

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

SBI-IFUSP



305M810T1409

e. 1



MODELO DE ISING COMPRESSÍVEL -  
FLUTUAÇÕES ELÁSTICAS E ORDEM DA  
TRANSIÇÃO MAGNÉTICA

*Manoel José de Almeida*  
*Sergio L. A. de Azevedo*  
*subtit*  
*Silvia Helena de Azevedo*

Tese de Doutorado

VERA BOHOMOLETZ HENRIQUES

*Defesa em 29/06/88*

SÃO PAULO

1988

530.414

H519m

D

e.1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação  
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

*Henriques, Vera Bohomoletz*

*Modelo de Ising compressível - flutuações elásticas e ordem da transição magnética. São Paulo, 1988.*

*Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Departamento de Física Experimental.*

*Área de Concentração: Física do Estado Sólido.*

*Orientador. Prof. Dr. Silvio R. A. Salinas.*

*Unitermos: 1. Transições de fase; 2. Sistemas magnéticos sob pressão.*

USP/IF/SBI - 27/88

Agradeço

pela orientação, ao S.R. Salinas

pelas discussões e sugestões, aos colegas

Amélia I. Hamburger

Wagner Figueiredo

Carlos E.I. Carneiro

Mário J. de Oliveira

Carlos S.O. Yokoi

## RESUMO

Neste trabalho, estuda-se o comportamento crítico de spins de Ising colocados em três tipos de rede elástica: uma rede rígida de volume variável (L1); uma rede cujas posições dos íons podem variar, sem tensão de cisalhamento (L2); uma rede do tipo "colchão de molas", com acoplamento elástico entre primeiros e segundos vizinhos (L3). Verificamos que o acoplamento spin-rede pode ser simulado por uma interação efetiva de longo alcance entre pares de spins, em vários casos. Nas hamiltonianas correspondentes, a integral de troca dos spins é considerada linearmente dependente da distância inter-iônica e a interação elástica é considerada apenas na aproximação harmônica. Mostramos que o coeficiente do termo de quatro spins, que representa a interação magnetoelástica na hamiltoniana efetiva de spins, tem sinal diferente para as flutuações elásticas microscópicas (na posição dos íons) e macroscópicas (de volume). O efeito dessa interação efetiva é alterar os expoentes críticos da transição magnética no primeiro caso, renormalizando-os, e transformar a transição contínua em uma transição de primeira ordem, no segundo caso. Em um sistema real, ambos os tipos de flutuação estão presentes e os dois efeitos competem entre si para determinar a ordem da transição. No modelo (L3), o mais "realista" entre os três estudados, os efeitos de volume predominam. Entretanto, não é possível fazer previsões para outros modelos específicos, pois os dois efeitos são da mesma ordem de grandeza. Estudamos, ainda, o efeito sobre a hamiltoniana efetiva de spins de se alterar as condições de contorno, assim como de se alterar o valor do spin, no caso do segundo modelo (L2). Para prever a ordem da transição, as hamiltonianas efetivas de spin são analisadas no contexto de campo médio, de grupo de renormalização e de uma solução exata em duas dimensões.

## ABSTRACT

We study the critical behaviour of Ising  $S = \frac{1}{2}$  spins on three compressible lattices: a compressible but rigid lattice (L1); an elastic lattice without shearing forces (L2) and a "spring mattress", with elastic couplings between nearest and next-nearest neighbours (L3). The corresponding hamiltonians contain an exchange interaction linearly dependent on the inter-ionic distance and an elastic interaction considered in the harmonic approximation. We show that both pure macroscopic (volume) and pure microscopic (ion position) fluctuations lead to a pair-pair interaction term in the effective spin hamiltonian. However, the coefficient of this additional term is negative in the first case, which turns the transition first order, and positive in the second case, which renormalizes the critical exponents. In a real system, both kinds of fluctuation are present and the two effects will compete. Model (L3), the closest to the above condition, has the volume effect as predominant. The delicate balance between the competing effects of the same order of magnitude forbid a prediction for other models. We also show that different effective spin Hamiltonians may be arrived at according to the choice of boundary condition of or ensemble. In one case (L2), we also consider spin  $S = 1$ . We use mean-field, an exact solution for dimensionality two and momentum space renormalization group to predict the order of the transitions.

I. INTRODUÇÃO

II. MODELOS - HAMILTONIANAS EFETIVAS ( $S = \frac{1}{2}$ )

III. ORDEM DA TRANSIÇÃO MAGNÉTICA - TRÊS TRATAMENTOS

IV. MODELO COMPRESSÍVEL COM  $S = 1$

V. CONCLUSÕES

Bibliografia

## I. INTRODUÇÃO

Modelos de Ising compressíveis já foram bastante discutidos na Literatura<sup>(1-15)</sup>. Em 1956, Domb<sup>(1)</sup> mostrou, através de um argumento termodinâmico desenvolvido por Rice<sup>(2)</sup>, que se a possibilidade de variação de volume fosse introduzida na rede rígida de Ising através de uma integral de troca dependente do volume global do sistema, a divergência da suscetibilidade na transição magnética levaria a uma compressibilidade negativa para o sistema e portanto a uma instabilidade mecânica, a qual seria evitada passando o sistema por uma transição descontínua. Assim, a transição magnética seria de primeira ordem, o que estaria de acordo com as transições ordem-desordem em alguns materiais. As soluções de campo médio para o modelo correspondente (constante de troca dependente do volume) foram obtidas por Bean e Rodbell<sup>(3)</sup> e Mattis e Schultz<sup>(4)</sup>, prevendo-se a possibilidade de comportamento tricrítico para um acoplamento magnetomecânico suficientemente forte.

