a universalidade dos expoentes críticos foi analisada. Finalmente, no capítulo VII as principais conclusões deste trabalho serão apresentadas.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos

2.1 Modelagem do ordenamento magnético

As interações correspondentes a dipolos magnéticos elementares associados aos spins dos elétrons, são de uma ordem de magnitude muito pequena para explicar o ordenamento ferromagnético. Por exemplo, a interação dipolar entre dois magnetons de Bohr separados por uma distância de um Angstrom é $\mu^2/(1\text{\AA})^3 \sim 10^{-4}\text{eV} \sim 1\text{K}$. Também, a mesma decai como $1/R^3$ sendo importante só para os efeitos macroscópicos, tais como nos campos de demagnetização [33]. Para explicar o magnetismo do ponto de vista microscópico, Heisenberg propôs que o alinhamento dos spins decorria de seus vizinhos mais próximos. A interação eletrostática entre os elétrons das camadas externas de íons adjacentes tratada quânticamente via teoria de perturbação, produz uma separação dos níveis de energia eletrônicos, que pode ser entendida como a quantidade de energia necessária para trocar os elétrons do átomo [31]. Para justificar esta interação de troca, vamos calcular com per-

turbação em primeira ordem a energia Coulombiana da interação de dois elétrons. Como consequência do princípio de exclusão de Pauli, a função de onda associada a estes elétrons tem que ser anti-simétrica,

$$\psi_1 = \phi_S(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_A(\sigma_1, \sigma_2) , \quad (2.1)$$

composta da dependência espacial simétrica (S), e daquela do spin anti-simétrica (A), assim como também,

$$\psi_2 = \phi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\chi_S(\sigma_1, \sigma_2) , \quad (2.2)$$

correspondendo à situação invertida. Levando em consideração apenas a forma das funções de onda dependentes da posição,

$$\phi_{S,A} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \pm \phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2)] , \quad (2.3)$$

onde o sinal $+(-)$ corresponde à função simétrica (anti-simétrica). As contribuições perturbativas para a energia são dadas por

$$\left\langle \psi_1 \left| \left(-\frac{e^2}{r_{12}} \right) \right| \psi_1 \right\rangle = A + B , \quad (2.4)$$

$$\left\langle \psi_2 \left| \left(-\frac{e^2}{r_{12}} \right) \right| \psi_2 \right\rangle = A - B , \quad (2.5)$$

onde

$$A = \left\langle \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \left| \left(-\frac{e^2}{r_{12}} \right) \right| \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \right\rangle , \quad (2.6)$$

enquanto que o termo de troca,

$$B = \left\langle \phi_1(\vec{r}_1)\phi_2(\vec{r}_2) \left| \left(-\frac{e^2}{r_{12}} \right) \right| \phi_2(\vec{r}_1)\phi_1(\vec{r}_2) \right\rangle . \quad (2.7)$$

Então,

$$\left\langle \psi_1 \left| \left(-\frac{e^2}{r_{12}} \right) \right| \psi_1 \right\rangle - \left\langle \psi_2 \left| \left(-\frac{e^2}{r_{12}} \right) \right| \psi_2 \right\rangle = 2B . \quad (2.8)$$

Isto significa que a diferença de energia entre dois níveis depende do termo de troca, que é de natureza Coulombiana, contudo, envolve a superposição de funções de onda, as quais têm que cumprir as exigências do princípio de exclusão de Pauli, isto é, têm que ser anti-simétricas.

Agora, vamos demonstrar que um hamiltoniano efetivo de spin da forma

$$H = C\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + D , \quad (2.9)$$

onde C e D são constantes, pode representar a interação dos elétrons em dois níveis de energia. A função de onda anti-simétrica, associada aos spins dos elétrons,

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta - \beta\alpha) , \quad (2.10)$$

é um singleto com spin total nulo, e α e β são estados de spin para cima $|\uparrow\rangle$, e para baixo $|\downarrow\rangle$, respectivamente. A função de onda simétrica é dada por um tripleto,

$$\chi_S = \begin{cases} \alpha\alpha \\ \beta\beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\beta + \beta\alpha) \end{cases} , \quad (2.11)$$

com spin total igual a 1. Escrevendo o hamiltoniano na forma

$$H = C\left\{\frac{1}{2}(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - \frac{1}{2}\vec{S}_1^2 - \frac{1}{2}\vec{S}_2^2\right\} + D, \quad (2.12)$$

e notando que

$$(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 \chi_A = 0,$$

$$(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 \chi_B = 0,$$

$$(\vec{S}_{1,2})^2 \chi_A = \frac{3}{4}\chi_A,$$

$$(\vec{S}_{1,2})^2 \chi_S = \frac{3}{4}\chi_S,$$

temos,

$$\langle \chi_S | H | \chi_S \rangle = \frac{1}{4}C + D, \quad (2.13)$$

$$\langle \chi_A | H | \chi_A \rangle = -\frac{3}{4}C + D. \quad (2.14)$$

Por conseguinte,

$$\langle \chi_S | H | \chi_S \rangle - \langle \chi_A | H | \chi_A \rangle = C, \quad (2.15)$$

identifica o coeficiente C no hamiltoniano (2.9) (normalmente denotado por J) do produto escalar entre dois spins, com o termo de troca de natureza Coulombiana da equação (2.8).

Por conseguinte, podemos introduzir o hamiltoniano de Heisenberg,

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.16)$$

onde $\sum_{\langle i,j \rangle}$ denota uma soma entre pares distintos de spins vizinhos mais próximos. Isto é justificado pelo fato de que a constante de troca J envolve a superposição de funções de onda, as quais só contribuem significativamente para pares de sítios vizinhos. A interação de troca decai exponencialmente, ou seja, mais rápido do que a dipolar, ou seja, da ordem de 3 a 4 eV, sendo muito maior do que esta última. Em baixas temperaturas, quando $J > 0$, a interação de troca tenta manter os spins paralelos (ferromagnetismo), mas se $J < 0$, a configuração favorecida é aquela na qual os spins são antiparalelos (antiferromagnetismo). Em altas temperaturas, os spins flutuam no tempo, de maneira que a magnetização total, $M = \sum_i \vec{S}_i$ é zero, sendo esta é chamada de fase Paramagnética.

A interação de Heisenberg é um efeito eletrostático de origem quântica, que não possui análogo clássico. Contudo, é de interesse mencionar o papel da interação eletrostática coulombiana usual sobre os elétrons dos íons de uma rede. O campo eletrostático que a rede cria sobre os íons é denominado de campo cristalino, e apresenta importantes conseqüências para as propriedades magnéticas dos materiais. Os efeitos do campo cristalino sobre os estados eletrônicos dos íons estão relacionados às simetrias da rede. Para ilustrar esta situação vamos considerar, como exemplo, seis cargas todas iguais a q , a distâncias a e b da origem, como mostra a figura 2.1, apresen-

tando uma simetria axial em torno do eixo z . O potencial eletrostático em uma posição \vec{r} com relação à origem é dado por,

$$V(\vec{r}) = q \left(\frac{1}{|\vec{r} - a\hat{x}|} + \frac{1}{|\vec{r} + a\hat{x}|} + \frac{1}{|\vec{r} - a\hat{y}|} + \frac{1}{|\vec{r} + a\hat{y}|} + \frac{1}{|\vec{r} - b\hat{z}|} + \frac{1}{|\vec{r} + b\hat{z}|} \right). \quad (2.17)$$

Considerando $r \ll a, b$, podemos utilizar a aproximação,

$$\frac{1}{|\vec{r} \pm a\hat{x}|} \approx \frac{1}{a} \mp \frac{x}{a^2} - \frac{r^2}{2a^3} + \frac{3x^2}{2a^3}, \quad (2.18)$$

para obter

$$V(x, y, z) = q \left(\frac{1}{b^3} - \frac{1}{a^3} \right) (3z^2 - r^2) + \text{constante}, \quad (2.19)$$

Portanto, para uma descrição realista de um íon magnético num cristal, temos que somar à interação magnética, a contribuição do campo cristalino,

$$H_{crist} \propto 3z^2 - r^2. \quad (2.20)$$

Observa-se que uma dificuldade surge do fato do termo de interação ser escrito em função dos operadores de momento angular do átomo, enquanto a contribuição do campo cristalino é escrita em termos das coordenadas espaciais do elétron. No entanto, através do importante teorema de Wigner-Eckart [34], o qual estabelece que os elementos do operador de posição z^2 são proporcionais aos elementos de matriz da componente z do operador momento angular ao quadrado, S_z^2 , assim como outras relações para as demais componentes, podemos escrever a contribuição do campo cristalino em termos dos

operadores de momento angular,

$$H_{crist} \propto 3S_z^2 - S^2 . \quad (2.21)$$

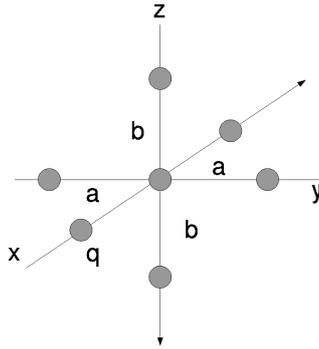


Figura 2.1: Arranjo de cargas exibindo anisotropia.

2.2 hamiltonianos clássicos de spin

Um modelo clássico, e por conseguinte mais simples do que o modelo de Heisenberg, é o modelo de Ising [9], no qual os spins interagem via a interação de troca

$$H = -J \sum_{(ij)} S_i S_j , \quad (2.22)$$

onde $\sum_{(ij)}$ denota uma soma sobre os pares de spins em geral (vizinhos mais próximos, ou não) e as variáveis de spins binárias $\{S_i\}$ ($S_i = \pm 1$) representam componentes dos spins na direção z . Análogo ao modelo de Heisenberg, o

modelo de Ising se encontra na fase paramagnética para altas temperaturas, podendo se encontrar na fase ferromagnética ($J > 0$) ou antiferromagnética ($J < 0$) abaixo de uma temperatura finita T_c , a qual depende da dimensionalidade. Por exemplo, em uma cadeia unidimensional com interações entre primeiros vizinhos apenas, a fase é ordenada apenas para $T=0$, enquanto que para dimensões superiores existe um ordenamento em temperatura finita. É importante mencionar que este modelo só apresenta transição de fases para dimensões $d \geq 2$.

Outro modelo clássico de três estados, $S_i = 0, \pm 1$, é o modelo de Blume-Capel [29],

$$H = -J \sum_{(ij)} S_i S_j + D \sum_i S_i^2, \quad (2.23)$$

onde D representa a magnitude do campo de anisotropia, e a justificativa da contribuição S_i^2 foi apresentada quando explicamos o papel do operador de momento angular no campo de anisotropia. O modelo de Blume-Capel, além de ser apropriado para a descrição de uma interação magnética incluindo anisotropia, também descreve qualitativamente sistemas não magnéticos que exibem experimentalmente pontos tricríticos, tais como as misturas de He^3 e He^4 [29].

2.3 Aproximação de campo médio

Um sistema de muitos corpos interagentes é geralmente difícil de ser resolvido exatamente, excetuados casos simples, tais como a teoria de campos

gaussiana, ou o modelo de Ising com interações entre primeiros vizinhos, em uma dimensão. A grande dificuldade surge ao tentar manipular a grande quantidade de contribuições que surgem para a função de partição devido às interações. Por isso, a principal idéia da teoria de campo médio (TCM) é a de substituir todas as interações que atuam em um corpo, por uma interação média ou efetiva. Isto reduz um problema de muitos corpos a um problema de um único corpo na presença de um campo que representa, em média, as interações sobre este corpo. A vantagem da TCM consiste em descrever qualitativamente o comportamento do sistema de maneira simplificada. Em geral, o hamiltoniano pode ser expandido em termos da magnitude das flutuações ao redor do campo médio; neste contexto, a TCM pode ser entendida como uma expansão do hamiltoniano na ordem zero nas flutuações. A dimensionalidade desempenha um papel essencial para determinar se a TCM é apropriada a um problema particular; devido ao fato das interações serem substituídas por uma única interação efetiva, a precisão será maior, a princípio, quanto maior o número de interações que atuam sobre um corpo. Isto acontece em altas dimensões, ou quando as interações são de longo alcance. Por exemplo, vamos analisar o hamiltoniano de um spin S_i no modelo de Ising,

$$H_i = -JS_i \left(\sum_{j=1}^z S_j^{(i)} \right), \quad (2.24)$$

onde z é o número de vizinhos mais próximos que rodeiam ao spin i , e $S_j^{(i)}$ denota o vizinho j do spin i . Então, a TCM obriga a substituir cada spin

$S_j^{(i)}$ pelo valor médio $\langle S_i \rangle$, o que aproxima o hamiltoniano acima por

$$H_i \approx -h_{\text{eff}} S_i , \quad (2.25)$$

onde $h_{\text{eff}} = zJ\langle S_i \rangle$ é o campo efetivo que atua no sítio i . Como o hamiltoniano da equação (2.25), a função de partição associada ao spin do sítio i , no ensemble canônico é

$$Z_i = \sum_{S_i=\pm 1} e^{-\beta H_i} = 2 \cosh(zJ\beta\langle S_i \rangle) , \quad (2.26)$$

onde $\beta = 1/k_B T$. O valor médio da magnetização local é proporcional a $\langle S_i \rangle$, a qual pode ser calculada a partir da função de partição acima,

$$\langle S_i \rangle = \tanh(zJ\beta\langle S_i \rangle) . \quad (2.27)$$

Para obter uma solução não trivial para $\langle S_i \rangle$, utilizamos a mudança de variáveis na equação anterior $x = \langle S_i \rangle$, e então notamos que existe uma temperatura a partir da qual as curvas $y = x$ e $y = \tanh(zJ\beta x)$ se cruzam, o que acontece quando suas derivadas são iguais, ou seja, $1 = zJ\beta$. Então, a temperatura crítica resulta em

$$T_c = zJ/k_B . \quad (2.28)$$

Esta aproximação prediz uma transição em temperatura finita para toda dimensão, o que é incorreto, uma vez que o Teorema de Mermin-Wagner exclui a possibilidade de quebras de simetrias discretas, em sistemas com

interações entre primeiros vizinhos, para dimensões $d < 2$. Entretanto, esta predição funciona qualitativamente para $d \geq 2$.

2.4 Transições de fases

Uma transição de fases [1, 2], embora não sempre, envolve uma mudança de simetria ao passar de uma fase a outra. Por exemplo, quando um fluido, seja líquido ou gás, é transformado num sólido cristalino, uma simetria translacional contínua é quebrada, uma vez que em um fluido homogêneo, cada ponto é similar a outro. No entanto, em um sólido regular, com invariância translacional, nem todo ponto é similar a outro, a menos que o mesmo seja deslocado por uma distância determinada pela regularidade da rede. É conveniente por isso, introduzir uma variável que descreva o grau do ordenamento, levando em consideração a simetria do sistema. Este é o chamado parâmetro de ordem, o qual costuma assumir o valor um, quando a ordem é máxima, e zero quando desaparece aquele ordenamento. Um dado sistema pode precisar de mais de um parâmetro de ordem, para que suas fases sejam descritas apropriadamente. Além disso, o parâmetro de ordem deve ser definido segundo as características da transição. Por exemplo, ao utilizar a magnetização como parâmetro de ordem para o modelo XY bidimensional, não se encontra ordenamento em temperatura finita; entretanto, se este parâmetro medir a aparição de vórtices no sistema, então é possível identificar uma transição a temperatura finita, conhecida como a transição Kosterlitz–Thouless [32].

A primeira proposta para classificar as transições de fases foi efetuada por Ehrenfest, que agrupou as transições pelo grau de não analiticidade envolvida na energia livre. Neste esquema, as transições de fases foram classificadas a partir da menor ordem na derivada da energia livre, com respeito a uma variável termodinâmica, a partir da qual existe a descontinuidade. Por exemplo, a transição líquido-gás é classificada como uma transição de primeira ordem, porque apresenta descontinuidade na primeira derivada com respeito à densidade. A transição ferromagnética-paramagnética e algumas vezes denominada de segunda ordem porque a segunda derivada da energia livre com respeito à temperatura é descontínua de acordo a TCM. Esta classificação não é completa, uma vez que não leva em consideração casos muito comuns, quando as derivadas da energia livre divergem, o que é só possível no limite termodinâmico, ou seja, quando o número de partículas tende a infinito.

Na classificação moderna costuma-se definir dois tipos de transição, a transição descontínua e a contínua. No primeiro caso, o parâmetro de ordem muda seu valor de maneira descontínua caracterizando-se pela existência de um calor latente, o qual ocorre sem mudança de temperatura, num intervalo de tempo onde existe coexistência de fases, e após isto, uma das fases desaparece. Por exemplo, a água não é transformada imediatamente em gás, porém, forma uma mistura turbulenta de líquido e gás. Na transição contínua não existe calor latente associado, nem coexistência de fases, porém, o parâmetro de ordem muda continuamente; a transição ferromagnética e a superfluida são deste tipo. Na figura 2.2 são representados estes tipos de transição, segundo o comportamento de um dado parâmetro de ordem $\langle\phi\rangle$ em função da tem-

peratura; a transição acontece na temperatura crítica T_c .

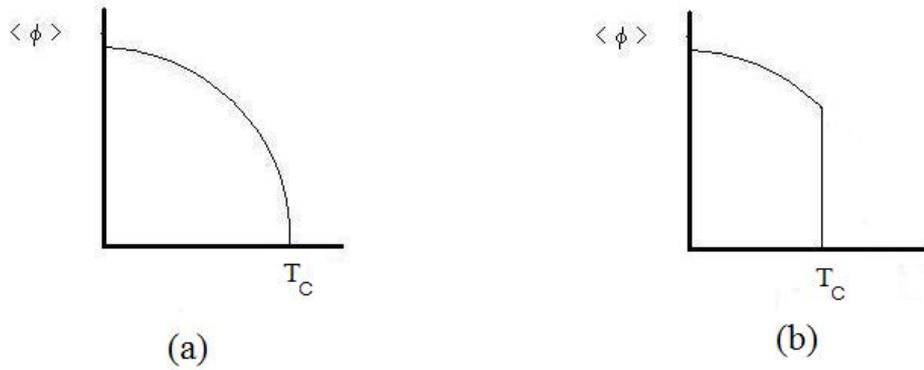


Figura 2.2: Comportamento de um parâmetro de ordem típico $\langle \phi \rangle$ em função da temperatura: (a) em uma transição contínua; (b) em uma transição descontínua.

2.5 Expoentes críticos

Uma boa parte dos sistemas físicos próximos ao ponto crítico é descrito por funções termodinâmicas que apresentam um comportamento do tipo lei de potência [1, 2]. Historicamente, esta descrição originou-se da mecânica dos fluidos, a partir de análises dimensionais que são conhecidas como leis de escala. Os fatos experimentais confirmam que diferentes sistemas podem apresentar um comportamento universal, isto é, em transições contínuas, as leis de potência exibem os mesmos expoentes próximos ao ponto crítico. O conjunto de sistemas que apresentam os mesmos expoentes críticos pertencem à mesma classe de universalidade. Acredita-se, embora não tenha sido provado, que os expoentes críticos não dependem dos detalhes microscópicos dos sistemas físicos, porém dependem de parâmetros globais, como a dimensão do

sistema, o alcance das interações, e a dimensão do parâmetro de ordem.

Para descrever uma quantidade física f ao redor da temperatura crítica T_c , definimos a grandeza adimensional $t = |T - T_c|/T_c$, a qual chamamos de temperatura reduzida. Logo, definimos o expoente crítico k tal como,

$$k = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\log f(t)}{\log t} . \quad (2.29)$$

Isto resulta na lei de potência,

$$f(t) \propto t^k , \quad t \sim 0 . \quad (2.30)$$

É importante destacar o fato de que a relação acima representa o comportamento assintótico da função $f(t)$, quando $t \rightarrow 0$. Geralmente, espera-se que,

$$f(t) = At^\lambda(1 + bt^{\lambda_1} + \dots) . \quad (2.31)$$

Acima e abaixo de T_c o sistema se encontra em duas fases diferentes caracterizadas por um parâmetro de ordem Ψ , o qual cai para zero em T_c . Particularmente, para um ferromagneto simples onde o parâmetro de ordem é a magnetização m do sistema, os expoentes críticos na fase ordenada ($T < T_c$) são definidos de maneira convencional na tabela 2.1. Na tabela 2.2 são apresentados os expoentes críticos da fase desordenada ($T > T_c$). Na tabela 2.3 os expoentes críticos apresentados são aqueles definidos no ponto crítico ($T = T_c$).

Expoente	Comportamento
α	$C \sim t^{-\alpha}$
β	$M \sim t^{\beta}$
γ	$\chi \sim t^{-\gamma}$
ν	$\xi \sim t^{-\nu}$

Tabela 2.1: Principais expoentes críticos para $T < T_c$, onde C , M , χ e ξ representam o calor específico, a magnetização total, a suscetibilidade e o comprimento de correlação, respectivamente.

Expoente	Comportamento
α'	$C \sim t^{-\alpha'}$
γ'	$\chi \sim t^{-\gamma'}$
ν'	$\xi \sim t^{-\nu'}$

Tabela 2.2: Principais expoentes críticos para $T > T_c$, onde C , χ e ξ representam o calor específico, a suscetibilidade e o comprimento de correlação, respectivamente.

Expoente	Comportamento
δ	$h \sim m^{\delta}$
η	$G(r) = \langle S(0)S(r) \rangle \sim r^{-d+2-\eta}$

Tabela 2.3: Principais expoentes críticos em $T = T_c$; m , h , $G(r)$, d representam a magnetização por partícula, o campo magnético externo, a função de correlação entre dois spins separados por uma distância r e a dimensão do sistema, respectivamente.

A partir de considerações termodinâmicas é possível obter relações de desigualdades entre os expoentes críticos. As relações mais importantes são,

$$\alpha + 2\beta + 2\gamma \geq 2 \text{ (desigualdade de Rushbrooke) ,} \quad (2.32)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2 \text{ (desigualdade de Griffiths) ,} \quad (2.33)$$

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1) \text{ (desigualdade de Widom) ,} \quad (2.34)$$

$$d\nu \geq 2 - \alpha \text{ (desigualdade de Josephson) ,} \quad (2.35)$$

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma \text{ (desigualdade de Fisher) .} \quad (2.36)$$

Teorias de escala e do grupo de renormalização [2, 37] sugerem as igualdades entre os expoentes definidos para $T < T_c$ e $T > T_c$ ($\alpha = \alpha'$, $\gamma = \gamma'$, $\nu = \nu'$), assim como que as desigualdades acima devem ser satisfeitas como igualdades. Como ilustração, para o modelo de Ising na rede quadrada com interações entre primeiros vizinhos, os expoentes críticos acima apresentam os seguintes valores: $\alpha = 0$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$, $\nu = 1$, $\delta = 15$ e $\eta = 1/4$.

2.6 Teoria de Landau

Segundo Landau [35, 36, 3] o potencial termodinâmico de Helmholtz, por partícula, f , pode ser expandido em torno da temperatura crítica ($T = T_c$) e do parâmetro de ordem ($m = 0$), neste caso a magnetização, numa série de

Taylor de duas variáveis,

$$f(T, m) = \sum_{j=0}^{\infty} u_j(T) m^j , \quad (2.37)$$

onde os coeficientes podem ainda ser expandidos ao redor de $T = T_c$,

$$u_j(T) = \sum_{k=0}^{\infty} r_{jk}(T - T_c)^k = r_{j0} + r_{j1}(T - T_c) + \dots . \quad (2.38)$$

Na ausência de campo magnético externo, pelo fato de $f(T, m)$ ser uma função par com respeito a m (uma vez que f tem que ser invariante quando $m \rightarrow -m$), então $u_j(T) = 0$, se j for ímpar. Na presença de um campo magnético externo h , a equação de estado na teoria de Landau é

$$h = h(m, T) = \left(\frac{\partial f}{\partial m} \right)_T = \sum_{j=1}^{\infty} j u_j(T) m^{j-1} = 2u_2(T)m + 4u_4(T)m^3 + \dots . \quad (2.39)$$

Neste caso, para o ferromagneto de Ising é suficiente escrever a densidade de energia livre até a quarta potência da magnetização,

$$f = \frac{1}{2} r m^2 + u m^4 , \quad (2.40)$$

onde redefinimos os coeficientes da expansão, $r = 2u_2(T)$, $u = u_4(T)$. Para que a função de partição seja finita, f tem que ser positiva definida, o que implica que u seja positivo quando m aumenta. A magnetização m é determinada pela equação de estado (2.39), a qual é válida tanto para campo externo nulo ou não. Para temperaturas altas, m tem que ser zero quando o campo magnético h é zero; isto significa que f tem que apresentar um mínimo

em $m = 0$ neste caso. Por outro lado, a baixas temperaturas, espera-se um estado ferromagnético e pelo menos um mínimo de f com $m \neq 0$. Isto é mais fácil de ocorrer se r muda de sinal quando T ultrapassa uma temperatura T_c ,

$$r = a(T - T_c) . \quad (2.41)$$

Na figura 2.3 a função f é representada para três valores de T , supondo que u seja independente da temperatura. Para $T > T_c$, existe um único mínimo em $m = 0$. Para $T < T_c$, existem dois mínimos simétricos colocados ao redor de $m = 0$. A equação de estado para o caso $h = 0$ é dada por

$$rm + 4um^3 = 0 , \quad (2.42)$$

cujas soluções são,

$$m = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \pm(-r/4u)^{1/2}, & T < T_c \end{cases} \quad (2.43)$$

Então, a teoria de Landau prediz uma transição contínua, onde

$$m \sim (T_c - T)^\beta ; \quad \beta = 1/2 , \quad (2.44)$$

sendo β o expoente crítico associado à magnetização, o qual controla a dependência do parâmetro de ordem na vizinhança de T_c . Quando as flutuações são importantes, isto é, na criticalidade, o expoente β é geralmente menor que $1/2$ (por exemplo, β é da ordem de $1/3$ em três dimensões). A equação (2.43)

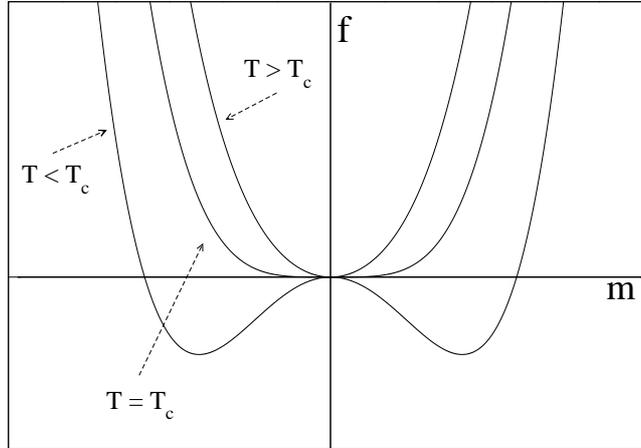


Figura 2.3: A densidade de energia livre, $f = \frac{1}{2}rm^2 + um^4$, como função de m , para diferentes temperaturas.

indica que existem dois valores possíveis para m quando $T < T_c$ e $h = 0$, correspondendo aos dois sentidos diferentes da magnetização. A suscetibilidade magnética pode ser obtida para um sistema na presença de um campo magnético externo, diferenciando a equação (2.39) com respeito a h ,

$$(r + 12um^2) \frac{\partial m}{\partial h} = 1 \quad (2.45)$$

ou,

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = \begin{cases} 1/r, & T > T_c \\ 1/(2|r|), & T < T_c \end{cases} . \quad (2.46)$$

Isto implica em,

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma} ; \quad \gamma = 1 . \quad (2.47)$$

O expoente γ associado à suscetibilidade magnética é tipicamente da ordem de $4/3$ em sistemas tridimensionais, onde as flutuações são relevantes na criticalidade. Finalmente, a dependência de m com relação a h , em $T = T_c$, segue da equação (2.39),

$$m = (h/4u)^{1/3} \sim h^{1/\delta}; \quad \delta = 1/3 \quad (T = T_c), \quad (2.48)$$

o qual define outro expoente crítico. É evidente a partir da figura 2.3 que o mínimo da densidade de energia livre é zero para $T > T_c$, e assume um valor negativo para $T < T_c$,

$$f_{min} = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ -r^2/(16u), & T < T_c \end{cases}, \quad (2.49)$$

e portanto, nesta teoria o calor específico é zero para $T > T_c$, e positivo para $T < T_c$,

$$c_v = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \Big|_{f=f_{min}} = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ Ta^2/(8u), & T < T_c \end{cases}. \quad (2.50)$$

A equação acima apresenta a contribuição do calor específico associada com o estabelecimento da ordem magnética; o calor específico total inclui uma parte analítica na temperatura que surge devido a outros graus de liberdade não associados com o ordenamento magnético (por exemplo, vibrações da rede).

2.7 Teoria de Landau para pontos tricríticos

Vamos agora considerar a seguinte densidade de energia livre de Landau

$$f = \frac{1}{2}rm^2 + u_4m^4 + u_6m^6 \quad (2.51)$$

onde $r = a(T - T^*)$. Se u_4 for positivo, o termo de sexta ordem não é relevante na vizinhança da transição contínua. Se, por outro lado, u_4 for negativo, o termo de sexta ordem é importante para manter a estabilidade. Neste caso, um segundo mínimo da energia livre, simétrico ao redor de $m = 0$, surge quando T diminui, tal como é mostrado na figura 2.4. Quando a energia livre do segundo mínimo (com $m \neq 0$) é zero, uma transição de primeira ordem ocorre. A temperatura T^* é o limite da metaestabilidade da fase isotrópica (paramagnética), uma vez que para $T^* < T < T_c$ a origem é ainda um mínimo local, porém não global. O limite de metaestabilidade da fase ordenada acontece na temperatura T^{**} , na qual o segundo mínimo desaparece. Então, se $u_4 > 0$ a transição acontece para $r = r_c = 0$ e $T_c = T^*$. Quando $u_4 < 0$ a transição de primeira ordem é determinada pela condição de igualdade das energias, $f(r_c, m) = 0$, e da condição de equilíbrio, $\partial f(r_c, m)/\partial m = 0$. Por conseguinte,

$$r_c = a(T_c - T^*) = \begin{cases} 0, & u_4 > 0 \\ \frac{1}{2}|u_4|^2/u_6, & u_4 < 0 \end{cases}, \quad (2.52)$$

$$m_c = \pm(u_4/(2u_6))^{1/2}. \quad (2.53)$$

A transição de primeira ordem está associada a um calor latente, uma vez que a entropia por unidade de volume da fase desordenada é zero em TCM, sendo negativa na fase ordenada. Este resultado pode ser obtido a partir da energia livre da fase ordenada, a qual na ordem mais baixa em $(r - r_c)$ é dada por

$$f = \frac{1}{2}(r - r_c)m_c^2 = -\frac{1}{4}(r - r_c)\frac{u_4}{u_6} . \quad (2.54)$$

A densidade de entropia da fase ordenada, resulta em

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{1}{4}au_4/u_6 , \quad (2.55)$$

enquanto a variação de entropia,

$$\Delta s = s_{desordenada} - s_{ordenada} = \frac{1}{4}au_4/u_6 . \quad (2.56)$$

É importante lembrar que existem outras contribuições para a entropia, não incluídas neste modelo, as quais asseguram sempre a positividade da entropia total (por exemplo, vibrações de rede). Portanto, o calor latente associado à transição é

$$Q = T_c \Delta s = \frac{1}{4}T_c a \frac{u_4}{u_6} \quad (2.57)$$

O diagrama de fases descrito pela equação (2.51), no plano u_4 versus r é mostrado na figura 2.5. A linha da transição contínua para $u_4 > 0$ é chamada de linha lambda, a qual foi primeiro observada na transição entre os estados normal e superfluido em misturas de hélio líquido. A transição superfluida é usualmente chamada de transição lambda, uma vez que a curva do seu calor

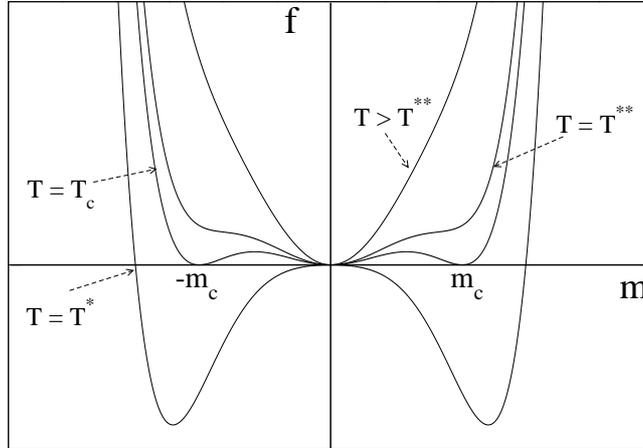


Figura 2.4: A densidade de energia livre f , em função de m , até a sexta potência em m (ver equação (2.51), quando $u_4 < 0$). Existe uma transição de primeira ordem para $T = T_c$. T^{**} e T^* são os limites de metaestabilidade (coexistência de fases) das fases ordenada e desordenada, respectivamente.

específico lembra à letra grega λ . Esta linha encontra a linha da transição de primeira ordem, que existe para $u_4 < 0$, num ponto chamado de tricrítico em $(r, u_4) = (0, 0)$.

Deve-se notar que ao longo da linha de transição de primeira ordem há coexistência de três fases, a fase desordenada com $m = 0$, e duas fases ordenadas simétricas para $m = \pm m_c$. Se $u_4 = 0$ a transição é de segunda ordem (segundo a classificação de Ehrenfest), mas neste caso o expoente do parâmetro de ordem β é $1/4$, ao invés de $1/2$, com

$$m = \pm(-r/6u_6)^{1/4}. \quad (2.58)$$

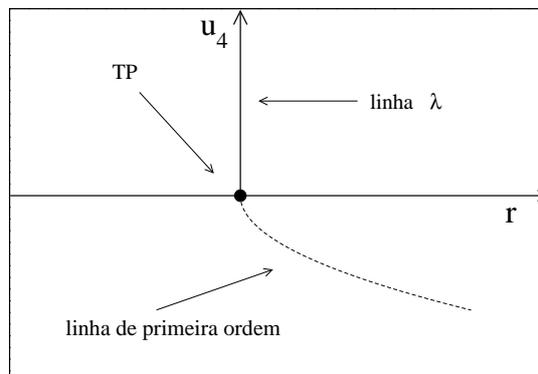


Figura 2.5: Diagrama de fases associado à energia livre da equação (2.51). A linha onde $r = 0$ e $u_4 > 0$ é uma linha lambda que representa uma fronteira de transição contínua. A linha $r = \frac{1}{2}|u_4|^2/u_6$ é uma linha de primeira ordem. O ponto TP representa o ponto tricrítico.

2.8 Teoria do grupo de renormalização e hipótese de escala

A idéia do grupo de renormalização (GR) [37] consiste em explorar o comportamento físico de um sistema próximo ao ponto crítico, levando a um procedimento para determiná-lo. Para explicar o método, é conveniente considerar um exemplo específico; seja uma rede quadrada que contém em cada sítio um spin, a qual foi dividida em blocos de 3×3 , tal como é mostrado na figura 2.6(a). Cada bloco contendo nove spins será substituído por um novo bloco contendo um único spin. O novo bloco apresentará um spin para cima ou para baixo, se a maioria dos spins no bloco antigo estão alinhados para cima ou para baixo; a nova rede é mostrada na figura 2.6(b). Próximo do ponto crítico, o sistema exibirá um ordenamento de longo alcance, e portanto, espera-se que o procedimento de reduzir a resolução da densidade de spins (“coarse-graining”) produza uma nova rede de spins, estatisticamente

equivalente à original. Quando isto acontece, então a rede de spins possui invariância de escala; por conseguinte, a forma da função de partição do novo sistema (representado aqui por grandezas com apóstrofes) é mantida invariante pela transformação dos blocos

$$Tr_{\sigma'} \exp(-\beta H'(\{\sigma'\})) = Tr_{\sigma} \exp(-\beta H(\{\sigma\})) , \quad (2.59)$$

garantindo que as propriedades físicas do sistema também são preservadas. Se a transformação dos blocos preserva a forma funcional do hamiltoniano, então a mesma pode ser iterada da mesma maneira em cada passo, logo, só seus parâmetros são afetados pela transformação. Por isso, se o hamiltoniano original contém um conjunto de parâmetros (K_1, K_2, \dots, K_n) (os quais podem ser associados aos acoplamentos do modelo de Ising), então a transformação produz um hamiltoniano com um novo conjunto de parâmetros $(K'_1, K'_2, \dots, K'_n)$, de maneira que os novos parâmetros dependem dos antigos,

$$K'_i = R_i(K_1, K_2, \dots, K_n), \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.60)$$

onde a função vetorial $\vec{R} \equiv (R_1, R_2, \dots, R_n)$ caracteriza a transformação. Estas equações são chamadas de “equações de renormalização”, e mediante a iteração destas equações, é possível determinar se o sistema está numa fase ordenada ou não, assim como conhecer os valores $(K_1^*, K_2^*, \dots, K_n^*)$, para os quais o sistema está no ponto crítico.

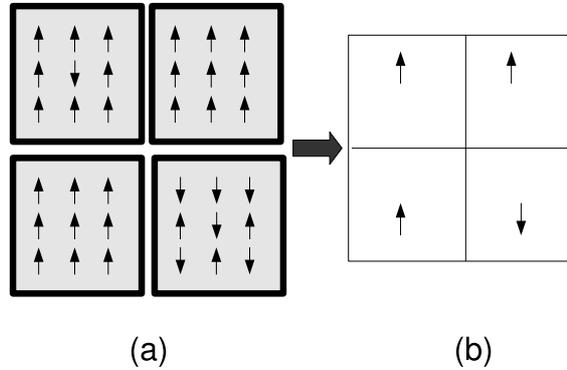


Figura 2.6: Procedimento de renormalização, no qual cada bloco de nove spins é transformado em um bloco contendo um único spin.

2.8.1 Exemplo : O modelo de Ising unidimensional em uma cadeia linear

O hamiltoniano do modelo de Ising para N spins em uma cadeia linear é representado por,

$$-\beta H = K \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} \quad (S_i = \pm 1), \quad (2.61)$$

onde $K = -\beta J$. Vamos considerar a transformação de bloco dos spins tal como é apresentado na figura 2.7, onde se pode observar parte de uma cadeia linear formada por N spins. Notamos que a nova cadeia linear após a dizimação dos spins nos sítios ímpares, é representada pelos spins das posições pares. Logo, a função de partição da cadeia original com acoplamentos K tem que ser proporcional à função de partição da nova cadeia com acoplamentos

K' . Por conseguinte,

$$\begin{aligned} \exp(K' S_2 S_4 + g) &= \\ \sum_{S_1} \sum_{S_3} \sum_{S_5} \exp(K S_1 S_2 + K S_2 S_3 + K S_2 S_4 + K S_4 S_5) &= \\ 8 \cosh(K S_2) \cosh(K(S_2 + S_4)) \cosh(K S_4), & \quad (2.62) \end{aligned}$$

onde g é uma função de K . Considerando os dois possíveis valores para o produto $S_2 S_4$, determina-se a expressão da função g , e do acoplamento K' em termos dos antigos acoplamentos,

$$K' = \frac{1}{2} \log[\cosh(2K)], \quad (2.63)$$

$$g(K) = \log[8 \cosh^2(K) \cosh^{1/2}(2K)]. \quad (2.64)$$

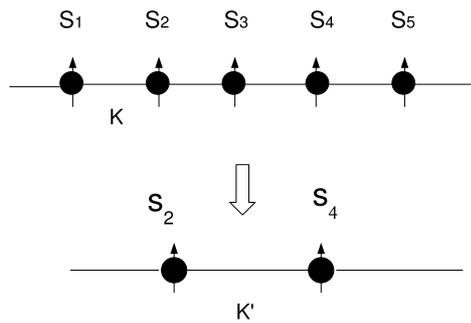


Figura 2.7: Procedimento de renormalização do modelo de Ising em dimensão $d = 1$.

Os pontos para os quais $K^* = R(K^*)$ são denominados de pontos fixos.

Nestes pontos o sistema é invariante por transformações GR. Em particular, neste modelo, as subseqüentes iterações da equação (2.63) levam a valores maiores de K , indicando que o fluxo de K apresenta apenas dois pontos fixos, um para $K = 0$ ($T \rightarrow \infty$), e outro para $K \rightarrow \infty$ ($T = 0$), como mostrado na figura 2.8. O ponto $K = \infty$ é chamado de instável (ou repulsor), porque qualquer perturbação afastará o fluxo deste para um ponto chamado de estável (ou atrator), o qual neste caso corresponde a $K = 0$. Logo, o sistema só apresenta uma fase ordenada para $T = 0$. Sistemas exibindo transições de fases em temperatura finita apresentam soluções não triviais para suas equações de renormalização, como por exemplo, o modelo de Ising em dimensões $d \geq 2$.

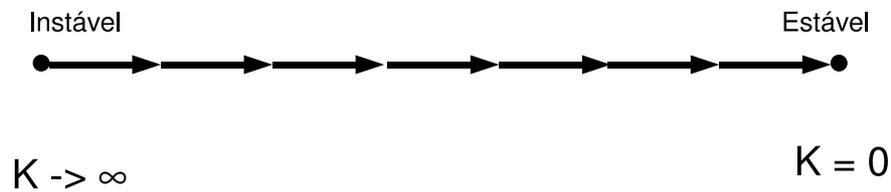


Figura 2.8: Fluxo de renormalização da equação (2.63).