Por outro lado, as discrepâncias entre os valores teóricos e experimentais dos expoentes críticos das transições de fase, levaram Fisher a conclusões opostas. Em um trabalho de 1968<sup>(16)</sup>, o autor define como ideais os expoentes críticos do modelo de Ising rígido e considera o efeito de vínculos (volume constante, número de impurezas constante, etc.) sobre o comportamento termodinâmico do modelo, na transição. Fisher postula que o comportamento crítico deveria permanecer ideal, se o sistema fosse observado sob a ação de um campo termodinâmico (força ou pressão) constante. Nesse caso, argumentos termodinâmicos, aliados a hipótese de analiticidade, conduzem à previsão de que, na situação de volume constante, o sistema apresentaria uma transição de segunda ordem, porém com expoentes críticos "renormalizados" (o calor es

pecífico deixaria de apresentar divergência e a divergência na suscetibilidade, por exemplo, seria mais "fraca").

O passo seguinte consistiu na inclusão de flutuações microscópicas no modelo de Ising, o que foi feito por Baker e Essam<sup>(5)</sup> em 1970. O modelo proposto por esses autores é mecanicamente instável, devido à ausência de forças de cisalhamento, mas é também o único modelo exatamente solúvel que permite flutuações microscópicas nas posições dos íons. Na verdade, o modelo havia sido de certa forma sugerido no trabalho de Fisher<sup>(16)</sup>, e confirmou suas previsões: transição ideal para o sistema sob força fixa, transição de segunda ordem, com expoentes renormalizados, para o sistema de volume fixo.

Diante das previsões contraditórias descritas acima, vários autores<sup>(6)</sup> tentaram tratamentos aproximados de modelos com propriedades físicas mais razoáveis, isto é, modelos em que as forças de cisalhamento estavam presentes. Embora estes trabalhos fossem inconclusivos do ponto de vista de estabelecer a ordem da transição, eles introduziram a possibilidade de discutir o modelo magneto-elástico em termos de uma hamiltoniana efetiva de spins, na qual, além da interação de Ising, com a constante de troca parametrizada, estavam presentes termos de quatro spins (incluindo interações de longo e de curto alcance). A natureza desse termo de quatro spins é difícil de estabelecer. Esse fato levou alguns autores (Aharony<sup>(7)</sup> e Salinas<sup>(8)</sup>) a considerar (em um tratamento de grupo de renormalização no espaço de momentos) o modelo de Ising na presença de uma interação adicional entre quatro spins. (No espaço de momentos, essa interação estaria representada na hamiltoniana por um termo do tipo  $\sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}-\vec{k}}$ ). Essa interação adicional poderia levar o sistema de Ising a apresen



tar, para certos valores do coeficiente do acoplamento, uma transição de primeira ordem. Outros autores (Rudnick et al<sup>(9)</sup>, Oitmaa e Barber<sup>(10)</sup>) consideraram uma interação de longo alcance entre pares de spins (representada na hamiltoniana por um termo biquadrático,  $-\frac{J_4}{N} (\sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j)^2$ ), mas sem justificar a escolha do sinal do coeficiente da interação. Rudnick e colaboradores consideraram  $J_4 \geq 0$  e, através de um cálculo de grupo de renormalização, predisseram a possibilidade de transição de primeira ordem, no primeiro caso, e segunda ordem, no segundo caso. Oitmaa e Barber consideraram apenas o caso  $J_4 > 0$ , e, através de um cálculo exato, previram para seu modelo apenas transições de primeira ordem.

Paralelamente ao estudo de modelos compressíveis microscópicos, outros autores (Larkin e Pikin<sup>(11)</sup>, Bruno e Sak<sup>(12)</sup>, Wegner<sup>(13)</sup>, Bergman e Halperin<sup>(14)</sup>) consideraram um modelo de Ising, na formulação de Landau-Guinsburg, linearmente acoplado a um meio elástico contínuo. O estudo de grupo de renormalização destes sistemas<sup>(12-14)</sup> mostrava que um modelo compressível de Ising, isotrópico do ponto de vista elástico, apresentaria uma transição de primeira ordem tanto a pressão constante<sup>(12-14)</sup>, quanto a volume constante<sup>(14)</sup>. Os expoentes críticos apresentariam a renormalização de Fisher apenas na condição particular em que os átomos da superfície estivessem fixos<sup>(14)</sup>. Destes trabalhos, apenas o de Bruno e Sak<sup>(12)</sup> trata com uma hamiltoniana efetiva de spins, no espaço de momentos, em que aparecem tanto um termo comum de quatro spins ( $\sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}-\vec{k}'} \sigma_{-\vec{k}''}$ ), quanto um termo biquadrático ( $(\sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}})^2$ ). O trabalho de Bruno e Sak estabelece claramente o papel predominante da interação entre pares de spins, no sentido de induzir uma transição de primeira ordem (para  $J_4 > 0$ ). (A presença da interação de quatro spins é, nesse caso, irrelevante). A solução de grupo de renormalização mostra a impossibilidade de um

cruzamento entre a região de transição de segunda ordem (para um coeficiente positivo da interação biquadrática) e a de transição de primeira ordem (para um coeficiente negativo da interação biquadrática). Na abordagem dos autores esse coeficiente era sempre negativo, e portanto a transição magneto-elástica apresentava-se de primeira ordem.

Enquanto desenvolviam-se os estudos do modelo de Ising acoplado a um meio contínuo, Salinas<sup>(17)</sup> notou que os modelos microscópicos de Domb e de Baker-Essam podiam, em qualquer ensemble (das intensidades ou das densidades), ser reduzidos à hamiltoniana efetiva de spins:

$$\mathcal{H} = - J_2 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{J_4}{N} \left( \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \right)^2,$$

com  $J_4 > 0$  para o modelo de Domb no ensemble das pressões,  $J_4 < 0$  para o modelo de Baker-Essam no ensemble dos volumes e  $J_4 = 0$  nos casos restantes. Por outro lado, eram conhecidos os fatos, já mencionados, de que o modelo de Domb apresenta transição de primeira ordem e o modelo de Baker-Essam, transição de segunda ordem. Como no modelo de Domb são desprezadas as flutuações de posição, ao passo que no modelo de Baker-Essam essas flutuações são consideradas em excesso (não há inibição através de forças de cisalhamento), surgiu a idéia de que um modelo microscópico simples, mas mecanicamente estável e com volume variável, pudesse apresentar um comportamento intermediário (com a possibilidade de exibir ponto tricrítico no diagrama de fases pressão vs temperatura). O modelo deveria ser tratado além de campo médio, pois era conhecida a contradição entre as previsões de campo médio e de grupo de renormalização no caso de meios contínuos<sup>(12)</sup>. Inspirado nesta idéia, este trabalho nos mostrou que o estudo cuidadoso dos modelos de Domb

e de Baker-Essam podiam esclarecer alguns aspectos dos modelos compressíveis em geral, isto é, que:

- (i) a interação efetiva de longo alcance entre pares de spins tem sido associada a flutuações de posição (Wagner<sup>(13)</sup>, Bruno e Sak<sup>(12)</sup>, Oitmaa e Barber<sup>(10)</sup>, Chen e Kardar<sup>(18)</sup>). Verificamos que, na verdade, uma interação desse tipo surge tanto a partir das flutuações microscópicas, quanto das flutuações de superfície, mas com coeficientes de sinais opostos. A natureza de primeira ordem da transição é portanto uma consequência do fato de que, nos modelos e aproximações consideradas na literatura, o acoplamento efetivo de pares de spins devido às flutuações de superfície é constante (independente da pressão) e maior do que o acoplamento associado às flutuações microscópicas.
- (ii) o modelo de Domb tem sido interpretado (Chen e Kardar<sup>(18)</sup>) como a aproximação de ordem mais baixa que apresenta as características essenciais do sistema de Ising compressível. Isto é verdade, em relação à ordem da transição, apenas se as flutuações de volume predominam. Entretanto, as flutuações de volume e de posição correspondem a termos da mesma ordem de grandeza, na hamiltoniana modelo, não havendo justificativa para desprezar as segundas.
- (iii) a expansão de Landau do modelo de campo médio permite analisar os coeficientes da expansão em termos de parâmetros microscópicos. Verifica-se que o ponto tricrítico da solução é acessível a partir destes parâmetros, em contradição, de fato, com a solução de grupo de renormalização para o mesmo modelo.

Além disso, estabelecemos ao longo do trabalho os

seguintes pontos:

- (i) condições de contorno diferentes, no ensemble das densidades, no caso do modelo de Baker-Essam, conduzem a hamiltonianas efetivas diferentes;
- (ii) o tratamento do modelo no ensemble de campos mostra que escolhas arbitrárias da variável de campo conjugada levam a comportamentos críticos diferentes para o mesmo modelo;
- (iii) o modelo de Ising no colchão de molas cúbico apresenta transição de primeira ordem, ao contrário da expectativa inicial;
- (iv) um modelo de Baker-Essam de  $s = 1$  apresenta uma hamiltoniana efetiva de spins com um termo adicional  $(\sum_j \sigma_j^2)^2$ . Essa interação, entretanto, não altera o comportamento crítico do sistema.

O presente trabalho está construído da seguinte maneira. No capítulo II, obtemos hamiltonianas efetivas de spins para (i) modelos de Domb, (ii) o modelo de Baker-Essam a "volume constante", (iii) o modelo de Baker-Essam para comprimento das linhas constantes, (iv) o modelo de Baker-Essam a volume variável e comprimento das linhas variável, (v) o modelo de Ising no colchão de molas. No capítulo III, (a) discutimos a solução de campo médio, em ensembles diferentes, do modelo de Domb, (b) apresentamos uma solução exata para as hamiltonianas dos modelos (i)-(iv) acima e (c) apresentamos uma solução de grupo de renormalização para as hamiltonianas dos modelos (i)-(v) acima. No capítulo IV, obtemos uma hamiltoniana efetiva para o modelo de Baker-Essam de spin  $s=1$  e discutimos a solução de grupo de renormalização para o modelo. Finalmente, no capítulo V, apresentamos algumas conclusões.

II. MODELOS - HAMILTONIANAS EFETIVAS ( $S = \frac{1}{2}$ )

- II.1 Modelo de Domb p. II-4
- II.2 Modelo de Baker-Essam I (de "volume" constante) p. II-8
- 2.1 Comprimento das linhas fixo
  - 2.2 "Volume" fixo
- II.3 Modelo de Baker-Essam II (de "volume" variável) P. II-18
- 3.1 Comprimento variável das linhas
  - 3.2 Variando o comprimento global das linhas
- II.4 Modelo de Ising no "colchão de molas" p. II-22
- 4.1 Interação elástica
  - 4.2 Interação magneto-elástica
  - 4.3 Variáveis elásticas "micro" e "macro"
  - 4.4 Tratamento das variáveis "micro"
  - 4.5 Hamiltoniana efetiva na função de partição do ensemble canônico
  - 4.6 Hamiltoniana efetiva na função de partição do ensemble das pressões