Deve-se notar que para baixas temperaturas $T \rightarrow 0$ ($K \rightarrow \infty$) a equação de transformação (2.63) pode ser aproximada por

$$K' \sim K . \quad (2.65)$$

Vamos analisar as implicações deste resultado em dimensões superiores. Por exemplo, para uma rede de spins em d dimensões, se cada um dos novos spins representam b^d spins antigos, onde b representa o fator de escala da transformação, é fácil verificar que para baixas temperaturas,

$$K' \sim b^{d-1}K \quad (2.66)$$

Assim, para $d > 1$ é claro que $K \rightarrow \infty$ não é mais um ponto fixo instável, uma vez que uma perturbação neste ponto não leva para ponto $K = 0$. Por conseguinte, entre $K \rightarrow \infty$ e $K = 0$ deve existir um outro ponto fixo K_c , sendo o mesmo instável (ver a figura 2.9). Para visualizar isto, consideremos a evolução do comprimento de correlação através do fluxo de renormalização; é importante ressaltar que, para uma renormalização por um fator de escala b , o comprimento de correlação é transformado de acordo com

$$\xi(K') = \xi(K)/b . \quad (2.67)$$

Agora vamos supor que partimos de um ponto K próximo a K_c , e que $n(K)$ iterações da equação de renormalização são necessárias para alcançar um valor K_0 entre $K = 0$ e $K = K_c$, através do fluxo de GR. Se ξ_0 for o comprimento de correlação em $K = K_0$ (ver a figura 2.10), o qual pode ser da ordem de 1, então, pela transformação acima temos,

$$\xi(K) = \xi_0 b^{n(K)} . \quad (2.68)$$

Note que K no início foi escolhido próximo de K_c , então, o número de it-

erações para alcançar K_0 são cada vez maiores, uma vez que perto de um ponto fixo instável, os acoplamentos mudam pouco com iterações sucessivas. Se $K = K_c$ inicialmente, então um número infinito de iterações seria necessário; com isto, podemos afirmar que quando K se aproxima de K_c , o comprimento de correlação tende a infinito, e assim, o novo ponto fixo instável deve corresponder a um ponto crítico.

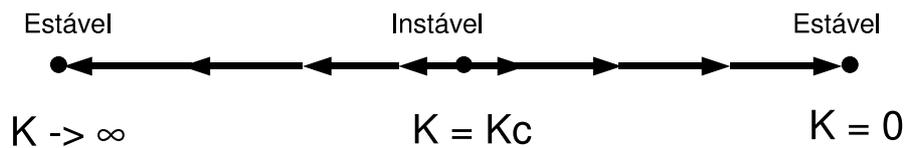


Figura 2.9: Fluxo de renormalização, associado a uma equação com um único parâmetro, com um ponto fixo instável em $K = K_c$.

Mediante o conhecimento das equações de GR próximo do ponto fixo instável é possível calcular o expoente crítico de correlação ν , uma vez que a seguinte expansão pode ser efetuada,

$$K' = R(K_c) + (K - K_c)R'(K_c) + \dots \quad (2.69)$$

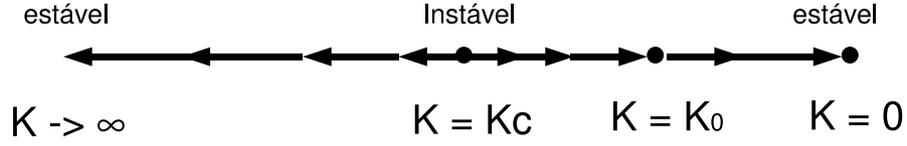


Figura 2.10: Fluxo de renormalização, associado a uma equação com um único parâmetro, com um ponto crítico em $K = K_c$; o ponto $K = K_0$ corresponde a um ponto arbitrário entre $K = K_c$ e $K = 0$.

Então, definindo o expoente y ,

$$y = \frac{\log R'(K_c)}{\log b} \quad (2.70)$$

e utilizando o fato de que $K_c = R(K_c)$, temos,

$$K' \sim K_c + b^y(K - K_c) . \quad (2.71)$$

Próximo ao ponto crítico, ξ diverge segundo,

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \sim \left| \frac{1}{K} - \frac{1}{K_c} \right|^{-\nu} \sim \left| \frac{K - K_c}{K} \right|^{-\nu} \sim \left| \frac{K - K_c}{K_c} \right|^{-\nu} , \quad (2.72)$$

ou seja,

$$\xi \sim |K - K_c|^{-\nu} . \quad (2.73)$$

Mas,

$$\xi(K) = b\xi(K') , \quad (2.74)$$

e utilizando a equação (2.71),

$$|K - K_c|^{-\nu} \sim b|K' - K_c|^{-\nu} = b|b^y(K - K_c)|^{-\nu} , \quad (2.75)$$

o que só é possível se,

$$\nu = \frac{1}{y} . \quad (2.76)$$

Este resultado mostra que o expoente crítico ν está relacionado com a derivada da equação de transformação.

2.8.2 Teoria geral linearizada do Grupo de Renormalização

A discussão anterior mostra o poder das equações de renormalização linearizadas. Agora, os conceitos desta aproximação serão generalizados para um hamiltoniano geral H com parâmetros $\vec{K} \equiv (K_1, K_2, \dots, K_n)$. A equação de renormalização

$$\vec{K}' = \vec{R}(\vec{K}) , \quad (2.77)$$

pode ser linearizada ao redor de um ponto fixo instável \vec{K}^* segundo

$$K'_a - K_a^* \sim \sum_{b=1}^n T_{ab}(K_b - K_b^*) , \quad (a = 1, 2, \dots, n) \quad (2.78)$$

onde

$$T_{ab} = \left. \frac{\partial R_a}{\partial K_b} \right|_{K=K^*} . \quad (2.79)$$

A matriz \mathbf{T} não precisa ser simétrica; no entanto, é possível definir a equação de autovalores para \mathbf{T} segundo,

$$\sum_a T_{ab} \phi_a^i = \lambda^i \phi_b^i , \quad (2.80)$$

onde supomos autovalores $\{\lambda\}$ reais. Definindo uma variável u_i segundo,

$$u_i = \sum_a \phi_a^i (K_a - K_a^*) , \quad (2.81)$$

a qual costuma ser denominada variável de escala, porque é transformada multiplicativamente em torno do ponto fixo pela renormalização,

$$\begin{aligned} u'_i &= \sum_a \phi_a^i (K'_a - K_a^*) \\ &= \sum_a \sum_b \phi_a^i T_{ab} (K_b - K_b^*) \\ &= \sum_b \lambda^i \phi_b^i (K_b - K_b^*) \\ &= \lambda^i u_i . \end{aligned} \quad (2.82)$$

Pelo fato de u_i modificar sua escala com λ^i , esta variável de escala aumentará se $\lambda^i > 1$, e diminuirá se $\lambda^i < 1$. Redefinindo os autovalores λ^i segundo

$$\lambda^i = b^{y_i} , \quad (2.83)$$

então,

$$u'_i = b^{y_i} u_i . \quad (2.84)$$

Ass quantidades $\{y_i\}$ estão diretamente ligadas aos autovalores da transformação de GR, $\{\lambda_i\}$, através da equação (2.82), sendo também comumente denominadas na literatura por autovalores da transformação; eles determinarão as relações de escala para os expoentes críticos, como será mostrado depois. Três casos são identificados para os autovalores $\{y_i\}$, com relação às perturbações em torno de um ponto fixo: i) Quando um dado $y_i > 0$, a variável u_i é chamada de relevante, porque sucessivas transformações de GR levarão u_i para longe do ponto fixo; (ii) se $y_i < 0$, u_i é denominada de variável irrelevante, uma vez que transformações de GR levarão u_i de volta para o ponto fixo; (iii) para $y_i = 0$, u_i é chamada de variável marginal, porque através de transformações de GR linearizadas não é possível determinar se u_i se afasta ou se aproxima do ponto fixo. Geralmente as variáveis de escala são relevantes ou irrelevantes, sendo raros os casos de variáveis marginais; o número de variáveis de escala relevantes corresponde ao número de parâmetros experimentais, tais como a temperatura T e o campo h , num sistema magnético.

2.8.3 Hipótese de escala

Mediante o processo de renormalização é possível verificar que a energia livre por partícula em função dos acoplamentos originais \vec{K} , está relacionada com

aquela em função dos acoplamentos renormalizados \vec{K}' segundo,

$$f(\{\vec{K}\}) = F(\{\vec{K}\}) + b^{-d} f_s(\{\vec{K}'\}) , \quad (2.85)$$

onde a função F é analítica e não é relevante na determinação dos expoentes críticos, uma vez que não apresenta divergências. Por outro lado, a função f_s é a parte singular e satisfaz a relação de escala,

$$f_s(\{\vec{K}\}) = b^{-d} f_s(\{\vec{K}'\}) . \quad (2.86)$$

Esta é a relação de escala mais básica para a energia livre, e a partir dela é possível derivar as relações de escala entre os expoentes críticos. Para mostrar isso, vamos considerar o caso do modelo de Ising na presença de um campo externo h . As variáveis relevantes, tais como a variável de escala térmica u_t e a magnética u_h serão transformadas segundo as equações de GR de acordo com,

$$u'_t = b^{y_t} u_t, \quad u'_h = b^{y_h} u_h , \quad (2.87)$$

onde y_t e y_h são os autovalores relevantes da transformação de GR. Supondo que a função f_s é homogênea em suas variáveis relevantes [1], então

$$f_s(u_t, u_h) = b^{-d} f_s(u'_t, u'_h) = b^{-d} f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h) . \quad (2.88)$$

Após efetuar n iterações de GR, a energia livre resulta em,

$$f_s(u_t, u_h) = b^{-nd} f_s(b^{ny_t} u_t, b^{ny_h} u_h) . \quad (2.89)$$

Devemos lembrar que estamos considerando variáveis de escala relevantes, as quais se afastam do ponto crítico através de renormalização; portanto vamos escolher um número n suficientemente pequeno para manter a aproximação linear. Para determinar n , consideraremos uma única variável de escala, ou seja u_t ; seja u_{t_0} um valor arbitrário de u_t obtido após n iterações, tal que u_{t_0} esteja suficientemente próximo do ponto fixo para manter a aproximação linear. Então,

$$u_{t_0} = b^{ny_t} u_t , \quad (2.90)$$

ou

$$n = \frac{1}{y_t} \log_b \left| \frac{u_{t_0}}{u_t} \right| = \log_b \left| \frac{u_{t_0}}{u_t} \right|^{1/y_t} , \quad (2.91)$$

o que nos leva a,

$$f_s(u_t, u_h) = \left| \frac{u_t}{u_{t_0}} \right|^{d/y_t} f_s \left(\pm u_{t_0}, u_h \left| \frac{u_t}{u_{t_0}} \right|^{-y_h/y_t} \right) . \quad (2.92)$$

Sabemos que f_s depende das variáveis físicas t e h ; na teoria linearizada as variáveis u_t e u_h estarão relacionadas linearmente às variáveis físicas,

$$\frac{u_t}{u_{t_0}} = \frac{t}{t_0}; \quad u_h = \frac{h}{h_0} , \quad (2.93)$$

onde t_0 e h_0 são constantes de proporcionalidade não universais, e podemos notar que $u_t \rightarrow 0$ quando $t \rightarrow 0$, o mesmo acontecendo com u_h . Logo,

$$f_s(t, h) = \left| \frac{t}{t_0} \right|^{d/y_t} f_s \left(\pm u_{t_0}, \frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right) . \quad (2.94)$$

O lado esquerdo desta equação não depende da constante u_{t_0} , e consequentemente, o mesmo deve acontecer com o lado direito; isto significa que a função do lado direito só depende de um único argumento. Por isso, a energia livre pode ser reescrita,

$$f_s(t, h) = \left| \frac{t}{t_0} \right|^{d/y_t} \Phi \left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right), \quad (2.95)$$

onde a função Φ é denominada de função de escala. Note que a dependência nas variáveis t_0 e h_0 é trivial, uma vez que elas só aparecem como fatores de escala em t e h . A relação de escala (2.95) é universal, uma vez que é válida para todos os sistemas dentro da mesma classe de universalidade. É importante ressaltar que a relação (2.95) depende apenas de y_t e y_h ; isto sugere que devem existir só dois expoentes críticos independentes dentre os seis, α , β , γ , δ , ν , e η , ou seja, devem existir quatro relações envolvendo estes expoentes críticos. Para obter estas relações, utilizaremos a relação de escala (2.95) para obter o comportamento singular de funções termodinâmicas tais como descritas abaixo.

Calor específico:

$$C_v \sim \frac{\partial^2 f_s}{\partial t^2} \Big|_{h=0} \sim |t|^{d/y_t-2}, \quad (2.96)$$

e utilizando,

$$C_v \sim |t|^{-\alpha}, \quad (2.97)$$

então,

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t}. \quad (2.98)$$

Magnetização:

$$m \sim \frac{\partial f_s}{\partial h} \Big|_{h=0} \sim |t|^{(d-y_h)/y_t} , \quad (2.99)$$

e sabendo que,

$$m \sim |t|^\beta , \quad (2.100)$$

então,

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} . \quad (2.101)$$

Suscetibilidade magnética:

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} \sim \frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2} \sim |t|^{(d-2y_h)/y_t} , \quad (2.102)$$

e sabendo que

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} , \quad (2.103)$$

então,

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} . \quad (2.104)$$

Magnetização versus campo magnético em $T = T_c$:

$$m \sim \frac{\partial f_s}{\partial h} = |t/t_0|^{(d-y_h)/y_t} \Phi' \left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right) . \quad (2.105)$$

O fato de que m deve permanecer finito quando $t \rightarrow 0$, significa que $\Phi'(x)$ tem que se comportar como $x^{(d/y_h)-1}$ quando $x \rightarrow \infty$, uma vez que

$$m \sim |t/t_0|^{(d-y_h)/y_t} \frac{(h/h_0)^{(d-y_h)/y_t}}{|t/t_0|^{y_h(d-y_h)/(y_h y_t)}} \sim (h/h_0)^{(d-y_h)/y_t} , \quad (2.106)$$

e utilizando

$$m \sim h^{1/\delta} , \quad (2.107)$$

tem-se

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} . \quad (2.108)$$

A partir destas relações é fácil demonstrar que os quatro expoentes acima obedecem a

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 , \quad (2.109)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2 . \quad (2.110)$$

As outras relações de escala envolvendo η e ν são obtidas a partir do comportamento de escala da função de correlação $G(r)$,

$$G(r) = b^{-2(d-y_h)} G(r/b, b^{y_t} t) , \quad (2.111)$$

$$G(r) = |t/t_0|^{2(d-y_h)/y_t} \Psi\left(\frac{r}{|t/t_0|^{-1/y_t}}\right) . \quad (2.112)$$

Isto leva a,

$$\nu = \frac{1}{y_t} , \quad (2.113)$$

$$\eta = d + 2 - 2y_h , \quad (2.114)$$

e, conseqüentemente às relações de escala,

$$\alpha = 2 - d\nu , \quad (2.115)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) . \quad (2.116)$$

Então, como consequência da hipótese de escala, verificamos que as desigualdades (2.32)-(2.36) são satisfeitas como igualdades.

2.9 Vidros de spins

Um material do tipo vidro de spins [4, 5, 6, 7] pode ser entendido como um conjunto de spins, ou momentos magnéticos, cujo estado a baixas temperaturas é congelado de maneira desordenada, com os spins apontando em direções aleatórias, ao invés de obedecer uma periodicidade, como costuma-se observar em magnetos convencionais. Em geral, para produzir tal estado, dois ingredientes são necessários: i) a desordem, produzindo uma aleatoriedade nas interações; ii) a competição entre as interações dos momentos magnéticos, de maneira a não existir uma única configuração de spins com uma menor energia (efeito este denominado de “frustração”). Os materiais considerados como vidros de spins “clássicos”, são constituídos por metais nobres não magnéticos, como por exemplo, Au, Ag, Cu, Pt ligeiramente diluídos por íons de metais de transição magnéticos, tais como Fe e Mn. Estes íons interagem por intermédio dos elétrons de condução na rede do metal hospedeiro, os quais produzem uma interação de troca indireta que oscila com a distância R_{ij} entre dois íons i, j , de acordo com (ver figura 2.11),

$$J_{ij}(R_{ij}) = J_0 \frac{\cos(2K_F R_{ij} + \phi_0)}{(K_F R_{ij})^3}, \quad (R_{ij} \rightarrow \infty), \quad (2.117)$$

onde J_0 e ϕ_0 são constantes, enquanto que K_F representa o vetor de onda de Fermi do metal hospedeiro. Esta característica oscilatória foi primeiro estu-

dada no contexto do magnetismo nuclear por Ruderman e Kittel (1954) [38], aplicada ao presente contexto em trabalhos posteriores por Kasuya (1956) [39] e Yoshida (1957) [40]; por isso, esta interação é conhecida como “interação RKKY”.

Pelo fato das distâncias entre os spins do metal de transição serem aleatórias, algumas interações são positivas, favorecendo um alinhamento paralelo, enquanto que outras serão negativas, favorecendo um alinhamento antiparalelo. No limite onde a liga metálica é diluída significativamente, $J_{ij}(R_{ij})$ assume valores positivos e negativos com igual probabilidade, $J_{ij}(R_{ij}) \sim \pm J'_0/(K_F R_{ij})^3$. Por conseguinte, não existe um único alinhamento de spins que seja satisfeito por todas as ligações de troca, produzindo assim, o efeito da frustração.

Além dos vidros com interações de tipo RKKY, outra classe é sugerida por ligas do tipo $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ [41]. No limite de altas concentrações de Eu, tem se verificado um ferromagneto com acoplamentos positivos a primeiros vizinhos, e negativos para segundos vizinhos. Mediante a técnica de espalhamento de nêutrons, tem se determinado que a baixas temperaturas as interações de longo alcance são desprezíveis. O Sr é não magnético e então a substituição do Sr pelo Eu dilui este último. O hamiltoniano pode ser escrito da forma

$$H = - \sum_{(ij)} J_{ij} c_i c_j S_i S_j, \quad (S_i = \pm 1), \quad (2.118)$$

onde c_i assume os valores 1 ou 0 com probabilidade x e $(1-x)$ respectivamente,

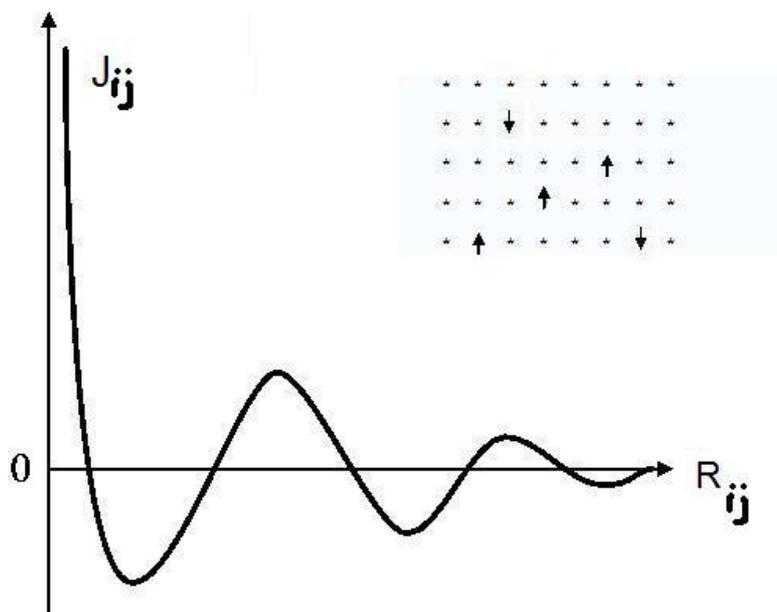


Figura 2.11: Diagrama esquemático dos momentos magnéticos diluídos aleatoriamente numa rede não magnética. A interação RKKY entre tais momentos é desenhada em função da distância de separação.

e a soma $\sum_{(ij)}$ aplica-se a pares distintos de spins. Para se ajustar o hamiltoniano acima com medidas de espalhamento de nêutrons, deve-se tomar $J_{ij} = 0.22K/k_B$ se o par (ij) é de primeiros vizinhos, $J_{ij} = -0.10K/k_B$ para segundos vizinhos, e $J_{ij} = 0$ para terceiros (e demais) vizinhos. De maneira análoga ao modelo de vidro de spins com interações RKKY, este modelo apresenta aleatoriedade e competição entre interações. Devido ao fato do comportamento de vidro de spins ser observado em uma ampla variedade de sistemas cujas interações não são da forma oscilatória RKKY, costuma-se simplificar o modelo visando um tratamento teórico mais simples; um modelo importante foi introduzido por Edwards e Anderson (EA) em 1975 [23] num artigo que deu início ao estudo teórico dos vidros de spins. Eles consideraram uma rede regular de spins (com invariância translacional) e trataram

as interações aleatórias entre pares de spins primeiros vizinhos apenas, ao invés de uma diluição de sítios, tal como se apresenta, por exemplo, no Mn diluído em Cu. Logo, o hamiltoniano que EA propuseram foi

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j , \quad (2.119)$$

onde \vec{S}_i representa uma variável de spin vetorial (por exemplo, um spin de Heisenberg), os J_{ij} são variáveis aleatórias independentes obedecendo uma certa distribuição $P(J_{ij})$ e a soma $\sum_{\langle ij \rangle}$ representa uma soma sobre todos os pares de spins primeiros vizinhos de uma rede regular. Cabe ressaltar, que baseados na fenomenologia experimental [4, 6], não deveria existir uma diferença significativa entre sítios aleatórios e acoplamentos aleatórios, se em ambos casos as interações forem atenuadas com a distância de maneira análoga, e tivermos a mesma natureza vetorial de variável de spin. Por isso, é possível imitar o modelo RKKY, para a qual a variância $\langle J_{ij}^2 \rangle \sim R_{ij}^{-6}$ com o modelo EA, assim como também espera-se que um modelo do tipo EA seja uma boa representação para o composto $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$.

2.10 Mecânica estatística dos vidros de spins

Os modelos da Física Estatística para os vidros de spins são definidos como sistemas de N spins localizados em sítios de uma rede regular com dimensão D , interagindo mediante acoplamentos J_{ij} aleatórios, em contato com um reservatório térmico à temperatura T . Esta aleatoriedade introduz problemas teóricos no âmbito das formulações da Física Estatística de equilíbrio, como

por exemplo, na determinação de uma configuração concreta de $\{J_{ij}\}$ e de $\{S_i\}$, a qual minimize a energia para baixas temperaturas. Em muitos casos, costuma-se definir um conjunto de hamiltonianos, cada um constituindo uma amostra particular do sistema físico, a qual é denominada como réplica e então efetuar uma média sobre as réplicas.

Em sistemas macroscópicos (limite onde o número de partículas, $N \rightarrow \infty$), as médias estatísticas podem ajudar a resolver o problema, porque as flutuações da energia ao redor do seu valor médio são da ordem de $1/\sqrt{N}$, o que implica que devem ser desprezíveis no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Por isso, seria conveniente que as flutuações da energia também sejam nulas quando calculamos médias sobre diferentes réplicas no limite $N \rightarrow \infty$. Se esse for o caso, costuma-se dizer que a energia (ou quaisquer outra grandeza extensiva) é auto-mediada; sistemas com esta propriedade são chamados de auto-mediados (“self averaging”).

Na Física Estatística de sistemas desordenados, podemos distinguir dois tipos de médias; a primeira é a média térmica usual, a qual é realizada sobre cada amostra macroscópica do sistema, e a segunda é a média sobre a distribuição de parâmetros aleatórios (desordem), que caracterizam o sistema. No caso dos vidros de spin, estes parâmetros aleatórios são as interações $\{J_{ij}\}$. Esta última média é normalmente denotada por $[\]_J$, e pode dar-se de duas maneiras diferentes, dependendo da natureza da interação de troca. Se as $\{J_{ij}\}$ flutuam em um tempo menor do que o tempo de observação, então estas alcançam o equilíbrio ao mesmo tempo que os spins, e podem

ser tratadas como variáveis aleatórias de uma forma análoga aos spins, de maneira que a média $[\]_J$ é efetuada sobre a função de partição,

$$[Z_{\{J_{ij}\}}]_J = \int Z_{\{J_{ij}\}} dJ_{ij} , \quad (2.120)$$

enquanto que a energia livre é dada por,

$$F = -k_B T \log([Z_{\{J_{ij}\}}]_J) \quad (2.121)$$

onde $Z_{\{J_{ij}\}}$, denota a função de partição para o conjunto $\{J_{ij}\}$. Este procedimento é chamado de média recozida (“annealed average”), o qual considera a média da função de partição sobre a distribuição de parâmetros aleatórios; pode ser aplicada a situações nas quais espécies de átomos magnéticos e não magnéticos se difundem através de uma rede cristalina. Na prática, os tempos de difusão atômica são longos a baixas temperaturas, para os compostos mencionados na seção anterior, onde os ordenamentos de vidros de spins ocorrem em sistemas reais; portanto, considerar a média $[\]_J$ sobre a função de partição não seria adequado nestes casos. Aliás, modelos tais como o modelo de Ising em redes regulares com ligações de sinais aleatórios na sua versão “recozida” não apresentam propriedades de interesse no estudo dos vidros de spins [42]. Neste modelo em particular, é evidenciado que a magnetização espontânea que aparece a partir de uma temperatura crítica T_1 , desaparece outra vez em uma temperatura crítica T_2 menor; também, na fase desordenada a baixas temperaturas são desenvolvidas correlações de longo alcance entre os sinais das ligações.

Para reforçar o conceito, devemos enfatizar que nos vidros de spins os $\{J_{ij}\}$ são considerados fixos para cada amostra macroscópica do sistema. Os spins podem variar em resposta a estas interações, mas não acontece o contrário, e se for o caso, o tempo de espera para tal observação é muito longo. Por conseguinte, se os $\{J_{ij}\}$ variam em um tempo muito maior do que o tempo de observação, uma questão importante diz respeito às quantidades sobre as quais devem ser calculadas as médias. Geralmente, devem-se calcular médias sobre variáveis extensivas se o sistema é auto-mediado; grandezas auto-automediadas estão de acordo com os resultados experimentais, uma vez que variações entre amostras, onde as variáveis aleatórias têm iguais propriedades estatísticas, não têm sido observadas.

Para verificar que considerar a média $[\]_J$ sobre a função de partição não é apropriado em sistemas auto-mediados, podemos argumentar que em um sistema com número de partículas finito N , a distribuição da densidade de uma dada variável extensiva é gaussiana com desvio da ordem $1/\sqrt{N}$; então para a densidade de energia livre f temos,

$$p(f) = \sqrt{\frac{N}{2\pi(\Delta f)^2}} \exp \left[-\frac{N(f - f_0)^2}{2(\Delta f)^2} \right], \quad (2.122)$$

onde f_0 , é a média da densidade de energia livre e $\Delta f \sim 1/\sqrt{N}$. A função de partição no ensemble canônico é $Z = \exp(-N\beta f)$, e o valor médio sobre a distribuição $p(f)$ é

$$\langle Z \rangle_f = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[-N\beta f] p(f) df = \exp \left[-N\beta \left(f_0 - \frac{1}{2}\beta(\Delta f)^2 \right) \right]. \quad (2.123)$$

Então, a média recozida da densidade de energia livre é dada por,

$$f_{\text{rec}} = -\frac{k_B T}{N} \log[\langle Z \rangle_f] = f_0 - \frac{1}{2} \beta (\Delta f)^2 . \quad (2.124)$$

$$(2.125)$$

Notamos que $f_{\text{rec}} \neq f_0$, e pode-se verificar que o resultado correto para o problema acima é obtido ao calcular a média da energia livre e não da função de partição. Para o caso dos vidros de spins considera-se a média

$$[f]_J = -k_B T [\log(Z_{\{J_{ij}\}})]_J , \quad (2.126)$$

a qual é denominada de média temperada (“quenched average”).

Outro problema que os vidros de spin parecem apresentar é a quebra de ergodicidade; eles aparentam ser não ergódicos pela existência de um grande número de estados fundamentais degenerados que não estão relacionados uns com outros por uma simetria simples. Portanto, existem muitos estados que podem minimizar a energia livre, e quando um sistema encontra-se em um destes estados, aquele exibirá propriedades que são específicas ao mesmo. Se considerarmos esta quebra de ergodicidade como essencialmente dinâmica, a definição natural do parâmetro de ordem deve corresponder àquela proposta por EA,

$$q_{EA} = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} [\langle S_i(t_0) S_i(t_0 + t) \rangle]_{\text{med}} , \quad (2.127)$$

onde a média se aplica sobre um grande número de tempos de referência

t_0 . A média seria zero para um sistema ergódico, e diferente de zero se o mesmo estiver preso a uma única fase. Deve-se tomar $N \rightarrow \infty$ antes do limite $t \rightarrow \infty$, uma vez que para um sistema finito a correlação desaparece se o verdadeiro equilíbrio é alcançado. Como um sistema de tamanho infinito não pode sair de um mínimo da energia livre, o parâmetro q_{EA} mede o valor médio quadrático das magnetizações locais mediada sobre todos os mínimos. Então, em termos da média térmica,

$$q_{EA} = \left[\sum_a P_a (m_{i,a})^2 \right]_{\text{med}} , \quad (2.128)$$

onde a é um índice associado a um mínimo, e m_i representa a magnetização do sítio i no mínimo a e

$$P_a = \frac{e^{-\beta F_a}}{\sum_a e^{-\beta F_a}} . \quad (2.129)$$

Assumindo auto-mediação, podemos escrever,

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_a P_a \sum_i (m_{i,a})^2 . \quad (2.130)$$

2.11 O modelo Sherrington-Kirkpatrick

Um modelo de spins foi introduzido por Sherrington e Kirkpatrick (SK) em 1975 [24], o qual consiste em uma versão do modelo EA onde todos os spins interagem entre si, representando então um modelo onde a abordagem de campo médio é exata. O hamiltoniano considerado neste modelo é dado por,

$$H = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i , \quad (2.131)$$

onde $S_i = \pm 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$), h representa um campo externo constante, e as interações são de alcance infinito, isto é, $\sum_{(ij)}$ se aplica a todos os pares distintos de spins. Os acoplamentos $\{J_{ij}\}$ são variáveis temperadas, as quais obedecem distribuições de probabilidade independentes dadas por,

$$P(J_{ij}) = \left(\frac{N}{2\pi J^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 \right]. \quad (2.132)$$

Para cada realização de acoplamentos $\{J_{ij}\}$ existe uma energia livre correspondente $F(\{J_{ij}\})$, de maneira que a média sobre a desordem $[\dots]_J$, pode ser efetuada em termos de integrais independentes,

$$[F(\{J_{ij}\})]_J = \int \prod_{(ij)} dJ_{ij} P(J_{ij}) F(\{J_{ij}\}). \quad (2.133)$$

O procedimento para obter a energia livre por spin consiste em aplicar o método das réplicas,

$$\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} [\log Z(\{J_{ij}\})]_J = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} ([Z^n]_J - 1), \quad (2.134)$$

onde Z^n é a função de partição das n réplicas do sistema. Cálculos padrões utilizando a transformação de Hubbard-Stratonovich [30] e o método do ponto de sela, levam a [4, 5, 6, 7]

$$\beta f = -\frac{(\beta J)^2}{4} + \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \min g(m_\alpha, q_{\alpha\beta}), \quad (2.135)$$

onde

$$g(m_\alpha, q_{\alpha\beta}) = \frac{\beta J_0}{2} \sum_{\alpha} (m_\alpha)^2 + \frac{(\beta J)^2}{2} \sum_{(\alpha,\beta)} (q_{\alpha\beta})^2 - \log Tr_{\alpha} \exp(H_{\text{eff}}) , \quad (2.136)$$

$$H_{\text{eff}} = \beta J_0 \sum_{\alpha} m_\alpha S^\alpha + (\beta J)^2 \sum_{(\alpha,\beta)} q_{\alpha\beta} S^\alpha S^\beta + \beta h \sum_{\alpha} S^\alpha . \quad (2.137)$$

Nas equações acima, os índices α e β ($\alpha, \beta = 1, 2, \dots, n$) representam réplicas e a soma $\sum_{(\alpha,\beta)}$ denota uma soma sobre pares de réplicas distintos.

A extremização da função $g(m_\alpha, q_{\alpha\beta})$ leva às equações de equilíbrio para a magnetização e o parâmetro de ordem de vidro de spins, respectivamente,

$$m_\alpha = \langle S^\alpha \rangle , \quad (2.138)$$

$$q_{\alpha\beta} = \langle S^\alpha S^\beta \rangle , \quad (2.139)$$

onde $\langle \dots \rangle$ se refere a média térmica com respeito ao hamiltoniano efetivo H_{eff} .

Ao considerar a hipótese de simetria entre réplicas,

$$m_\alpha = m \quad (\forall \alpha) , \quad (2.140)$$

$$q_{\alpha\beta} = q \quad (\forall (\alpha\beta)) , \quad (2.141)$$

a energia livre por spin e as condições de equilíbrio resultam em,

$$\beta f = -\frac{(\beta J)^2}{4} (1 - q)^2 + \frac{\beta J_0}{2} m^2 - \int Dz \log(2 \cosh \xi) , \quad (2.142)$$

$$m = \int Dz \tanh \xi , \quad (2.143)$$

$$q = \int Dz \tanh^2 \xi , \quad (2.144)$$

onde,

$$\int Dz \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} dz \exp(-z^2/2) \dots , \quad (2.145)$$

$$\xi = \beta J_0 m + \beta J q^{1/2} z + \beta h . \quad (2.146)$$

Mediante as equações de equilíbrio (2.143) e (2.144) é possível obter o diagrama de fases mostrado na figura 2.12, para $h = 0$, com as fases,

Paramagnética (P) : $m = q = 0$,

Ferromagnética (F) : $m \neq 0$; $q \neq 0$,

Vidro de spins (VS): $m = 0$; $q \neq 0$.

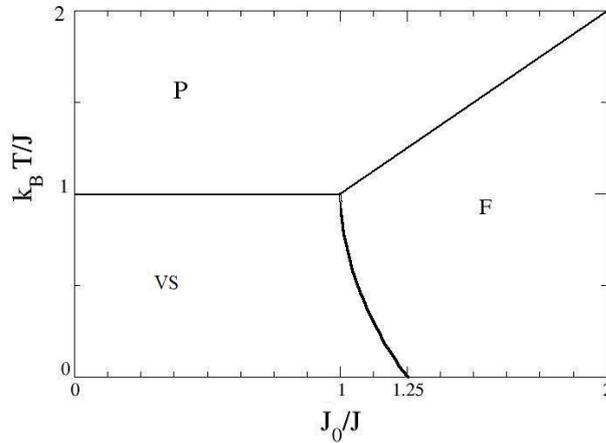


Figura 2.12: Diagrama de fases do modelo SK assumindo a hipótese de simetria entre réplicas e $h = 0$, onde são mostradas três regiões que compreendem três fases distintas, a fase vidro de spins (VS), a fase ferromagnética (F), e a paramagnética (P).

2.11.1 Análise da estabilidade da solução em simetria entre réplicas

Na solução de Sherrington e Kirkpatrick a entropia por spin, $s = \partial f / \partial T$, é igual $k_B[\log 2 - J^2 / (2k_B T)^2]$ na fase P, enquanto que na fase VS e no limite $T \rightarrow 0$, tende a um valor negativo, $-k_B / (2\pi)$. Este comportamento não físico foi interpretado como um efeito inesperado a baixas temperaturas, devido provavelmente à troca dos limites $N \rightarrow \infty$, e $n \rightarrow 0$, nas etapas da obtenção da energia livre. No entanto, no trabalho original de SK não foi analisado se a função $g(m_\alpha, q_{\alpha\beta})$ é minimizada para todo valor de T , dentro da hipótese de simetria entre réplicas ($m_\alpha = m, q_{\alpha\beta} = q$), de tal maneira que o método do ponto de sela seja aplicado. Almeida e Thouless (AT) [25] analisaram a estabilidade da função $g(m_\alpha, q_{\alpha\beta})$, quando se produz pequenas flutuações ao redor de m, q , de maneira que

$$g(m + \epsilon_\alpha, q + \eta_{\alpha\beta}) = g(m, q) + \frac{1}{2} \vec{\mu}^t \cdot \mathbf{G} \cdot \vec{\mu}, \quad (2.147)$$

onde,

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial m_\alpha \partial m_\beta} |_{m,q} & \frac{\partial^2 g}{\partial m_\alpha \partial q_{\beta\gamma}} |_{m,q} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\gamma} |_{m,q} & \frac{\partial^2 g}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\gamma\delta}} |_{m,q} \end{pmatrix} \quad (2.148)$$

é uma matriz de ordem $\frac{1}{2}n(n+1) \times \frac{1}{2}n(n+1)$, a qual deve ser positivo definida para que $g(m, q)$ seja um mínimo em m, q , e

$$\vec{\mu} = \begin{pmatrix} \epsilon_\alpha \\ \eta_{\alpha\beta} \end{pmatrix} \quad (2.149)$$

é o vetor deslocamento, com ϵ_α e $\eta_{\alpha\beta}$ pequenos. Para resolver o problema tem que se analisar se todos os autovalores λ de $\mathbf{G} \cdot \vec{\mu} = \lambda \vec{\mu}$ são positivos quando $n \rightarrow 0$; caso contrário, deve-se determinar a região na qual a condição de estabilidade é satisfeita. Dos autovalores encontrados, todos são positivos, salvo um que para ser positivo deve satisfazer a,

$$\left(\frac{k_B T}{J}\right)^2 > \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \operatorname{sech}^4[\beta(Jqz + J_0m)] . \quad (2.150)$$

Esta desigualdade é satisfeita na região paramagnética, onde $k_B T > J$, e em parte da fase ferromagnética mas não na fase vidro de spins. A região de estabilidade pode ser obtida numericamente; o resultado pode ser observado na figura 2.13, onde as linhas mais finas mostram a fronteira de estabilidade para a solução com simetria entre réplicas.

Abaixo destas linhas a solução é instável, ou seja, a hipótese $m_\alpha = m$, $q_{\alpha\beta} = q$ só é satisfeita na fase paramagnética e parcialmente na fase ferromagnética.

Quando $J_0 = 0$ e $h \neq 0$ a região de estabilidade é dada por,

$$\left(\frac{k_B T}{J}\right)^2 > \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int dz e^{-\frac{1}{2}z^2} \operatorname{sech}^4[\beta(Jqz + h)] , \quad (2.151)$$

e a fronteira que define esta relação pode ser visualizada na figura 2.14, a qual é denominada normalmente por “linha de Almeida-Thouless”.

Por conseguinte, a análise feita por AT mostra que a origem do erro no resultado não físico em baixas temperaturas da solução de Sherrington e

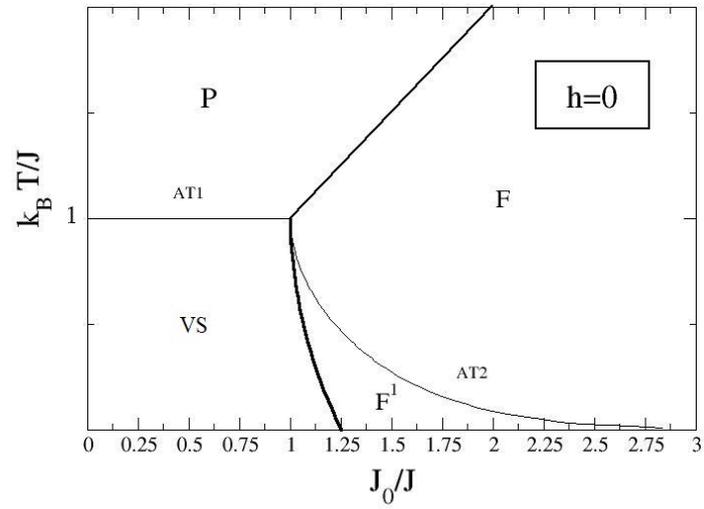


Figura 2.13: Diagrama de fases do modelo SK, onde abaixo das linhas fracas (AT1, AT2) existe uma região de instabilidade, ou seja, existe uma quebra de simetria de réplicas em toda a região vidro de spins (VS) e na fase ferromagnética mixta (F').

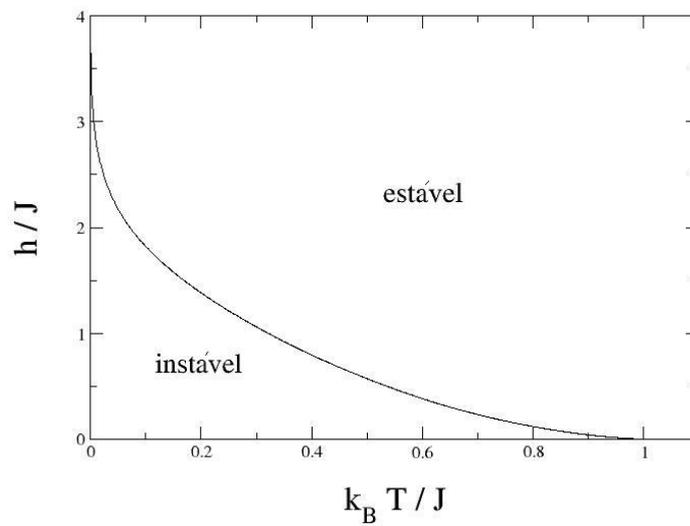


Figura 2.14: Linha de Almeida-Thouless, no plano h/J versus $k_B T/J$.

Kirkpatrick não está na inversão da ordem dos limites associados a N e n , mas em considerar a hipótese de simetria entre réplicas. Isto motivou a procura de uma solução mais complexa onde exista uma quebra de simetria no espaço das réplicas. Este problema foi resolvido por Parisi [26] ao considerar que nenhum ansatz contendo um número finito de parâmetros de ordem $q_{\alpha\beta}$ poderia prover uma solução estável no limite $n \rightarrow 0$; logo, no esquema de Parisi uma seqüência infinita de procedimentos de quebra de simetria entre réplicas aproximaria a solução correta. Desta maneira, Parisi mostra que a solução estável do modelo SK é formulada em termos de uma função contínua, a qual é obtida como um limite desta seqüência infinita.

2.11.2 Física da quebra de simetria entre réplicas

Analisamos inicialmente um sistema ferromagnético simples. Se o sistema for esfriado a uma temperatura abaixo de sua temperatura crítica T_c , uma quebra espontânea de simetria acontece, de maneira que em cada sítio surge uma magnetização diferente de zero $\langle S_i \rangle$. Contudo, para qualquer sistema finito a média térmica sobre todas $\langle S_i \rangle$ é zero, uma vez que devido à simetria do hamiltoniano com respeito a uma inversão global dos sinais de todos os spins, os estados com magnetizações opostas têm peso igual na função de partição. No entanto, no limite termodinâmico estes estados estão separados por uma barreira infinita de energia, logo, quando o sistema se encontra em um destes estados, será impossível saltar para o outro estado em um tempo finito. Neste sentido, o estado não é um estado observável de Gibbs, o qual seria obtido pela soma de todos os microestados na função de partição, mas

um dos “estados puros” com magnetização diferente de zero [7].