## II. MODELOS - HAMILTONIANAS EFETIVAS

Vamos considerar um modelo de Ising de spins  $s=1/2$  compressível, em que a elasticidade do sistema é considerada através das interações elásticas entre os íons. Assim, consideramos a seguinte hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)}^{(1)} J(|\vec{r}_{ij}|) \sigma_i \sigma_j + \sum_{(i,j)}^{(1,2)} \varphi_{el}(|\vec{r}_{ij}|) \quad (\text{II-1})$$

na qual

- o primeiro termo descreve uma interação de Ising ferromagnética entre primeiros vizinhos, com uma integral de troca  $J(|\vec{r}_{ij}|)$  dependente da distância inter-iônica  $\vec{r}_{ij} \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_j$ , onde  $\vec{r}_{i,j}$  descreve a posição do íon  $i,j$ ;
- o segundo termo corresponde à energia elástica do sistema, descrita em termos de uma soma de interações elásticas entre pares de íons, primeiros e segundos vizinhos.

A compressibilidade do sistema, decorrente da possibilidade de movimento dos íons, conduz a dois efeitos simultâneos. Consideremos a interação elástica quadrática nos deslocamentos, então as variações de volume a pressão constante estarão associadas apenas à presença da interação magnética. Supondo, por outro lado, a integral de troca linear em  $\{|\vec{r}_{ij}|\}$ , e crescente com a aproximação de íons\*, teremos a seguinte situação: (i) dentro de um domínio, a tendência a uma pequena aproximação dos íons e (ii) nas paredes entre domínios, uma tendência ao afastamento. Na medi

---

\* Para  $J(|\vec{r}_{ij}|)$  decrescente com a aproximação dos íons todos os efeitos se invertem e há uma tendência à expansão do volume, para baixas temperaturas.

da em que os domínios crescem, para temperaturas baixas, este e feito leva a uma contração do sistema. Temos então um efeito lo cal de competição entre a interação magneto-elástica, que tende a aproximar ou afastar os íons, e a interação elástica, que tende a mantê-los a uma determinada distância, e um efeito global de va riação de volume, associada ao ordenamento magnético.

Para um sistema com compressibilidade suficiente mente pequena (constantes elásticas "grandes"), podemos supor que tanto as variações de volume, quanto as oscilações dos íons em torno de suas posições de equilíbrio serão "pequenas". Nesse ca so, podemos fazer duas expansões da hamiltoniana (II-1):

- uma expansão da hamiltoniana em torno da energia de equilíbrio  $\mathcal{H}(\{\vec{R}\})$ , onde os vetores  $\{\vec{R}\}$  descrevem as posições de equilíbrio dos íons na rede regular de volume  $V$ , e
- uma expansão da energia de equilíbrio da rede regular de volume  $V$  em torno do volume "natural" do sistema,  $V_0$ . Na ausência de termos anarmônicos na energia elástica, o volume "natural" cor responde ao volume do sistema na ausência de pressão e a tempe raturas suficientemente altas, isto é, na ausência de ordenamen to magnético e, portanto, de contração.

A primeira expansão leva à seguinte expressão para a hamiltoniana

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & - \sum_{(i,j)} \left\{ \mathcal{J}(|\vec{R}_{ij}^{\alpha}|) + \sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{J}(|\vec{R}_{ij}^{\alpha}|)}{\partial R_{ij}^{\alpha}} (R_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha}) + \dots \right\} \sigma_i \sigma_j \\
 & + \sum_{(i,j)} \left\{ \mathcal{P}_0(|\vec{R}_{ij}^{\alpha}|) + \sum_{\alpha} \frac{\partial \mathcal{P}_0(|\vec{R}_{ij}^{\alpha}|)}{\partial R_{ij}^{\alpha}} (R_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha}) + \right. \\
 & \left. + \sum_{\alpha, \beta} \frac{\partial^2 \mathcal{P}_0(|\vec{R}_{ij}^{\alpha}|)}{\partial R_{ij}^{\alpha} \partial R_{ij}^{\beta}} (R_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha})(R_{ij}^{\beta} - R_{ij}^{\beta}) + \dots \right\} \\
 \equiv & \mathcal{H}(\{\vec{R}_{ij}^{\alpha}(a_{ij})\}) + \mathcal{H}(\{\vec{R}_{ij}^{\alpha} - \vec{R}_{ij}^{\alpha}\}),
 \end{aligned}
 \tag{II-2}$$

onde  $a_{ij}$  é o espaçamento da rede regular e  $\alpha, \beta = x, y, \dots$ . A segunda expansão, da energia de equilíbrio  $\mathcal{H}(\{\vec{R}_{ij}\})$  da rede contraída, leva a

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\{R_j\}) = \sum_{(ij)} \left\{ - [J(R_j^{\vec{a}}(a_{ij}^0))] + \frac{dJ(R_j^{\vec{a}}(a_{ij}^0))}{da_{ij}^0} (a_{ij} - a_{ij}^0) + \dots \right\} \sigma_i \sigma_j \\ + \sum_{(ij)} \left\{ \mathcal{L}_{el}(R_j^{\vec{a}}(a_{ij}^0)) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \mathcal{L}_{el}(R_j^{\vec{a}}(a_{ij}^0))}{da_{ij}^0{}^2} (a_{ij} - a_{ij}^0)^2 + \dots \right\} \quad (\text{II-3}) \end{aligned}$$

para uma rede de  $N$  spins de volume  $Na^d$ , cujo volume "natural" é  $Na_0^d$ .

A hamiltoniana decorrente da primeira expansão contém informação sobre as flutuações de posição dos íons e a segunda expansão contém informação sobre as oscilações de volume.