A solução obtida para o modelo SK pela quebra de simetria no espaço das réplicas sugere que no limite termodinâmico, um número muito grande de estados puros pode existir na fase vidro de spins a baixas temperaturas. Por conseguinte, os estados de Gibbs na fase de vidro de spins poderiam ser considerados como o resultado da soma sobre todos os estados puros pesados segundo as energias respectivas. Por exemplo, a média termodinâmica da magnetização por sítio poderia ser representada como

$$\langle S_i \rangle = m_i = \sum_{\alpha} w_{\alpha} m_i^{\alpha} , \quad (2.152)$$

onde α denota o estado puro e w_{α} seu peso estatístico, o qual é dado por

$$w_{\alpha} = e^{-\beta F_{\alpha}} , \quad (2.153)$$

onde F_{α} é a energia livre do estado puro α . A superposição entre dois estados puros é definida como,

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i m_i^{\alpha} m_i^{\beta} , \quad (2.154)$$

com $0 \leq |q_{\alpha\beta}| \leq 1$.

Visando uma descrição estatística da superposição de todos os pares de estados puros é conveniente introduzir uma função distribuição de probabilidades,

$$P_J(q) = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha} w_{\beta} \delta(q_{\alpha\beta} - q) . \quad (2.155)$$

Note que a função $P_J(q)$ pode depender de uma realização concreta de interações temperadas $\{J_{ij}\}$, e então, a distribuição de probabilidades mediada sobre a desordem é dada por,

$$P(q) = [P_J(q)]_J . \quad (2.156)$$

$P(q)$ representa a probabilidade de encontrar dois estados puros com superposição q , sendo esta função considerada como o parâmetro de ordem físico. Logo, é em termos de $P(q)$ que a natureza não trivial dos vidros de spins poderiam ser entendidos.

No esquema de Parisi o estado vidro de spins é representado mediante a função $P(q)$ na figura 2.15(a). No entanto, para sistemas em dimensões finitas, com as interações de curto alcance, algumas simulações de Monte Carlo sugerem um esquema diferente, o qual favorece à proposta de Fisher e Huse [28], chamada de modelo de gotas (“droplet model”). Eles propuseram que a baixas temperaturas, em dimensões finitas, só existiria um estado de energia mínima, relacionado a um outro por uma simetria de inversão global dos spins do hamiltoniano, como acontece na fase ferromagnética a baixas temperaturas. Neste esquema, o estado vidro de spins é representado mediante a função $P(q)$ na figura 2.15(b). Também, segundo o modelo de gotas, não haveria linha de Almeida-Thouless em dimensões finitas. Existe no momento, uma grande polêmica sobre a validade destas duas representações. No capítulo III, em redes hierárquicas de baixas dimensões verificamos que existe uma linha que poderia ser identificada com a linha de Almeida-Thouless.

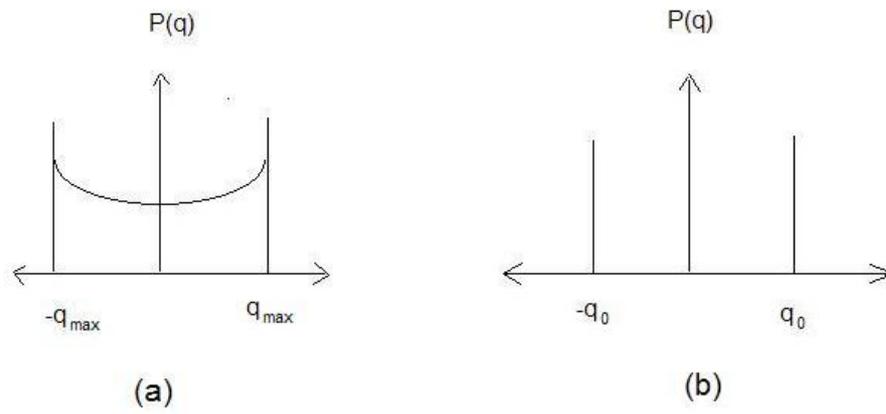


Figura 2.15: Função de distribuição $P(q)$: (a) no esquema do Parisi; (b) no modelo de gotas.

Capítulo 3

Vidros de spins em redes hierárquicas sob ação de um campo magnético externo

3.1 Redes hierárquicas

A fim de obter resultados que possam representar qualitativamente o comportamento crítico de redes convencionais, tais como as redes de Bravais, surgiu a idéia de trabalhar em redes cujas equações de renormalização levem a resultados exatos. Isto ocorreu no final da década dos 70, e concentrou uma grande atenção na década dos 80. Tais redes são as redes hierárquicas (RH); um exemplo de geração de uma rede hierárquica é mostrado na figura 3.1. A célula básica desta rede apresenta a forma de um diamante; a rede é gerada de maneira iterativa de tal forma que na hierarquia 0 inicia-se o processo com uma ligação (figura 3.1(a)), e em cada etapa, uma ligação é

substituída pela célula básica. Neste caso particular, quatro ligações são reunidas para formar uma célula básica, a qual representa a hierarquia de ordem 1. A seguir, cada ligação da hierarquia 1 é substituída por uma célula básica, formando a hierarquia de ordem 2 (figura 3.1(c)). Este processo é repetido N vezes para gerar a rede na hierarquia de ordem N . Outras receitas de geração de redes hierárquicas são mostradas na figura 3.2. Ao contrário das redes de Bravais, as RH não possuem simetria translacional, no entanto, apresentam invariância de escala e auto-similaridade [43], ou seja, cada parte da rede é uma imagem reduzida do todo. Para uma RH como as da figura 3.2, o número de agregação B , é definido como o número de ligações que formam uma célula básica. Conseqüentemente, B assume os valores 4,5 e 3, nas figuras 3.2(a), 3.2(b) e 3.2(c), respectivamente.

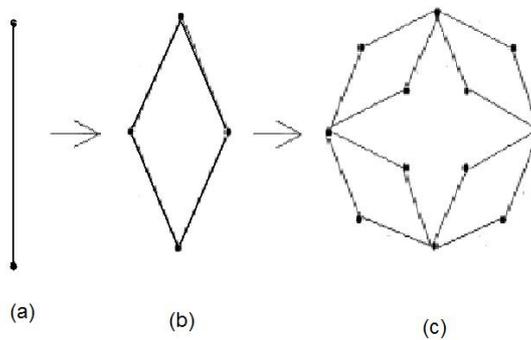


Figura 3.1: Etapas da construção de uma rede hierárquica, em suas hierarquias 0, 1 e 2, respectivamente.

Desde o início do estudo das RH surgiu a polêmica de como definir o comprimento de correlação, enquanto que o número B foi associado a b^d na linguagem do grupo de renormalização, onde b e d_f são o fator de escala, e a

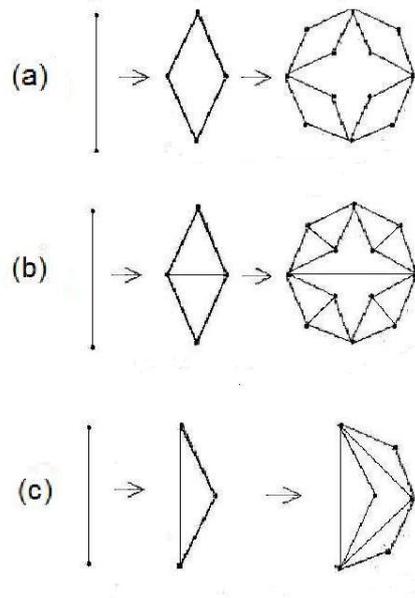


Figura 3.2: Algumas receitas de construção de redes hierárquicas.

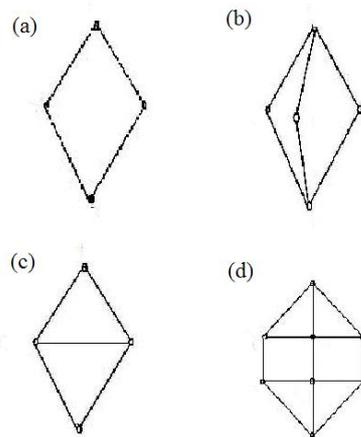


Figura 3.3: Células básicas (hierarquia 1) de redes hierárquicas com dimensões fractais a) $d_f \approx 2$, b) $d_f \approx 2.585$, c) $d_f \approx 2.322$, d) $d_f \approx 2.334$.

dimensão fractal da rede, respectivamente. A princípio, sendo b conhecido, não existiria ambigüidade ao definir os expoentes críticos termodinâmicos, mediante os autovalores do ponto fixo. No entanto, o expoente relacionado ao comprimento de correlação não é bem definido, a menos que b , e consequentemente também d_f , tivessem um significado concreto. Por esta última dificuldade, B é considerado de maior relevância para alguns autores, tais como Kauffman e Griffiths [44]. Desta maneira, a dimensão fractal d_f de uma RH, se define convencionalmente de acordo com,

$$d_f = \frac{\log(B)}{\log(b)}, \quad (3.1)$$

onde b é o número de ligações em um caminho mínimo entre os sítios terminais de uma dada célula elementar, e B é o número total de ligações contidas na mesma. As figuras 3.3(a), (b), (c), (d) mostram quatro células cujas dimensões são (conforme a definição anterior), $d_f = \log(4)/\log(2) = 2$, $d_f = \log(6)/\log(2) \approx 2.585$, $d_f = \log(5)/\log(2) \approx 2.322$ e $d_f = \log(13)/\log(3) \approx 2.334$, respectivamente.

O procedimento de renormalização de uma RH consiste no processo inverso ao de sua geração, ou seja, para os casos das figuras 3.1 a 3.3, cada célula básica será substituída por uma ligação. Para ilustrá-lo vamos considerar a célula “ponte de Wheatstone” da figura 3.4, com os acoplamentos constantes e positivos entre spins de Ising, isto é $K_{ij} = \beta J = K, \forall (i, j)$.

No processo de renormalização deve-se preservar a forma da probabilidade

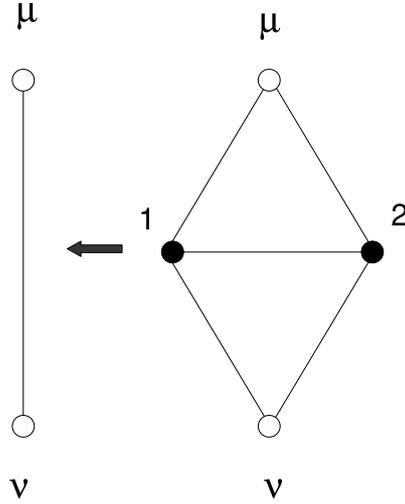


Figura 3.4: Renormalização de uma rede do tipo ponte de Wheatstone.

associada à energia de interação entre os spins nos sítios terminais, S_μ e S_ν , o que implica que o fator de Boltzmann da ligação da hierarquia zero seja igual ao traço sobre os spins interiores do peso de Boltzmann da célula básica. Isto é expressado por,

$$e^{K'S_\mu S_\nu + G} = \sum_{S_1=-1}^1 \sum_{S_2=-1}^1 e^{-\beta H}, \quad (3.2)$$

onde G é uma constante, e $-\beta H$ é o hamiltoniano adimensional da célula elementar,

$$-\beta H = K S_\mu S_1 + K S_\mu S_2 + K S_\nu S_1 + K S_\nu S_2 + K S_1 S_2. \quad (3.3)$$

Por conseguinte, ao efetuar a soma sobre os spins interiores, e tomando o

logaritmo em ambos os lados da equação (3.2), temos

$$K' S_\mu S_\nu + G = \log[2e^K \cosh(2K(S_\mu + S_\nu)) + 2e^{-K}] . \quad (3.4)$$

Um sistema de duas equações independentes resulta a partir das possibilidades, $S_\mu = S_\nu$ e $S_\mu \neq S_\nu$,

$$K' + G = \log[2e^K \cosh(4K) + 2e^{-K}] , \quad (3.5)$$

$$-K' + G = \log[4 \cosh(K)] , \quad (3.6)$$

as quais levam à seguinte relação de recorrência,

$$K' = \frac{1}{2} \log \left[\frac{e^K \cosh(4K) + e^{-K}}{2 \cosh(K)} \right] . \quad (3.7)$$

A equação acima apresenta como ponto fixo não trivial em $K_c = 0.44068679\dots (k_B T_c / J \approx 2.269)$, o qual coincide com o valor exato obtido por Onsager [10] para a temperatura crítica do modelo de Ising na rede quadrada. Também, o expoente térmico vale $y = \log(\frac{dK'}{dK}|_{K_c=0.44068\dots}) / \log(2) \approx 0.87$, e então o expoente crítico associado ao comprimento de correlação resulta em $\nu = 1/y \approx 1.15$, o qual apresenta uma discrepância relativa de 15%, aproximadamente, com relação ao valor exato, da rede quadrada. Embora esta rede sirva como uma boa aproximação para descrever a criticalidade do modelo de Ising ferromagnético na rede quadrada [45], o mesmo não acontece para o caso antiferromagnético, para o qual é necessário o uso de outras redes que preservem a simetria do estado antiferromagnético [46]. Geralmente, não existe um critério para determinar *a priori* uma célula elementar que possa aproximar

adequadamente um modelo em uma dada rede de Bravais.

No que se refere aos vidros de spins, neste capítulo será estudado o modelo EA sob ação de um campo externo em redes dos tipos Migdal-Kadanoff e ponte de Wheatstone em dimensões fractais próximas a três. A motivação é dada pela polêmica que existe no que se refere à existência da linha de Almeida-Thouless em dimensões finitas. No entanto, a fim de estudar o modelo EA sob ação de diferentes tipos de campos externos, introduziremos inicialmente a técnica de GR adequada para o estudo deste problema.

3.2 O procedimento de grupo de renormalização para o modelo de Edwards-Anderson

O modelo EA sob ação de um campo magnético externo é representado pelo seguinte hamiltoniano reduzido,

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{(ij)} K_{ij} S_i S_j + \sum_i H_i S_i, \quad (3.8)$$

onde $S_i = \pm 1$, $K_{ij} = \beta J_{ij}$ e $H_i = \beta h_i$. Neste trabalho consideraremos os acoplamentos $\{J_{ij}\}$ obedecendo uma distribuição de probabilidades gaussianas,

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J} \exp\left(-\frac{(J_{ij} - J_0)^2}{2J^2}\right), \quad (3.9)$$

enquanto que os campos $\{h_i\}$ poderão obedecer distribuições de três tipos,

$$P(h_i) = \delta(h_i - H_0) \text{ (campo uniforme) ,} \quad (3.10)$$

$$P(h_i) = \frac{1}{2}\delta(h_i - H_0) + \frac{1}{2}\delta(h_i + H_0) \text{ (distribuição bimodal) ,} \quad (3.11)$$

$$P(h_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp(-(h_i - H_0)^2/2\sigma^2) \text{ (distribuição gaussiana) .} \quad (3.12)$$

As equações de renormalização são obtidas utilizando o princípio dado na equação (3.2); para uma célula elementar arbitrária com sítios terminais μ e ν , estas equações são,

$$K'_{\mu\nu} = \frac{1}{4} \log \left(\frac{Z_{--}Z_{++}}{Z_{-+}Z_{+-}} \right) , \quad (3.13)$$

$$H'_\mu = \frac{1}{4} \log \left(\frac{Z_{++}Z_{+-}}{Z_{--}Z_{-+}} \right) , \quad (3.14)$$

$$H'_\nu = \frac{1}{4} \log \left(\frac{Z_{++}Z_{-+}}{Z_{--}Z_{+-}} \right) , \quad (3.15)$$

onde

$$Z_{S_\mu, S_\nu} = \text{Tr}_{S_i, (i \neq \mu, \nu)} \{ \exp(-\beta\mathcal{H}) \} . \quad (3.16)$$

Sendo \mathcal{H} o hamiltoniano associado à célula elementar considerada. Em $T = 0$ estas equações podem ser linearizadas ao tomar o limite $\beta \rightarrow \infty$.

Visando apresentar as equações de GR de uma maneira mais comum, primeiro devemos notar que o hamiltoniano de qualquer célula geradora, pode ser dividido de maneira que $\mathcal{H} = \mathcal{H}' + H_\mu S_\mu + H_\nu S_\nu$, onde \mathcal{H}' representa o hamiltoniano da célula com $H_\mu = H_\nu = 0$. Logo, a função de partição Z_{S_μ, S_ν} pode ser escrita convenientemente

$$Z_{S_\mu, S_\nu} = \exp(H_\mu S_\mu + H_\nu S_\nu) \mathcal{Z}_{S_\mu, S_\nu} , \quad (3.17)$$

onde

$$\mathcal{Z}_{S_\mu, S_\nu} = \text{Tr}_{\{S_i \ (i \neq \mu, \nu)\}} [\exp(-\beta \mathcal{H}')] . \quad (3.18)$$

Em consequência, as equações (3.13)-(3.15) tomam a seguinte forma,

$$K'_{\mu\nu} = \frac{1}{4} \log \left(\frac{\mathcal{Z}_{--} \mathcal{Z}_{++}}{\mathcal{Z}_{-+} \mathcal{Z}_{+-}} \right) , \quad (3.19)$$

$$H'_\mu = H_\mu + \frac{1}{4} \log \left(\frac{\mathcal{Z}_{++} \mathcal{Z}_{+-}}{\mathcal{Z}_{--} \mathcal{Z}_{-+}} \right) , \quad (3.20)$$

$$H'_\nu = H_\nu + \frac{1}{4} \log \left(\frac{\mathcal{Z}_{++} \mathcal{Z}_{-+}}{\mathcal{Z}_{--} \mathcal{Z}_{+-}} \right) . \quad (3.21)$$

É possível observar, a partir das duas últimas equações acima, que após a transformação, o campo em cada sítio remanescente representa uma contribuição da hierarquia anterior, mais um termo devido à dizimação dos spins interiores.

Em geral, mediante o procedimento de GR, as distribuições $P(K_{ij})$ e $P(H_i)$ mudarão suas formas, de tal maneira que é importante introduzir técnicas para o acompanhamento destas distribuições. Um procedimento numérico para o acompanhamento de uma única distribuição foi introduzido há aproximadamente três décadas [52]; este procedimento consiste na representação

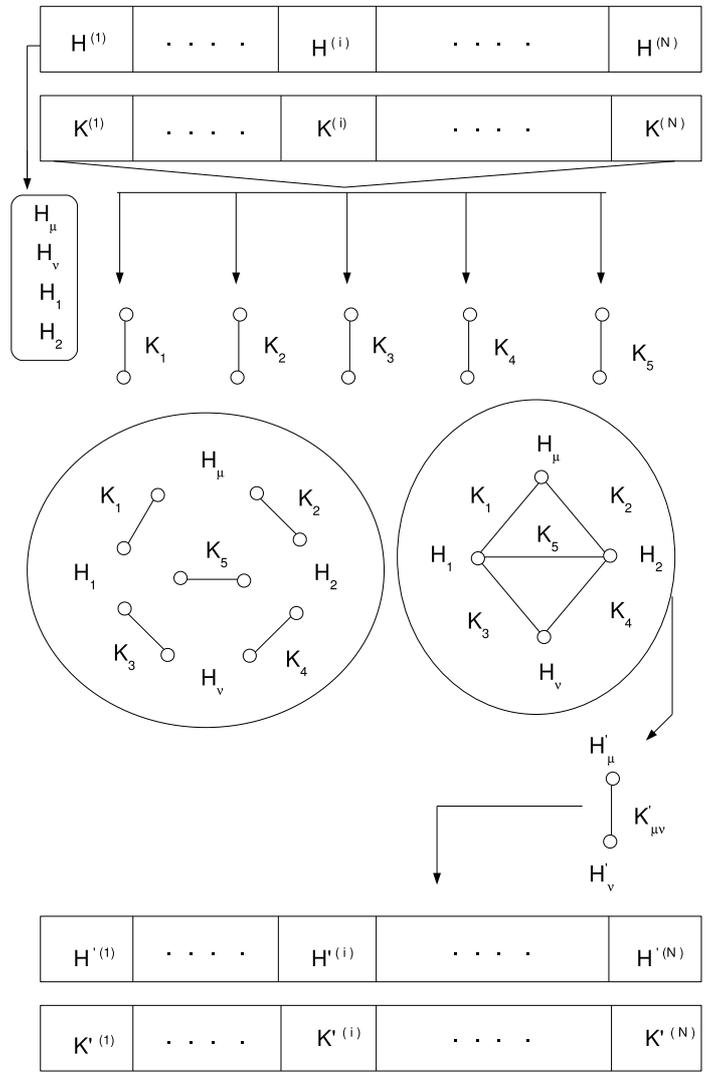


Figura 3.5: Ilustração do método dos bancos independentes aplicado a uma rede hierárquica gerada a partir da ponte de Wheatstone bidimensional. A partir de um conjunto de M ligações $\{K_i^{(i)}\}$, e M campos $\{H_1^{(i)}\}$ sorteamos 5 ligações $\{K_i\}$ e 4 campos $\{H_\mu, H_\nu, H_1, H_2\}$ dos respectivos bancos, que definem a célula unitária. A renormalização desta célula, através das equações (3.13),(3.14),(3.15), gera as variáveis renormalizadas $K'_{\mu\nu}$ e $\frac{1}{2}(H'_\mu + H'_\nu)$ os quais são armazenados em dois novos bancos de dados. Repetimos o processo M vezes de forma a termos dois bancos renormalizados, cada um do mesmo tamanho original. A sequência de bancos nos dá o fluxo de GR.

de uma distribuição de probabilidades por meio de um banco de números. Entretanto, para o caso de duas distribuições, como no presente problema, duas formas são comumente empregadas na literatura : (i) o procedimento dos bancos descorrelacionados, ou independentes; (ii) o procedimento de um único banco de tripletos correlacionados $\{K_{\mu\nu}, H_\mu, H_\nu\}$. Estes dois procedimentos serão descritos abaixo.

O método dos bancos independentes consiste em gerar inicialmente um banco contendo M acoplamentos aleatórios $\{K_{ij}\}$ gerados a partir da distribuição dada na equação (3.9), e outro banco com M campos aleatórios $\{H_i\}$ gerados mediante a escolha de uma das distribuições iniciais dadas nas equações (3.10), (3.11) e (3.12). Logo, sorteamos v números do banco das ligações e z números do banco dos campos, de tal maneira a definir apropriadamente uma dada célula unitária. O número v corresponde ao número de ligações desta célula, enquanto que z corresponde ao número de nodos onde são alocados os spins da mesma (veja o esquema da figura 3.5). A renormalização da célula geradora irá gerar as variáveis renormalizadas de tal maneira que $K'_{\mu\nu}$ e $\frac{1}{2}(H'_\mu + H'_\nu)$ representarão os primeiros elementos dos novos bancos de acoplamentos e de campos, respectivamente. Ao repetir M vezes este processo de sorteio e renormalização, obtemos dois bancos renormalizados, cada um de tamanho M . Assim, os passos de renormalização geram seqüências de bancos de números que representarão as distribuições renormalizadas, as quais indicarão ao fluxo de renormalização.

O método dos bancos correlacionados consiste, basicamente, em tomarmos

um conjunto de M pares de sítios ligados ¹, correspondendo a bancos constituídos por M tripletos de números, e sorteamos z ² dessas ligações para formar uma célula básica (conforme esquematizado na figura 3.6). A renormalização dessa célula básica irá gerar um tripleto de números, que representará a ligação renormalizada, o qual representará o primeiro elemento do banco renormalizado. Repetimos esse processo de sorteio e renormalização M vezes, a fim de obtermos um banco renormalizado do mesmo tamanho do banco original. Análogamente ao método dos bancos independentes, a seqüência de passos de renormalização gera uma seqüência de bancos de tripletos a partir dos quais podem ser obtidos os momentos das distribuições renormalizadas que indicarão o fluxo de renormalização.

No início do procedimento de GR temos as médias $\langle K_{ij} \rangle = \beta J_0$ para os acoplamentos, e $\langle H_i \rangle = \beta H_0$ (campo uniforme e distribuição gaussiana), $\langle H_i \rangle = 0$ (distribuição bimodal) para os campos. Para o caso $J_0 = 0$, uma quantidade importante a ser analisada consiste na razão,

$$r = \frac{\sigma_K}{\sigma_H}, \quad (3.22)$$

onde $\sigma_K = \langle (K_{ij} - \langle K_{ij} \rangle)^2 \rangle^{1/2}$, e $\sigma_H = \langle (H_i - \langle H_i \rangle)^2 \rangle^{1/2}$, a qual é útil para determinar se a largura dos acoplamentos cresce mais rápido do que a largura dos campos, ou vice-versa, em cada passo de renormalização. A razão r é inicialmente infinita para o caso do campo uniforme, e $r = J/H_0$, $r = J/\sigma$

¹Cada um deles composto por uma ligação K_i entre dois sítios, e dois campos locais $H_{1,i}, H_{2,i}$, associados a cada um dos sítios.

²O número z corresponde ao número de ligações da célula geradora.

para as distribuições bimodal e gaussiana, respectivamente. Após um dado número n de iterações³, o atrator paramagnético é identificado quando todos os momentos da distribuição dos acoplamentos tendem a zero, com $\sigma_K \rightarrow 0$, $\sigma_H \rightarrow 0$, de tal forma que $r \rightarrow 0$. O atrator vidro de spins é identificado quando após n iterações, $\langle K_{ij} \rangle = 0$, $\sigma_K \rightarrow \infty$, e $r \rightarrow \infty$. Neste último caso, independentemente de o sistema estar ou não sob ação de uma distribuição de campos, deve ser observado que na distribuição renormalizada dos acoplamentos, os momentos ímpares tendem a zero, enquanto que os momentos pares crescem indefinidamente. Por conseguinte, é possível determinar o ponto crítico (o qual divide estes dois atratores de renormalização) efetuando uma varredura, por exemplo, no valor inicial H_0 (por exemplo, para um campo inicial uniforme), ou fazendo uma varredura na temperatura inicial T , mantendo fixo H_0 . Desta maneira, pode-se obter diagramas de fases dos respectivos modelos.

Na seção seguinte o método dos bancos independentes será aplicado nas redes do tipo Migdal-Kadanoff.

3.3 Vidro de spins de Ising sob ação de um campo magnético externo em redes do tipo Migdal-Kadanoff

Nas redes hierárquicas do tipo Migdal-Kadanoff (MK), a aproximação de Migdal-Kadanoff [47, 49] torna-se exata. Portanto, estas estruturas podem

³Longe da criticalidade, consideramos n em torno de 10 iterações; próximo ao ponto crítico, somente a partir de 30 iterações é que conclusões razoáveis podem ser obtidas.

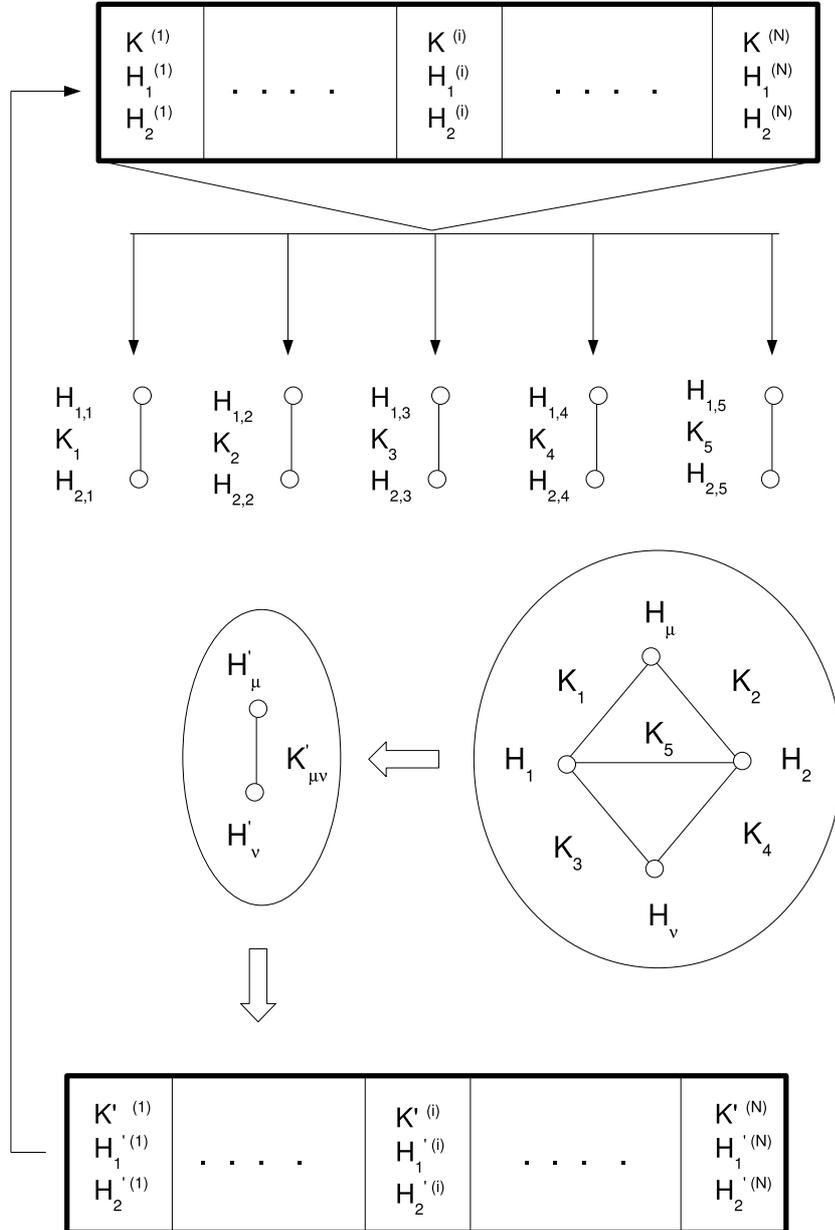


Figura 3.6: Ilustração do método dos bancos correlacionados aplicado a uma rede hierárquica gerada a partir da ponte de Wheatstone bidimensional. A partir de um conjunto de M tripletos do banco de dados original, sorteamos 5 tripletos $\{K_i, H_{1,i}, H_{2,i}\}$, e formamos uma célula básica de maneira que H_μ, H_ν, H_1, H_2 resultam da média aritmética dos campos que se cruzam nos pontos respectivos; por exemplo $H_1 = (H_{2,1} + H_{1,3} + H_{1,5})/3$. A renormalização desta célula, através das equações (3.13), (3.14), (3.15), gera um tripleto $K'_{\mu\nu}, H'_\mu, H'_\nu$, o qual é armazenado em um novo banco de dados. Repetimos o processo N vezes de forma a termos um novo banco renormalizado do mesmo tamanho do banco original. A seqüência de bancos nos dá o fluxo de GR.

ser adequadas para o estudo da criticalidade do modelo de Ising com interações de curto alcance em redes de Bravais. Uma célula básica de uma rede do tipo MK é representada na figura 3.7.

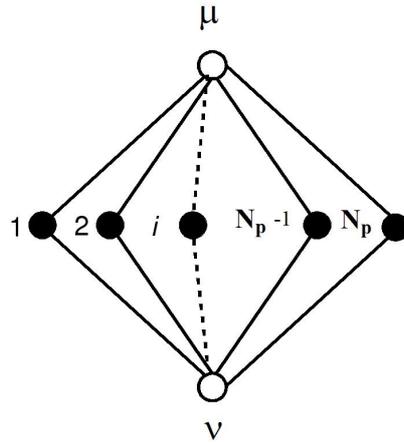


Figura 3.7: Célula básica de uma rede do tipo Migdal-Kadanoff. N_p representa o número de caminhos paralelos ligando os sítios terminais da célula.

A dimensão fractal destas redes está relacionada com o número de caminhos paralelos N_p da célula elementar,

$$d_f = 1 + \log(N_p) / \log(2) . \quad (3.23)$$

As formas explícitas das equações (3.19) - (3.21) para as redes MK são dadas por [21, 22],

$$K'_{\mu\nu} = \frac{1}{4}(A - B + D - C) , \quad (3.24)$$

$$H'_\mu = H_\mu + \frac{1}{4}(A + B - C - D) , \quad (3.25)$$

$$H'_\nu = H_\nu + \frac{1}{4}(A - B + C - D) , \quad (3.26)$$

onde

$$A = \sum_{i=1}^{N_p} \log(K_{\mu i} + K_{\nu i} + H_i) , \quad (3.27)$$

$$B = \sum_{i=1}^{N_p} \log(K_{\mu i} - K_{\nu i} + H_i) , \quad (3.28)$$

$$C = \sum_{i=1}^{N_p} \log(-K_{\mu i} + K_{\nu i} + H_i) , \quad (3.29)$$

$$D = \sum_{i=1}^{N_p} \log(-K_{\mu i} - K_{\nu i} + H_i) . \quad (3.30)$$

Em temperatura nula as equações de renormalização são obtidas ao tomar o limite $\beta \rightarrow \infty$, o qual leva às seguintes equações,

$$J'_{\mu\nu} = \frac{1}{4}(A - B - C + D) , \quad (3.31)$$

$$h'_\mu = h_\mu + \frac{1}{4}(A + B - C - D) , \quad (3.32)$$

$$h'_\nu = h_\nu + \frac{1}{4}(A - B + C - D) . \quad (3.33)$$

onde

$$A = \sum_{i=1}^{N_p} \max[(J_{\mu i} + J_{\nu i} + h_i), -(J_{\mu i} + J_{\nu i} + h_i)] , \quad (3.34)$$

$$B = \sum_{i=1}^{N_p} \max[(J_{\mu i} - J_{\nu i} + h_i), -(J_{\mu i} - J_{\nu i} + h_i)] , \quad (3.35)$$

$$C = \sum_{i=1}^{N_p} \max[(-J_{\mu i} + J_{\nu i} + h_i), -(-J_{\mu i} + J_{\nu i} + h_i)] , \quad (3.36)$$

$$D = \sum_{i=1}^{N_p} \max[(-J_{\mu i} - J_{\nu i} + h_i), -(-J_{\mu i} - J_{\nu i} + h_i)] . \quad (3.37)$$

Através destes tipos de redes é possível estudar sistemas do tipo vidros de spins com interações de curto alcance e comparar resultados com aqueles obtidos por outras técnicas [50, 51]. Por exemplo, é possível verificar que a dimensão crítica inferior, abaixo da qual não existe fase VS em temperatura finita, encontra-se no intervalo $2 < d_c < 3$ [52]. Estudos recentes, considerando a ação de um campo externo, sugerem que na rede cúbica um campo infinitesimal destrói a fase vítrea em temperatura finita [27]. No entanto, outros estudos apresentam evidências da linha de Almeida-Thouless (AT) na rede hipercúbica ⁴ [53]. A existência de um atrator do tipo VS, para o vidro de spins de Ising na presença de um campo externo em redes da família MK, será investigada a seguir.

Acompanhando a evolução de distribuições de probabilidades mediante o método dos bancos independentes determinamos a dimensão crítica abaixo da qual não existe atrator vidro de spins no plano $H_0 - T$, onde H_0 é o campo dado na equação (3.10). Foi encontrado um atrator VS a partir de $N_p = 5$, que corresponde à dimensão fractal $d \approx 3.32$. Em cada passo de GR, observa-

⁴Recentemente, novas evidências em favor da linha AT em baixas dimensões têm sido apresentadas para o vidro de spins com interações que decaem com a distância de acordo com uma lei de potência [54].

mos que a média da distribuição dos acoplamentos oscilou em torno de zero, com flutuações da ordem de 10^{-3} . Entretanto, a figura 3.8 mostra que em uma análise em temperatura nula da razão r da equação (3.22), existem dois atratores de GR, de acordo com o valor inicial dado para H_0 . Observamos que para $H_0/J = 0.6$, o atrator é do tipo VS, e para $H_0/J = 0.8$ o atrator é do tipo paramagnético (P). Logo, entre estes dois valores deve existir um ponto fixo instável, o qual divide as fases VS e P. A figura 3.9 mostra as fronteiras críticas VS-P, correspondendo a diferentes valores de N_p , assumindo inicialmente um campo magnético constante (equação (3.10)). Para $N_p = 4$ ($d_f = 3$), não foram encontradas evidências da fase VS para nenhuma distribuição inicial de campos. Por conseguinte, este método sugere que, a rede cúbica não apresentaria esta fase na presença de um campo externo. Isto concorda com algumas simulações recentes [26].

Nas figuras 3.10 e 3.11 apresentamos as fronteiras críticas que correspondem à dimensão crítica $d_f \approx 3.32$, para as distribuições iniciais dadas em (3.11) e (3.12), respectivamente. Em ambas as figuras a concavidade é a mesma que aquela obtida para o caso do campo inicial constante, porém, contrária à concavidade obtida em campo médio para a linha AT. Para dimensões superiores, conferimos que este comportamento é qualitativamente similar, o que sugere que no limite $d_f \rightarrow \infty$, a concavidade desta fronteira crítica em redes MK, não é alterada. Se identificamos a fronteira crítica exibida nas figuras 3.9-3.11 com uma linha AT, obtida para o modelo SK, verificamos que a concavidade da fronteira não tende àquela obtida analiticamente pela aproximação de campo médio [25].

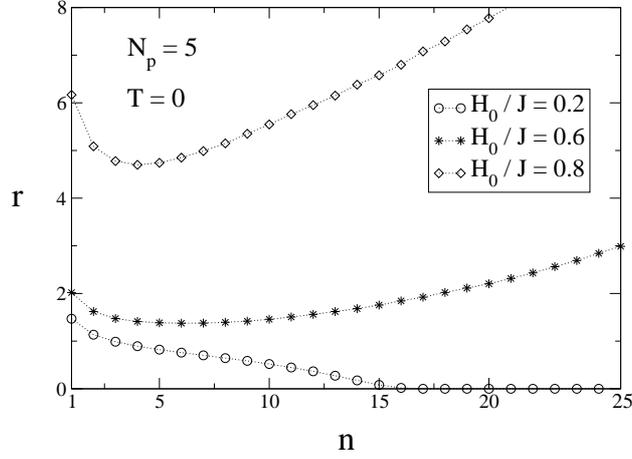


Figura 3.8: Evolução com os passos de renormalização n , em temperatura nula, da razão r definida na equação (3.22) para diferentes valores do campo inicial H_0 . Para $H_0/J = 0.2$ e 0.6 o atrator é do tipo VS, porém para $H_0/J = 0.8$ o atrator é paramagnético.

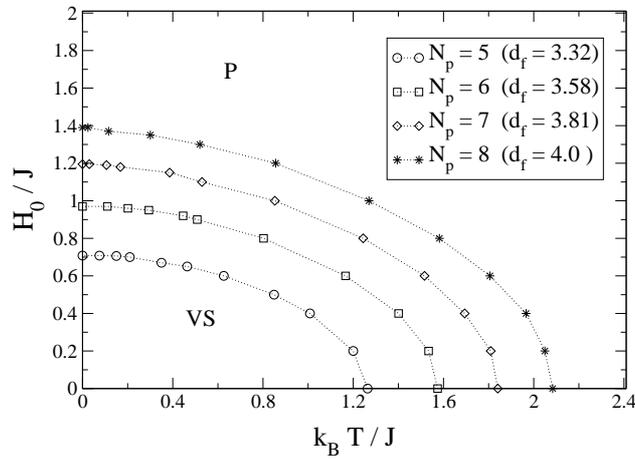


Figura 3.9: Fronteiras críticas VS-P no plano H_0/J versus $k_B T/J$ para o caso de um campo inicial uniforme em redes do tipo MK com diversos valores de N_p , correspondendo a diferentes dimensões fractais d_f . A dimensão crítica inferior corresponde a $N_p = 5$ ($d_f \approx 3.32$).

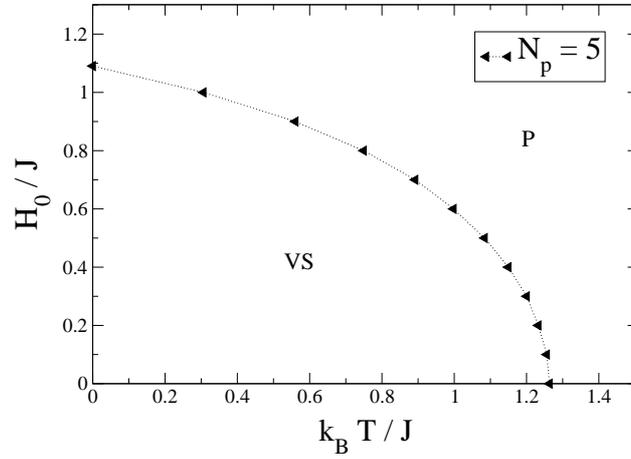


Figura 3.10: Fronteira crítica VS-P para uma distribuição inicial bimodal nos campos (ver equação (3.11)) para uma rede do tipo MK com $N_p = 5$ ($d_f \approx 3.32$).

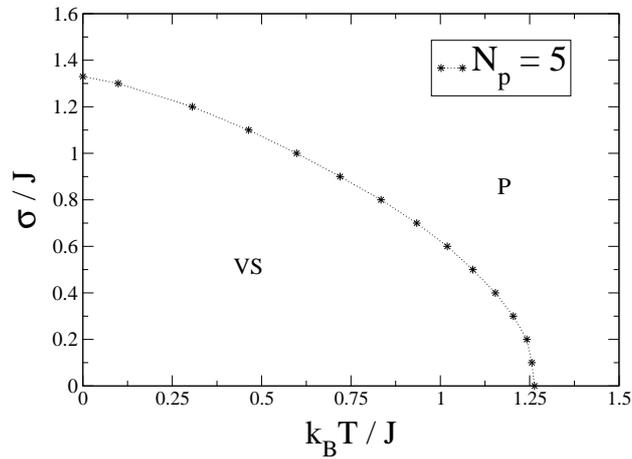


Figura 3.11: Fronteira crítica VS-P para uma distribuição inicial gaussiana centrada nos campos ($H_0 = 0$) (equação (3.9)) para uma rede do tipo MK com $N_p = 5$ ($d_f \approx 3.32$).

Finalmente, podemos concluir que embora uma fronteira crítica tenha sido determinada, a qual pode ser identificada com a linha de Almeida-Thouless para dimensões $d_f \geq 3.32$, a metodologia utilizada não permite discernir se o esquema de quebra de simetria entre réplicas de Parisi ou o modelo de gotas de Fisher e Huse é o adequado para estas redes⁵. Entretanto, a estimativa da dimensão crítica inferior ($d_f \approx 3.32$), associada à presença do atrator VS acima, pode ser alterada se considerarmos uma análise em termos de bancos de números correlacionados, como mostraremos na próxima seção.