A formulação geral permite perceber que ambas as flutuações devem ser da mesma ordem de grandeza, uma vez que dependem essencialmente das mesmas constantes elásticas (ver Apêndice A). No entanto, os modelos mais simples discutidos na literatura correspondem exatamente a esses dois limites: o modelo de Domb<sup>(1/8)</sup>, que despreza as flutuações de posição dos íons, e o modelo de Baker-Essam (versão original<sup>(5)</sup>), que despreza as flutuações de volume do sistema (além de desprezar as tensões de cisalhamento). Propondo-nos inicialmente o estudo de um modelo mais geral, que incluísse os dois tipos de flutuação, como também as forças de cisalhamento, verificamos que o estudo comparativo das hamiltonianas efetivas de spin dos dois modelos era esclarecedor com relação à controvérsia sobre a ordem da transição. Assim neste capítulo obtemos as hamiltonianas efetivas de spin dos seguintes modelos:



1. MODELO DE DOMB<sup>(4)</sup> - modelo de Ising com íons rígidos numa rede de volume variável.
2. MODELO DE BAKER-ESSAM (versão original<sup>(5)</sup>) - modelo de Ising com íons livres para oscilar, sem cisalhamento, numa rede de volume constante.
3. MODELO DE BAKER-ESSAM (versão de Bergman, Imery e Gunther<sup>(15)</sup>) - modelo de Ising com íons livres para oscilar, sem cisalhamento, numa rede de volume variável.
4. MODELO DE ISING NO COLCHÃO DE MOLAS - íons livres para oscilar, com cisalhamento, numa rede de volume variável.

### 1. Modelo de Domb

O modelo de Domb consiste em um modelo de Ising cuja integral de troca depende do volume global do sistema. Isso corresponde a tomar na expressão (II-2) apenas a energia de equilíbrio ( $\{R_{ij}(a_{ij})\}$ ), desprezando-se as flutuações nas posições dos íons. Na situação mais simples possível, corresponde a supor a integral de troca linearmente dependente do espaçamento da rede e a energia elástica quadrática nesse espaçamento. Obtemos, para uma rede cúbica simples ( $a_{ij} = a$ ),

$$\mathcal{H}_D(\{R_{ij}\} = a) =$$

$$- [J_0 - J_1(a - a_0)] \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j$$

$$+ \frac{3N}{2} \kappa (a - a_0)^2,$$

(II-4)

onde definimos

$$f_{el}(a_0) \equiv 0 ,$$

$$J_0 \equiv J(a_0) ,$$

$$J_1 \equiv - \frac{dJ(a_0)}{da_0} ,$$

$$K \equiv \frac{d^2 J(a_0)}{da_0^2} . \tag{II-5}$$

Se o sistema é impedido de ter variações de volume, o modelo em questão é obviamente idêntico ao modelo de Ising, pois o efeito que se quer observar, compressão produzindo ordenamento magnético ou ordenamento magnético produzindo contração, estará ausente.

Na ausência desse vínculo (volume constante), a energia livre do sistema pode ser obtida tanto no ensemble das densidades, quanto no ensemble das pressões. O tratamento no ensemble das pressões permite discutir o comportamento crítico do modelo em termos apenas das variáveis magnéticas, pois na hamiltoniana efetiva de spins apenas essas variáveis podem apresentar comportamento não analítico. O estudo da energia livre no ensemble canônico exige que levemos em conta o fato de que a densidade volumétrica torna-se crítica na transição magnética, devido ao acoplamento entre as variáveis elásticas e de spin.

No ensemble das pressões, a função de partição para a hamiltoniana de Domb é dada por

$$Y(T, p) = \int dv \exp(-\beta p v) \sum_{\{s\}} \exp[-\beta \mathcal{H}_D(a)] , \tag{II-6}$$

onde  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$ , a temperatura.

Para fazer a integral, expandimos o volume em torno de  $V_0$ ,

$$V = N a_0^3 \left[ 1 + 3(a - a_0)/a_0 + d(a - a_0)^2/a_0 \right], \quad (\text{II-7})$$

para uma rede de dimensionalidade  $d = 3$ .

Supomos pequenas as flutuações de volume e consideramos apenas a contribuição de primeira ordem. Nesse caso, a integral em (II-6) no volume é uma integral Gaussiana simples. Ao completarmos o quadrado no argumento da exponencial surgem acoplamentos entre pares de spins através de um termo de quatro spins. A função de partição  $Y(T, p)$  fica escrita em termos de uma hamiltoniana efetiva de spins, isto é,

$$Y(T, p) = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[ -\beta \mathcal{H}_D^{\text{ef}}(p, \{\sigma\}) \right], \quad (\text{II-8})$$

onde

$$\mathcal{H}_D^{\text{ef}}(p) = \mathcal{H}_0 - J_2(p) \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{J_4}{N} \left( \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \right)^2 \quad (\text{II-9})$$

com

$$J_2(p) \equiv J_0 + p a_0^2 \frac{J_1}{\kappa}, \quad (\text{II-10})$$

$$J_4 \equiv \frac{J_1^2}{6\kappa} \quad (\text{II-11})$$

$$e \quad H_0 = pV_0 - \frac{3N(p a_0)^2}{2K}$$

Caso consideremos o termo de segunda ordem na expansão do volume (II-7), o coeficiente do termo de quatro spins,  $J_4$ , torna-se dependente da pressão, segundo a expressão

$$J_4(p) = \frac{J_1^2}{6(K + 2pa_0)}$$

Isso significa que o acoplamento de pares de spins decresce com a pressão mas não pode mudar de sinal, para pressões positivas.