3.4 Atrator vidro de spins no modelo de Edwards-Anderson com campo magnético em redes hierárquicas de dimensão fractal próximo a três

Nesta seção investigaremos o modelo EA, na presença de diversos tipos de campos magnéticos, em três redes hierárquicas, que aproximam a rede cúbica, conforme mostrado na figura 3.12. Na figura 3.12(a) temos uma rede diamante cuja dimensão fractal é $d_f = 3$; na figura 3.12(b) temos a rede dual da rede diamante, com dimensão $d_f = 3$, e finalmente uma rede do tipo ponte de Wheatstone tridimensional, com dimensão fractal $d \approx 3.58$. As distribuições de probabilidades serão acompanhadas segundo a técnica do banco de tripletos correlacionados, descrito acima. A forma explícita das equações (3.19) - (3.21) para a rede diamante da figura 3.12(a), é dada nas equações

⁵Gardner [56] não encontrou evidências do esquema de Parisi para $N_p \rightarrow \infty$.

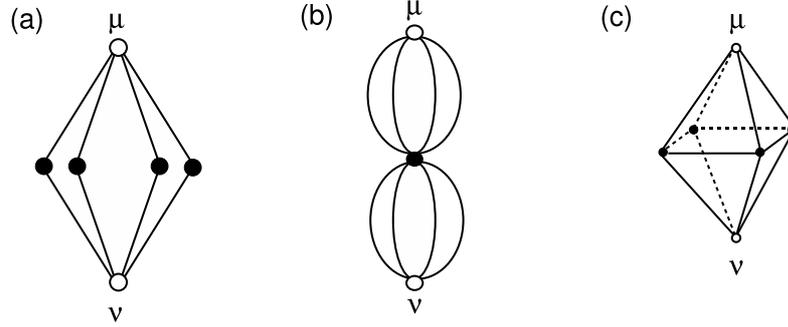


Figura 3.12: Células Básicas de três redes hierárquicas diferentes, as quais aproximam a rede cúbica. (a) Célula tipo MK de dimensão fractal $d_f = 3$ (usualmente denominada célula diamante); (b) célula dual da célula diamante (dimensão fractal $d_f = 3$); (c) ponte de Wheatstone tridimensional (dimensão fractal $d \approx 3.58$). Os círculos pretos representam os sítios internos que serão dizimados, enquanto que os círculos vazios representam os sítios externos.

(3.24) - (3.26) tomando $NP = 4$, entretanto, para a rede da figura 3.12(b) as respectivas equações são,

$$K'_{\mu\nu} = \frac{A + B - C - D}{4}, \quad (3.38)$$

$$H'_\mu = \frac{A - B + C - D}{4}, \quad (3.39)$$

$$H'_\nu = \frac{A - B - C + D}{4}, \quad (3.40)$$

onde $A = F(1, 1)$, $B = F(1, -1)$, $C = F(-1, 1)$ e $D = F(-1, -1)$, com

$$F(S_\mu, S_\nu) = \log[2 \exp(H_\mu S_\mu + H_\nu S_\nu) \cosh(H_1 + K_{\mu 1} S_\mu + K_{\mu 1} S_\mu)], \quad (3.41)$$

onde o número 1 denota o único sítio interno desta célula básica, e $K_{\mu 1} = \sum_{i=1}^4 K_{\mu 1}^{(i)}$, $K_{\nu 1} = \sum_{i=1}^4 K_{\nu 1}^{(i)}$, com $K_{\mu 1}^{(i)}$ ($K_{\nu 1}^{(i)}$) representando uma dada ligação entre os sítios μ (ν) e 1. A célula da figura 3.12(c) apresenta quatro sítios

internos, os quais denotamos por 1, 2, 3, 4, logo, as equações de transformação são,

$$K'_{\mu\nu} = \frac{1}{4} \log(AD/BC) , \quad (3.42)$$

$$H'_\mu = \frac{1}{4} \log(BA/DC) , \quad (3.43)$$

$$H'_\nu = \frac{1}{4} \log(AC/DB) , \quad (3.44)$$

onde as grandezas A, B, C e D são apresentadas no Apêndice A. Para estas duas últimas células (figuras 3.12(b) e 3.12(c)), as equações de renormalização em temperatura nula podem ser obtidas de maneira análoga às aquelas obtidas para as redes do tipo MK na seção anterior.

Para as três redes hierárquicas definidas acima, foi considerada a mesma distribuição inicial para os acoplamentos dada na equação (3.9), com $J_0 = 0$, enquanto que para os campos foram aplicadas as três distribuições dadas nas equações (3.10) - (3.12). Para determinar os diferentes atratores de GR foram utilizados os mesmos critérios definidos na seção 3.2. Isto é ilustrado na figura 3.13, onde podemos observar a evolução de r em cada passo de GR, para a rede diamante com campo inicial uniforme (veja a equação (3.10)), para $T = 0$ (figura 3.13(a)), e para $T \neq 0$ (figura 3.13(b)). Para $T = 0$ observamos que para $(H_0/J) = 0.40$ e 0.52 o atrator é do tipo VS, entretanto, para $(H_0/J) = 0.54$ e 0.60 o atrator é do tipo P. Por conseguinte, o ponto crítico que divide estes dois atratores está entre $(H_0/J) = 0.52$ e $(H_0/J) = 0.54$. Em $T \neq 0$, observamos que ao aplicar um campo inicial $(H_0/J) = 0.3$, existe um ponto crítico entre $(k_B T/J) = 0.65$ e $(k_B T/J) = 0.70$. É importante

destacar que mediante este método não foi encontrado atrator VS abaixo de $d_f = 3$, tanto nas redes diamante, quanto nas redes com célula básica do tipo mostrado na figura 3.12(b).

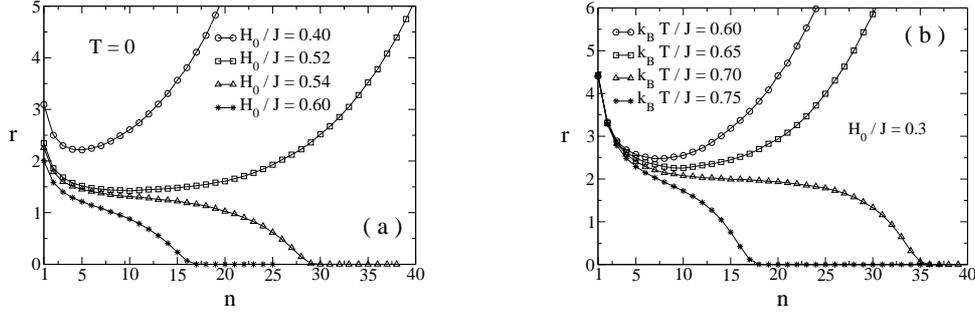


Figura 3.13: Evolução da razão r com o passo n de GR, para um vidro de spins do tipo Ising na rede diamante da figura 3.12(a), na presença de um campo inicial uniforme H_0 . (a) Valores iniciais para H_0/J em $T = 0$; o campo crítico está no intervalo $0.52 < (H_{0c}/J) < 0.54$. (b) Valores de temperatura para $(H_0/J) = 0.3$; a temperatura crítica está no intervalo $0.65 < (k_B T_c/J) < 0.70$.

As fronteiras críticas correspondentes à distribuição gaussiana (equação (3.12)), podem ser observadas na figura 3.14. Na figura 3.14(a) temos três fronteiras no plano $H_0/J - k_B T/J$ que correspondem a três valores de largura, $\sigma = 0, 1.0$ e 2.0 , enquanto que na figura 3.14(b) o diagrama de fases é representado no plano $\sigma/J - k_B T/J$, considerando $H_0 = 0$ na equação (3.12). Neste último caso, notamos que existe um ponto de inflexão que muda a concavidade da fronteira VS-P. O mesmo se observa na figura 3.15, onde o diagrama de fases corresponde à distribuição bimodal dada na equação (3.11).

As figuras 3.16 e 3.17 mostram os diagramas de fases que correspondem à rede ponte de Wheatstone cuja célula básica está exibida na figura 3.12(e). Observa-se que estes diagramas são similares aos obtidos para a rede dia-

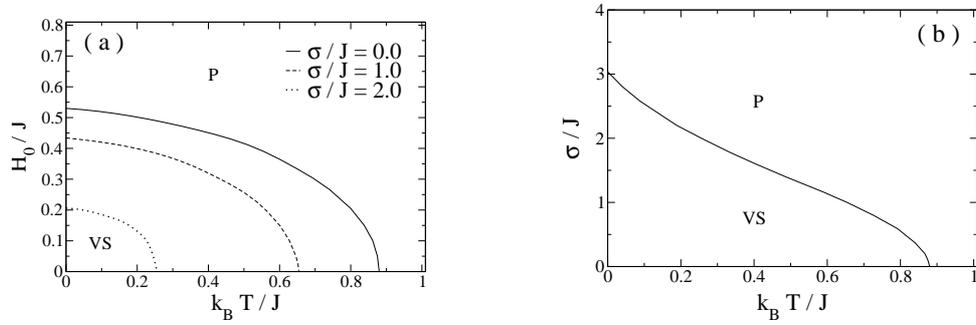


Figura 3.14: Diagramas de fases para um vidro de spins do tipo Ising na rede diamante definida na figura 3.12(a), na presença de um campo inicial que obedece a uma distribuição gaussiana (equação (3.12)). (a) Plano $H_0/J - k_B T/J$, para diferentes valores de σ/J . (b) Plano $\sigma/J - k_B T/J$, para $H_0 = 0$.

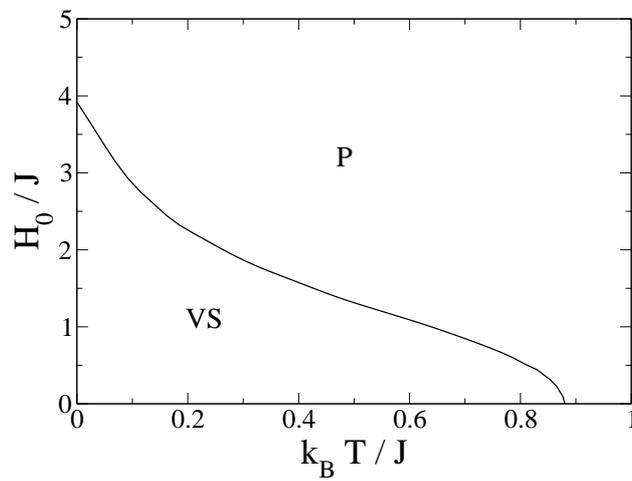


Figura 3.15: Diagrama de fases para um vidro de spins do tipo Ising na rede diamante definida na figura 3.12(a), na presença de uma distribuição inicial de campos bimodal simétrica.

mente. Particularmente em campo nulo (caso $(\sigma/J) = 1$), a temperatura crítica que divide as fases VS e P, é $(k_B T_c/J) \approx 0.98$, o que está muito próximo da temperatura obtida em simulações de Monte Carlo para a rede cúbica $(k_B T_c/J) \approx 0.95$ [8].

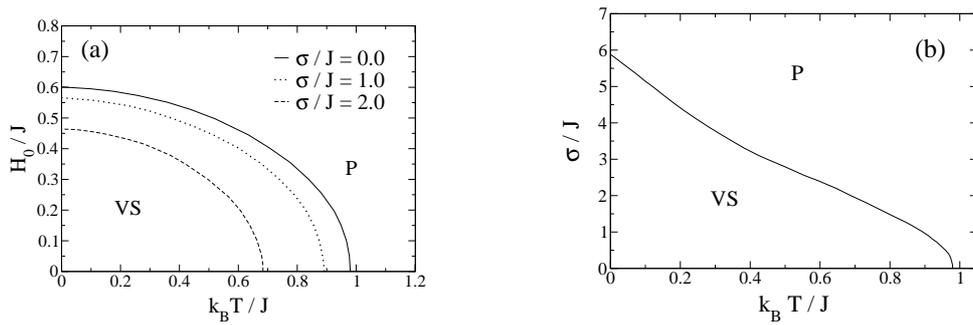


Figura 3.16: Diagramas de fases para um vidro de spins tipo Ising na rede ponte de Wheatstone definida na figura 3.12(c), na presença de um campo inicial que obedece a uma distribuição gaussiana (equação (3.12)). (c) Plano $H_0/J - k_B T/J$, para diferentes valores de σ/J . (b) Plano $\sigma/J - k_B T/J$, para $H_0 = 0$.

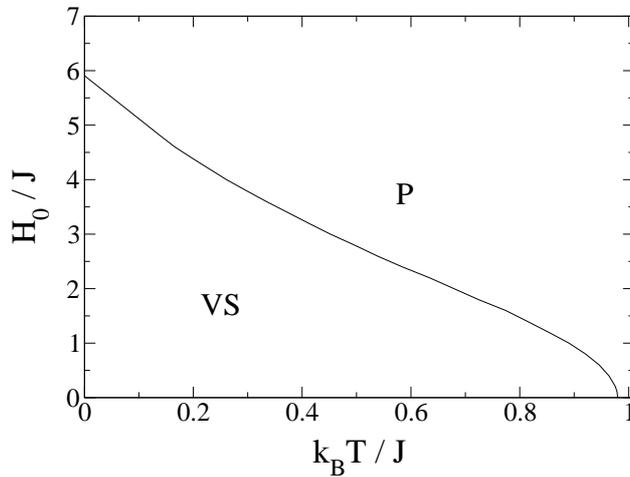


Figura 3.17: Diagrama de fases para um vidro de spins tipo Ising na rede ponte de Wheatstone definida na figura 3.12(c) na presença de uma distribuição de campos bimodal simétrica.

Nas tabelas 3.1 e 3.2 os parâmetros críticos associados aos diagramas de fases são comparados, para as três redes hierárquicas investigadas. Na tabela 3.1 mostramos os valores das temperaturas críticas em $H_0 = 0$, para as distribuições uniforme e bimodal nos campos, enquanto que para a distribuição gaussiana, os resultados se referem ao caso particular com $(\sigma/J) = 1$. Na tabela 3.2 apresentamos valores dos parâmetros críticos em temperatura nula; para uma distribuição gaussiana, nossos resultados correspondem aos casos, $(\sigma/J) = 1$, ou $H_0 = 0$. A partir destas tabelas podemos notar que os parâmetros críticos que correspondem às redes definidas pelas células básicas das figuras 3.12(a) e 3.12(b), então sempre abaixo e acima daquelas obtidos para a rede definida pela célula básica da figura 3.12(c), respectivamente.

Rede hierárquica	$k_B T_c / J$ Uniforme e Bimodal	$k_B T_c / J$ Gaussiana $[(\sigma/J) = 1]$
Célula (a)	0.880(1)	0.661(1)
Célula (b)	1.761(1)	1.750(1)
Célula (c)	0.980(1)	0.891(1)

Tabela 3.1: Temperaturas críticas para $H_0 = 0$, com os campos obedecendo as equações (3.10)–(3.12), para as rede definidas pelas células básicas da figura 3.12. No caso da distribuição gaussiana para os campos, tomamos $(\sigma/J) = 1$.

Rede hierárquica	Uniforme H_{0c}/J	Bimodal H_{0c}/J	Gaussiana $[(\sigma/J) = 1]$ H_{0c}/J	Gaussiana ($H_0 = 0$) σ_c/J
Célula (a)	0.530(1)	3.919(1)	0.433(1)	3.036(1)
Célula (b)	1.414(2)	21.45(2)	1.418(1)	20.25(2)
Célula (c)	0.590(2)	5.907(2)	0.566(2)	5.884(2)

Tabela 3.2: Parâmetros críticos em temperatura nula, para as redes hierárquicas definidas pelas células básicas da figura 3.12. Para o caso da distribuição gaussiana para os campos, foi escolhido $(\sigma/J) = 1$, ou $H_0 = 0$.

3.5 Conclusões

Podemos concluir que nas redes hierárquicas do tipo Migdal-Kadanoff, o modelo de EA apresenta um atrator do tipo vidro de spins, na presença de um campo magnético, em temperatura finita, acompanhando as distribuições de probabilidades tanto pelo método dos bancos independentes, quanto pelo método dos bancos correlacionados. Mediante o primeiro método, a dimensão crítica inferior determinada é $d_f \approx 3.32$, enquanto que pelo segundo método, a dimensão crítica inferior é $d_f = 3$. Resultados similares acontecem para as redes duais das do tipo diamante, definidas na figura 3.12(b). Para a rede ponte de Wheatstone tridimensional, os resultados obtidos pelas duas técnicas são conflitantes, de tal maneira que o atrator VS foi (não foi) encontrado mediante o acompanhamento das distribuições de probabilidades através do método dos bancos correlacionados (independentes). Visto que estas redes são consideradas como aproximações para as redes convencionais, estes resultados sugerem a presença de uma fase vidro de spins na presença de campos externos em dimensões finitas, com a dimensão crítica inferior em torno de três.

Capítulo 4

Modelo de Ising na presença de campo aleatório com distribuição contínua*

4.1 Introdução

O modelo de Ising com campo aleatório (RFIM)¹ é atualmente um dos problemas mais estudados na área de sistemas magnéticos desordenados [58, 59]. Do ponto de vista teórico [60], a simplicidade de sua definição [61], junto com a riqueza das propriedades físicas que surgem do seu estudo, representam duas motivações para a investigação deste modelo. Por outro lado, surgiu um grande interesse do ponto de vista experimental após a identificação deste modelo com antiferromagnetos diluídos na presença de um

¹Do Inglês “Random Field Ising Model”.

* Este capítulo corresponde essencialmente ao artigo da referência [57].

campo uniforme [63, 64, 65]; a partir de então, os dois compostos mais investigados têm sido o $\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{F}_2$ e o $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ [62, 66]. No que se refere a seus diagramas de fases de equilíbrio, os efeitos de diferentes distribuições de probabilidades (DP) dos campos aleatórios têm atraído a atenção de muitos autores [17, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82]. Na aproximação de campo médio, a DP gaussiana produz uma fronteira crítica contínua entre as fases paramagnética e ferromagnética [67], enquanto que uma DP discreta poder levar a diagramas mais elaborados, caracterizados por um ponto tricrítico em temperatura finita, seguido por uma transição de primeira ordem em baixas temperaturas [17, 68, 69, 70, 71], inclusive apresentando pontos críticos terminais e de quarta ordem [70, 71]. Para o RFIM com interações de curto alcance, a existência de uma fronteira de primeira ordem ainda é um tema polêmico [72, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79, 80, 81].

Do ponto de vista experimental, é de interesse identificar o RFIM com um sistema físico real, uma vez que a presença de campos aleatórios independentes em cada sítio de uma rede, não é uma experiência física fácil de reproduzir em um laboratório. No entanto, tal como já foi mencionado, este modelo tem sido identificado com antiferromagnetos diluídos na presença de um campo magnético uniforme [62]. Visando melhorar esta identificação, alguns tipos de distribuições para o RFIM são mais apropriadas para uma descrição destes compostos. Por exemplo, nestes sistemas existem variações locais na soma dos acoplamentos de troca que ligam um sítio com outros, o que produz variações nas magnetizações de cada subrede, e por conseguinte, as magnetizações locais variam em sinal e intensidade. Nas identificações do RFIM

com antiferromagnetos diluídos [63, 64, 65], o campo aleatório efetivo em um dado sítio é sempre expresso em termos de quantidades que variam tanto em sinal, quanto em intensidade, tais como: (i) a magnetização local [63]; (ii) duas contribuições, a primeira que assume três valores discretos, que estão relacionados à diluição do sistema e ao campo externo uniforme, e a segunda que é proporcional à magnetização local [64]; (iii) a soma dos acoplamentos de troca associados ao sítio [65]. Por conseguinte, para uma descrição adequada de um antiferromagneto diluído na presença de um campo uniforme externo, o RFIM correspondente deve ser sempre considerado em termos de uma distribuição de campos contínua.

O composto $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ apresenta um comportamento de vidro de spins para $x < 0.55$, e é considerado um RFIM típico para altas concentrações magnéticas. No regime RFIM o mesmo apresenta um comportamento curioso sendo um bom candidato para exibir multicriticalidade [62, 64, 71]. Como exemplo deste tipo de efeito, encontra-se uma transição de primeira ordem que torna-se contínua devido uma mudança dos campos aleatórios [62, 83, 84]; a concentração para a qual a transição de primeira ordem desaparece, é estimada em $x = 0.6$. A mudança da transição de primeira ordem para a transição contínua foi investigada através de diferentes abordagens teóricas [72, 73, 84]. Um possível mecanismo utilizado para determinar esta mudança, ou para eliminar totalmente a transição de primeira ordem, consiste em introduzir um tipo de aleatoriedade adicional no sistema, por exemplo, a aleatoriedade nos acoplamentos [72, 73]. Também, esta mudança foi analisada considerando a aleatoriedade unicamente nos campos em

temperatura nula, inclusive na aproximação de campo médio [85], ou em simulações computacionais em uma rede tridimensional [84, 85]. Recentemente um RFIM foi proposto [82], para o qual um ponto tricítico em temperatura finita, junto com uma fronteira de primeira ordem, pode desaparecer devido ao incremento da aleatoriedade do campo, de maneira análoga ao que acontece no composto $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$.

Entretanto, é possível que o antiferromagneto diluído $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, ou algum outro composto similar, possa vir a apresentar um comportamento crítico mais complicado ainda não verificado experimentalmente. De acordo com a análise da referência [64], uma das contribuições para o campo aleatório assume unicamente os valores $0, \pm\sqrt{2}H$ (H representa o campo magnético externo uniforme); isto motivou a proposta [70, 71] de um campo aleatório descrito em termos de uma distribuição trimodal. Tal RFIM, estudado na aproximação de campo médio através de um modelo no limite de interações de alcance infinito, produz um comportamento crítico muito rico, uma vez que apresenta pontos tricríticos e pontos críticos de ordem superior [86] em temperaturas finitas, inclusive com a possibilidade de duas fases ferromagnéticas distintas em baixas temperaturas [70, 71]. Estas investigações sugerem que o composto $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$ pode exibir um comportamento crítico interessante que vai além da supressão da transição de primeira ordem observada em torno de $x = 0.6$. Contudo, seguindo o critério acima para a identificação do RFIM com antiferromagnetos diluídos, pode-se notar que a distribuição trimodal não representa uma apropriada escolha do ponto de vista físico. De fato, na análise da referência [64], uma segunda contribuição contínua deveria

ser levada em conta também. Por conseguinte, para uma descrição teórica adequada do $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, deve-se considerar um campo aleatório definido em termos de uma distribuição com três picos, cada um com uma largura definida que possa produzir um comportamento multicrítico, além de uma mudança para uma transição contínua, com o incremento da aleatoriedade. Para tanto, introduzimos um RFIM que consiste em um ferromagneto de Ising com interações de alcance infinito na presença de um campo magnético aleatório externo distribuído de acordo com uma gaussiana tripla [57]. Esta distribuição é definida pela superposição de três distribuições gaussianas com mesma largura σ , centradas em $H = 0$ e $H = \pm H_0$, com probabilidades p e $(1 - p)/2$, respectivamente. O caso particular de um RFIM na presença de uma distribuição trimodal estudado anteriormente [70, 71], é recuperado no limite $\sigma \rightarrow 0$. Este modelo pode exibir uma grande riqueza no seu comportamento crítico, com diagramas de fases exibindo uma ou duas fases ferromagnéticas, fronteiras críticas contínuas e de primeira ordem, pontos tricríticos e pontos críticos de ordem superior tanto em temperaturas finitas, quanto em temperatura zero. A partir deste modelo diversos diagramas de fases podem ser obtidos ao variar os parâmetros da correspondente DP, por exemplo, p e σ . Na seção seguinte, será definido o modelo, e também será determinada a energia livre, por intermédio da qual obtém-se a magnetização pela condição de equilíbrio. Na seção 4.3 apresentaremos os diversos diagramas de fases deste modelo.

4.2 O modelo

O modelo de Ising com interações de alcance infinito na presença de um campo magnético externo aleatório é definido em termos do seguinte hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{(i,j)} S_i S_j - \sum_i H_i S_i, \quad (4.1)$$

onde a soma $\sum_{(i,j)}$ abrange todos os pares distintos de spins $S_i = \pm 1$ ($i = 1, 2, \dots, N$). Os campos aleatórios $\{H_i\}$ são variáveis temperadas que obedecem a uma distribuição de probabilidades dada por,

$$\begin{aligned} P(H_i) &= \frac{(1-p)}{2} \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/2} \left\{ \exp \left[-\frac{(H_i - H_0)^2}{2\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(H_i + H_0)^2}{2\sigma^2} \right] \right\} \\ &+ p \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{H_i^2}{2\sigma^2} \right], \end{aligned} \quad (4.2)$$

a qual consiste em uma superposição de três distribuições gaussianas independentes com a mesma largura σ , centradas em $H_i = 0$ e $H_i = \pm H_0$, com probabilidades p e $(1-p)/2$, respectivamente (esta distribuição será chamada aqui de gaussiana tripla). Esta é uma distribuição geral que depende de três parâmetros p , σ , e H_0 , e contém como casos particulares várias distribuições conhecidas na literatura, tais como a distribuição trimodal e bimodal, a gaussiana dupla, e a gaussiana simples. A partir da energia livre

$F(\{H_i\})$, associada com uma dada realização dos campos $\{H_i\}$, é possível calcular a média temperada, $[F(\{H_i\})]_H$,

$$[F(\{H_i\})]_H = \int \prod_i [dH_i P(H_i)] F(\{H_i\}) . \quad (4.3)$$

O procedimento usual para obter a média acima é mediante o método das réplicas [59, 87], que resulta na energia livre por spin,

$$-\beta f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} [\ln Z(\{H_i\})]_H = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{Nn} ([Z^n]_H - 1) , \quad (4.4)$$

onde Z^n representa a função de partição de n cópias do sistema original definido na equação (4.1) e $\beta = 1/(k_B T)$. Então,

$$\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \min g(m^\alpha) , \quad (4.5)$$

com

$$g(m^\alpha) = \frac{\beta J}{2} \sum_\alpha (m^\alpha)^2 - \frac{(1-p)}{2} \ln \text{Tr}_\alpha \exp(\mathcal{H}_{\text{eff}}^+) - \frac{(1-p)}{2} \ln \text{Tr}_\alpha \exp(\mathcal{H}_{\text{eff}}^-) - p \ln \text{Tr}_\alpha \exp(\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}) , \quad (4.6)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^\pm = \beta J \sum_\alpha m^\alpha S^\alpha + \beta \sigma \left(\sum_\alpha S^\alpha \right)^2 \pm \beta H_0 \sum_\alpha S^\alpha , \quad (4.7)$$

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)} = \beta J \sum_\alpha m^\alpha S^\alpha + \beta \sigma \left(\sum_\alpha S^\alpha \right)^2 . \quad (4.8)$$

Nas equações acima, α representa um índice de réplicas ($\alpha = 1, 2, \dots, n$) e Tr_α é um traço sobre as variáveis de spin de cada réplica. O extremo do funcional $g(m^\alpha)$ conduz à equação da magnetização para a réplica α ,

$$m^\alpha = \frac{(1-p)}{2} \langle S^\alpha \rangle_+ + \frac{(1-p)}{2} \langle S^\alpha \rangle_- + p \langle S^\alpha \rangle_0, \quad (4.9)$$

onde $\langle \rangle_\pm$ e $\langle \rangle_0$ representam as médias térmicas com respeito aos “hamiltonianos efetivos” $\mathcal{H}_{\text{eff}}^\pm$ e $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(0)}$, nas equações (4.7) e (4.8), respectivamente.

Ao assumir a hipótese de simetria entre réplicas [59, 87], isto é, $m^\alpha = m$ ($\forall \alpha$), a energia livre por spin das equações (4.5)–(4.8) e a condição de equilíbrio da equação (4.9), resultam em

$$f = \frac{J}{2} m^2 - \frac{(1-p)}{2\beta} \int Dz \ln(2 \cosh \Phi^+) - \frac{(1-p)}{2\beta} \int Dz \ln(2 \cosh \Phi^-) - \frac{p}{2} \int Dz \ln(2 \cosh \Phi^{(0)}), \quad (4.10)$$

$$m = \frac{(1-p)}{2} \int Dz \tanh \Phi^+ + \frac{(1-p)}{2} \int Dz \tanh \Phi^- + p \int Dz \tanh \Phi^{(0)}, \quad (4.11)$$

onde

$$\begin{aligned}
\Phi^\pm &= \beta(Jm + \sigma z \pm H_0) ; \\
\Phi^{(0)} &= \beta(Jm + \sigma z) ; \\
\int Dz (..) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2/2} (..) . \tag{4.12}
\end{aligned}$$

É importante mencionar que a instabilidade associada com a solução de simetria entre réplicas [25] em baixas temperaturas, está geralmente relacionada aos parâmetros caracterizados por dois índices de réplicas, como acontece no problema dos vidros de spins [59, 87]. No entanto, no presente sistema o parâmetro de ordem m^α depende de um único índice de réplicas, então tal instabilidade não ocorre.

Na seção seguinte as equações (4.10) e (4.11) serão utilizadas visando obter diversos diagramas de fases para o presente modelo. Embora a maioria das fronteiras críticas serão determinadas numericamente, alguns resultados analíticos podem ser obtidos em temperatura zero. Em $T = 0$, a energia livre e a magnetização são dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned}
f &= -\frac{J}{2}m^2 - \frac{H_0}{2}(1-p) \left[\operatorname{erf} \left(\frac{Jm + H_0}{\sigma\sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{Jm - H_0}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right] \\
&- \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}}(1-p) \left\{ \exp \left[-\frac{(Jm + H_0)^2}{2\sigma^2} \right] + \exp \left[-\frac{(Jm - H_0)^2}{2\sigma^2} \right] \right\} \\
&- \frac{2\sigma}{\sqrt{2\pi}} p \exp \left[-\frac{(Jm)^2}{2\sigma^2} \right] , \tag{4.13}
\end{aligned}$$

$$m = \frac{(1-p)}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{Jm + H_0}{\sigma\sqrt{2}}\right) + \frac{(1-p)}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{Jm - H_0}{\sigma\sqrt{2}}\right) + p \operatorname{erf}\left(\frac{Jm}{\sigma\sqrt{2}}\right). \quad (4.14)$$

4.3 Diagramas de fases

Normalmente, no RFIM são encontradas duas fases: a ferromagnética (**F**) e a paramagnética (**P**). Contudo, para a DP da equação (4.2), existe a possibilidade de três fases distintas : além da paramagnética ($m = 0$) há duas fases ferromagnéticas, **F**₁ e **F**₂ , caracterizadas por diferentes magnetizações (**F**₁ refere-se à fase ordenada com maior magnetização, isto é, $m_1 > m_2 > 0$). Próximo a uma transição contínua entre uma fase ordenada e uma desordenada, m é pequeno, e assim, é possível expandir a equação (4.11) em potências de m ,

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + A_7 m^7 + O(m^9), \quad (4.15)$$

onde os coeficientes são dados por

$$A_1 = \beta J \{1 - (1-p)\lambda_1 - p\lambda_1^{(0)}\}, \quad (4.16)$$

$$A_3 = -\frac{(\beta J)^3}{3} \{1 - 4[(1-p)\lambda_1 + p\lambda_1^{(0)}] + 3[(1-p)\lambda_2 + p\lambda_2^{(0)}]\}, \quad (4.17)$$

$$A_5 = \frac{(\beta J)^5}{15} \{2 - 17[(1-p)\lambda_1 + p\lambda_1^{(0)}] + 30[(1-p)\lambda_2 + p\lambda_2^{(0)}] - 15[(1-p)\lambda_3 + p\lambda_3^{(0)}]\} \quad (4.18)$$

$$A_7 = \frac{(\beta J)^7}{315} \{17 - 248[(1-p)\lambda_1 + p\lambda_1^{(0)}] + 756[(1-p)\lambda_2 + p\lambda_2^{(0)}] - 840[(1-p)\lambda_3 + p\lambda_3^{(0)}] + 315[(1-p)\lambda_4 + p\lambda_4^{(0)}]\}, \quad (4.19)$$

com

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2/2} \tanh^{2k} \beta(H_0 + \sigma z), \\ \lambda_k^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2/2} \tanh^{2k}(\beta\sigma z). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Para determinar uma fronteira crítica contínua considera-se $A_1 = 1$, com a condição $A_3 < 0$. Se uma fronteira de primeira ordem aparecer, a linha contínua termina quando $A_3 = 0$; em tais casos, a linha contínua e a de primeira ordem se encontram em um ponto tricrítico cujas coordenadas podem ser obtidas mediante a solução numérica das equações $A_1 = 1$ e $A_3 = 0$, com a condição $A_5 < 0$. Neste problema existe a possibilidade de surgir um ponto crítico de quarta ordem, o qual é obtido das condições $A_1 = 1$,

$A_3 = A_5 = 0$ e $A_7 < 0$. Também, quando duas fases ferromagnéticas distintas estão presentes, outros dois pontos críticos podem aparecer (aqui acompanhamos a classificação de Griffiths [86]): (i) o ponto crítico ordenado, que corresponde a um ponto crítico isolado dentro de uma região ordenada representando o final de uma linha de primeira ordem, a qual separa duas fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 ; (ii) o ponto crítico terminal, onde as três fases podem coexistir, correspondendo ao cruzamento de uma linha contínua que separa a fase paramagnética de uma das fases ferromagnéticas com uma linha de primeira ordem separando a fase paramagnética da outra fase ferromagnética. A posição dos pontos críticos definidos em (i) e (ii), assim como também a fronteira de primeira ordem, foram determinadas numericamente analisando os mínimos da energia livre. Por exemplo, dois mínimos iguais na energia livre, caracterizados por dois valores diferentes para a magnetização, $m_1 > m_2 > 0$, produz em um ponto da fronteira crítica que separa as fases \mathbf{F}_1 and \mathbf{F}_2 .

A seguir, serão apresentados diversos diagramas de fases deste modelo, tanto para temperaturas finitas, quanto para temperatura nula. Além da notação introduzida acima para as fases, nestes diagramas de fases serão utilizados símbolos e representações distintas para os pontos críticos e fronteiras críticas, os quais são descritos abaixo.

- Fronteira crítica contínua: linha contínua;
- Fronteira crítica de primeira ordem: linha pontilhada;
- Ponto tricrítico: representado por um círculo preto;

- Ponto crítico de quarta ordem: representado por um quadrado vazio;
- Ponto crítico ordenado: representado por um asterisco preto;
- Ponto crítico terminal: representado por um triângulo preto.

4.3.1 Fronteiras críticas para temperaturas finitas

Apresentamos agora os diagramas de fases para temperaturas finitas; estes diagramas são exibidos no plano das variáveis adimensionais, $(k_B T)/J - H_0/J$, para valores típicos de p e σ/J . Por completeza, em cada figura mostramos as formas das respectivas DPs da equação (4.2), com parâmetros típicos utilizados nos diagramas de fases.

Na figura 4.1 mostramos alguns diagramas de fases qualitativamente distintos do modelo, para o valor fixo $p = 0.2$ e valores típicos de σ/J . Na figura 4.1(a) representamos a DP da equação (4.2) para $p = 0.2$, $(H_0/J) = 0.56$, e as larguras σ/J utilizadas na obtenção dos diagramas de fases das figuras 4.1(c)–(f). O caso particular $(\sigma/J) = 0.1$ utilizado na figura 4.1(b), produz uma distribuição de três picos e não é apresentada na figura 4.1(a) para uma melhor visualização dos outros casos; também, a escolha $(H_0/J) = 0.56$ corresponde à região do diagrama de fases onde mudanças essenciais acontecem na criticalidade do sistema em baixas temperaturas. Pode-se notar que a fronteira crítica que separa a fase paramagnética (**P**) e a ferromagnética (**F**₁ e **F**₂) exhibe mudanças significativas ao incrementar σ/J . Para $(\sigma/J) = 0.1$ [cf. figura 4.1(b)], tem-se um diagrama de fases que é qualitativamente similar ao obtido no caso da distribuição trimodal [71], com um ponto tricrítico

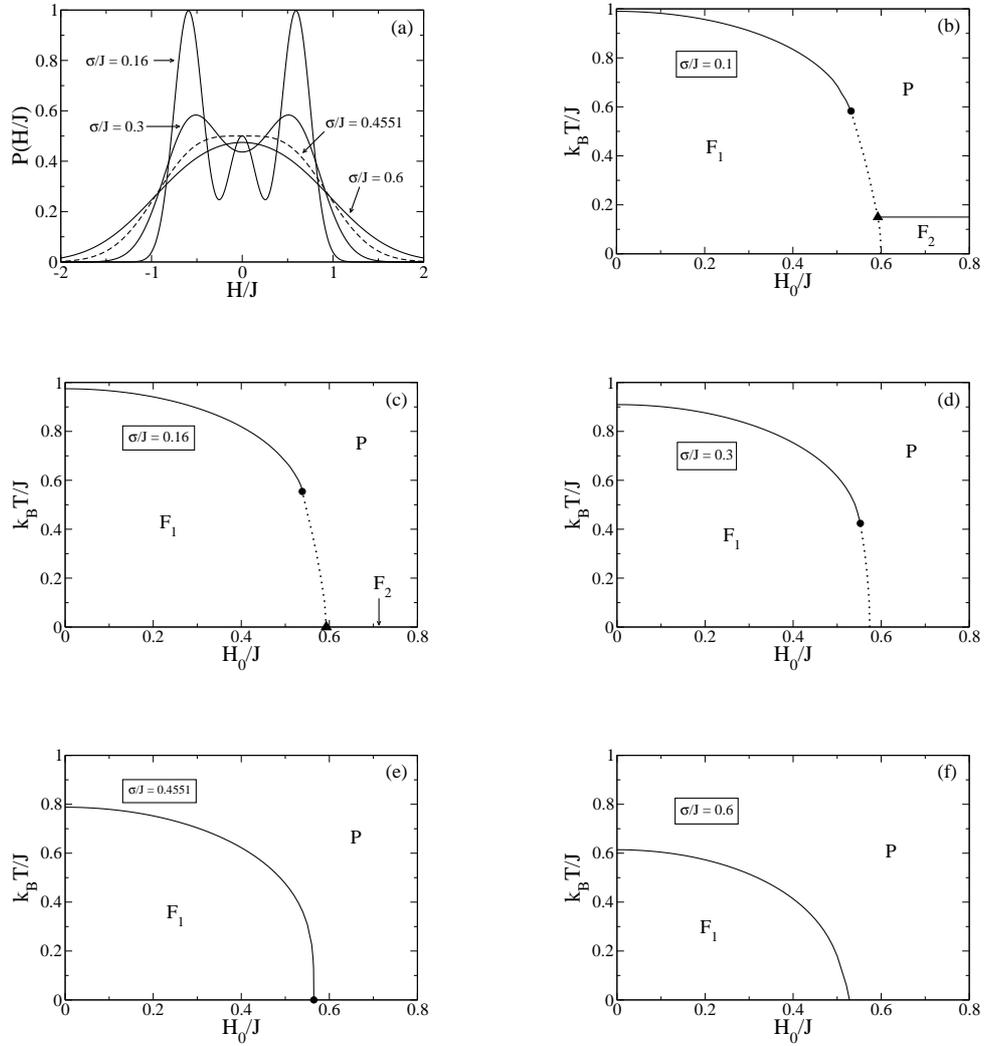


Figura 4.1: (a) A distribuição de probabilidades dada na equação (4.2), para $p = 0.2$ e $(H_0/J) = 0.56$ é representada para diversos valores de larguras. (b)–(f) são diagramas de fases mostrando as fronteiras críticas que separam a fase paramagnética (**P**) e as fases ferromagnéticas (**F₁** e **F₂**) para o ferromagneto com interações de alcance infinito na presença de um campo aleatório que obedece a uma distribuição dada por uma superposição de três gaussianas, para valores típicos de σ/J e $p = 0.2$. Os pontos críticos e as fronteiras são descritas no texto.

(círculo preto) e um ponto crítico terminal (triângulo preto) em uma temperatura finita menor, onde uma fronteira crítica contínua que separa as fases \mathbf{P} and \mathbf{F}_2 encontra uma fronteira de primeira ordem. Contudo, para valores maiores de σ/J estes pontos críticos caem para temperaturas mais baixas, de tal maneira que para $(\sigma/J) = 0.16$ pode-se observar o colapso do ponto crítico terminal em temperatura nula, isto é, a fase ferromagnética \mathbf{F}_2 acontece apenas para $T = 0$, tal como é apresentado na figura 4.1(c). Por conseguinte, para $p = 0.2$ o valor $(\sigma/J) = 0.16$ representa um limite para a existência da fase \mathbf{F}_2 . A partir da figura 4.1(a), pode-se notar que para $p = 0.2$, a existência da fase \mathbf{F}_2 é associada com uma DP para os campos caracterizados por três picos. Para $(\sigma/J) = 0.3$ [cf. figura 4.1(d)], o diagrama é qualitativamente similar ao obtido para a distribuição bimodal [17] ou a contínua de dois picos [82], onde pode-se encontrar um ponto tricrítico em temperaturas finitas e uma transição de primeira ordem em baixas temperaturas. Através de uma análise em temperatura nula (a qual será discutida depois), foi determinado analiticamente o valor $(\sigma/J) \approx 0.4551$ para o qual o ponto tricrítico atinge a temperatura nula, indicando a destruição completa da transição de primeira ordem para o caso $p = 0.2$, tal como é mostrado na figura 4.1(e). Neste caso, a correspondente DP apresenta um único máximo achatado em concordância com as referências [17, 68, 69]. Para valores ainda maiores de σ/J , tal como é mostrado na figura 4.1(f) para o caso $(\sigma/J) = 0.6$, a DP apresenta um único pico e a fronteira paramagnética-ferromagnética é toda contínua, análogo ao que acontece para o caso da distribuição gaussiana simples [67].