Temos então que o modelo de Domb pode ser analisado, no ensemble das pressões, em termos de uma hamiltoniana efetiva de spins, que corresponde a um modelo de Ising cuja integral de troca cresce com a pressão, com um acoplamento adicional, de longo alcance, entre todos os pares de spins do sistema, cujo coeficiente  $-J_4 = -\frac{J_1^2}{6K}$  é sempre negativo.

O papel da interação entre pares de spins não é óbvio, mas tentamos interpretá-lo da seguinte maneira. Observamos que essa interação favorece, do ponto de vista energético, as configurações de pares de spin  $(\uparrow\uparrow)-(\uparrow\uparrow)$  e  $(\uparrow\uparrow)-(\uparrow\downarrow)$ , com relação às configurações  $(\uparrow\uparrow)-(\uparrow\uparrow)$ . São inibidas, portanto, as flutuações de spin no interior dos domínios (considerados tanto as interações entre dois pares de spins dentro de um domínio, quanto as interações entre dois pares de spins de domínios diferentes). [Observe-se que as configurações  $(\uparrow\downarrow)-(\uparrow\downarrow)$  são igualmente favoráveis; no entanto, para inverter spins de pares dentro de um domínio ou de spins de pares de domínios diferentes, paga-se duas ve

zes o preço energético da interação de Ising]. Essa inibição das flutuações no modelo efetivo de spins, corresponderia à situação discutida na sessão anterior, de que a formação de domínios produziria uma contração do sistema, levando a um aumento do acoplamento magnético de Ising.

## 2. Modelo de Baker-Essam (de "volume" constante)

O modelo de Baker-Essam, em sua versão original, consiste em tratar o modelo de Ising com uma integral de troca dependente da separação inter-iônica local, na presença de uma interação elástica quadrática na projeção do deslocamento da posição de equilíbrio ao longo da direção da ligação. Isso equivale a levar em conta, na hamiltoniana geral (II-2) a energia elástica até segunda ordem em  $(r-R)$ , consideradas apenas as interações elásticas entre primeiros vizinhos. Nesse caso, a hamiltoniana (II-2), para uma rede cúbica simples, é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{BE}(\{\vec{r}_{ij}\}, a) = & \\ = \sum_{(ij)} \left\{ - [J_0 - J_1(a-a_0) + J_1^{(1)} \sum_{\alpha} (r_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha})] \sigma_i \sigma_j \right. & \\ \left. + \frac{\kappa}{2} (a-a_0)^2 + \kappa^{(1)} \sum_{\alpha} (r_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha}) + \sum_{\alpha\beta} \kappa_{\alpha\beta}^{(2)} (r_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha})(r_{ij}^{\beta} - R_{ij}^{\beta}) + \dots \right\}, & \end{aligned}$$

(II-12)

com  $\varphi_{el}(a_0)$ ,  $J_0$ ,  $J_1$  e  $\kappa$  dados pelas equações (II-5). Além disso,

$$\begin{aligned} J_1^{(1)} &= \frac{dJ}{da} = -J_1(1 + o(\Delta a)), \\ \kappa^{(1)} &= \left. \frac{\partial \varphi_{el}}{\partial R_{ij}^{\alpha}} \right|_{a \hat{=} a_0} = \kappa(a-a_0) + o(\Delta a^2), \end{aligned}$$

(II-13)

$$\kappa^{(2)} \equiv \frac{\partial^2 \rho_{cl}}{\partial R_{ij}^\alpha \partial R_{ij}^\beta} = \kappa \bar{\sigma}_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} + o(\Delta a),$$

$$\Delta a \equiv a - a_0,$$

conforme mostramos no Apêndice A. Considerando as constantes de a coplamento até a ordem apropriada obtemos a hamiltoniana de Baker-Essam:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{BE}(\{R_{ij}\}, a) = \sum_{(i,j)} \left\{ - [J_0 - J_1(a-a_0) - J_2 \sum_{\alpha} (R_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha})] \sigma_i \sigma_j \right. \\ \left. + \frac{\kappa}{2} (a-a_0)^2 + \kappa (a-a_0) \sum_{\alpha} (R_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha}) \right. \\ \left. + \frac{\kappa}{2} \sum_{\alpha} (R_{ij}^{\alpha} - R_{ij}^{\alpha})^2 \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II-14})$$

A ausência de cisalhamento decorre de que, para primeiros vizinhos "elásticos",  $\frac{\partial^2 \varphi(r)}{\partial r^\alpha \partial r^\beta} = 0$  para  $\alpha \neq \beta$  e  $\frac{\partial^2 \varphi(r^\alpha)}{\partial r^\alpha \partial r^\beta} \sim 0 \left( \frac{\Delta a}{a_0} \right)$ , para  $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ . A unidimensionalidade das interações elásticas fica evidente se reescrevemos a hamiltoniana da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{BE}(\{x_i\}, a) = \sum_{\ell} \mathcal{H}^{\ell} \\ = \sum_{\ell} \left\{ - \sum_{i=1}^{N} J_{i,i-1}^{\ell} \sigma_i^{\ell} \sigma_{i-1}^{\ell} + \sum_{i=1}^{N} \varphi(x_i^{\ell} - x_{i-1}^{\ell}) \right\} \end{aligned} \quad (\text{II-15})$$

com

$$J_{i,i-1}^{\ell} = J_0 - J_1 (x_i^{\ell} - x_{i-1}^{\ell} - a_0)$$

e

$$\varphi(x_i^{\ell} - x_{i-1}^{\ell}) = \frac{1}{2} \kappa (x_i^{\ell} - x_{i-1}^{\ell} - a_0)^2, \quad (\text{II-16})$$

onde  $x_i^{\ell}$  corresponde à projeção do vetor posição do spin  $i$  na linha  $\ell$  na direção da linha  $\ell$  e  $N_0^3$  é o número de spins da

rede. Dessa maneira, as variáveis elásticas  $\{x, \ell\}$  se acoplam a penas dentro da linha  $\ell$ .

No caso deste modelo (BE), uma hamiltoniana efetiva de spins,  $\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{BE}}(a)$ , diferente da hamiltoniana de Ising, é obtida mesmo no ensemble "canônico", ao integrarmos as variáveis elásticas locais. A função de partição canônica é

$$\begin{aligned} Z(\tau, a) &= \prod_{\ell} \int dx_1^{\ell} \dots \int dx_{N_0}^{\ell} \sum_{\{\sigma\}} \exp \left\{ -\beta \mathcal{H}_{\text{BE}}^{\ell}(\{x_i^{\ell}\}, a) \right\} \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \exp \left\{ -\beta \mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{BE}}(\{\sigma\}, a) \right\} \end{aligned} \quad (\text{II-17})$$

Temos, então,

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{BE}}(\{\sigma\}, a) = -\frac{1}{\beta} \ln I(\{\sigma\}), \quad (\text{II-18})$$

para

$$I(\{\sigma\}) \equiv \prod_{\ell} I_{\ell}(\{\sigma\}) \equiv \prod_{\ell} \left\{ \int_0^{L_{\ell}} dx_1^{\ell} \dots \int_{x_{N_0-1}^{\ell}}^{L_{\ell}} dx_{N_0}^{\ell} \exp \left[ -\beta \mathcal{H}^{\ell}(\{x_i^{\ell}\}, \{\sigma_i^{\ell}\}) \right] \right\}, \quad (\text{II-19})$$

onde consideramos o primeiro spin de cada linha fixo na posição  $x_0^{\ell} = 0$ .  $L_{\ell}$  é o comprimento de linha  $\ell$ .

Podemos considerar densidades fixas com pelo menos duas condições de contorno diferentes: (i) fixando o "volume" do sistema, isto é, fixando a soma do comprimento das linhas e (ii)

fixando o comprimento de cada linha ou impondo condições periódicas de contorno.

## 2.1 Comprimento das linhas fixo

Vamos fixar o comprimento das linhas  $L = N_0 a$  introduzindo uma função delta  $\delta(x_{N_0}^l - N_0 a)$  para cada linha nas integrais sobre as variáveis elásticas locais. Vamos usar uma representação da função delta

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega x} d\omega, \quad (\text{II-20})$$

então temos para cada linha uma integral

$$I_l = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(x_{N_0}^l - N_0 a)} \int dx_1^l \dots \int dx_{N_0}^l e^{-\beta H_l(x_1^l, \dots, x_{N_0}^l)} \quad (\text{II-21})$$

Com a mudança de variáveis

$$\rho_i^l \equiv x_i^l - x_{i-1}^l, \quad (\text{II-22})$$

podemos reescrever o argumento da função delta

$$x_{N_0}^l - N_0 a = \sum_{i=1}^{N_0} \rho_i^l - N_0 a, \quad (\text{II-23})$$

porque  $x_0^l = 0$ . Então a integral  $I_l$  fica

$$I_l = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega N_0 a} \left\{ \prod_{i=1}^{N_0} \int_0^L d\rho_i^l \exp \left[ \beta (\mathcal{J}_0 - \mathcal{J}_1 (\rho_i^l - a_0)) \right] \prod_{i=1}^{N_0-1} \exp \left[ -\beta \frac{\kappa}{2} (\rho_i^l - a_0)^2 + i\omega \rho_i^l \right] \right\} \quad (\text{II-24})$$



Fazemos inicialmente a integral gaussiana em  $\rho_i^l$ , o que não introduz novos acoplamentos de spin, porque  $(\sigma_i \sigma_{i-1})^2 = 1$  para  $s = 1/2$ . Até aqui nosso procedimento é inteiramente análogo ao de Baker e Essam (5), em seu artigo original. Esses autores fazem em seguida a integral em  $\omega$ , utilizando o método do ponto de sela num espaço de variáveis de número igual ao número de linhas. Entretanto, para utilizar esse método, é necessário primeiro somar sobre as variáveis de spin, e é por isso que se obtém, dessa maneira, uma hamiltoniana de Ising cujo coeficiente da integração de troca,  $J_{ef}$ , depende da temperatura através da correlação de spin,  $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{T \sigma_i \sigma_j e^{-\beta H}}{T e^{-\beta H}}$ ,

$$J_{ef}(a, T) = J_0 + J_1 a - \frac{J_1^2}{K} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle, \quad (\text{II-25})$$

em termos das variáveis deste trabalho. Observamos que o aumento na correlação dos spins produz uma redução do coeficiente da interação de troca.