Há um valor especial de p , o qual será representado por p^* , que representa

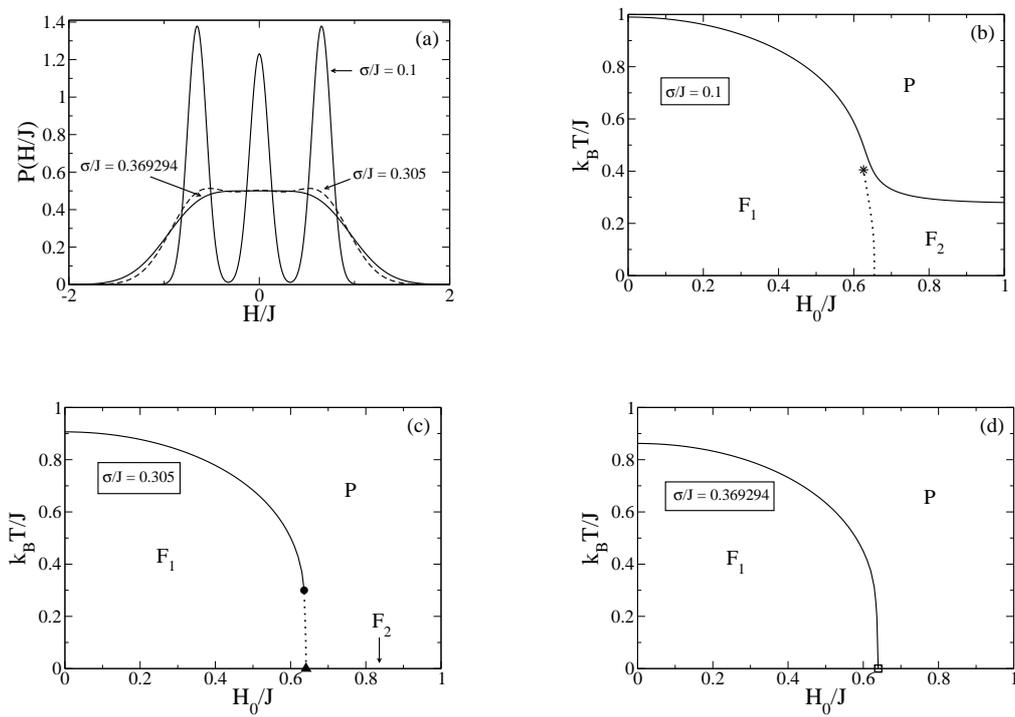


Figura 4.2: (a) Distribuição de probabilidades dada na equação (4.2), para $p = 0.308561$ e $(H_0/J) = 0.65$, é representada por diversos valores de largura. (b)–(d) Diagramas de fases mostrando as fronteiras críticas separando as fases paramagnética (**P**), e as ferromagnéticas (**F**₁ e **F**₂) para valores típicos de σ/J e $p = 0.308561$.

um limite superior para a existência de pontos tricríticos ao longo da fronteira paramagnética, caracterizado por um ponto de quarta ordem em temperatura nula. O valor $p^* \approx 0.308561$, assim como também as respectivas larguras, $(\sigma^*/J) \approx 0.369294$, serão determinadas na seção seguinte, através uma análise em temperatura nula. Na figura 4.2 mostramos diagramas de fases para $p = 0.308561$ e três valores diferentes de σ/J . Na figura 4.2(a) apresentamos a DP da equação (4.2) para $p = 0.308561$, $(H_0/J) = 0.65$, e as larguras σ/J utilizadas para obter os diagramas de fases das figuras 4.2(b)–(d); a escolha $(H_0/J) = 0.65$ está relacionada à região dos diagramas de fases onde fenômenos críticos de interesse ocorrem em baixas temperaturas. Na figura 4.2(b) mostramos o diagrama de fases para $(\sigma/J) = 0.1$, onde pode-se notar que a fronteira da fase paramagnética é completamente contínua; para valores de campos menores (maiores) esta fronteira crítica separa as fases \mathbf{P} e \mathbf{F}_1 (\mathbf{F}_2). No entanto, há uma curiosa linha de primeira ordem que separa as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 que termina em um ponto crítico ordenado (asterisco preto), acima do qual pode-se atravessar suavemente de uma fase para outra. Ao incrementar ligeiramente os valores de σ/J , observa-se que o ponto crítico ordenado desaparece, levando ao aparecimento tanto de pontos tricríticos, quanto de pontos críticos terminais em temperaturas finitas, produzindo um diagrama de fases que é qualitativamente similar ao mostrado na figura 4.1(b); este tipo de diagrama acontece tipicamente no intervalo $0.1 < (\sigma/J) < 0.3$. Contudo, tal como é apresentado na figura 4.2(c) para $(\sigma/J) = 0.305$, obtém-se um colapso do ponto crítico terminal em temperatura nula, com a fase \mathbf{F}_2 acontecendo só em temperatura nula, de maneira similar ao que aparece na figura 4.1(c), mas agora para um valor

maior de H_0/J . Ao comparar as figuras 4.1(c) e 4.2(c), pode-se notar que em alguns casos, é possível obter essencialmente diagramas de fases qualitativamente similares ao incrementar tanto p , quanto σ/J ; no entanto, para valores maiores destes parâmetros, a extensão da linha de transição de primeira ordem é reduzida. Cabe mencionar que em ambas figuras, a existência da fase \mathbf{F}_2 é associada com uma DP para os campos caracterizada por três picos. Na figura 4.2(d) mostramos o diagrama de fases para $(\sigma/J) = 0.369294$, no qual a linha de primeira ordem é totalmente suprimida. Cabe destacar que este efeito acontece também para outros valores de p através de um ponto trcrítico em $T = 0$ [cf. figura 4.1(e)]; contudo, o diagrama de fases da figura 4.2(d) é muito singular, no sentido de que o colapso da fronteira de primeira ordem em temperatura nula ocorre mediante um ponto crítico de quarta ordem. Para valores maiores de σ/J , a fronteira crítica que separa as fases \mathbf{P} e \mathbf{F}_1 é toda contínua, sendo qualitativamente idêntico ao diagrama da figura 4.1(f).

Outros diagramas de fases são mostrados na figura 4.3, para $p = 0.5$. Na figura 4.3(a) representamos a DP da equação (4.2) para tal valor de p , $(H_0/J) = 0.74$, e as larguras σ/J utilizadas para obter os diagramas de fases das figuras 4.3(b)–(d); a escolha $(H_0/J) = 0.74$ corresponde à região do diagrama de fases onde um ponto crítico ordenado aparece em baixas temperaturas. Na figura 4.3(b) apresentamos o diagrama de fases para o mesmo valor de σ/J das figuras 4.1(b) e 4.2(b), isto é, $(\sigma/J) = 0.1$; estas figuras sugerem que a existência da fase \mathbf{F}_2 é associada com distribuições que apresentam três picos. No entanto, para valores suficientemente pequenos de p , esta fase

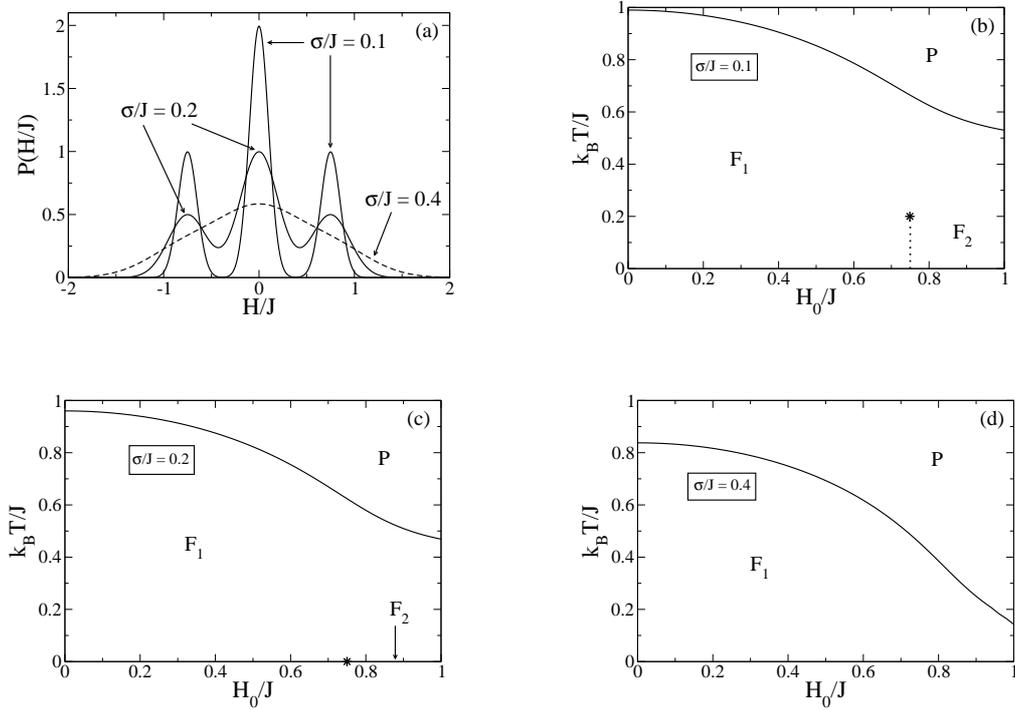


Figura 4.3: (a) Distribuição de probabilidade da equação (4.2), para $p = 0.5$ e $(H_0/J) = 0.74$, é representado por diversos valores das larguras. (b)–(d) Diagramas de fases exibindo as fronteiras críticas que separam as fases paramagnética (**P**) e as fases ferromagnéticas (**F**₁ e **F**₂) para valores típicos de σ/J e $p = 0.5$.

aparece junto com um ponto crítico terminal, tal como é mostrado na figura 4.1(b), enquanto que para valores maiores de p , a fronteira da fase paramagnética é toda contínua, e as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 estão separadas por uma fronteira de primeira ordem que termina em um ponto crítico ordenado. Na figura 4.3(b) é possível atravessar suavemente de uma fase ferromagnética para a outra, através de um caminho termodinâmico que liga estas fases acima do ponto crítico ordenado. Na figura 4.3(c) observa-se o colapso do ponto crítico ordenado com o eixo da temperatura nula, o qual é estimado numericamente no valor $(\sigma/J) = 0.20$, com o aparecimento da fase \mathbf{F}_2 em temperatura nula. Cabe mencionar que o diagrama de fases exibido na figura 4.3(c) é qualitativamente distinto daqueles mostrados nas figuras 4.1(c) e 4.2(c), no sentido de que o primeiro é caracterizado por uma fronteira paramagnética totalmente contínua e em temperatura nula, as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 estão separadas por um ponto crítico ordenado. Para $(\sigma/J) = 0.4$ na figura 4.3(d), a fronteira que separa as fases \mathbf{P} e \mathbf{F}_1 é contínua. No entanto, há uma diferença básica entre os diagramas de fases exibidos nas figuras 4.1(f) e 4.3(d): não há nenhum ponto em temperatura nula que separa estas duas fases, isto é, a fase \mathbf{F}_1 existe para todos os valores de H_0/J . Na verdade, para qualquer $(\sigma/J) \leq 0.4$ a fronteira da fase paramagnética nunca toca o eixo de temperatura nula, tal como é sugerido nas figuras 4.3(b)–(d); para valores maiores de σ/J , esta fronteira crítica encontra o eixo H_0/J , e tem-se um diagrama de fases qualitativamente similar àquele mostrado na figura 4.1(f).

Há alguns valores limites importantes associados à existência dos pontos críticos acima mencionados, conforme descritos a seguir.

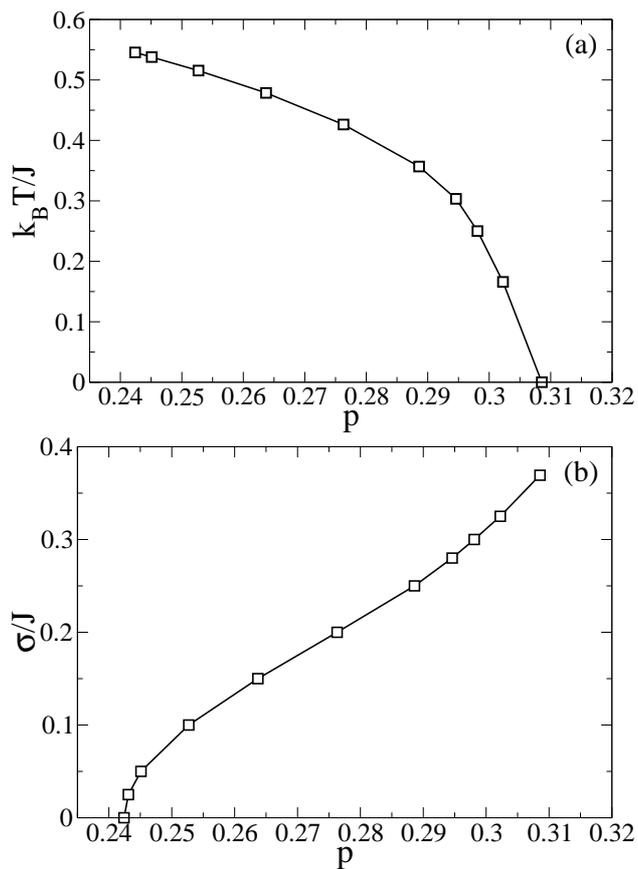


Figura 4.4: Projeções da linha de pontos críticos de quarta ordem em dois planos diferentes: (a) O plano $(k_B T)/J - p$, mostra as temperaturas críticas associadas com pontos de quarta ordem que existem no intervalo $8/33 \leq p \leq p^*$; (b) O plano $\sigma/J - p$. Os quadrados vazios representam pontos críticos de quarta ordem calculados, enquanto que as linhas são guias para os olhos.

(i) Numericamente verifica-se que não existem pontos críticos terminais em temperaturas finitas, nem nula, para $p \geq p^*$.

(ii) Foi também verificado numericamente que para $p \geq 0.93$, pontos críticos ordenados desaparecem; em consequência, este representa um limite para a fase \mathbf{F}_2 , a qual não aparece acima deste valor, inclusive em temperatura nula.

(iii) Mediante uma análise em temperatura nula, determinamos analiticamente que para $p^* \approx 0.308561$ existe um ponto crítico de quarta ordem nesta temperatura; este representa uma cota superior para a existência de pontos tricríticos.

(iv) Os pontos críticos de quarta ordem normalmente limitam a existência de pontos tricríticos e são algumas vezes considerados na literatura como limites superiores para os pontos tricríticos [71]. No caso da expansão em série de potências da equação (4.15), os mesmos existem também para temperaturas finitas, e são determinados pelas condições $A_1 = 1$, $A_3 = A_5 = 0$ e $A_7 < 0$, o que define uma linha no espaço de quatro dimensões $[(kT)/J, p, H_0/J, \sigma/J]$. Na figura 4.4 mostramos projeções da linha de pontos críticos de quarta ordem nos planos $(kT)/J - p$ [figura 4.4(a)] e $\sigma/J - p$ [figura 4.4(b)]. Estas projeções interpolam entre os pontos críticos de quarta ordem que acontecem para $p = 8/33$ ($\sigma = 0$, isto é, a distribuição trimodal [71]) e o valor limite em temperatura nula para a DP gaussiana tripla, $p^* \approx 0.308561$, o qual será determinado na seção seguinte.

A partir da análise acima, podemos concluir que é possível obter diagramas de fases qualitativamente similares para diferentes pares de parâmetros

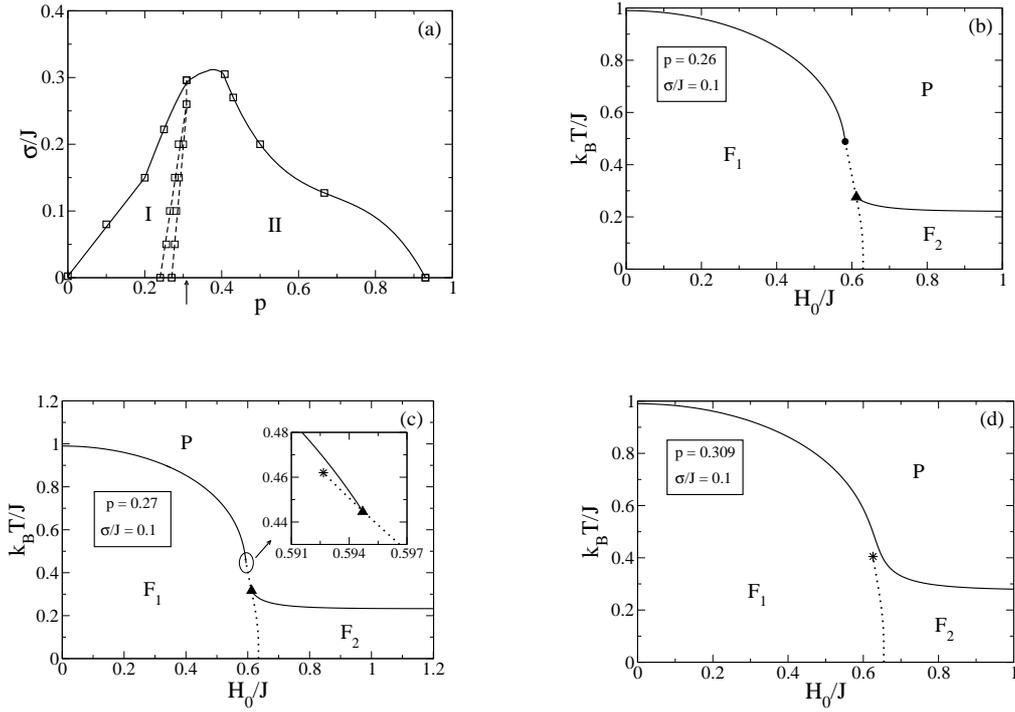


Figura 4.5: (a) Regiões no plano $\sigma/J - p$, associados com diagramas de fases qualitativamente distintos deste modelo; os quadrados vazios representam pontos calculados, entretanto as linhas são guias para os olhos; a seta representa o valor limite $p = p^*$. Nas regiões I e II os diagramas de fases são similares aos mostrados em (b) e (d), respectivamente. As duas linhas tracejadas que aparecem em (a) definem uma estreita região intermediária, que exibe um diagrama de fases caracterizado por dois pontos críticos terminais e um ponto crítico ordenado ao longo da fronteira da fase paramagnética, tal como é exibido em (c). O tipo de diagrama de fases na região intermediária aparece ao variar os parâmetros da distribuição (4.2) para passar da região I à região II (tal como é mostrado na seqüência (b), (c) e (d), para $(\sigma/J) = 0.1$).

$(p, \sigma/J)$. Essencialmente, estes diagramas são definidos pela presença de diferentes tipos de pontos críticos que podem aparecer neste modelo. A existência de pontos tricríticos foi já discutida nos ítems (iii) e (iv), enquanto que as regiões no plano $\sigma/J - p$ associadas com os pontos críticos ordenados e terminais são exibidas na figura 4.5(a). Ao longo do eixo $(\sigma/J) = 0$ nossos limites para a existência de pontos críticos terminais ($0 < p \leq 0.24$) e pontos críticos ordenados ($0.27 \leq p \leq 0.93$) estão de acordo com aqueles estimados na referência [71]; entre estes dois regimes, uma pequena região acontece, a qual é muito sutil do ponto de vista numérico, onde dois pontos críticos terminais e um ponto crítico ordenado aparecem. Esta região intermediária é reduzida ao aumentar o valor de σ/J e está limitada por duas linhas tracejadas na figura 4.5(a). Um diagrama de fases típico dentro desta região é mostrado na figura 4.5(c), o qual é caracterizado por uma fronteira crítica que separa as fases **P** and **F₁** que apresenta uma parte contínua, seguida por uma linha de primeira ordem em baixas temperaturas, sem nenhum ponto tricrítico. Cabe destacar que o tipo de diagrama mostrado na figura 4.5(c) acontece particularmente para $(\sigma/J) = 0$ para um intervalo de valores de p ligeiramente acima de $p = 8/33 \approx 0.24$, que representa a probabilidade na qual um ponto de quarta ordem ocorre em temperatura finita [71]. Verifica-se um efeito análogo para valores finitos de σ/J , no sentido em que a região intermediária da figura 4.5(a) corresponde à região estreita de pontos à direita da projeção da linha de quarta ordem no plano $\sigma/J - p$ da figura 4.4(b). Esta região intermediária aparece quando os pontos de quarta ordem surgem em temperaturas finitas e torna-se essencialmente indiscernível do o ponto de vista computacional, ao se aproximar do limite $p = p^*$, que corresponde ao

ponto crítico de quarta ordem em temperatura nula. O fato de que a região intermediária seja reduzida para valores maiores de σ é esperado, uma vez que um dos efeitos introduzidos pelo parâmetro σ consiste na destruição dos diversos tipos de comportamentos multicríticos. Na figura 4.5(a), a região I é associada aos diagramas de fases que apresentam um único ponto crítico terminal, tal como observamos na figura 4.5(b), enquanto que a região II é associada aos diagramas de fases que apresentam um único ponto crítico ordenado, tal como é mostrado na figura 4.5(d); pode-se passar da região I à região II através da seqüência de diagramas apresentados nas figuras 4.5(b)–(d). Os intervalos de p associados a estas duas regiões diminuem para valores maiores de σ/J , tal como é mostrado na figura 4.5(a); os pontos calculados ao longo das linhas cheias (quadrados vazios) representam limites superiores (em σ/J) para as regiões I e II, e nestes casos os pontos críticos correspondentes surgem em temperatura nula. Como exemplos típicos, temos os intervalos onde aparecem estes pontos, $\sigma/J \leq 0.08$ ($p = 0.1$) e $\sigma/J \leq 0.16$ ($p = 0.2$), na região I, enquanto que $\sigma/J \leq 0.2$ ($p = 0.5$) e $\sigma/J \leq 0.127$ ($p \approx 0.6667$), na região II. Por conseguinte, para um dado par de parâmetros $(p, \sigma/J)$ a forma qualitativa dos correspondentes diagramas de fases pode ser predita, mediante a utilização da figura 4.5(a).

4.3.2 Fronteiras críticas em temperatura nula

Alguns resultados analíticos podem ser obtidos a partir da investigação da energia livre e da magnetização em temperatura nula, dadas nas equações (4.13) e (4.14), respectivamente. Consideraremos $\sigma > 0$ na equação (4.2); o

caso $\sigma = 0$, isto é, a DP trimodal requer uma análise separada e os resultados são apresentados nas referências [70, 71]. Para tanto, aplica-se o mesmo procedimento descrito anteriormente para temperaturas finitas, partindo da expansão da equação (4.14) em potências de m ,

$$m = a_1 m + a_3 m^3 + a_5 m^5 + a_7 m^7 + O(m^9) , \quad (4.21)$$

onde

$$a_1 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{J}{\sigma} \right) \left\{ p + (1-p) \exp\left(-\frac{H_0^2}{2\sigma^2}\right) \right\} , \quad (4.22)$$

$$a_3 = \frac{1}{6} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{J}{\sigma} \right)^3 \left\{ (1-p) \left[\left(\frac{H_0}{\sigma} \right)^2 - 1 \right] \exp\left(-\frac{H_0^2}{2\sigma^2}\right) - p \right\} , \quad (4.23)$$

$$a_5 = \frac{1}{120} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{J}{\sigma} \right)^5 \left\{ (1-p) \left[\left(\frac{H_0}{\sigma} \right)^4 - 6 \left(\frac{H_0}{\sigma} \right)^2 + 3 \right] \right. \\ \left. \times \exp\left(-\frac{H_0^2}{2\sigma^2}\right) + 3p \right\} \quad (4.24)$$

$$a_7 = \frac{1}{5040} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{J}{\sigma} \right)^7 \left\{ (1-p) \left[\left(\frac{H_0}{\sigma} \right)^6 - 15 \left(\frac{H_0}{\sigma} \right)^4 + 45 \left(\frac{H_0}{\sigma} \right)^2 - 15 \right] \right. \\ \left. \times \exp\left(-\frac{H_0^2}{2\sigma^2}\right) - 15p \right\} . \quad (4.25)$$

Uma fronteira crítica contínua ocorre em temperatura nula segundo as condições, $a_1 = 1$ e $a_3 < 0$, as quais conduzem a uma relação envolvendo H_0/J , σ/J e p ,

$$\frac{\sigma}{J} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left\{ p + (1-p) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{H_0}{J} \right)^2 \left(\frac{J}{\sigma} \right)^2 \right] \right\}. \quad (4.26)$$

Pode-se notar que para $(H_0/J) = 0$ tem-se $(\sigma/J) = \sqrt{2/\pi} \approx 0.7979$ ($\forall p$), o que produz uma fronteira crítica para pequenos valores de H_0/J . Para $a_3 > 0$, há uma fronteira crítica contínua de primeira ordem em temperatura nula, que está normalmente associada com pontos críticos de ordem superior em temperaturas finitas. Um ponto tricrítico aparece em temperatura nula, desde que $a_1 = 1$, $a_3 = 0$, e $a_5 < 0$, de maneira que,

$$\frac{H_0}{\sigma} = \left[1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{J}{\sigma} \right) p \right]^{-1/2}. \quad (4.27)$$

Vamos analisar o coeficiente a_5 , com as condições $a_1 = 1$, $a_3 = 0$. Mediante a substituição das equações (4.26) e (4.27) na equação (4.24), obtém-se

$$a_5 = \frac{1}{120} \left(\frac{J}{\sigma} \right)^4 \left\{ \left[1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{J}{\sigma} \right) p \right]^{-1} - 3 \right\}, \quad (4.28)$$

levando a $a_5 < 0$ para $\left[1 - \frac{2}{\pi} \left(\frac{J}{\sigma} \right) p \right]^{-1} < 3$. Deve-se notar que para $p = 0$, isto é, para a DP gaussiana dupla [82], os coeficientes a_5 são sempre negativos; no entanto, no presente caso pode-se ter $a_5 = 0$, de tal forma que existe a possibilidade de ocorrência de um ponto crítico de quarta ordem. Este ponto em temperatura nula é único ao considerar a distribuição dada na equação (4.2) e acontece para um conjunto de parâmetros $(p^*, H_0^*/J, \sigma^*/J)$, que serão

determinados abaixo. Considerando $a_5 = 0$,

$$\frac{\sigma}{J} = \frac{3}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} p, \quad (4.29)$$

e utilizando este resultado na equação (4.27), obtém-se

$$\frac{H_0}{\sigma} = \sqrt{3}. \quad (4.30)$$

Tomando $a_3 = 0$ e utilizando as equações (4.29) e (4.30) resulta em

$$p^* = 2 (2 + e^{3/2})^{-1} \approx 0.308561, \quad (4.31)$$

o que pode ser substituído nas equações (4.29), (4.30) para produzir, respectivamente,

$$\frac{\sigma^*}{J} = \frac{6}{\sqrt{2\pi}} (2 + e^{3/2})^{-1} \approx 0.369294; \quad \frac{H_0^*}{J} = 3\sqrt{\frac{6}{\pi}} (2 + e^{3/2})^{-1} \approx 0.639637. \quad (4.32)$$

Por conseguinte, para o conjunto de parâmetros das equações (4.31) e (4.32) tem-se um ponto crítico de quarta ordem em temperatura nula, tal como foi mostrado na figura 4.2(d), e também exibido na figura 4.6. No presente problema, o ponto crítico de quarta ordem em temperatura nula pode ser

interpretado como um limite para a existência de pontos tricríticos tanto em temperatura nula, quanto para temperaturas finitas. Para $p > p^*$, não há nenhum ponto tricrítico para valores arbitrários de σ/J and H_0/J , embora um ponto crítico ordenado possa ainda acontecer para temperaturas finitas (cf. figura 4.3(b)), assim como também para temperatura nula [ver figura 4.6]. Este limite é associado com uma DP achatada, tal como é mostrado na figura 4.2(a), de acordo com as condições para a existência de pontos tricríticos [17, 68, 69].

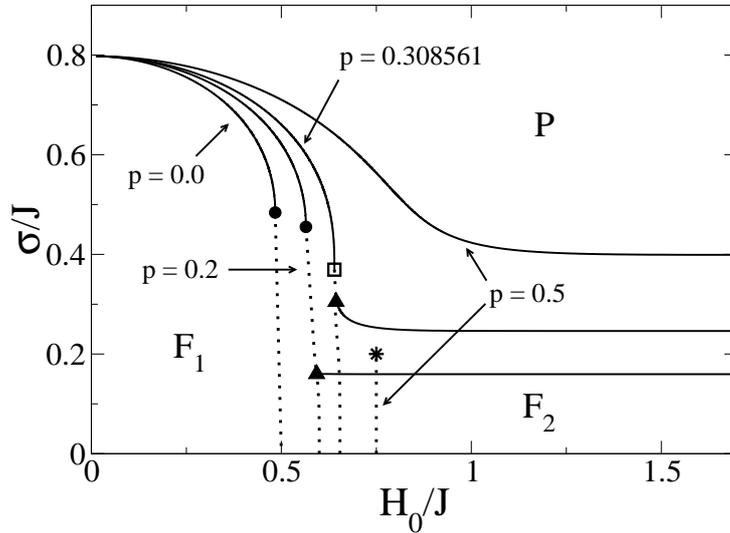


Figura 4.6: Diagramas de fases em temperatura nula para valores típicos de p . As fronteiras críticas separam a fase paramagnética (\mathbf{P}) e as fases ferromagnéticas (\mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2).

Os diagramas de fases do modelo em temperatura nula são apresentados na figura 4.6 para diversos valores de p . Pode-se notar que além de pontos tricríticos e do ponto de quarta ordem mencionado acima, pontos críticos ter-

minais e ordenados também aparecem em $T = 0$. Estes dois últimos pontos foram determinados mediante uma análise da energia livre dada na equação (4.13), em temperatura nula, analogamente ao que foi feito para temperaturas finitas. Comparando os diagramas de fases da figura 4.6 com aqueles em temperaturas finitas, pode-se notar que a largura σ produz desordem, desempenhando um papel para $T = 0$, que é análogo ao efeito da temperatura; como exemplos, podem ser observados os diagramas para $p = 0$, $p = 0.2$, e $p = 0.5$, na figura 4.6, similares àqueles mostrados nas figuras 4.1(d), 4.1(b), e 4.3(b), respectivamente, ao considerar a correspondência $\sigma \leftrightarrow T$.

4.4 Conclusões

O modelo de Ising com interações de alcance infinito, com um campo aleatório que obedece a uma distribuição que consiste em uma superposição de três gaussianas com a mesma largura σ , centradas em $H = 0$ e $H = \pm H_0$, com probabilidades p e $(1 - p)/2$, respectivamente, foi investigado. No limite $\sigma \rightarrow 0$, esta distribuição resulta em uma trimodal, um caso já estudado na literatura [71], que apresenta uma grande riqueza de fenômenos multicríticos. Contudo, ao graduar a desordem mediante o parâmetro σ , podemos obter essencialmente todos os tipos de diagramas de fases obtidos em estudos anteriores. Também, nossa análise em temperatura nula mostra uma grande variedade de fronteiras críticas, similares às obtidas em temperaturas finitas, o que pode ser contrastado com a simplicidade do diagrama de fases da distribuição trimodal, onde apenas um único ponto crítico ordenado é possível de ser obtido.

O presente modelo é apropriado para a descrição de alguns antiferromagnetos diluídos, os quais, na presença de uma campo magnético externo uniforme exibem também grande variedade de fenômenos multicríticos. Como exemplo de um candidato temos o $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, o qual tem sido modelado através de um ferromagneto de Ising sob ação de um campo aleatório, cuja distribuição é bem representada pela superposição de duas partes; uma distribuição trimodal, e uma distribuição contínua [64]. Este composto apresenta uma fronteira crítica de primeira ordem que desaparece ao aumentar a aleatoriedade; tal efeito foi descrito recentemente em termos de um modelo mais simples [82]. Contudo, é provável que o composto $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$, ou outro similar, possa vir a apresentar um comportamento multicrítico mais complicado, descrito apropriadamente ao ajustar os parâmetros da distribuição mais geral estudada neste capítulo. O modelo apresentado neste estudo pode ser capaz de descrever tais fenômenos.

Capítulo 5

Sistemas tipo Ising interagentes na presença de campos magnéticos aleatórios

Os modelos de spins clássicos podem ser aplicados não só na modelagem de sistemas magnéticos, mas também em em uma grande variedade de outros sistemas, tais como nos cristais moleculares. Estes cristais exibem uma fase plástica [88], a qual é caracterizada pela desordem nas orientações moleculares incorporadas numa ordem translacional da estrutura definida pelas posições dos centros de massas das moléculas. Um protótipo de tais materiais é o CBr_4 [89]. Na situação inversa estão os cristais líquidos, os quais apresentam ordenamento orientacional e desordem translacional. A dinâmica da reorientação em fases plásticas é complexa; além de oscilações ao redor de orientações preferenciais permitidas pela simetria, consideráveis saltos de amplitude são incluídos desde uma orientação a outra. Para descrever tal

fenômeno modelos de spins têm sido utilizados [90]. Obstruções configuracionais fazem com que as orientações dependam da estrutura translacional da rede, a qual induz a fortes acoplamentos de translação-rotação. Por conseguinte, costuma-se propor um modelo, o qual consiste de N moléculas, as quais podem estar centradas em sítios que pertencem a duas redes superpostas A e B. O estado fundamental é definido de maneira que todas as moléculas ocupam uma das redes A ou B. Ao aumentar a temperatura, algumas moléculas passam a ocupar os sítios vazios. Por exemplo, os sítios B passam a ser ocupados se a rede A é totalmente ocupada em temperatura nula. Ao alcançar a temperatura crítica, a ordem posicional de longo alcance é destruída com igual probabilidade de ocupação para os sítios das redes A e B. Para modelar esta situação e levar em conta o custo da energia para mover uma molécula de um sítio a outro, costuma-se introduzir uma variável de spin de Ising T_i . Se a molécula i ocupa um sítio da rede A, então $T_i = 1$, entretanto $T_i = -1$ para um sítio da rede B. Um acoplamento ferromagnético é adicionado entre as moléculas mais próximas (primeiros vizinhos), o qual sugere um hamiltoniano para as N moléculas dado por

$$H_T = -J_T \sum_{(ij)} T_i T_j . \quad (5.1)$$

Visando considerar os graus de liberdade rotacionais [90], que caracterizam os cristais plásticos, é introduzida uma outra variável R_i , associada à molécula i . Nos cristais plásticos a simetria determina um conjunto discreto de possíveis orientações no equilíbrio. No NH_4^+Cl^- existem duas orientações equivalentes, entretanto no $\text{C}(\text{CH}_3)_4$ o número de orientações é seis; para simplificar o mod-

elo é possível considerar apenas duas orientações, de maneira que $R_i = \pm 1$. No estado fundamental todas as moléculas apresentam a mesma orientação; a destruição da ordem rotacional de longo alcance terá lugar quando estas orientações se tornarem equiprováveis. Logo, uma contribuição para o hamiltoniano que considera o custo da energia para reverter uma orientação é dada por,

$$H_R = -J_R \sum_{(i,j)} R_i R_j . \quad (5.2)$$

É importante incluir o acoplamento translacional-rotacional, que pode ser representado pela contribuição,

$$H_{TR} = - \sum_i (hT_i + h_i) R_i , \quad (5.3)$$

onde h é uma grandeza positiva da parte linear do acoplamento translacional-rotacional e h_i é um campo aleatório acoplado a R_i . Este campo surge de acoplamentos não lineares entre T_i e R_i [91, 92, 93]. Por conseguinte, o hamiltoniano total é dado por

$$H = -J_T \sum_{(ij)} T_i T_j - J_R \sum_{(i,j)} R_i R_j - h \sum_i T_i R_i - \sum_i h_i R_i . \quad (5.4)$$

Isto motiva o estudo de sistemas com spins interagentes com aleatoriedade nos campos externos. Na seção seguinte vamos considerar um modelo de spins, baseado no hamiltoniano acima, com interações de alcance infinito.

5.1 Dois sistemas do tipo Ising interagentes na presença de campos externos aleatórios

O modelo a ser estudado neste capítulo consiste em dois sistemas de spins interagentes caracterizado pelo seguinte hamiltoniano,

$$H = -\frac{J}{N} \sum_{(ij)} \tau_i \tau_j - \frac{J}{N} \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - D \sum_i \sigma_i \tau_i - \sum_i h_i^\sigma \sigma_i - \sum_i h_i^\tau \tau_i, \quad (5.5)$$

onde $\tau_i = \pm 1$, $\sigma_i = \pm 1$, e $\{h_i^\sigma\}$, $\{h_i^\tau\}$ são campos aleatórios em cada sítio. A soma $\sum_{(ij)}$ abrange todos os pares distintos de spins, onde $i = 1, \dots, N$, e D representa a interação entre os spins σ_i e τ_i . Note que o caso particular $D = 0$ corresponde a dois sistemas de Ising independentes. Podemos obter a energia livre do sistema mediante procedimentos análogos àqueles aplicados no capítulo 4, de maneira que a energia livre por sítio pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{2} J m_\tau^2 + \frac{1}{2} J m_\sigma^2 \\ &- \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dh^\tau dh^\sigma P(h^\tau, h^\sigma) \log A, \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} A &= 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(m_\tau + m_\sigma + h^\tau + h^\sigma)) \\ &+ 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(m_\tau - m_\sigma + h^\tau - h^\sigma)), \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde $P(h^\tau, h^\sigma)$ é a distribuição de probabilidades conjunta para os campos externos aplicados num dado sítio de cada sistema. As magnetizações m_τ e m_σ são dadas por

$$m_\tau = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dh^\tau dh^\sigma P(h^\tau, h^\sigma) \frac{B_+}{A}, \quad (5.8)$$

$$m_\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dh^\tau dh^\sigma P(h^\tau, h^\sigma) \frac{B_-}{A}, \quad (5.9)$$

respectivamente, onde

$$\begin{aligned} B_\pm &= 2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(m_\tau + m_\sigma + h^\tau + h^\sigma)) \\ &\pm 2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(m_\tau - m_\sigma + h^\tau - h^\sigma)), \end{aligned} \quad (5.10)$$

Vamos considerar duas situações diferentes no que se refere às distribuições dos campos externos. A primeira consiste em estabelecer que os campos $\{h_i^\tau\}$ e $\{h_i^\sigma\}$ estejam totalmente correlacionados; neste caso consideraremos $h_i^\tau = h_i^\sigma = h_i$. É importante salientar que esta situação é bastante comum nos modelos magnéticos, embora não seja adequada para a descrição dos cristais plásticos, conforme sugere a equação (5.4). Logo, $m_\tau = m_\sigma = m$, devido à simetria da energia livre. Se cada h_i assumir os valores $\pm h_0$ com igual probabilidade, então as equações (5.6), (5.8) e (5.9) são reduzidas a duas equações,

$$f = Jm^2 - \frac{1}{\beta} \log[2 \exp(\beta D) \cosh(2\beta h_0) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(2\beta Jm)], \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned}
m = & \frac{1}{2} \left[\frac{\sinh(2\beta(Jm + h_0))}{\cosh(2\beta(Jm + h_0)) + \exp(-2\beta D)} \right] \\
& + \frac{1}{2} \left[\frac{\sinh(2\beta(Jm - h_0))}{\cosh(2\beta(Jm - h_0)) + \exp(-2\beta D)} \right]. \quad (5.12)
\end{aligned}$$

Os diagramas de fases podem ser obtidos analogamente àqueles do capítulo 4, através de uma análise da energia livre e de uma expansão em série da equação (5.12); estes diagramas são exibidos na figura 5.1. Para $D = 0$ recupera-se o resultado já conhecido do RFIM [17]; entretanto, para valores positivos de D os diagramas de fases não mudam qualitativamente, com um ponto tricrítico (círculo preto) representando a conexão entre as fronteiras contínua (linha contínua) e de primeira ordem (linha pontilhada).

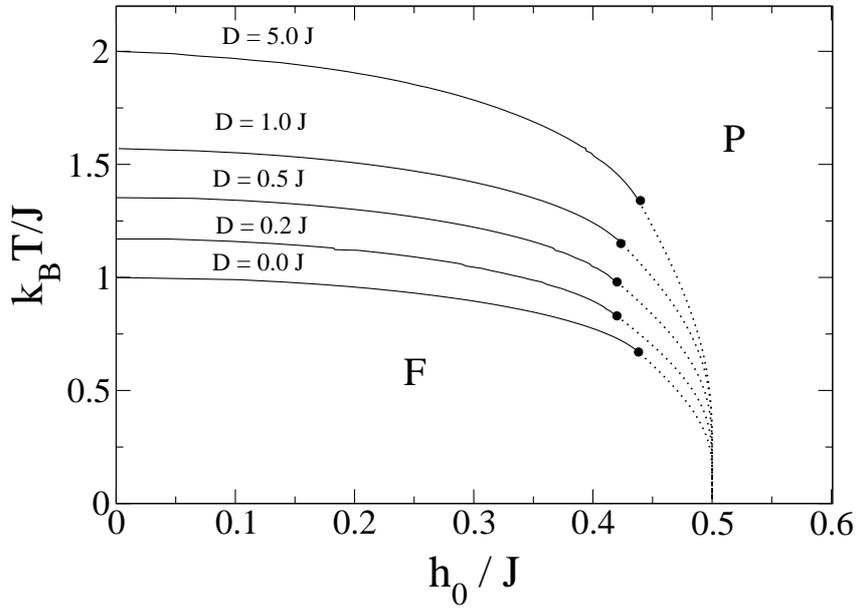


Figura 5.1: Diagrama de fases obtido a partir das equações (5.11) e (5.12), para diversos valores da constante de interação D . Note que para $D = 0$ os sistemas são independentes, e portanto recupera-se a solução do RFIM [17].

A segunda situação a ser considerada, a qual é relevante para a descrição dos cristais plásticos da equação (5.4), corresponde aos campos h_i^τ e h_i^σ totalmente decorrelacionados; desta forma, para cada índice i temos,

$$P(h^\tau, h^\sigma) = P(h^\tau)P(h^\sigma) . \quad (5.13)$$

Na análise a seguir consideraremos

$$P(h^\tau) = \frac{1}{2}\delta(h^\tau - h_0) + \frac{1}{2}\delta(h^\tau + h_0) , \quad (5.14)$$

$$P(h^\sigma) = \frac{1}{2}\delta(h^\sigma - h_0) + \frac{1}{2}\delta(h^\sigma + h_0) . \quad (5.15)$$

Com esta nova distribuição de probabilidades as equações (5.6),(5.8) e (5.9) adquirem a seguinte forma,

$$\begin{aligned} f &= \frac{1}{2}Jm_\tau^2 + \frac{1}{2}Jm_\sigma^2 \\ &- \frac{1}{4\beta} \log [2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))] \\ &- \frac{1}{4\beta} \log [2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))] \\ &- \frac{1}{4\beta} \log [2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))] \\ &- \frac{1}{4\beta} \log [2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))] , \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned}
m_\tau &= \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))} \right] \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))}{2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))} \right] \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))}{2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))} \right] \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))} \right], \\
&\hspace{15em} (5.17)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_\sigma &= \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma + 2h_0)) - 2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))} \right] \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{-2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))}{2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))} \right] \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{-2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))}{2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma + 2h_0)) + 2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma))} \right] \\
&- \frac{1}{4} \left[\frac{2 \exp(\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma - 2h_0)) - 2 \exp(-\beta D) \sinh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))}{2 \exp(\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau + Jm_\sigma - 2h_0)) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(\beta(Jm_\tau - Jm_\sigma))} \right]. \\
&\hspace{15em} (5.18)
\end{aligned}$$

Ao efetuar a diferença das equações (5.17) – (5.18) obtém-se

$$(m_\tau - m_\sigma) \propto \sinh(\beta J(m_\tau - m_\sigma)) , \quad (5.19)$$

o que implica que $m_\tau = m_\sigma = m$ é uma solução do sistema. Além disso, uma análise numérica das equações (5.17) e (5.18) sugerem que esta é a única solução em temperatura finita. Por conseguinte, considerando esta solução, a energia livre e a magnetização resultam em,

$$\begin{aligned} f &= Jm^2 - \frac{1}{4\beta} \log [2 \exp(\beta D) \cosh(2\beta(Jm + h_0)) + 2 \exp(-\beta D)] \\ &- \frac{1}{2\beta} \log [2 \exp(\beta D) \cosh(2\beta Jm) + 2 \exp(-\beta D) \cosh(2\beta h_0)] \\ &- \frac{1}{4\beta} \log [2 \exp(\beta D) \cosh(2\beta(Jm - h_0)) + 2 \exp(-\beta D)] , \end{aligned} \quad (5.20)$$

$$\begin{aligned}
m &= \frac{1}{4} \left[\frac{\sinh(2\beta(m + h_0))}{\cosh(2\beta(m + h_0)) + \exp(-2\beta D)} \right] \\
&+ \frac{1}{4} \left[\frac{\sinh(2\beta(m - h_0))}{\cosh(2\beta(m - h_0)) + \exp(-2\beta D)} \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[\frac{\sinh(2\beta Jm)}{\cosh(2\beta Jm) + \exp(-2\beta D) \cosh(2\beta h_0)} \right] .
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Para determinar a fronteira crítica contínua, pontos tricríticos e de quarta ordem, é conveniente expandir o lado direito da equação (5.21) até a sétima ordem em m , de tal forma que

$$m = A_1 m + A_3 m^3 + A_5 m^5 + A_7 m^7 + O(m^9) . \tag{5.22}$$

Os coeficientes acima não serão explicitados por serem muito longos. No entanto, é conveniente lembrar que a fronteira contínua calcula-se pela condição $A_1 = 1$ e $A_3 < 0$, pontos tricríticos por intermédio de $A_1 = 1$, $A_3 = 0$, $A_5 < 0$, e os pontos críticos de quarta ordem acontecem quando $A_1 = 1$, $A_3 = 0$, $A_5 = 0$, $A_7 < 0$. As fronteiras de primeira ordem e demais pontos críticos são obtidas mediante uma análise da energia livre.

5.1.1 Análise em temperatura nula para o caso dos campos descorrelacionados

Para estudar o comportamento do sistema em temperatura nula tomamos o limite $\beta \rightarrow \infty$ nas equações (5.16), (5.17) e (5.18). Desta maneira, obtemos configurações que dependem dos valores considerados para D/J . Quatro fases ordenadas \mathbf{F}_1 , \mathbf{F}_2 , \mathbf{F}_3 e \mathbf{F}_4 foram encontradas, as quais correspondem a $(m_\tau, m_\sigma) = (1, 1)$, $(m_\tau, m_\sigma) = (1/2, 1/2)$, $(m_\tau, m_\sigma) = (0, 1/2)$ e $(m_\tau, m_\sigma) = (1/2, 0)$, respectivamente.

Na figura 5.2 pode-se observar três seções típicas de diagramas de fases que dependem dos valores de D/J . Para $0 \leq D/J < 1/2$, duas regiões distintas existem, correspondendo às fases ordenada \mathbf{F}_1 e paramagnética \mathbf{P} , as quais coexistem em $(h_0/J) = (D/J + 1)/2$. Em $(D/J) = 1/2$ temos $(h_0/J) = 3/4$, representado por um diamante aberto, onde há uma coexistência das fases \mathbf{F}_1 , \mathbf{F}_2 , \mathbf{F}_3 , \mathbf{F}_4 , com a fase paramagnética. Para $(D/J) > 1/2$, há três regiões distintas, separadas pelos pontos $(h_0/J) = 3/4$ e $(h_0/J) = D/J + 1/4$. No primeiro ponto as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 coexistem, e no segundo, representado por um diamante preto, coexistem as fases \mathbf{F}_2 , \mathbf{F}_3 e \mathbf{F}_4 , com a fase \mathbf{P} . Cabe mencionar que os únicos pontos onde a solução $m_\tau \neq m_\sigma$ existe são aqueles representados pelos diamantes, sendo $m_\tau = m_\sigma$ a única solução encontrada em temperatura finita. Estes resultados são sintetizados no diagrama de fases da figura 5.3.

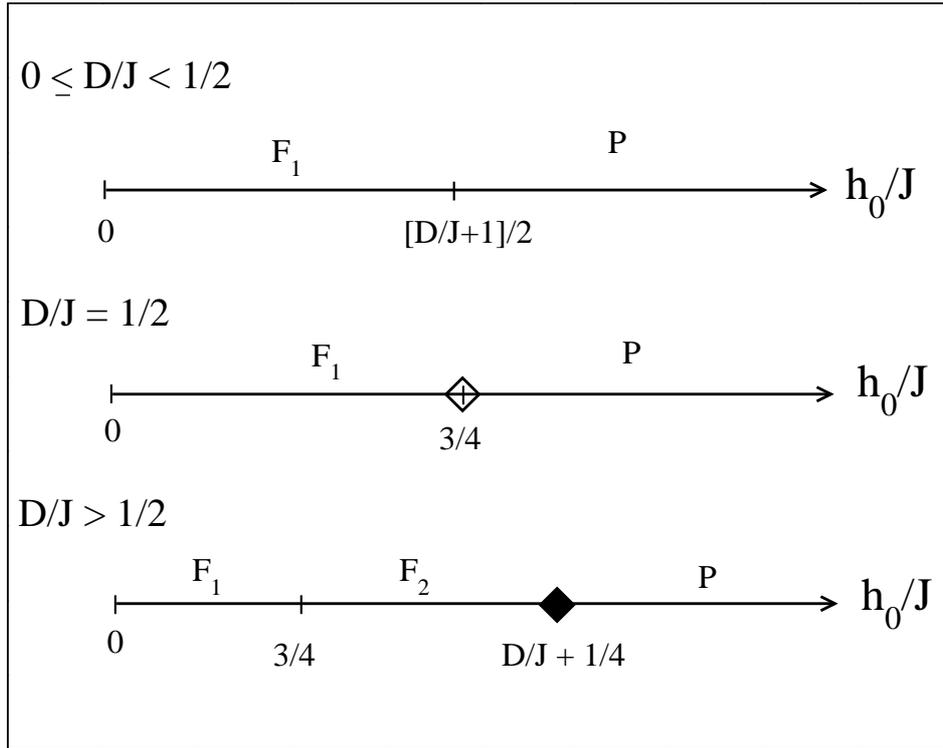


Figura 5.2: Diagrama de fases em temperatura nula para o modelo definido pelo hamiltoniano da equação (5.5), com os campos descorrelacionados dados pelas equações (5.13)-(5.15), ao longo do eixo h_0/J , para diversas faixas do parâmetro D/J . As fases F_1 e F_2 correspondem a $(m_\tau, m_\sigma) = (1, 1)$ e $(m_\tau, m_\sigma) = (1/2, 1/2)$, respectivamente. Com exceção dos pontos representados por diamantes, os demais pontos ao longo do eixo h_0/J correspondem a soluções com $m_\tau = m_\sigma$. O diamante aberto representa o ponto onde as fases F_1 , F_2 , coexistem com as fases F_3 e F_4 , as quais correspondem a $(m_\tau, m_\sigma) = (0, 1/2)$ e $(m_\tau, m_\sigma) = (1/2, 0)$, respectivamente. O diamante preto representa o ponto onde as fases F_2 , F_3 e F_4 coexistem com a fase P .

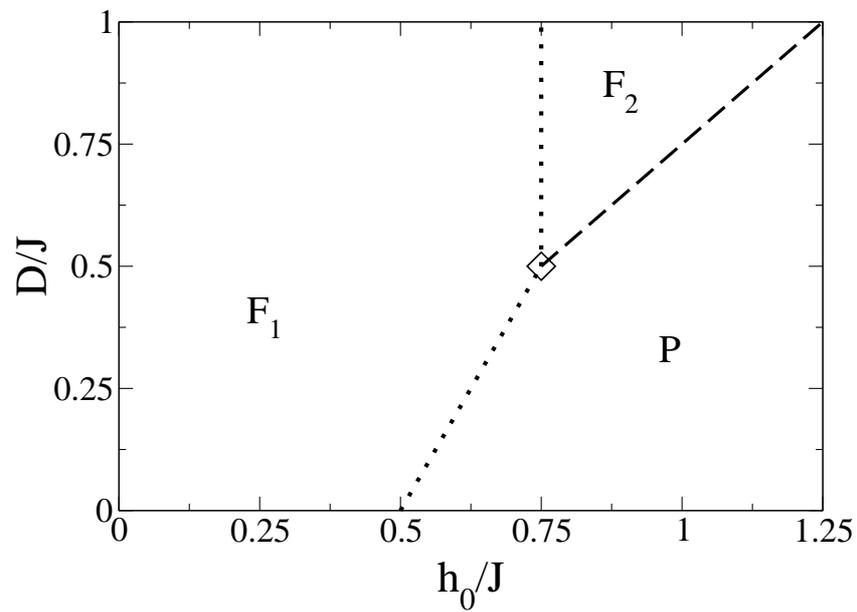


Figura 5.3: Diagrama de fases em temperatura nula para o modelo definido pelo hamiltoniano da equação (5.5), com os campos descorrelacionados dados pelas equações (5.13)-(5.15). As linhas pontilhadas correspondem a transições de primeira ordem, enquanto que a linha tracejada corresponde a uma linha de coexistência entre as fases F_2 , F_3 , F_4 e P (pontos representados pelo diamante preto na figura 5.2). O diamante aberto representa um ponto onde as cinco fases do modelo coexistem.

5.1.2 Diagramas de fases em temperatura finita para o caso dos campos descorrelacionados

As diferentes topologias obtidas nos diagramas de fases correspondem aos diversos valores assumidos pelo parâmetro adimensional D/J , e têm relação com as três diferentes situações apresentadas em temperatura nula na figura 5.2. Para $0 \leq D/J < 1/2$, as figuras 5.4(a), (b), (c) e (d) exibem diferentes topologias dos diagramas de fases obtidos neste intervalo. Em 5.4(a) é mostrado um diagrama típico onde aparece um único ponto tricrítico representando o encontro de uma fronteira contínua com uma de primeira ordem, que separa as fases \mathbf{P} e \mathbf{F}_1 . Esta situação apresenta-se no subintervalo $0 \leq D/J < 0.3535$. Em 5.4(b) é mostrado o diagrama para $D/J = 0.3535$, onde o ponto tricrítico acima transforma-se em um ponto crítico de quarta ordem, representado pelo quadrado aberto. Este ponto representa um limite para a existência de pontos tricríticos. Em 5.4(c) apresentamos o diagrama de fases para $D/J = 0.45$; observa-se que neste caso a linha de primeira ordem termina em um ponto crítico ordenado (representado pelo asterisco), enquanto que a fronteira contínua termina em um ponto crítico terminal (representado por um triângulo preto). Notamos que o segmento que une o ponto crítico terminal com o ponto crítico ordenado separa duas fases ferromagnéticas diferentes denotadas por \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 . Para $D/J = 0.48$, vemos em 5.4(d) que agora a fronteira contínua não termina em um ponto crítico terminal, mas em um ponto tricrítico que dá início a uma fronteira de primeira ordem que por sua vez, finaliza em outra linha de primeira ordem; o ponto de cruzamento destas duas fronteiras de primeira ordem é representado pelo

triângulo aberto.

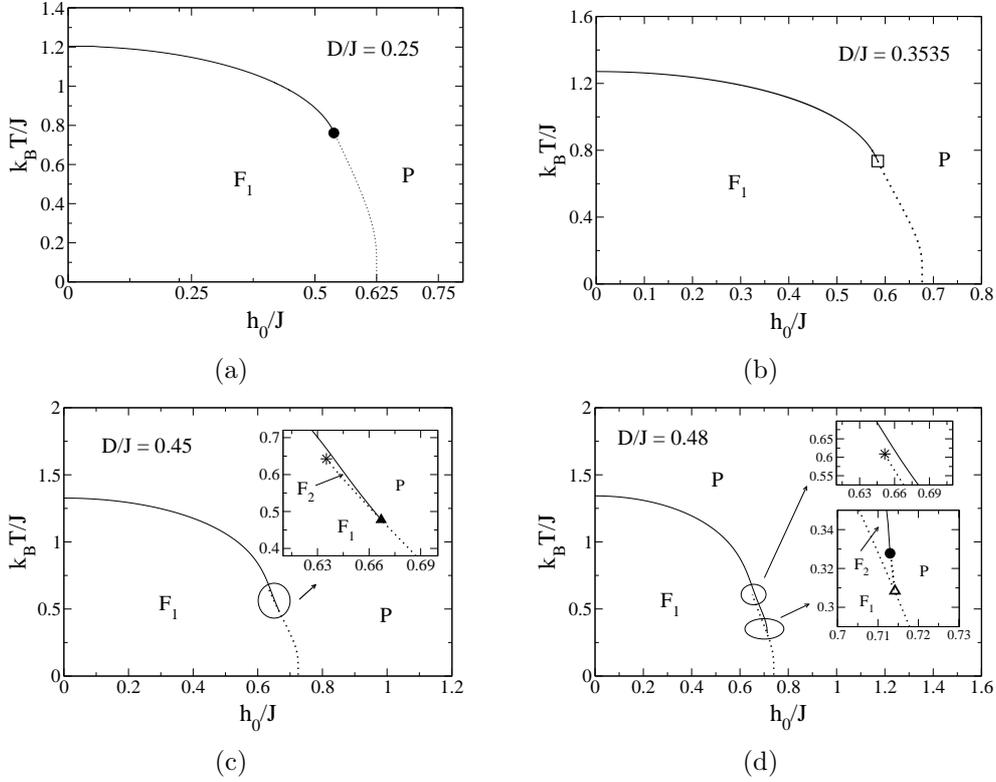


Figura 5.4: Diferentes topologias dos diagramas de fases obtidos para o intervalo $0 \leq D/J < 1/2$.

A figura 5.5 mostra o diagrama de fases para caso $D/J = 1/2$. A diferença qualitativa deste diagrama com aquele obtido na figura 5.4(d) está no ponto $k_B T/J = 0, h_0/J = 3/4$, onde coexistem as fases $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2, \mathbf{F}_3, \mathbf{F}_4$, e \mathbf{P} . Para descrever o que acontece nas proximidades deste ponto, calculamos a energia livre para uma temperatura próxima a zero, em $(D/J) = 0.5$. Na figura 5.6(a) exibimos o gráfico tridimensional da energia livre em função dos parâmetros de ordem m_τ e m_σ para $(h_0/J) = 0.75$. Notamos à primeira vista que sete mínimos da energia estão aproximadamente na mesma altura. Em 5.6(b) os planos $m_\tau = m_\sigma$ (representado pela linha contínua), $m_\sigma =$

$0, m_\tau \neq 0$ e $m_\sigma \neq 0, m_\tau = 0$ (representados pela linha tracejada), estão superpostos em um gráfico bidimensional para representar esta situação, onde três fases ordenadas com suas correspondentes simétricas, coexistem com a fase paramagnética. Em 5.6(c) vemos que para um valor do campo um pouco menor, tal como $h_0/J = 0.748$, a energia livre é minimizada no plano onde $m_\tau = m_\sigma = \pm 1$. Em 5.6(d), com $(h_0/J) = 0.752$, vemos que a fase paramagnética $m_\tau = m_\sigma = 0$ minimiza a energia.

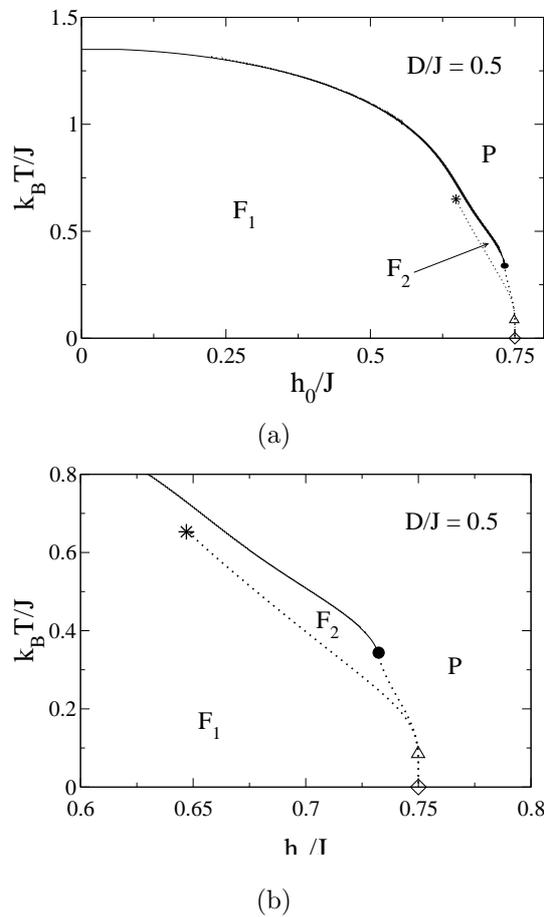


Figura 5.5: Em (a) e (b) mostramos o diagrama de fases para $D/J = 1/2$. Em (b) ampliamos a região de maior complexidade. Notamos que para temperaturas finitas o diagrama é qualitativamente similar ao obtido na figura 5.4(d). No entanto, para temperatura nula, no ponto $h_0/J = 3/4$, as fases \mathbf{F}_1 , \mathbf{F}_2 , \mathbf{F}_3 , \mathbf{F}_4 , e \mathbf{P} coexistem.

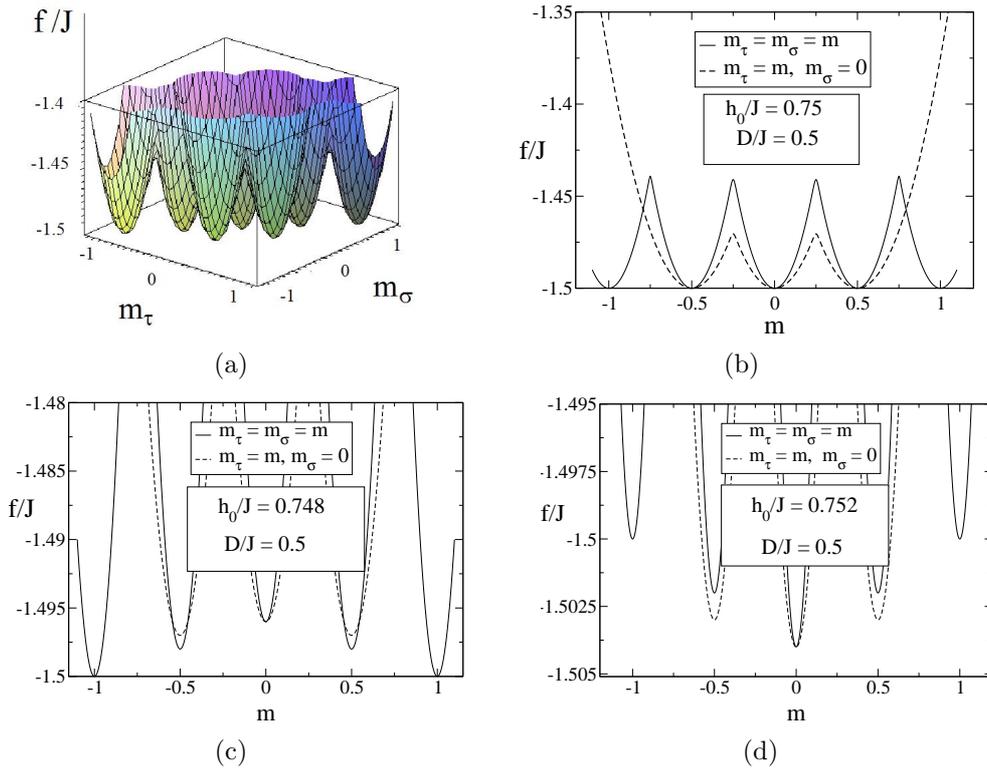
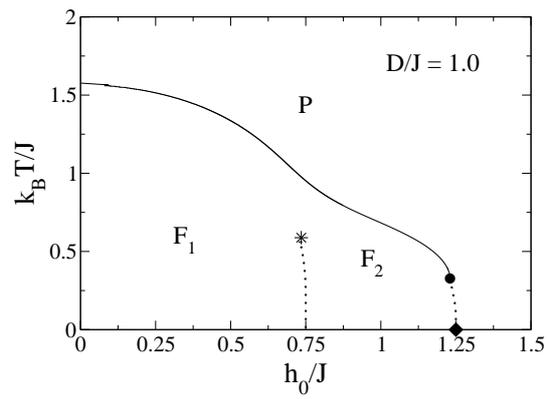


Figura 5.6: Gráficos da energia livre f em $(k_B T/J) = 0.01$, para $(D/J) = 0.5$. Em (a) o gráfico tridimensional de f/J em função das magnetizações m_τ, m_σ para $h_0/J = 0.75$. Notamos que sete mínimos estão aproximadamente na mesma altura, no entanto, isto acontece exatamente em $T = 0$, uma vez que em temperatura finita a única solução que minimiza a energia livre está no plano $m_\tau = m_\sigma$. Em (b) vemos a superposição do plano $m_\tau = m_\sigma$ (linha contínua) com o plano $m_\tau \neq 0, m_\sigma = 0$ (o mesmo acontece para o plano $m_\sigma \neq 0, m_\tau = 0$) (linhas tracejadas). Em (c) observamos a energia livre para um valor de h_0/J um pouco menor que 0.75, onde apenas uma fase ordenada com sua correspondente simétrica aparecem no plano $m_\tau = m_\sigma$. Em (d), para um valor de h_0/J ligeiramente maior que 0.75, a energia livre mostra que o sistema se encontra na fase desordenada.

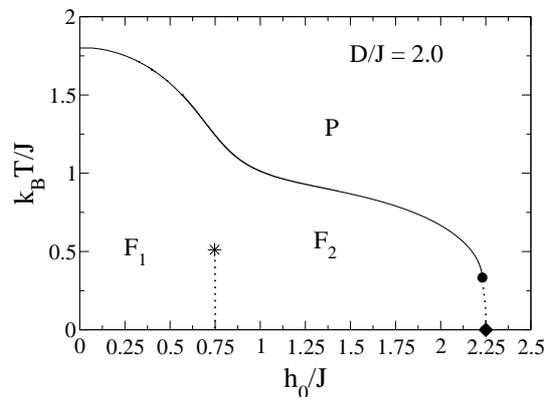
Para valores $D/J > 1/2$ (ver as figuras 5.7(a) e (b)), o ponto crítico que une as três fronteiras de primeira ordem, representado pelo triângulo aberto nas figuras 5.4(d) e 5.5, desaparece. Como consequência disto, duas linhas de primeira ordem separadas surgem, e a linha que termina em um ponto crítico ordenado (representado pelo asterisco) agora mantém sua base em $h_0/J = 3/4$, e sempre separa as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{F}_2 ; entretanto no ponto $(h_0/J) = (D/J + 1/4)$, $(k_B T/J) = 0$, representado pelo diamante preto, as fases \mathbf{F}_2 , \mathbf{F}_3 e \mathbf{F}_4 coexistem com a fase \mathbf{P} . Nas figuras 5.8(a) e (b) mostramos esta tendência mediante a energia livre para uma temperatura próxima de zero, em $(D/J) = 1$, onde vemos que cinco mínimos estão na mesma altura, aproximadamente.

5.2 Conclusões e perspectivas

Um sistema modelado pela soma de dois hamiltonianos de spins de Ising $(\tau_i, \sigma_i = \pm 1)$, cada um com acoplamentos ferromagnéticos J , onde os pares $\{\tau_i, \sigma_i\}$ interagem por intermédio de uma constante positiva D , foi estudado, considerando campos magnéticos aleatórios atuando em ambos os sistemas. Inicialmente, estudamos o caso em que os campos $\{h_i^\tau\}$ e $\{h_i^\sigma\}$ são totalmente correlacionados entre si, o que corresponde a uma situação típica de sistemas magnéticos; esta análise levou a resultados qualitativamente similares aos obtidos para o RFIM [17]. No entanto, ao estabelecer uma decorrelação total entre $\{h_i^\tau\}$ e $\{h_i^\sigma\}$, os diagramas de fases apresentam uma topologia bastante rica, com dependência no valor de D/J . Em temperatura finita, as magnetizações de ambos os sistemas são iguais; soluções com magnetizações distintas surgem apenas em temperatura nula, para $(h_0/J) = (D/J + 1/4)$, com

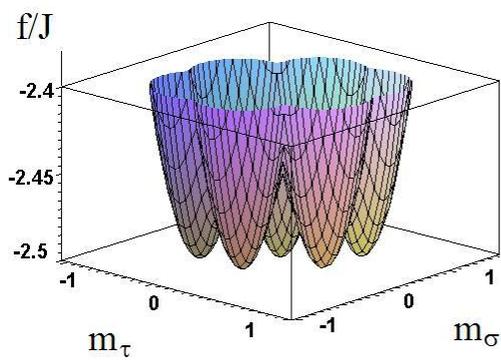


(a)

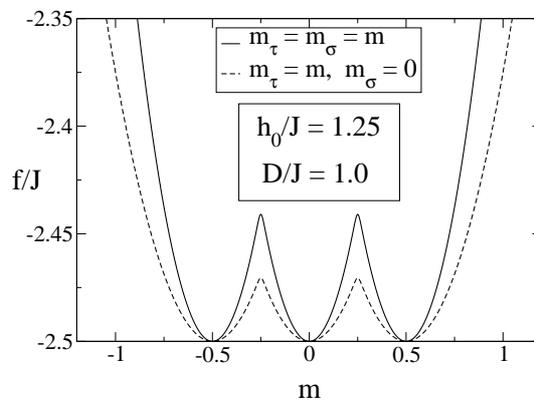


(b)

Figura 5.7: Diagramas de fases típicos para $D/J > 1/2$.



(a)



(b)

Figura 5.8: Energia livre para $(k_B T/J) = 0.01$, $(D/J) = 1$ e $h_0/J = 1.25$. Em (a) mostramos a energia livre em função dos parâmetros de ordem m_τ e m_σ . Em (b) exibimos o plano $m_\tau = m_\sigma$ (linha contínua) superposto com o plano $m_\tau \neq m_\sigma, m_\sigma = 0$ (o mesmo acontece para o plano $m_\sigma \neq m_\tau, m_\tau = 0$) (linhas tracejadas). As figuras acima mostram a coexistência das fases \mathbf{F}_2 , \mathbf{F}_3 e \mathbf{F}_4 , com a fase \mathbf{P} .

$(D/J) \geq 1/2$. No intervalo $0 \leq D/J < 0.3535$ os resultados são qualitativa-
mente similares aos do RFIM, com a presença de um ponto tricrítico ao longo
da fronteira que separa as fases \mathbf{F}_1 e \mathbf{P} . No entanto, para $(D/J) \geq 0.3535$
as topologias dos diagramas de fases aumentam sua complexidade até D/J
tornar-se maior do que $1/2$, quando os diagramas não mudam qualitativa-
mente. É importante mencionar que a situação onde os campos $\{h_i^\tau\}$ e $\{h_i^\sigma\}$
são independentes apresenta interesse para sistemas físicos do tipo cristais
plásticos.

Capítulo 6

Modelo de Ising na rede quadrada com interações competitivas

6.1 Introdução

Continuando o estudo de sistemas com desordem temperada, daremos agora atenção a um modelo relevante para as ligas do tipo $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ [41]. No limite de altas concentrações de Eu, tem se verificado que o composto apresenta acoplamentos com sinais positivos entre primeiros vizinhos e negativos para os segundos vizinhos. Um modelo simplificado que representa essencialmente esta situação, consiste de um hamiltoniano do tipo Ising dado por,

$$H = -J_1 \sum_{nn} S_i S_j + J_2 \sum_{nnn} S_i S_j , \quad (6.1)$$

onde $S_i = \pm 1$, e os acoplamentos $J_1 > 0$, $J_2 > 0$, representam as interações entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. O modelo costuma ser denominado na literatura por modelo $J_1 - J_2$. Na rede quadrada, este modelo tem sido estudado por diversos autores [94, 95, 96, 98, 99, 100, 101, 102], os quais concordam em que a razão entre os acoplamentos entre primeiros e segundos vizinhos, definida por

$$R = \frac{J_2}{J_1}, \quad (6.2)$$

define duas regiões em temperatura nula: se $R < 0.5$, a fase é antiferromagnética (**AF**), enquanto que para $R \geq 0.5$, a fase é super-antiferromagnética (**SAF**). A figura 6.1 ilustra estas duas situações.

Em temperatura finita, para o caso $R \geq 0.5$, a principal polêmica surge em determinar a natureza da transição que leva a fase paramagnética para a fase **SAF**. Mediante simulações de Monte Carlo, Landau e Binder [97], assim como também Malakis et al. [99], sugerem que a transição é contínua para todos os valores $R \geq 0.5$. Estes autores encontraram expoentes críticos não universais, os quais variam com R , embora apresentando uma quebra de universalidade fraca ¹. No entanto, mediante métodos variacionais, Lopez et al. [100] e Anjos et al. [101] sugerem uma fronteira de primeira ordem para $J_1/2 < J_2 \leq J_1$ e uma transição contínua para valores maiores de J_2 . Recentemente, A. Kalz et al. [102], concordam com o último cenário (embora a faixa de valores de J_2 para a transição de primeira ordem seja reduzida),

¹Na quebra de universalidade fraca expoentes críticos variam mantendo certas razões (como $\alpha/\nu, \beta/\nu, \gamma/\nu$) inalteradas.

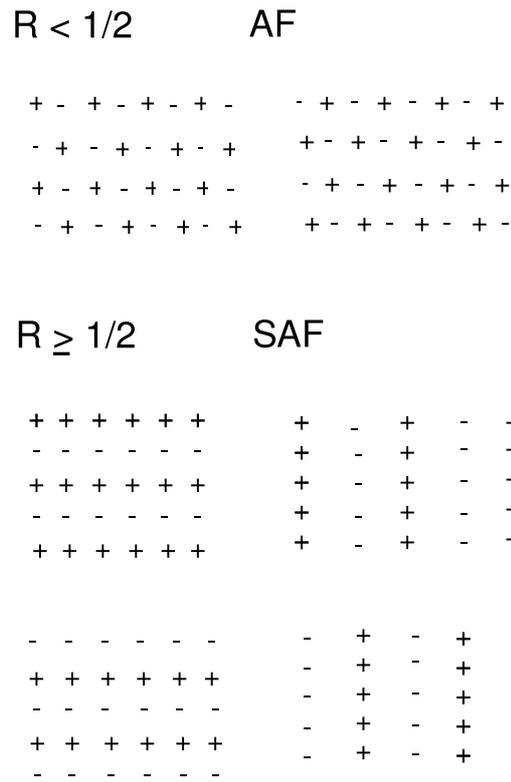


Figura 6.1: Fases do modelo $J_1 - J_2$ na rede quadrada, em temperatura nula, segundo a razão R definida na equação (6.2). Para $R < 1/2$, o estado fundamental antiferromagnético (**AF**), o qual é duplamente degenerado. Para $R \geq 1/2$ o sistema está na fase superantiferromagnética (**SAF**), a qual apresenta degenerescência quatro.

utilizando o método de Monte Carlo com equilibrção paralela (“parallel tempering”). Seus histogramas da energia na temperatura crítica, mostram dois picos apenas para $0.5J_1 < J_2 < 0.7J_1$ (indicando a coexistência de duas fases), e um único pico para $J_2 \geq 0.7J_1$, sugerindo uma transição contínua. A figura 6.2 mostra estes resultados.

Visando aprofundar o estudo das competições entres as fases que resultam dos diferentes valores e sinais das interações entre primeiros e segundos vizinhos do modelo acima, vamos introduzir uma desordem nos acoplamentos entre segundos vizinhos do modelo $J_1 - J_2$, de tal forma que este novo hamiltoniano será definido por

$$H = -J_1 \sum_{nn} S_i S_j - \sum_{nmn} J_2^{(ij)} S_i S_j , \quad (6.3)$$

onde $S_i = \pm 1$, $J_1 > 0$, e as ligações $J_2^{(ij)}$ obedecem a uma distribuição bimodal dada por

$$P(J_2^{(ij)}) = p\delta(J_2^{(ij)} - J_2) + (1 - p)\delta(J_2^{(ij)} + J_2) , \quad (6.4)$$

com $J_2 > 0$ e $0 \leq p \leq 1$.

Em $p = 0$ recuperamos o modelo dado pela equação (6.1), enquanto que para $p = 1$, o modelo apresenta uma fase ordenada do tipo ferromagnética (**F**). No intervalo $0 < p < 1$ deve existir a baixas temperaturas, uma competição entre os ordenamentos **F** e **SAF**. Supondo que estas duas fases se encontram

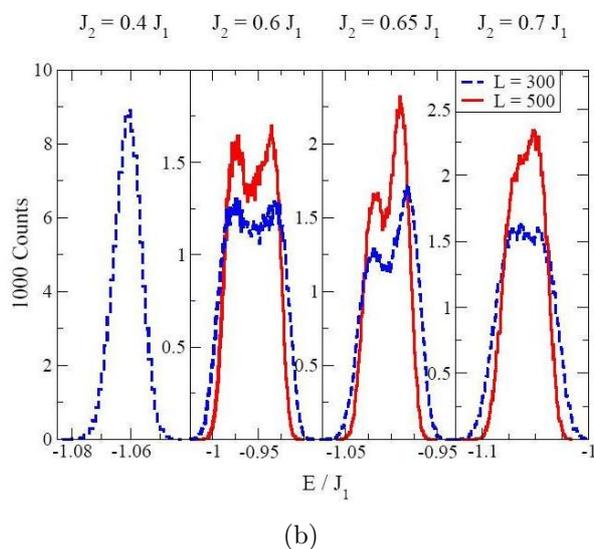
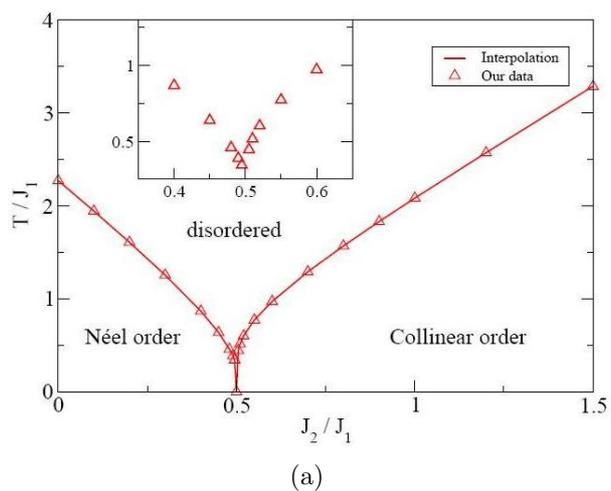


Figura 6.2: Figuras obtidas da referência [102], as quais resultaram de simulações de Monte Carlo do modelo $J_1 - J_2$, na rede quadrada dado na equação (6.1). Em (a) diagrama de fases no plano $T/J_1 - J_2/J_1$ ($k_B = 1$). Notamos as três diferentes fases que resultam; antiferromagnética (Néel order), super-antiferromagnética (collinear order) e a paramagnética (disordered). Em (b) observamos os histogramas da energia obtidos nas temperaturas críticas respectivas, para diversos valores de J_2 em função de J_1 , utilizando dois tamanhos do sistema ($L = 300, 500$). Neste último esquema notamos que no intervalo $0.5J_1 < J_2 < 0.7J_1$ é sugerida uma transição de primeira ordem, entretanto para $J_2 = 0.7J_1$ a coexistência de fases desaparece, uma vez que os dois picos do histograma desaparecem, o que sugere que a partir deste valor o sistema só apresentará uma transição contínua.

em $T = 0$, o ponto de transição entre as fases **SAF** e **F**, pode ser obtido ao igualar as energias por spin das fases respectivas,

$$E_F = E_{SAF} ,$$

$$-4J_1 - 4pJ_2 + 4(1 - p)J_2 = 4pJ_2 - 4(1 - p)J_2 , \quad (6.5)$$

e então,

$$p = \frac{2R - 1}{4R} \quad (\forall R \geq 1/2) . \quad (6.6)$$

A equação acima permite determinar o valor da probabilidade p , em função da razão R , no caso de existir uma transição entre as fases **SAF** e **F**, em temperatura nula. Por exemplo, para $R = 1$, $R = 0.75$, os pontos da transição seriam $p = 0.25$ e $p \approx 0.166$, respectivamente. Em temperaturas finitas, o problema não é tão simples, porque não existe uma solução analítica exata. No entanto, além de simulações de Monte Carlo, algumas aproximações analíticas podem ser feitas para determinar as características essenciais do diagrama de fases no plano $(k_B T/J_1) - p$, para um dado valor de R . Uma das técnicas a serem utilizadas no presente trabalho, a técnica do operador diferencial, será descrita a seguir.

6.2 Técnica do operador diferencial

A teoria de campo efectivo (EFT-N)² é baseada em aglomerados finitos com N sítios centrais, os quais estão rodeados de n sítios vizinhos cujas

²Do inglês, “effective field theory”; N representa o tamanho do aglomerado.

disposições espaciais indicam a topologia e a dimensão da rede. Os spins da vizinhança apresentam uma orientação espacial bem definida, em relação aos sítios centrais, sendo usada uma escolha privilegiada para os mesmos, de acordo com o tipo de ordenamento em temperatura nula, enquanto que as variáveis de spins dos sítios centrais têm a liberdade de ocupar todas as suas configurações permitidas.

No ensemble canônico, a média térmica de uma grandeza \mathcal{O} é calculada por

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{O}} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}) \right]}{Z}, \quad (6.7)$$

onde $Z = \text{Tr} \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}})$ é a função de partição, $\hat{\mathcal{O}}$ é o operador associado ao observável \mathcal{O} , e $\text{Tr}\{\dots\}$ é o traço no espaço dos spins associado ao hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$. Dado um hamiltoniano de spins é possível separá-lo em duas partes; uma representando o aglomerado finito Ω , que descreve as interações dentro do aglomerado e sua vizinhança, e a parte restante Ω' que exclui os spins do aglomerado. Desta forma, podemos escrever convenientemente o hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ da forma

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{\Omega} + \hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}, \quad (6.8)$$

onde $\hat{\mathcal{H}}_{\Omega}$ representa o hamiltoniano do aglomerado Ω e $\hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}$ o hamiltoniano da parte restante Ω' . Caso $\hat{\mathcal{H}}_{\Omega}$ e $\hat{\mathcal{H}}_{\Omega'}$ comutem, o traço da equação (6.7) pode ser efetuado em duas etapas; primeiro efetuando o traço sobre o aglomerado finito Ω e em seguida sobre os spins da vizinhança que não pertencem ao

aglomerado Ω , acompanhado da fatoração

$$\exp\left(-\beta(\hat{\mathcal{H}}_\Omega + \hat{\mathcal{H}}'_\Omega)\right) = \exp\left(-\beta\hat{\mathcal{H}}_\Omega\right) \exp\left(-\beta\hat{\mathcal{H}}'_\Omega\right) . \quad (6.9)$$

o que leva a

$$\langle \mathcal{O}(\Omega) \rangle = \frac{\text{Tr}_\Omega \hat{\mathcal{O}}(\Omega) \exp(-\beta\hat{\mathcal{H}}_\Omega)}{\text{Tr}_\Omega \exp(-\beta\hat{\mathcal{H}}_\Omega)} . \quad (6.10)$$

A relação acima será utilizada para calcular a magnetização de um sistema modelado por um hamiltoniano do tipo Ising. Por exemplo, em um aglomerado com um sítio central (EFT-1), o hamiltoniano de Ising com interações entre z primeiros vizinhos é dado por

$$\mathcal{H}_1 = -JS_1 \sum_{i=1}^z \sigma_i , \quad (6.11)$$

onde $\{\sigma_i = \pm 1\}$ são os spins vizinhos mais próximos ao spin central $S_1 = \pm 1$. Para o sistema ferromagnético, a magnetização por spin $m = \langle S_1 \rangle$ é obtida a partir da equação (??), substituindo \mathcal{O} por S_1 , então,

$$m = \langle S_1 \rangle = \left\langle \tanh \left(K \sum_{i=1}^z \sigma_i \right) \right\rangle , \quad (6.12)$$

onde $K = \beta J$. Esta identidade é conhecida como identidade de Callen e Suzuki [103, 104].

A técnica do operador diferencial desenvolvida por Hommura e Kaneyoshi [105] tem como ponto de partida o uso da identidade

$$\exp(\alpha D_x) F(x) = F(x + \alpha) , \quad (6.13)$$

onde $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ é um operador diferencial com respeito à variável x e $F(x)$ é uma função analítica. Ao definir $F(x) = \tanh(x)$, a equação (6.12) é reescrita na forma

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^z \exp(K\sigma_i D_x) \right\rangle F(x)|_{x=0} . \quad (6.14)$$

Usando a identidade

$$e^{\theta\sigma} \equiv \cosh(\theta) + \sigma \sinh(\theta) \quad (\forall \sigma = \pm 1) , \quad (6.15)$$

a equação (6.14) resulta

$$m = \left\langle \prod_{i=1}^z [\cosh(KD_x) + \sigma_i \sinh(KD_x)] \right\rangle F(x)|_{x=0} . \quad (6.16)$$

Como ilustração, vamos aplicar a equação (6.16) para uma rede quadrada ($z = 4$). Ao desenvolver o operador do lado direito utilizando a propriedade do operador diferencial dada na equação (6.13), a magnetização fica

$$m = A_1(K) \left\langle \frac{1}{4}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4) \right\rangle + A_3(K) \left\langle \frac{1}{4}(\sigma_1\sigma_2\sigma_3 + \sigma_1\sigma_2\sigma_4 + \sigma_2\sigma_3\sigma_4 + \sigma_1\sigma_3\sigma_4) \right\rangle , \quad (6.17)$$

onde os índices 1,2,3,4 referem-se aos quatro vizinhos mais próximos do sítio central

$$A_1(K) = \frac{1}{2}(\tanh(4K) + 2 \tanh(2K)) , \quad (6.18)$$

$$A_3(K) = \frac{1}{2}(\tanh(4K) - 2 \tanh(2K)) . \quad (6.19)$$

Ao considerar a simetria translacional do sistema, a equação (6.17) toma

uma forma mais simples,

$$m = A_1(K)m + A_3(K)\langle\sigma_i\sigma_j\sigma_l\rangle, \quad (6.20)$$

com $i \neq j \neq l = 1, 2, 3, 4$. A equação (6.20) conduz a um resultado exato, no entanto o segundo membro envolve o cálculo da função de correlação, o que implica a solução de um sistema de equações acopladas de várias funções de correlação. Assim sendo, a aproximação mais simples consiste em desprezar as correlações entre os spins, ou seja,

$$\langle\sigma_i\sigma_j\dots\sigma_l\rangle = \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle\dots\langle\sigma_l\rangle, \quad (6.21)$$

onde $i \neq j \neq l$. Esta aproximação é denominada de “aproximação de fase aleatória” (RPA) ³.

Usando a RPA na equação (6.20), a magnetização resulta em

$$m = \sqrt{\frac{1 - A_1(K)}{A_3(K)}}. \quad (6.22)$$

Podemos calcular a temperatura crítica tomando o limite $m \rightarrow 0$, resultando na seguinte expressão

$$A_1(K_c) = 1, \quad (6.23)$$

da qual obtemos numericamente $(k_B T_c / J) \approx 3.09$, o que representa uma melhora em relação ao resultado obtido pela aproximação de campo médio

³Do inglês, “random-phase approximation”.

$[(k_B T_c/J) = 4]$; contudo, este resultado ainda está longe do valor exato $(k_B T_c/J) \approx 2.27$ e para melhorá-lo é necessário aumentar o tamanho do aglomerado. Por exemplo, com um aglomerado de dois sítios centrais (EFT-2) a estimativa da temperatura crítica é $(k_B T_c/J) \approx 3.025$. Cabe mencionar que a principal fonte da discrepância está na aproximação dada na equação (6.21), a qual desconsidera os fortes efeitos das correlações entre os spins na criticalidade.

Na seção seguinte vamos aplicar a técnica do operador diferencial na aproximação RPA, a fim de obter por EFT-1, EFT-2 e EFT-4 os respectivos diagramas de fases do modelo dado pelo hamiltoniano da equação (6.3).

6.2.1 Modelo $J_1 - J_2$ com acoplamentos de segundos vizinhos aleatórios segundo a técnica do operador diferencial

Nesta seção vamos estudar o modelo $J_1 - J_2$ mediante a técnica do operador diferencial, para o qual os acoplamentos entre segundos vizinhos são considerados aleatórios (ver equação (6.3)), obedecendo a distribuição de probabilidades dada na equação (6.4). Para tanto, vamos considerar primeiro um aglomerado de um sítio central cujo spin é representado por S_1 , e dependendo da fase (**F** ou **SAF**) que analisaremos, condições de contorno apropriadas serão utilizadas. Na figura 6.3(a) temos o esquema de uma rede quadrada para um ordenamento ferromagnético, enquanto na figura 6.3(b) temos o esquema pertencente a um ordenamento super-antiferromagnético.

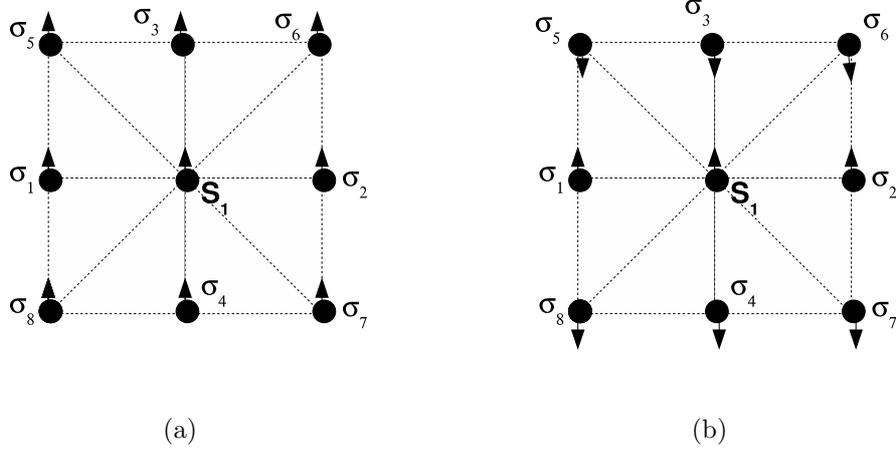


Figura 6.3: Aglomerado de um sítio para o estudo do hamiltoniano dado na equação (6.3) na rede quadrada. No sítio central está colocado o spin S_1 . Os primeiros vizinhos são os spins $\{\sigma_i\}$, com $i = 1, 2, 3, 4$, enquanto que os segundos vizinhos são os spins $\{\sigma_i\}$, com $i = 5, 6, 7, 8$. Em (a) está representado o ordenamento ferromagnético; Em (b) o ordenamento super-antiferromagnético.

Para o ordenamento ferromagnético o hamiltoniano para este aglomerado é dado por

$$\beta\mathcal{H}_1^F = (C_x + C_y)S_1, \quad (6.24)$$

sendo

$$C_x = K \sum_{i=1}^4 \sigma_i, \quad (6.25)$$

$$C_y = \sum_{i=5}^8 K_2^{(1i)} \sigma_i, \quad (6.26)$$

onde $K = \beta J_1$, e $K_2^{(1i)} = \beta J_2^{(1i)}$, sendo $\{J_2^{(1i)}\}$ os acoplamentos entre os spins segundos vizinhos $\{\sigma_i\}$, $i = 5, 6, 7, 8$, com o spin central S_1 . É fácil verificar que a identidade de Callen e Suzuki aplicada ao hamiltoniano dado na equação (6.24) é

$$m = [\langle \tanh(C_x + C_y) \rangle]_{J_2}, \quad (6.27)$$

onde $[\dots]_{J_2}$ representa a média sobre as variáveis temperadas, isto é, sobre os acoplamentos entre segundos vizinhos. Aplicando a técnica do operador diferencial ficamos com a seguinte expressão,

$$m = [\langle \exp(C_x D_x + C_y D_y) \rangle]_{J_2} f(x, y)|_{x, y=0} , \quad (6.28)$$

onde $f(x, y) = \tanh(x + y)$, $D_x = \frac{\partial}{\partial x}$ e $D_y = \frac{\partial}{\partial y}$. Ao aplicar a identidade dada na equação (6.15), temos

$$\left[\left\langle \prod_{i=1}^4 \hat{X}_i \prod_{i=5}^8 \hat{Y}_i \right\rangle \right]_{J_2} f(x, y)|_{x, y=0} , \quad (6.29)$$

onde

$$\hat{X}_i = \cosh(K D_x) + \sigma_i \sinh(K D_x) , \quad (6.30)$$

$$\hat{Y}_i = \cosh(K_2^{(1i)} D_y) + \sigma_i \sinh(K_2^{(1i)} D_y) . \quad (6.31)$$

Ao aplicar a aproximação RPA e tomar a média temperada correspondente, a equação acima fica

$$m = [\cosh(K D_x) + m \sinh(K D_x)]^4 \times [\cosh(R K D_y) + m(2p - 1) \sinh(R K D_y)]^4 f(x, y)|_{x, y=0} , \quad (6.32)$$

onde $R = J_2/J_1$. No desenvolvimento em serie da equação acima será obtida uma expressão do tipo

$$m = \sum_{j=0}^8 A_j m^j , \quad (6.33)$$

sendo nulos os termos de expoente par devido à simetria do hamiltoniano.

Desta forma podemos expressar a magnetização em uma forma mais compacta,

$$m = \sum_{l=0}^3 A_{2l+1} m^{2l+1} . \quad (6.34)$$

Os coeficientes $A_{2l+1} = A_{2l+1}(K, R)$ são dados por expressões muito grandes, as quais são obtidas por intermédio de programas de manipulação algébrica. A equação (6.34) pode ser obtida também ao minimizar uma energia livre $\Psi(m)$. A utilidade da energia livre reside na determinação do tipo de transição de fases entre os estados **F** e **P** mediante a expressão dada por

$$\Psi(m \neq 0) = \Psi(m = 0) . \quad (6.35)$$

Assim sendo, ao integrar a equação (6.34) encontramos

$$\Psi(m, K, R) = \lambda_1(K, R) + \lambda_2(K, R) \left[\frac{1}{2} m^2 - \sum_{l=0}^3 \frac{A_{2l+1}}{2l+2} m^{2l+2} \right] , \quad (6.36)$$

onde $\lambda_1(K, R)$ e $\lambda_2(K, R)$ são funções irrelevantes na análise da transição de fases. Igualando as energias livres das fases **F** e **P** resulta a seguinte expressão,

$$\sum_{l=0}^3 \frac{A_{2l+1}}{l+1} m^{2l} = 1 . \quad (6.37)$$

Ao resolver simultaneamente as equações (6.34) e (6.37), encontramos K_c e m para um dado valor da razão R . Na criticalidade teremos uma transição de primeira ordem se $m \neq 0$; entretanto, se $m = 0$ a transição será contínua.

Na figura 6.3(b) temos o estado fundamental da fase **SAF** em uma rede

quadrada, onde convenientemente consideramos a sub-rede A formada pelos spins apontando para cima, e a sub-rede B com os spins apontando para baixo. O hamiltoniano deste sistema deve ser descomposto nestas duas sub-redes, dado pela seguinte expressão,

$$-\beta\mathcal{H}_1^{SAF} = (C_x + C_y)S_1 , \quad (6.38)$$

onde

$$C_x = K \left(\sum_{i=1}^2 \sigma_i^A + \sum_{i=3}^4 \sigma_i^B \right) , \quad (6.39)$$

$$C_y = \sum_{i=5}^8 K_2^{(1i)} \sigma_i^B . \quad (6.40)$$

Podemos obter uma expressão para a magnetização de maneira análoga ao caso ferromagnético, de tal forma que

$$\left[\left\langle \prod_{i=1}^2 \hat{X}_i^A \prod_{i=3}^4 \hat{X}_i^B \prod_{i=5}^8 \hat{Y}_i^B \right\rangle_{J_2} \right] f(x, y)|_{x,y=0} , \quad (6.41)$$

sendo

$$\hat{X}_i^A = \cosh(KD_x) + \sigma_i^A \sinh(KD_x) , \quad (6.42)$$

$$\hat{X}_i^B = \cosh(KD_x) + \sigma_i^B \sinh(KD_x) , \quad (6.43)$$

$$\hat{Y}_i^B = \cosh(K_2^{(1i)}D_y) + \sigma_i^B \sinh(K_2^{(1i)}D_y) . \quad (6.44)$$

Tomando a média temperada e a aproximação RPA, junto com a condição

$m_A = -m_B = m$, temos

$$m = [\cosh(KD_x) + m \sinh(KD_x)]^2 [\cosh(KD_x) - m \sinh(KD_x)]^2 \\ \times [\cosh(KD_y) + m(2p - 1) \sinh(KD_y)]^4 f(x, y)|_{x,y=0}, \quad (6.45)$$

onde $f(x, y) = \tanh(x + y)$. A partir da equação da magnetização obtemos a energia livre analogamente ao efetuado para o caso ferromagnético, a fim de determinar a fronteira **SAF-P**.

A figura 6.4 mostra o diagrama de fases obtido para o aglomerado de um sítio central para $R = 1$. Notamos que as fronteiras **F-P** e **SAF-P** estão separadas em $T = 0$, o que sugere não haver fronteira **SAF-F**. No entanto, a fronteira **SAF-P** é de primeira ordem, inclusive em $p = 0$, contradizendo os resultados obtidos em simulações de Monte Carlo para o modelo da equação (6.1) [95, 96, 102].

Para melhorar a aproximação, vamos aumentar o tamanho do aglomerado para dois sítios centrais. Para tanto, utilizamos o esquema da figura 6.5 que mostra em (a) o ordenamento ferromagnético e em (b) o ordenamento superantiferromagnético. Para um sistema com aglomerados de dois ou mais sítios centrais, devemos levar em conta a presença de spins comuns nas interações entre primeiros e segundos vizinhos. No caso de dois sítios centrais, como mostra a figura 6.5, temos alguns sítios que são primeiros vizinhos ao spin S_1 , porém são segundos vizinhos para S_2 (e vice-versa). Desta maneira, quando aplicamos a técnica do operador diferencial aparecem termos do tipo $\sigma_i^2 = 1$

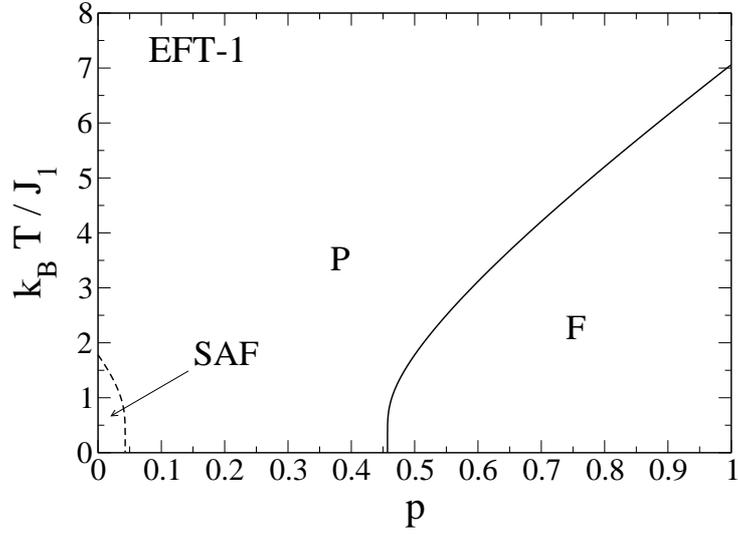


Figura 6.4: Diagrama de fases obtido mediante a técnica do operador diferencial, na aproximação RPA, com um aglomerado de um sítio central (EFT-1) para $R = 1$. Notamos que a fronteira **SAF-P** é de primeira ordem (linhas tracejadas), enquanto que a fronteira **F-P** é contínua (linha contínua).

no desenvolvimento dos produtórios nas expressões das magnetizações.

Tomando como referência a figura 6.5(a) teremos o seguinte hamiltoniano para o ordenamento ferromagnético,

$$-\beta\mathcal{H}_2^F = K S_1 S_2 + C_1 S_1 + C_2 S_2 , \quad (6.46)$$

sendo

$$C_n = C_{nx} + C_{ny}, \quad n = 1, 2 , \quad (6.47)$$

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^3 \sigma_i , \quad (6.48)$$

$$C_{1y} = \sum_{i=4,5,7,8} K_2^{(1i)} \sigma_i , \quad (6.49)$$

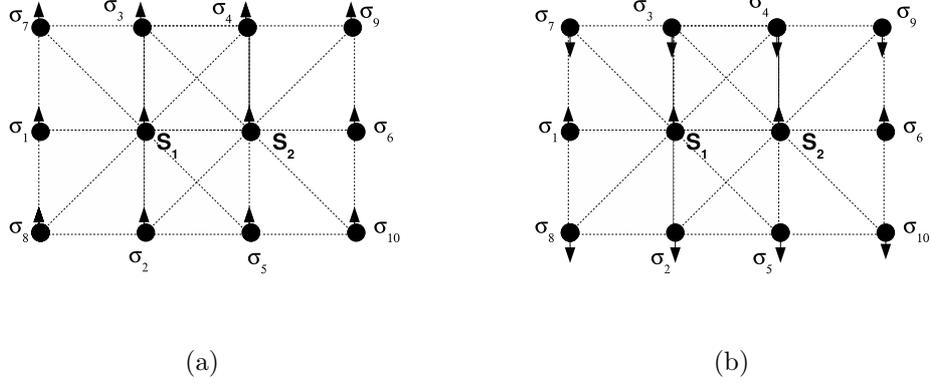


Figura 6.5: Aglomerado de dois sítios centrais para o estudo do hamiltoniano dado na equação (6.3) na rede quadrada. Nos sítios centrais estão colocados os spins S_1 e S_2 . Em (a) está representado o ordenamento ferromagnético; Em (b) o ordenamento superantiferromagnético.

$$C_{2x} = K \sum_{i=4}^6 \sigma_i , \quad (6.50)$$

$$C_{2y} = \sum_{i=2,3,9,10} K_2^{(2i)} \sigma_i , \quad (6.51)$$

onde $K_2^{(1i)} = \beta J_2^{(1i)}$ e $K_2^{(2i)} = \beta J_2^{(2i)}$ representam as interações aleatórias entre os spins S_1 e S_2 com seus segundos vizinhos. A função de partição é dada por

$$Z_2^F = 2[\exp(K) \cosh(C_2 + C_1) + \exp(-K) \cosh(C_2 - C_1)] . \quad (6.52)$$

Usando a identidade de Callen e Suzuki, definindo $m = \langle S_1 \rangle$, e usando a identidade para o traço parcial neste aglomerado de dois sítios, a magnetização para uma realização dos acoplamentos $\{J_2^{(ij)}\}$ resulta em

$$m_{\{J_2^{(ij)}\}} = \langle S_1 \rangle = \left\langle \frac{\text{Tr} S_1 \exp(-\beta \mathcal{H}_2^F)}{\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}_2^F)} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \log(Z_2^F)}{\partial C_1} \right\rangle , \quad (6.53)$$

ou seja,

$$m_{\{J_2^{(ij)}\}} = \left\langle \frac{\sinh(C_2 + C_1) - \exp(-2K) \sinh(C_2 - C_1)}{\cosh(C_2 + C_1) + \exp(-2K) \cosh(C_2 - C_1)} \right\rangle . \quad (6.54)$$

A técnica do operador diferencial pode ser implementada para quatro dimensões, de tal forma que

$$\exp(\vec{a} \cdot \vec{D}) F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{a}) , \quad (6.55)$$

onde $\vec{r} = (x_1, y_1, x_2, y_2)$, $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3, a_4)$ e $\vec{D} = (D_{x1}, D_{y1}, D_{x2}, D_{y2})$. Desta forma, a equação (6.54) resulta em,

$$m_{\{J_2^{(ij)}\}} = \left\langle \exp \left[\sum_{n=1}^2 C_{xn} D_{xn} + C_{yn} D_{yn} \right] \right\rangle f(\vec{r})|_{\vec{r}=0} . \quad (6.56)$$

Desenvolvendo o somatório acima, aplicando a identidade dada na equação (6.15) e tomando a média sobre as variáveis temperadas, temos

$$m = \left[\left\langle \prod_{i=1}^3 \hat{X}_{1i} \prod_{i=4,5,7,8} \hat{Y}_{1i} \prod_{i=4}^6 \hat{X}_{2i} \prod_{i=2,3,9,10} \hat{Y}_{2i} \right\rangle \right]_{J_2} f(\vec{r})|_{\vec{r}=0} , \quad (6.57)$$

onde

$$\hat{X}_{1i} = \cosh(K D_{x1}) + \sigma_i \sinh(K D_{x1}) , \quad (6.58)$$

$$\hat{Y}_{1i} = \cosh(K_2^{(1i)} D_{y1}) + \sigma_i \sinh(K_2^{(1i)} D_{y1}) , \quad (6.59)$$

$$\hat{X}_{2i} = \cosh(K D_{x2}) + \sigma_i \sinh(K D_{x2}) , \quad (6.60)$$

$$\hat{Y}_{2i} = \cosh(K_2^{(2i)} D_{y2}) + \sigma_i \sinh(K_2^{(2i)} D_{y2}) , \quad (6.61)$$

sendo

$$f(\vec{r}) = \frac{\sinh\left(\sum_{i=1}^2(x_i + y_i)\right) - \exp(-2K) \sinh(x_2 + y_2 - x_1 - y_1)}{\cosh\left(\sum_{i=1}^2(x_i + y_i)\right) + \exp(-2K) \cosh(x_2 + y_2 - x_1 - y_1)} . \quad (6.62)$$

Observamos que os sítios $i = 2, 3, 4, 5$ se repetem nos produtórios; desta forma vamos expressar todos os senos e cossenos em termos de exponenciais para aplicar a propriedade $e^x e^y = e^{x+y}$, o que nos leva à seguinte expressão,

$$m = \left[\left\langle \hat{X}_1 \hat{X}_2 \prod_{i=7}^8 \hat{Y}_{1i} \prod_{i=9}^{10} \hat{Y}_{2i} \prod_{i=2}^3 \hat{\Delta}_{x_1, y_{2i}} \prod_{i=4}^5 \hat{\Delta}_{x_2, y_{1i}} \right\rangle_{J_2} f(\vec{r})|_{\vec{r}=0} \right] , \quad (6.63)$$

onde

$$\hat{X}_1 = \cosh(KD_{x_1}) + \sigma_1 \sinh(KD_{x_1}) , \quad (6.64)$$

$$\hat{Y}_{1i} = \cosh(K_2^{(1i)} D_{y_1}) + \sigma_i \sinh(K_2^{(1i)} D_{y_1}) , \quad (6.65)$$

$$\hat{X}_2 = \cosh(KD_{x_2}) + \sigma_2 \sinh(KD_{x_2}) , \quad (6.66)$$

$$\hat{Y}_{2i} = \cosh(K_2^{(2i)} D_{y_2}) + \sigma_i \sinh(K_2^{(2i)} D_{y_2}) , \quad (6.67)$$

$$\hat{\Delta}_{x_1, y_{2i}} = \cosh(KD_{x_1} + K_2^{(2i)} D_{y_2}) + \sigma_i \sinh(KD_{x_1} + K_2^{(2i)} D_{y_2}) , \quad (6.68)$$

$$\hat{\Delta}_{x_2, y_{1i}} = \cosh(KD_{x_2} + K_2^{(1i)} D_{y_1}) + \sigma_i \sinh(KD_{x_2} + K_2^{(1i)} D_{y_1}) . \quad (6.69)$$

Aplicando a aproximação RPA e tomando a média temperada, a magnetização resulta em

$$\begin{aligned}
m &= [\cosh(KD_{x1}) + m \sinh(KD_{x1})] \\
&\times [\cosh(RKD_{y1}) + m(2p-1) \sinh(RKD_{y1})]^2 \\
&\times [\cosh(KD_{x2}) + m \sinh(KD_{x2})] \\
&\times [\cosh(RKD_{y2}) + m(2p-1) \sinh(RKD_{y2})]^2 \\
&\times [\cosh(KD_{x1} + RKD_{y2}) + m(2p-1) \sinh(KD_{x1} + RKD_{y2})]^2 \\
&\times [\cosh(KD_{x2} + RKD_{y1}) + m(2p-1) \sinh(KD_{x2} + RKD_{y1})]^2 \\
&\times f(\vec{r})|_{\vec{r}=0} .
\end{aligned} \tag{6.70}$$

A partir da expressão acima podemos determinar uma expressão para a energia livre, e assim determinar a fronteira **F-P**. Para obter uma expressão para a magnetização de subredes do ordenamento super-antiferromagnético com o aglomerado de dois sítios centrais, vamos utilizar a configuração dos spins mostrada na figura 6.5(b). O hamiltoniano para este sistema é dado pela seguinte expressão

$$-\beta\mathcal{H}_2^{SAF} = KS_1S_2 + C_1S_1 + C_2S_2 , \tag{6.71}$$

sendo

$$C_n = C_{nx} + C_{nx}, \quad n = 1, 2 , \tag{6.72}$$

$$C_{1x} = K(\sigma_1^A + \sum_{i=2}^3 \sigma_i^B) , \tag{6.73}$$

$$C_{1y} = \sum_{i=4,5,7,8} K_2^{(1i)} \sigma_i^B , \tag{6.74}$$

$$C_{2x} = K(\sigma_6^A + \sum_{i=4}^5 \sigma_i^B) , \quad (6.75)$$

$$C_{2y} = \sum_{i=2,3,9,10} K_2^{(2i)} \sigma_i^B , \quad (6.76)$$

onde a subrede A está definida pela linha de spins $\sigma_1, S_1, S_2, \sigma_6$, enquanto que os spins restantes pertencem à subrede B . Após aplicar a técnica do operador diferencial, a expressão para a magnetização com $m_A = -m_B = m$, é dada por

$$\begin{aligned} m &= [\cosh(KD_{x1}) + m \sinh(KD_{x1})] \\ &\times [\cosh(KD_{y1}) - m(2p-1) \sinh(KD_{y1})]^2 \\ &\times [\cosh(KD_{x2}) + m \sinh(KD_{x2})] \\ &\times [\cosh(KD_{y2}) - m(2p-1) \sinh(KD_{y2})]^2 \\ &\times [\cosh(KD_{x1} + RKD_{y2}) - m(2p-1) \sinh(KD_{x1} + RKD_{y2})]^2 \\ &\times [\cosh(KD_{x2} + RKD_{y1}) - m(2p-1) \sinh(KD_{x2} + RKD_{y1})]^2 \\ &\times f(\vec{r})|_{\vec{r}=0} , \end{aligned} \quad (6.77)$$

sendo $f(\vec{r})$ dada pela equação (6.62).

As fronteiras críticas obtidas para $R = 1$ com este aglomerados de dois sítios centrais podem ser observadas na figura 6.6. Observamos que a fronteira **SAF-P** agora é contínua, o que está de acordo com trabalhos anteriores em $p = 0$ [95, 96, 102]. Também, a distância entre estas fronteiras **SAF-P** e **F-P** em $T = 0$ diminui com relação àquela obtida para o aglomerado de apenas um spin.

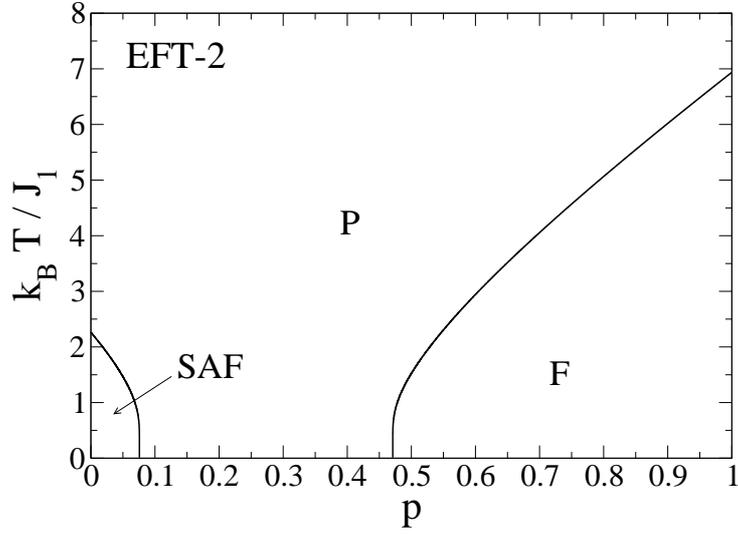


Figura 6.6: Diagrama de fases obtido mediante a técnica do operador diferencial, na aproximação RPA, com um aglomerado de dois sítios centrais (EFT-2) para $R = 1$.

Com o intuito de melhorar os resultados anteriores, aumentaremos o tamanho do aglomerado para quatro sítios centrais. A figura 6.7 mostra a configuração dos spins para o ordenamento ferromagnético (figura 6.7(a)) e para o ordenamento super-antiferromagnético (figura 6.7(b)).

Para determinar a magnetização por spin, $m = \langle S_1 \rangle$ do ordenamento ferromagnético definimos primeiro o hamiltoniano do aglomerado

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H}_4^F &= K(S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + S_4 S_1) + K_2^{(13)} S_1 S_3 + K_2^{(24)} S_2 S_4 \\ &+ C_1 S_1 + C_2 S_2 + C_3 S_3 + C_4 S_4, \end{aligned} \quad (6.78)$$

sendo

$$C_n = C_{nx} + C_{ny}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \quad (6.79)$$

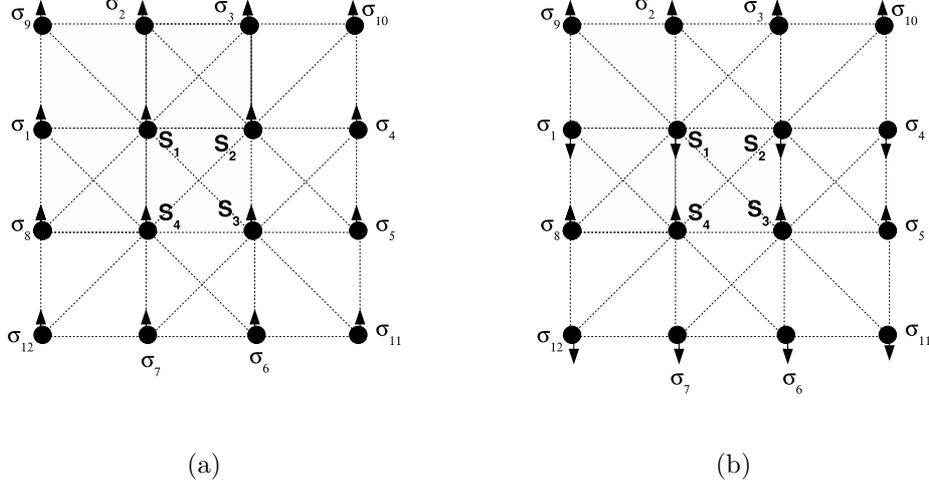


Figura 6.7: Aglomerado de quatro sítios centrais para o estudo do hamiltoniano dado na equação (6.3) na rede quadrada. Nos sítios centrais estão colocados os spins S_1, S_2, S_3, S_4 . Em (a) está representado o ordenamento ferromagnético; Em (b) o ordenamento super-antiferromagnético.

$$C_{1x} = K \sum_{i=1}^2 \sigma_i , \quad (6.80)$$

$$C_{1y} = \sum_{i=3,8,9} K_2^{(1i)} \sigma_i , \quad (6.81)$$

$$C_{2x} = K \sum_{i=3}^4 \sigma_i , \quad (6.82)$$

$$C_{2y} = \sum_{i=2,5,10} K_2^{(2i)} \sigma_i , \quad (6.83)$$

$$C_{3x} = K \sum_{i=5}^6 \sigma_i , \quad (6.84)$$

$$C_{3y} = \sum_{i=4,7,11} K_2^{(3i)} \sigma_i , \quad (6.85)$$

$$C_{4x} = K \sum_{i=7}^8 \sigma_i , \quad (6.86)$$

$$C_{4y} = \sum_{i=1,6,12} K_2^{(4i)} \sigma_i . \quad (6.87)$$

Temos oito sítios σ_i ($i = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$), que são primeiros e segundos vizinhos em relação aos sítios centrais S_1, S_2, S_3 e S_4 . Mediante um procedimento análogo ao efetuado para os aglomerados de um e dois sítios, temos a seguinte expressão para a magnetização

$$\begin{aligned} m = & [\cosh(KD_{x1} + RKD_{y4}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x1} + RKD_{y4})] \\ & \times [\cosh(KD_{x1} + RKD_{y2}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x1} + RKD_{y2})] \\ & \times [\cosh(KD_{x2} + RKD_{y1}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x2} + RKD_{y1})] \\ & \times [\cosh(KD_{x2} + RKD_{y3}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x2} + RKD_{y3})] \\ & \times [\cosh(KD_{x3} + RKD_{y2}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x3} + RKD_{y2})] \\ & \times [\cosh(KD_{x3} + RKD_{y4}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x3} + RKD_{y4})] \\ & \times [\cosh(KD_{x4} + RKD_{y3}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x4} + RKD_{y3})] \\ & \times [\cosh(KD_{x4} + RKD_{y1}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x4} + RKD_{y1})] \\ & \times [\cosh(RKD_{y1}) + m(2p - 1) \sinh(RKD_{y1})][\cosh(RKD_{y2}) + m(2p - 1) \sinh(RKD_{y2})] \\ & \times [\cosh(RKD_{y3}) + m(2p - 1) \sinh(RKD_{y3})][\cosh(RKD_{y4}) + m(2p - 1) \sinh(RKD_{y4})] \\ & \times g(\vec{r})|_{\vec{r}=0} , \end{aligned} \quad (6.88)$$

onde,

$$g(\vec{r}) = F_1/F_2 , \quad (6.89)$$

sendo,

$$\begin{aligned}
F_1 &= \exp(4K - 2KR) \sinh(r_1 + r_2 + r_3 + r_4) \\
&+ \exp(2KR) [\sinh(r_1 + r_2 - r_3 - r_4) + \sinh(r_1 - r_2 - r_3 + r_4)] \\
&+ \sinh(r_1 + r_2 + r_3 - r_4) + \sinh(r_1 + r_2 - r_3 + r_4) \\
&+ \sinh(r_1 - r_2 + r_3 + r_4) + \sinh(-r_1 + r_2 + r_3 + r_4) \\
&+ \exp(-4K - 2KR) \sinh(r_1 - r_2 + r_3 - r_4) , \tag{6.90}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_2 &= \exp(4K - 2KR) \cosh(r_1 + r_2 + r_3 + r_4) \\
&+ \exp(2KR) [\cosh(r_1 + r_2 - r_3 - r_4) + \cosh(r_1 - r_2 - r_3 + r_4)] \\
&+ \cosh(r_1 + r_2 + r_3 - r_4) + \sinh(r_1 + r_2 - r_3 + r_4) \\
&+ \sinh(r_1 - r_2 + r_3 + r_4) + \sinh(-r_1 + r_2 + r_3 + r_4) \\
&+ \exp(-4K - 2KR) \cosh(r_1 - r_2 + r_3 - r_4) , \tag{6.91}
\end{aligned}$$

onde $r_i = x_i + y_i$, $i = 1, 2, 3, 4$. Na figura 6.7(b) temos o ordenamento super-antiferromagnético, para o qual o hamiltoniano é dado por,

$$\begin{aligned}
\beta\mathcal{H}_4^{SAF} &= K(S_1S_2 + S_2S_3 + S_3S_4 + S_4S_1) + K_2^{(13)}S_1S_3 + K_2^{(24)}S_2S_4 \\
&+ C_1S_1 + C_2S_2 + C_3S_3 + C_4S_4 , \tag{6.92}
\end{aligned}$$

sendo

$$C_n = C_{nx} + C_{ny}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \quad (6.93)$$

$$C_{1x} = K(\sigma_1^A + \sigma_2^B), \quad (6.94)$$

$$C_{1y} = \sum_{i=3,8,9} K_2^{(1i)} \sigma_i^B, \quad (6.95)$$

$$C_{2x} = K(\sigma_4^A + \sigma_3^B), \quad (6.96)$$

$$C_{2y} = \sum_{i=2,5,10} K_2^{(2i)} \sigma_i^A, \quad (6.97)$$

$$C_{3x} = K(\sigma_6^A + \sigma_5^B), \quad (6.98)$$

$$C_{3y} = \sum_{i=4,7,11} K_2^{(3i)} \sigma_i^A, \quad (6.99)$$

$$C_{4x} = K(\sigma_7^A + \sigma_8^B), \quad (6.100)$$

$$C_{4y} = \sum_{i=1,6,12} K_2^{(4i)} \sigma_i^A. \quad (6.101)$$

Aplicando a técnica do operador diferencial a expressão da magnetização,

$m_A = -m_B = m$, resulta

$$\begin{aligned}
m &= [\cosh(KD_{x1} + RKD_{y4}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x1} + RKD_{y4})] \\
&\times [\cosh(KD_{x1} + RKD_{y2}) - m(2p - 1) \sinh(KD_{x1} + RKD_{y2})] \\
&\times [\cosh(KD_{x2} + RKD_{y1}) - m(2p - 1) \sinh(KD_{x2} + RKD_{y1})] \\
&\times [\cosh(KD_{x2} + RKD_{y3}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x2} + RKD_{y3})] \\
&\times [\cosh(KD_{x3} + RKD_{y2}) - m(2p - 1) \sinh(KD_{x3} + RKD_{y2})] \\
&\times [\cosh(KD_{x3} + RKD_{y4}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x3} + RKD_{y4})] \\
&\times [\cosh(KD_{x4} + RKD_{y3}) + m(2p - 1) \sinh(KD_{x4} + RKD_{y3})] \\
&\times [\cosh(KD_{x4} + RKD_{y1}) - m(2p - 1) \sinh(KD_{x4} + RKD_{y1})] \\
&\times [\cosh(RKD_{y1}) - m(2p - 1) \sinh(RKD_{y1})] \\
&\times [\cosh(RKD_{y2}) - m(2p - 1) \sinh(RKD_{y2})] \\
&\times [\cosh(RKD_{y3}) + m(2p - 1) \sinh(RKD_{y3})] \\
&\times [\cosh(RKD_{y4}) + m(2p - 1) \sinh(RKD_{y4})] \\
&\times g(\vec{r})|_{\vec{r}=0} .
\end{aligned} \tag{6.102}$$

A figura 6.8 mostra o diagrama de fases correspondente ao aglomerado de quatro spins, o qual apresenta qualitativamente as mesmas características daquele do aglomerado de dois spins. Na figura 6.9 são apresentadas as distâncias entre as fases **SAF** e **F** para $T \approx 0$, correspondentes aos três aglomerados considerados, $N = 1, 2, 4$. Notamos que esta distância diminui ao aumentar o tamanho do aglomerado, embora não possamos concluir que para tamanhos maiores do aglomerado, venhamos a ter uma fronteira **SAF-F** em temperatura nula.

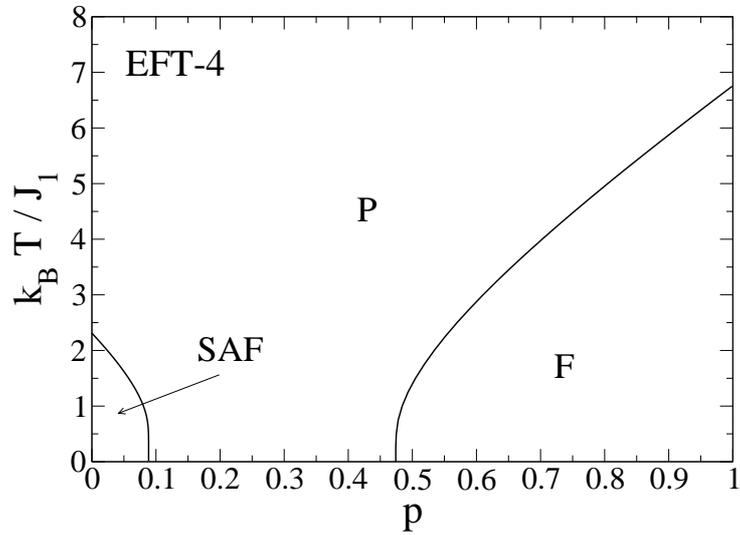


Figura 6.8: Diagrama de fases obtido mediante a técnica do operador diferencial, na aproximação RPA, com um aglomerado de quatro sítios centrais (EFT-4) para $R = 1$.

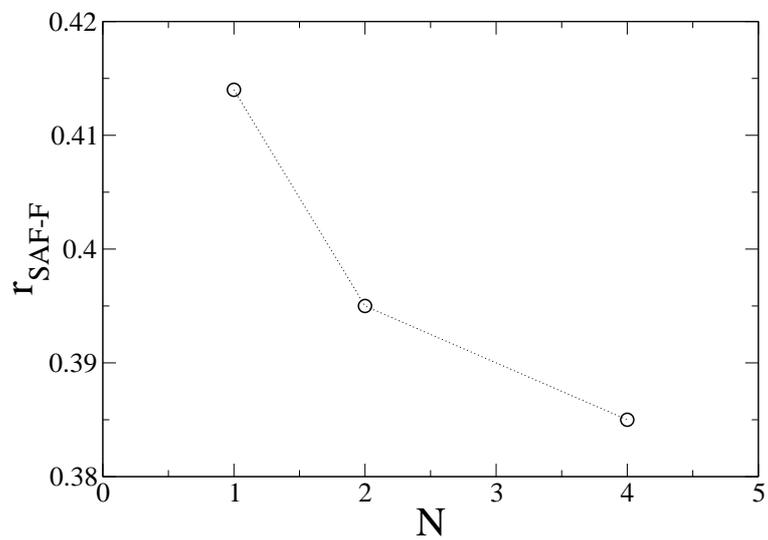


Figura 6.9: Distâncias entre as fronteiras **SAF-F** para $T \approx 0$, obtidas a partir dos três aglomerados de tamanhos $N = 1, 2, 4$. Notamos que a tendência entre as fases **SAF** e **F** é de se aproximarem quando N aumenta.

Devido às limitações computacionais para desenvolver as expansões dos operadores diferenciais que surgem ao aumentar o tamanho do aglomerado, torna-se necessário o desenvolvimento de algoritmos que evitem o consumo excessivo da memória computacional na utilização deste método. Recentemente, uma nova metodologia computacional foi proposta [106] para tratar esta dificuldade trazendo uma motivação para progredir neste trabalho, mediante a técnica do operador diferencial.

Na seção seguinte será estudado o modelo $J_1 - J_2$ com acoplamentos de segundos vizinhos aleatórios mediante o método de Monte Carlo.

6.3 Modelo $J_1 - J_2$ com acoplamentos de segundos vizinhos aleatórios segundo a técnica de Monte Carlo

6.3.1 Metodologia de cálculo

A técnica de Monte Carlo (MC) é um método estatístico utilizado em simulações estocásticas com diversas aplicações em áreas como a física, matemática e biologia. Em particular, nesta seção será utilizado o algoritmo de Metropolis que tem como objetivo determinar valores esperados de propriedades do sistema simulado, através de médias temporais sobre uma amostra. O algoritmo é concebido de modo a se obter uma amostra que siga o caminho para o equilíbrio obedecendo uma distribuição de Boltzmann. A princípio, para

se determinar a probabilidade de uma dada configuração, seria necessário conhecer a função de partição do sistema, ou seja, a chance de ocorrência de todas as outras configurações. A eficiência do algoritmo de Metropolis está diretamente ligada ao fato do mesmo não levar em conta a probabilidade das configurações em si, mas sim a razão entre elas, pois a razão entre as probabilidades de duas dadas configurações pode ser determinada independentemente das outras. Dadas duas configurações m e n quaisquer, a razão entre suas probabilidades P_m e P_n pode ser escrita como

$$\frac{P_n}{P_m} = \frac{\exp(-\beta E_n)}{\exp(-\beta E_m)} = \exp(-\beta(E_n - E_m)) , \quad (6.103)$$

onde E_m e E_n são as energias das configurações m e n , respectivamente. A partir dessa igualdade, o algoritmo de Metropolis pode ser implementado através da seguinte receita :

1. Geração de uma configuração inicial aleatória, ou seja, com valores aleatórios para todos os graus de liberdade do sistema. Para o caso do modelo de Ising, os spins numa dada rede assumem valores iniciais aleatórios. Vamos designar o índice m para essa configuração inicial.
2. Geração de uma nova configuração tentativa de índice n , resultado de pequenas alterações nas variáveis da configuração m . Para o nosso caso, consideramos $S_i \rightarrow -S_i$ para um dado spin.
3. Se $E_n < E_m$, aceita-se a configuração n na nossa amostra. Caso contrário, realizam-se os passos descritos nos sub-itens abaixo:
4. Gera-se um número aleatório x entre 0 e 1;

5. Se $x < \exp(-\beta(E_n - E_m))$, aceita-se a configuração n como a nova configuração; caso contrário a configuração original m permanece.
6. Repete-se os passos (2) e (3) até atingir todos os spins da rede, o que se chama de varredura completa da rede. Isto constitui um passo de MC.

Em cada passo de MC são calculadas grandezas tais como a magnetização, suscetibilidade, calor específico, etc. O sistema atinge o equilíbrio após um determinado número de passos de MC. Ao tomar a média sobre um determinado número de passos de MC no equilíbrio, obtemos a média térmica de uma dada grandeza. No entanto, para o presente problema, devido ao fato de os acoplamentos entre segundos vizinhos serem variáveis aleatórias temperadas, é necessário repetir o processo para diferentes realizações $\{J_2^{(ij)}\}$, para depois tomar a média das grandezas sobre diferentes realizações.

Visando implementar o algoritmo de Metropolis para o hamiltoniano de N spins dado pela equação (6.3), com acoplamentos entre segundos vizinhos obedecendo a distribuição dada na equação (6.4), na rede quadrada $L \times L$, levando em conta os diferentes ordenamentos que podem surgir, dividimos a rede em quatro subredes denotadas por 1,2,3,4, da mesma maneira como foram definidas na referência [96]. Nesta divisão, cada um dos quatro vértices de um quadrado elementar da rede pertence a uma subrede diferente, de tal forma a termos quatro subredes quadradas interpenetrantes, cada subrede com espaçamento de duas unidades de rede. Logo, a magnetização de cada

subrede é definida por,

$$M_\lambda = \frac{4}{N} \sum_{i \in \lambda} \langle S_i \rangle \quad (\lambda = 1, 2, 3, 4) . \quad (6.104)$$

Para medir o ordenamento antiferromagnético definimos

$$M_{AF} = (M_1 - M_2 + M_3 - M_4)/4 . \quad (6.105)$$

O parâmetro de ordem ferromagnético M_F é dado por,

$$M_F = (M_1 + M_3 + M_2 + M_4)/4 . \quad (6.106)$$

Consequentemente a suscetibilidade ferromagnética é dada por,

$$\chi = N \frac{(\langle M_F^2 \rangle - \langle M_F \rangle^2)}{k_B T} . \quad (6.107)$$

Para definir o ordenamento super-antiferromagnético, levamos em conta as degenerescências deste estado (ver figura 6.1); para tanto, consideramos as duas contribuições,

$$M_{SAF}^{(1)} = (M_1 + M_2 - M_3 - M_4) \quad (6.108)$$

$$M_{SAF}^{(2)} = (M_1 - M_2 - M_3 + M_4) , \quad (6.109)$$

o que leva a definir convenientemente o parâmetro,

$$M_{SAF} = \sqrt{M_{SAF}^{(1)2} + (M_{SAF}^{(2)})^2} , \quad (6.110)$$

cuja suscetibilidade correspondente, χ_{SAF} , é dada por

$$\chi_{SAF} = N \frac{\langle (M_{SAF})^2 \rangle - \langle M_{SAF} \rangle^2}{k_B T} . \quad (6.111)$$

Uma das principais limitações deste método consiste na dificuldade de equilibrar o sistema em baixas temperaturas, devido à exponencial $\exp(-\beta(E_n - E_m))$ pode assumir valores muito pequenos, o que pode levar ao sistema ficar preso em um estado metaestável por um tempo muito longo. Outra limitação consiste nos efeitos que surgem ao tratar com tamanhos finitos, principalmente próximo da temperatura crítica, onde o comprimento de correlação ξ torna-se do tamanho do sistema e como consequência, a temperatura crítica T_c e os expoentes críticos dependem do tamanho L da rede. Por conseguinte, surge a necessidade de efetuar uma análise de escala para estimar os valores críticos no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$. Para tanto, pode-se aproximar $\xi \sim L$ em torno de T_c , e então $t = |T - T_c|/T_c \sim L^{-1/\nu}$. Sabendo que próximo de T_c uma grandeza g (tal como a magnetização, suscetibilidade ou calor específico) satisfaz uma lei de potência do tipo $g \sim t^\theta$, então $g \sim L^{-\theta/\nu}$. Por conseguinte, no plano $g-t$, todos os gráficos de g obtidos para diferentes valores de L devem coincidir na escala $gL^{\theta/\nu}$ versus $tL^{1/\nu}$, ao estimar corretamente os valores de θ , T_c e ν , no limite $L \rightarrow \infty$. Desta forma, mediante um colapso de dados estimamos a temperatura e os expoentes críticos. A seguir apresentamos resultados obtidos a partir de simulações de MC e do método de escala para tamanhos finitos (“finite size scaling”).

6.3.2 Resultados

As simulações foram realizadas utilizando os tamanhos $L = 20, 40, 80, 160$; desta maneira foi possível aplicar o método dos colapsos de dados para estimar grandezas críticas para diversos valores da razão R e da probabilidade p dadas pelas equações (6.2) e (6.4), respectivamente. As figuras 6.10 e 6.11 mostram os diagramas de fases no plano $(k_B T / J_1) - p$, obtidos mediante o colapso da suscetibilidade magnética ⁴ para os valores $R = 0.75$ e $R = 1.0$, respectivamente. Notamos que é sugerida a existência de uma fronteira **SAF-F** para baixas temperaturas, próximo ao valor estimado na equação (6.6).

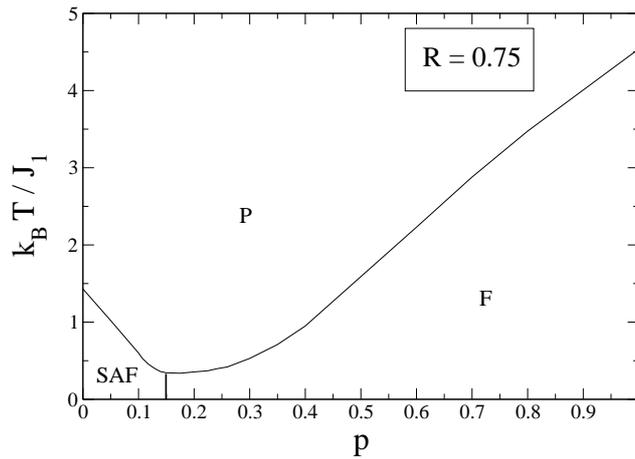


Figura 6.10: Diagrama de fases do modelo definido pelo hamiltoniano dado na equação (6.3), para $R = 0.75$. A linha contínua representa um ajuste das temperaturas críticas obtidas para diversos valores de p .

Ao longo da fronteira **F-P** os colapsos da suscetibilidade sugerem uma quebra de universalidade com os parâmetros p e R . Isto pode ser observado nas figuras 6.12 e 6.13 que mostram os colapsos da suscetibilidade em $p = 0.6$

⁴Para o presente problema, a suscetibilidade magnética apresenta melhores colapsos de dados do que as demais grandezas.

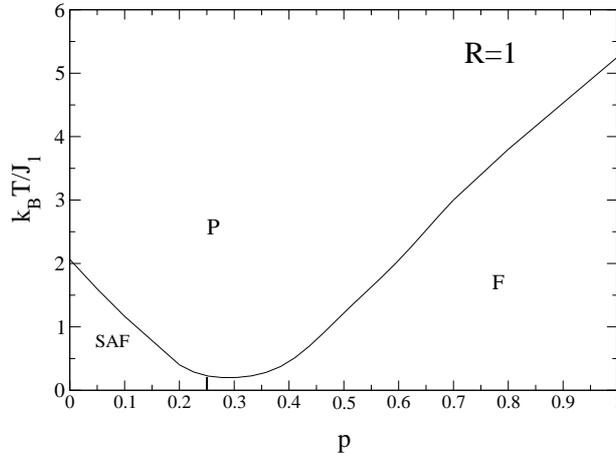


Figura 6.11: Diagrama de fases do modelo definido pelo hamiltoniano dado na equação (6.3), para $R = 1.0$. A linha contínua representa um ajuste das temperaturas críticas obtidas para diversos valores de p .

para $R = 0.75$ e $R = 1.0$. Particularmente, na figura 6.12 mostramos na figura interior os mesmos dados utilizando os expoentes universais do modelo de Ising bidimensional ($\gamma = 1.75$ e $\nu = 1.0$).

Nas figuras 6.14 e 6.15 são apresentados os colapsos da suscetibilidade para um valor de p mais próximo de $p = 1$ (ferromagneto puro), como o caso $p = 0.8$ para $R = 0.75$ e $R = 1.0$, respectivamente. Notamos um ligeira quebra de universalidade devido ao menor grau na desordem.

Nas figuras 6.16 e 6.17 mostramos os valores estimados para o expoente crítico ν em função de p , para $R = 0.75$ e $R = 1.0$, respectivamente. Nota-se que o expoente se afasta do seu valor universal $\nu = 1$ ao diminuir p ao longo da fronteira **F-P**. Finalmente, na figura 6.18 mostramos a razão de expoentes γ/ν em função de p para $R = 0.75$ e $R = 1.0$.

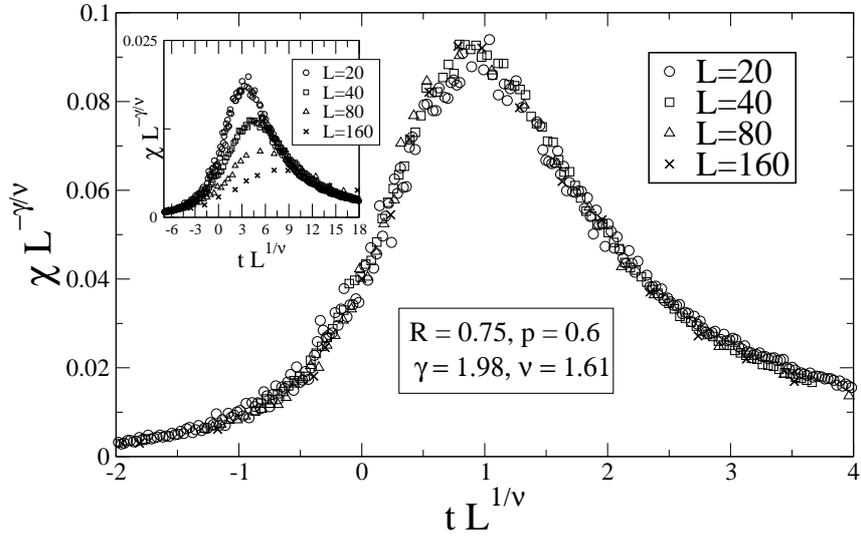


Figura 6.12: Colapso da suscetibilidade para $p = 0.6$, realizado a partir de quatro tamanhos do sistema, para $R = 0.75$. Na figura interior, mostramos as mesmas curvas com os expoentes do modelo de Ising bidimensional.

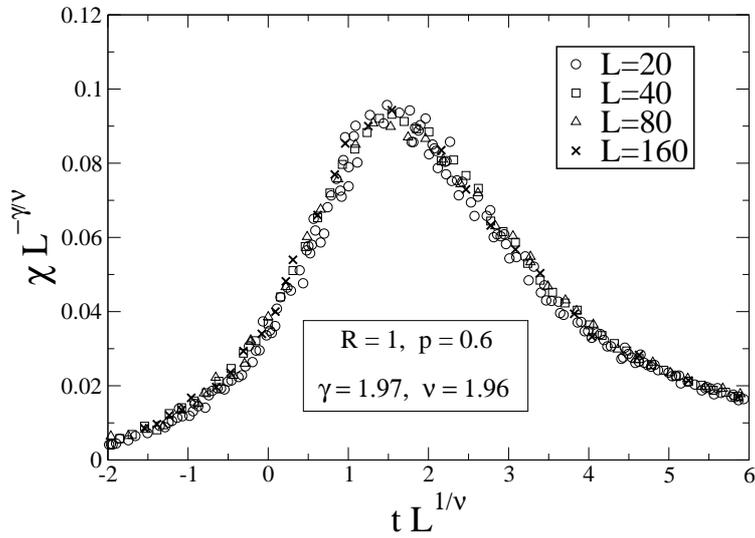


Figura 6.13: Colapso da suscetibilidade para $p = 0.6$, realizado a partir de quatro tamanhos do sistema, para $R = 1.0$.

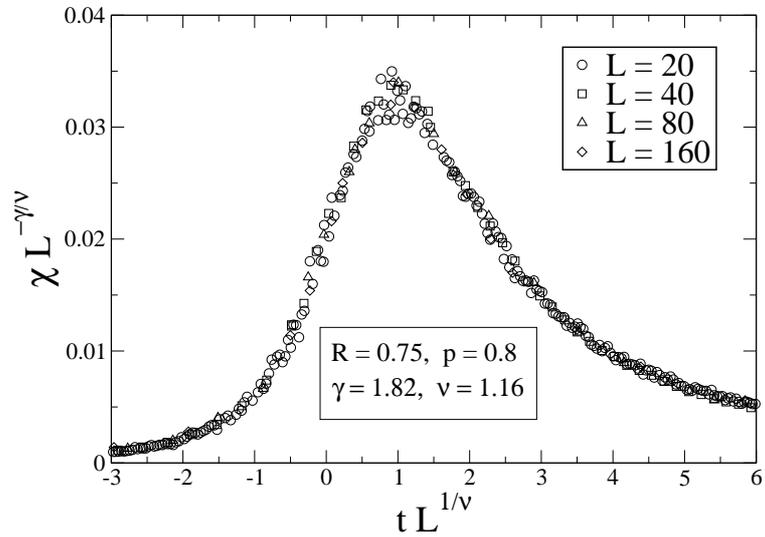


Figura 6.14: Colapso da suscetibilidade para $p = 0.8$, realizado a partir de quatro tamanhos do sistema, para $R = 0.75$.

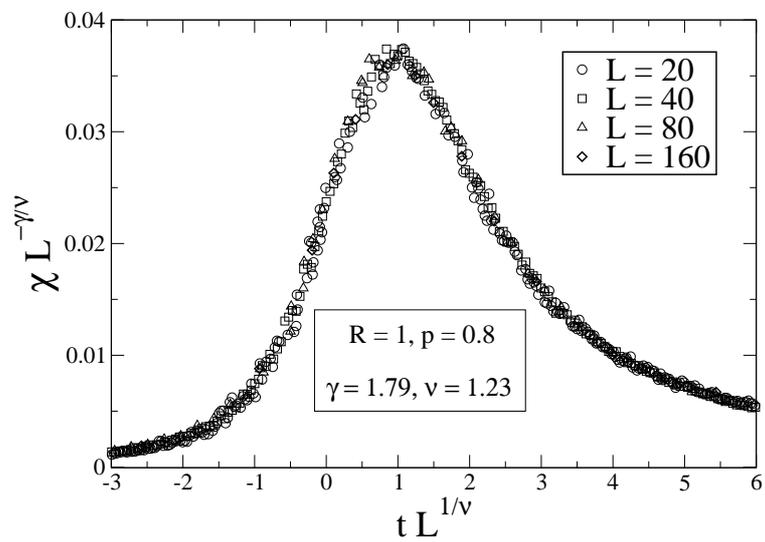


Figura 6.15: Colapso da suscetibilidade para $p = 0.8$, realizado a partir de quatro tamanhos do sistema, para $R = 1.0$.

Cabe mencionar que embora os colapsos acima sugiram uma quebra de universalidade nos expoentes γ e ν , é possível que correções de escala possam recuperar a universalidade dos expoentes considerados.

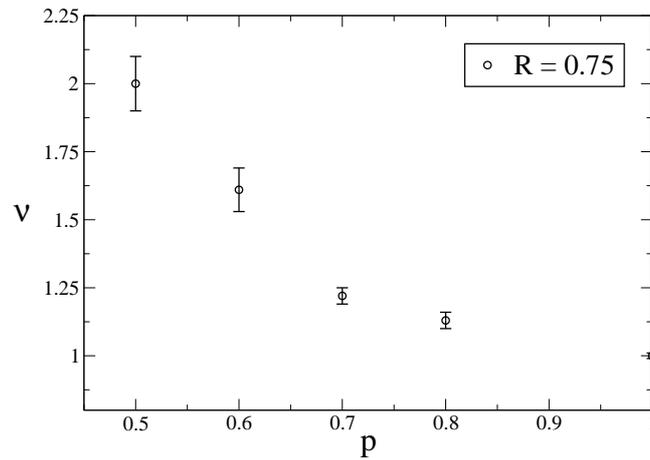


Figura 6.16: Variação do expoente crítico ν em função de p , para $R = 0.75$.

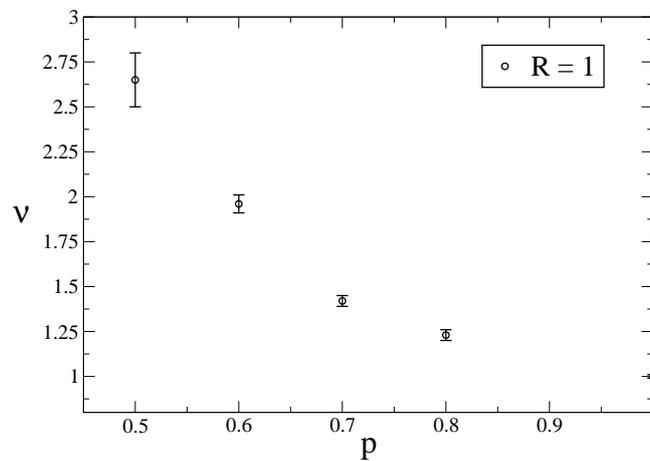


Figura 6.17: Variação do expoente crítico ν em função de p , para $R = 1.0$.

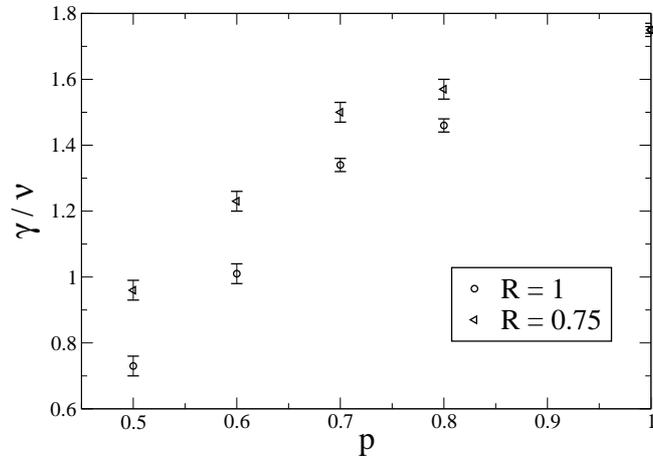


Figura 6.18: Variação da razão γ/ν em função de p , para $R = 0.75$ e $R = 1.0$.

6.4 Conclusões

O modelo de Ising com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e interações aleatórias entre segundos vizinhos, ferromagnéticas com probabilidade p e antiferromagnéticas como probabilidade $1 - p$, foi estudado. O modelo foi tratado primeiramente através da técnica do operador diferencial, mediante a qual foram obtidos diagramas de fases para aglomerados de um, dois e quatro spins centrais, mostrando as fronteiras **SAF-P** e **F-P**. A fronteira **SAF-F** em temperatura nula é calculada mediante uma análise das energias do estado fundamental de cada fase. A segunda abordagem deste modelo foi realizada por simulações de Monte Carlo, as quais além de mostrar as fronteiras **SAF-P** e **F-P**, sugerem a existência da transição **SAF-F** em baixas temperaturas, em boa concordância com a análise dos estados fundamentais. Também, é apresentada uma quebra de universalidade em função dos parâmetros p e R ao longo da fronteira **F-P**, mediante os colapsos da suscetibilidade. No entanto, estes resultados motivam uma análise futura

com vistas a incorporar correções de escala, a fim de tentar recuperar os expoentes universais do modelo de Ising ferromagnético em duas dimensões.

Capítulo 7

Conclusões

Nesta tese, diversos modelos magnéticos desordenados foram investigados através de diferentes técnicas de aproximação. A seguir, descreveremos os principais resultados obtidos e possíveis desdobramentos.

Um modelo de vidro de spins de Ising com interações entre primeiros vizinhos, na presença de um campo magnético externo, foi investigado em diversos tipos de redes hierárquicas. Além do caso do campo inicial uniforme, campos iniciais aleatórios nos sítios obedecendo as distribuições bimodal ou gaussiana foram considerados. Em todos os casos analisados, um atrator do tipo vidro de spins foi encontrado, no plano campo magnético contra temperatura, o qual está associado com uma fase a baixas temperaturas, para redes hierárquicas de dimensão fractal em torno de três, assim como em dimensões maiores. Estes resultados sugerem que a dimensão crítica inferior, associada com a existência deste atrator é próxima a três. Embora a fase encontrada

seja sugestiva de uma possível linha de Almeida-Thouless, investigações de propriedades relativas à quebra de simetria entre réplicas são necessárias.

Um ferromagneto na presença de campo aleatório foi estudado no limite de interações de alcance infinito. A distribuição para os campos foi considerada como uma gaussiana tripla, a qual consiste em uma superposição de três distribuições gaussianas com mesma largura. Este modelo pode ser útil para a descrição de alguns antiferromagnetos diluídos na presença de um campo uniforme que exibem fenômenos multicríticos, como por exemplo, o composto $\text{Fe}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Cl}_2$. Uma grande riqueza de diagramas de fases foi verificada, com uma ou duas fases ferromagnéticas distintas, linhas de transições contínuas e de primeira ordem, pontos tricríticos, de quarta ordem, pontos críticos terminais, e outros fenômenos multicríticos interessantes.

Um sistema de dois modelos de Ising acoplados, na presença de campos magnéticos aleatórios, foi analisado no limite de interações de alcance infinito. De maneira análoga ao modelo do parágrafo acima, diagrama de fases bastante ricos foram obtidos, com a possibilidade de coexistência de diferentes fases ferromagnéticas, dependendo da intensidade do parâmetro de acoplamento entre as duas variáveis de Ising. Este modelo pode ser relevante para o estudo de alguns sistemas do tipo cristais plásticos.

Um modelo de Ising na rede quadrada, com interações competitivas, ferromagnéticas entre primeiros vizinhos e aleatórias (ferromagnéticas e antiferromagnéticas) entre segundos vizinhos, foi estudado. Este modelo foi

investigado através de uma abordagem de campo efetivo, assim como por simulações de Monte Carlo. Um diagrama de fases interessante foi encontrado, exibindo as fases ferromagnética e super-antiferromagnética em baixas temperaturas. Um comportamento não esperado foi encontrado para os expoentes críticos, através de uma análise de escala para tamanhos finitos dos resultados de Monte Carlo: uma possível quebra de universalidade ao longo da fronteira ferromagnética. É possível que a propriedade de universalidade dos expoentes críticos seja recuperada a partir de uma análise de correções de escala.

Os principais desdobramentos e problemas a serem investigados, como consequências diretas desta tese estão relacionados a seguir.

- Implementação do método de cálculo de magnetizações locais para algumas redes hierárquicas utilizadas neste trabalho, como por exemplo, a rede gerada pela célula do tipo ponte de Wheatstone tridimensional. Com esta técnica seria possível investigar outros comportamentos críticos dos vidros de spins estudados no Capítulo 3.
- Verificação de possíveis propriedades de quebra de simetria entre réplicas na fase de vidro de spins encontrada para o vidro de spins de Ising na presença de campos magnéticos.
- Investigação do modelo de ferromagneto na presença de campos aleatórios do capítulo 4 em uma rede cúbica com interações entre spins primeiros vizinhos, através de simulações numéricas. Este estudo tem como principal objetivo a persistência de algumas características encontradas nos

diagramas de fases de campo médio em sistemas com interações de curto alcance.

- Estudo do modelo do capítulo 4 em redes hierárquicas para as quais seja possível calcular as magnetizações locais exatamente; através desta abordagem seria possível verificar se alguns tipos de comportamentos multicríticos acontecem também para este tipo de sistema em redes hierárquicas.
- Introdução de correções de escala para a análise dos expoentes críticos do modelo de Ising com interações aleatórias entre segundos vizinhos. É possível que o cenário de quebra de universalidade verificado no Capítulo 6 seja alterado mediante este estudo.

Bibliografia

- [1] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1971)
- [2] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Oxford Science Publications, Oxford, 1992).
- [3] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, Oxford, 1980).
- [4] K. H. Fischer e J. A. Hertz, *Spin Glasses* (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).
- [5] M. Mezard, G. Parisi e M. A. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond* (World Scientific, Singapore, 1987).
- [6] K. Binder e A. P. Young, *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801 (1986).
- [7] V. Dotsenko, *Introduction to the Replica Theory of Disordered Statistical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
- [8] T. Jorg e H. G. Katzgraber, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 197205 (2008).
- [9] E. Ising, *Zeitschrift f. Physik* **31**, 253 (1925).

- [10] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [11] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley, New York, 1987).
- [12] D. P. Landau e K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [13] M. E. J. Newman e G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Clarendon Press, Oxford, 1999).
- [14] M. Creutz, P. Mitra e K. J. M. Moriarty, J. Stat. Phys. **42**, 823 (1986) .
- [15] H. W. J. Blöte, E. Luijten e J. R. Heringa, J. Phys. A **28**, 6289 (1995).
- [16] H. W. J. Blöte e G. Kamieniarz, Acta Phys. Pol. A **85**, 395 (1994).
- [17] A. Aharony, Phys. Rev. B **18**, 3318 (1978).
- [18] Y. Arian e Y. Shapir, Phys. Rev. B **34**, 8133 (1986).
- [19] J. Z. Imbrie, Comm. Math. Phys. **98**, 145 (1985).
- [20] N. G. Fytas e A. Malakis, Eur. Phys. J. B **61**, 111 (2008).
- [21] B. Boechat e M. A. Continentino Phys. Rev. B **44**, 11767 (1991).
- [22] A. Rosas e S. Coutinho, Physica A **335**, 115 (2004).
- [23] S. F. Edwards e P. W. Anderson, J. Phys. F: Met. Phys. **5**, 965 (1975).
- [24] D. Sherrington e S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35**, 1792 (1975).
- [25] J. R. L. de Almeida e D. J. Thouless, J. Phys. A, **11**, 983 (1978).

- [26] G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **43**, 1754 (1979).
- [27] A. P. Young e H. G. Katzgraber, Phys. Rev. Lett. **93**, 207203 (2004).
- [28] D. S. Fisher e D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **56**, 1601 (1986).
- [29] M. Blume, J. Emery e R. B. Griffiths, Phys. Rev. A **4**, 1071 (1971).
- [30] J. Hubbard, Phys. Rev. Lett. **3**, 77 (1959)
- [31] K. Yoshida, *Theory of Magnetism* (Springer-Verlag, Berlin, 1996).
- [32] J. M. Kosterlitz e D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Physics **6**, 1181 (1973).
- [33] S. Blundell, *Magnetism in Condensed Matter* (Oxford University Press, Oxford, 2001)
- [34] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, New York 1994).
- [35] I. R. Yukhnovskii, *Phase Transitions of the Second Order-Collective Variables Method* (World Scientific, Singapore, 1987).
- [36] J. C. Tolédano e P. Tolédano, *The Landau Theory of Phase Transitions* (World Scientific, Singapore, 1987).
- [37] L. P. Kadanoff, *Statistical Physics: Statics, Dynamics and Renormalization* (World Scientific, Singapore, 1999).
- [38] M. A. Ruderman e C. Kittel, Phys. Rev. **99** (1954).
- [39] T. Kasuya, Prog. Theor. Phys. **16**, 45 (1956).

- [40] K. Yosida, Phys. Rev. **106**, 895 (1957)
- [41] H. Maletta, *Excitations in Disordered Systems* (Plenum Press, New York, 1982).
- [42] M. F. Thorpe, J. Phys. C **11**, 2983 (1978).
- [43] B. B. Mandelbrot, *Fractals: Form, Chance and Dimensions* (Wiley InterScience, Wiley, 1977).
- [44] R. B. Griffiths e M. Kaufman, Phys. Rev. B **26**, 5022 (1982).
- [45] H. O. Martin e C. Tsallis, J. Phys C, **14**, 5645 (1981).
- [46] P. M. C. de Oliveira, J. Physique **47**, 1107 (1986).
- [47] A. A. Migdal, JETP **42**, 413 (1976).
- [48] M. S. Cao e J. Machta, Phys. Rev. B **48**, 3177 (1993).
- [49] L. P. Kadanoff, Ann. Phys. **100**, 359 (1976).
- [50] R. N. Bhatt e A. P. Young, Phys. Rev. Lett. **54**, 924 (1985).
- [51] R. Singh e S. ChaKravarty, Phys. Rev. Lett. **57**, 245 (1986).
- [52] B. W. Southern e A. P. Young, J. Phys. C **10**, 2179 (1977).
- [53] D. Badoni, J. C. Ciria, G. Parisi, F. Ritort, J. Pech e J. J. Ruiz-Lorenzo, Europhys. Lett. **21**, 495 (1993).
- [54] L. Leuzzi, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi e J.J. Ruiz-Lorenzo, arXiv 0811.3435v1. (2008).

- [55] M. Sasaki, K. Hukushima, H. Yoshino e H. Takayama, *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1514 (2007).
- [56] E. Gardner, *J. Phys* **45**, 1755 (1984).
- [57] O. R. Salmon, N. Crokidakis e F. D. Nobre, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 056005 (2009).
- [58] *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998).
- [59] V. Dotsenko, *Introduction to the Replica Theory of Disordered Statistical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 2001).
- [60] T. Nattermann, em *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998).
- [61] Y. Imry and S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1399 (1975).
- [62] D. P. Belanger, em *Spin Glasses and Random Fields*, editado por A. P. Young (World Scientific, Singapore, 1998).
- [63] S. Fishman e A. Aharony, *J. Phys. C* **12** , L729 (1979).
- [64] Po-Zen Wong, S. von Molnar e P. Dimon, *J. Appl. Phys.* **53** , 7954 (1982).
- [65] J. Cardy, *Phys. Rev. B* **29** , 505 (1984).
- [66] R. J. Birgeneau, *J. Magn. Magn. Mater.* **177**, 1 (1998).
- [67] T. Schneider e E. Pytte, *Phys. Rev. B* **15**, 1519 (1977).

- [68] D. Andelman, Phys. Rev. B **27**, 3079 (1983).
- [69] S. Galam e J. Birman, Phys. Rev. B **28**, 5322 (1983).
- [70] D. C. Mattis, Phys. Rev. Lett. **55**, 3009 (1985).
- [71] M. Kaufman, P. E. Kluzinger e A. Khurana, Phys. Rev. B **34**, 4766 (1986).
- [72] M. Aizenman e J. Wehr, Phys. Rev. Lett. **62**, 2503 (1989); Errata, Phys. Rev. Lett. **64**, 1311 (1990).
- [73] K. Hui e A.N. Berker, Phys. Rev. Lett. **62**, 2507 (1989); Errata, Phys. Rev. Lett. **63**, 2433 (1989).
- [74] M. Gofman, J. Adler, A. Aharony, A. B. Harris e M. Schwartz, Phys. Rev. B **53**, 6362 (1996).
- [75] M. R. Swift, A. J. Bray, A. Maritan, M. Cieplak e J. R. Banavar, Europhys. Lett. **38**, 273 (1997).
- [76] J. Machta, M. E. J. Newman e L. B. Chayes, Phys. Rev. E **62**, 8782 (2000).
- [77] A. A. Middleton e D. S. Fisher, Phys. Rev. B **65**, 134411 (2002).
- [78] I. Dukovski e J. Machta, Phys. Rev. B **67**, 014413 (2003).
- [79] Y. Wu e J. Machta, Phys. Rev. Lett. **95**, 137208 (2005).
- [80] Y. Wu e J. Machta, Phys. Rev. B **74**, 064418 (2006).
- [81] N. G. Fytas e A. Malakis, Eur. Phys. J. B **61**, 111 (2008).

- [82] N. Crokidakis e F. D. Nobre, *J. Phys. Condens. Matter* **20**, 145211 (2008).
- [83] J. Kushauer e W. Kleemann, *J. Magn. Magn. Mater.* **140–144** , 1551 (1995).
- [84] J. Kushauer, R. van Bentum, W. Kleemann, e D. Bertrand, *Phys. Rev. B* **53**, 11647 (1996).
- [85] J. P. Sethna, K. Dahmen, S. Kartha, J. A. Krumhansl, B. W. Roberts e J. D. Shore, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3347 (1993).
- [86] R. B. Griffiths, *Phys. Rev. B* **12**, 345 (1975).
- [87] H. Nishimori, *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing* (Oxford University Press, Oxford 2001).
- [88] J. N. Sherwood, *The Plastic Crystalline State* (Wiley, New York, 1979).
- [89] J. Folmer, R. Withers, T. Welberry e J. Martin, *Phys. Rev. B* **77**, 144205 (2008).
- [90] Y. Yamada, H. Takatera e D. L. Huber, *J. Phys. Soc. Japan* **36**, 216 (1974).
- [91] L. M. Amzel e L. N. Becka, *J. Phys. Chem. Solids* **30**, 521 (1969).
- [92] S. Galam, *Phys. Lett. A* **122**, 271 (1987).
- [93] S. Galam, V. B. Henriques e S. R. Salinas, *Phys. Rev. B* **42**, 6720 (1990).
- [94] R. H. Swedsen e S. Krinsky, *Phys. Lett.* **43** , 177 (1979).

- [95] D. P. Landau, Phys. Rev. B **21**, 1285 (1980).
- [96] K. Binder e D. P. Landau, Phys. Rev. B, **21**, 1941 (1980).
- [97] D. P. Landau e K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [98] H. W. J. Blöte, A. Compagner e A. Hoogland, Physica A **141A**, 375 (1987).
- [99] A. Malakis, P. Kalozoumis e N. Tyraskis, Eur. Phys. J. B **50**, 63 (2006).
- [100] J. L. Lopez, F. Granja e J. M. Sanchez, Phys. Rev. B **48**, 3519 (1993).
- [101] R. A. dos Anjos, J. R. Viana e J. R. de Sousa, Phys. Lett. A **372**, 1180 (2008).
- [102] A. Kalz, A. Honecker, S. Fuchs e T. Pruschke, arXiv: 0809.2503v1. (2008).
- [103] H. B. Callen, Phys. Lett. **4**, 161 (1963).
- [104] N. Susuki, Phys. Lett. **19**, 267 (1965).
- [105] R. Honmura e T. Kaneyoshi, J. Phys. C **12**, 3970 (1979).
- [106] J. R. V. Azevedo, *Transição de Fase Quântica e Modelos de Spins Frustrados*, tese de doutorado, UFAM/UFSCar, 2007

Apêndice A

Termos das relações de recorrência da rede hierárquica ponte de Wheatstone tridimensional

Neste apêndice listaremos os termos das relações de recorrência para o modelo EA na presença de campos magnéticos externos (ver equações (3.42)-(3.44)).

Temos então,

$$A = \sum_{i=1}^{16} \exp(A_i) , \quad (\text{A.1})$$

$$A_1 = -K_{\mu 1} - K_{\mu 2} - K_{\mu 3} - K_{\mu 4} - K_{\nu 1} - K_{\nu 2} - K_{\nu 3} - K_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 - H_2 - H_3 - H_4 + K_{12} + K_{23} + K_{34} + K_{14} ,$$

$$A_2 = K_{\mu 1} - K_{\mu 2} - K_{\mu 3} - K_{\mu 4} + K_{\nu 1} - K_{\nu 2} - K_{\nu 3} - K_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 - H_2 - H_3 - H_4 - K_{12} + K_{23} + K_{34} - K_{14} ,$$

$$A_3 = -K_{\mu 1} + K_{\mu 2} - K_{\mu 3} - K_{\mu 4} - K_{\nu 1} + K_{\nu 2} - K_{\nu 3} - K_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 + H_2 - H_3 - H_4 - K_{12} - K_{23} + K_{34} + K_{14} ,$$

$$\begin{aligned}
A_4 &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 + H_2 - H_3 - H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
A_5 &= -\kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 - H_2 + H_3 - H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
A_6 &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 - H_2 + H_3 - H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
A_7 &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 + H_2 + H_3 - H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
A_8 &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 + H_2 + H_3 - H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
A_9 &= -\kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 - H_2 - H_3 + H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
A_{10} &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 - H_2 - H_3 + H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
A_{11} &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 + H_2 - H_3 + H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
A_{12} &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 + H_2 - H_3 + H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
A_{13} &= -\kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 - H_2 + H_3 + H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
A_{14} &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 - H_2 + H_3 + H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
A_{15} &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 + H_2 + H_3 + H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
A_{16} &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
B &= \sum_{i=1}^{16} \exp(B_i) , \tag{A.2} \\
B_1 &= -\kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 - H_2 - H_3 - H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
B_2 &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 - H_2 - H_3 - H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_3 &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 + H_2 - H_3 - H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_4 &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 + H_2 - H_3 - H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_5 &= -\kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 - H_2 + H_3 - H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
B_6 &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 - H_2 + H_3 - H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_7 &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 + H_2 + H_3 - H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
B_8 &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} - \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} + \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 + H_2 + H_3 - H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_9 &= -\kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 - H_2 - H_3 + H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_{10} &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 - H_2 - H_3 + H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
B_{11} &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 + H_2 - H_3 + H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_{12} &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} - \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} + \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 + H_2 - H_3 + H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} - \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
B_{13} &= -\kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 - H_2 + H_3 + H_4 + \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_{14} &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 - H_2 + H_3 + H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
B_{15} &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} - H_1 + H_2 + H_3 + H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
B_{16} &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} + H_{\mu} - H_{\nu} + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
C &= \sum_{i=1}^{16} \exp(C_i) , \tag{A.3} \\
C_1 &= \kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} - H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 - H_2 - H_3 - H_4 + \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} , \\
C_2 &= -\kappa_{\mu 1} + \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} + \kappa_{\nu 1} - \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} - H_{\mu} + H_{\nu} + H_1 - H_2 - H_3 - H_4 - \kappa_{12} + \kappa_{23} + \kappa_{34} - \kappa_{14} , \\
C_3 &= \kappa_{\mu 1} - \kappa_{\mu 2} + \kappa_{\mu 3} + \kappa_{\mu 4} - \kappa_{\nu 1} + \kappa_{\nu 2} - \kappa_{\nu 3} - \kappa_{\nu 4} - H_{\mu} + H_{\nu} - H_1 + H_2 - H_3 - H_4 - \kappa_{12} - \kappa_{23} + \kappa_{34} + \kappa_{14} ,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_4 &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}+H_1+H_2-H_3-H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}+\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
c_5 &= \kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}-H_1-H_2+H_3-H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
c_6 &= -\kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}+H_1-H_2+H_3-H_4-\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
c_7 &= \kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}-H_1+H_2+H_3-H_4-\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
c_8 &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}+H_1+H_2+H_3-H_4+\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
c_9 &= \kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}-H_1-H_2-H_3+H_4+\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
c_{10} &= -\kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}+H_1-H_2-H_3+H_4-\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
c_{11} &= \kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}-H_1+H_2-H_3+H_4-\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
c_{12} &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}+H_1+H_2-H_3+H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
c_{13} &= \kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}-H_1-H_2+H_3+H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}+\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
c_{14} &= -\kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}+H_1-H_2+H_3+H_4-\kappa_{12}-\kappa_{23}+\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
c_{15} &= \kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}-H_1+H_2+H_3+H_4-\kappa_{12}+\kappa_{23}+\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
c_{16} &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}+H_{\nu}+H_1+H_2+H_3+H_4+\kappa_{12}+\kappa_{23}+\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
D &= \sum_{i=1}^{16} \exp(D_i), \tag{A.4} \\
D_1 &= \kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1-H_2-H_3-H_4+\kappa_{12}+\kappa_{23}+\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
D_2 &= -\kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1-H_2-H_3-H_4-\kappa_{12}+\kappa_{23}+\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_3 &= \kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1+H_2-H_3-H_4-\kappa_{12}-\kappa_{23}+\kappa_{34}+\kappa_{14},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D_4 &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1+H_2-H_3-H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}+\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_5 &= \kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1-H_2+H_3-H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
D_6 &= -\kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1-H_2+H_3-H_4-\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_7 &= \kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1+H_2+H_3-H_4-\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
D_8 &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}+\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}+\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1+H_2+H_3-H_4+\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_9 &= \kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1-H_2-H_3+H_4+\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_{10} &= -\kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1-H_2-H_3+H_4-\kappa_{12}+\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
D_{11} &= \kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1+H_2-H_3+H_4-\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_{12} &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}+\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}+\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1+H_2-H_3+H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}-\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
D_{13} &= \kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1-H_2+H_3+H_4+\kappa_{12}-\kappa_{23}+\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_{14} &= -\kappa_{\mu 1}+\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}+\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1-H_2+H_3+H_4-\kappa_{12}-\kappa_{23}+\kappa_{34}+\kappa_{14}, \\
D_{15} &= \kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}+\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}-H_1+H_2+H_3+H_4-\kappa_{12}+\kappa_{23}+\kappa_{34}-\kappa_{14}, \\
D_{16} &= -\kappa_{\mu 1}-\kappa_{\mu 2}-\kappa_{\mu 3}-\kappa_{\mu 4}-\kappa_{\nu 1}-\kappa_{\nu 2}-\kappa_{\nu 3}-\kappa_{\nu 4}-H_{\mu}-H_{\nu}+H_1+H_2+H_3+H_4+\kappa_{12}+\kappa_{23}+\kappa_{34}+\kappa_{14}.
\end{aligned}$$