Em nosso caso, fazemos a integração gaussiana nas variáveis  $\omega_l$ , antes de fazer o traço sobre as variáveis de spin. Obtemos

$$\mathcal{Z}_L(T, a) = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_L) \quad (L = N^{1/3} a) \quad (\text{II-26})$$

onde

$$\mathcal{H}_L(\{\sigma\}, L = N^{1/3} a) = \mathcal{H}_0^L(a) - J_2^L(a) \sum_l \sum_{i=1}^{N^{1/3}} \sigma_i^l \sigma_{i-1}^l + \frac{J_4}{N^{1/3}} \sum_l \left( \sum_{i=1}^{N^{1/3}} \sigma_i^l \sigma_{i-1}^l \right)^2, \quad (\text{II-27})$$

com

$$J_2^L(a) \equiv J_0 - J_1(a-a_0), \quad (\text{II-28})$$

$$J_4^L \equiv \frac{J_1^2}{2K}, \quad (\text{II-29})$$

$$e \quad \mathcal{H}_0^L(a) \equiv \frac{3N}{2} (a-a_0)^2 + \frac{J_1^2}{K}. \quad (\text{II-30})$$

Deve ser observado, com relação a essa hamiltonia na efetiva, que:

- (i) os termos de acoplamento de longo alcance de quatro spins só aparecem ao longo das linhas,
- (ii) o coeficiente do termo de quatro spins é sempre positivo, situação oposta à do modelo de Domb,
- (iii) o coeficiente  $J_4^2 = J_1^2/2K$  é independente do sinal de  $J_1$ , como no caso do modelo de Domb.

## 2.2 "Volume fixo"

A condição "volume" fixo corresponde a tornar fixa a soma dos comprimentos das linhas, uma vez que o sistema é unidimensional sob o ponto de vista elástico. Isso é feito introduzindo-se uma única função delta,  $\delta(\sum_{\ell} (x_{N_0}^{\ell} - x_0^{\ell}) - 3Na)$ , no integrando da função de partição (II-17), ao invés de uma função delta para cada linha. O procedimento é idêntico ao do item anterior, e

obtemos

$$Z_V(T, a) = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[ -\beta H_V(\sigma_i, V = n_e N_0 a) \right], \quad (\text{II-31})$$

onde

$$H_V(\{\sigma_i\}, V = n_e N_0 a) = H_0^V(a) - J_2^V(a) \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \frac{J_4}{N} \left[ \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right]^2, \quad (\text{II-32})$$

com

$$H_0^V(a) \equiv \frac{3N}{2} \kappa (a - a_0)^2 + \frac{J_1^2}{\kappa}, \quad (\text{II-33})$$

$$J_2^V(a) \equiv J_0 - J_1 (a - a_0), \quad (\text{II-34})$$

$$J_4 \equiv J_1^2 / 6\kappa. \quad (\text{II-35})$$

Nesse caso, o acoplamento de quatro spins ocorre entre todos os pares de spin do sistema, e não apenas ao longo da linha. As outras características do acoplamento de quatro spins são análogas às do modelo com comprimento de linha fixo.

### 2.3 Condições periódicas de contorno

Vamos tomar  $x_0^l = x_{N_0}^l$  para cada linha  $l$  e reescrever as variáveis de posição  $\vec{r}$  em termos dos deslocamentos das posições de equilíbrio  $\vec{u}$ , isto é

$$\vec{r}_R = \vec{R} + \vec{u}_R. \quad (\text{II-36})$$

Nesse caso, as projeções das posições ao longo das linhas nas expressões (II-15) e (II-16) ficam

$$(x_i^l - x_{i-1}^l - a_0) = (u_{\vec{R}^i + a\hat{e}_\alpha}^\alpha - u_{\vec{R}^i}^\alpha) + (a - a_0), \quad (\text{II-37})$$

onde  $\alpha = x, y, z$  indica direção da linha. A hamiltoniana (II-14) fica

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{u\}, \{\sigma\}) + \mathcal{H}(\{\sigma\}, a), \quad (\text{II-38})$$

onde

$$\mathcal{H}(\{u\}, \{\sigma\}) \equiv \sum_{\vec{R}^i, \alpha} \left\{ J_1 (u_{\vec{R}^i + a\hat{e}_\alpha}^\alpha - u_{\vec{R}^i}^\alpha) \sigma_{\vec{R}^i} \sigma_{\vec{R}^i + a\hat{e}_\alpha} + \frac{\kappa}{2} (u_{\vec{R}^i + a\hat{e}_\alpha}^\alpha - u_{\vec{R}^i}^\alpha)^2 \right\}, \quad (\text{II-39})$$

$$\mathcal{H}(\{\sigma\}, a) \equiv \sum_{\vec{R}^i, \alpha} \left\{ [-J_0 + J_1(a - a_0)] \sigma_{\vec{R}^i} \sigma_{\vec{R}^i + a\hat{e}_\alpha} + \frac{\kappa}{2} (a - a_0)^2 \right\}, \quad (\text{II-40})$$

e os termos lineares desaparecem sob as condições periódicas de contorno.

Utilizamos uma transformada de Fourier dos  $\{u\}$ , de finida por

$$\vec{u}_{\vec{R}^i} = \sum_{\vec{q}^i} \vec{u}_{\vec{q}^i} e^{i\vec{q}^i \cdot \vec{R}^i}, \quad (\text{II-41})$$

com  $\vec{u}_Q = \sum_{\vec{R}} \vec{u}_{\vec{R}} = 0$ , para fixar o centro de massa do sistema. Obtemos

$$\mathcal{H}(\{u\}, \{v\}) = \sum_{\alpha} \sum_{\substack{\vec{q}' \neq 0 \\ q_{\alpha} \neq 0}} \left\{ A(q') u_{\vec{q}'}^{\alpha} u_{-\vec{q}'}^{\alpha} + B(q') u_{\vec{q}'}^{\alpha} \right\} \quad (\text{II-42})$$

com

$$A(q') = \kappa N (1 - \cos(q_{\alpha} a))$$

$$B(q') = J_1 \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{q}' \cdot \vec{R}} (e^{iq_{\alpha} a} - i) \delta_{\vec{R}} \delta_{\vec{R} + a\hat{e}_{\alpha}} \quad (\text{II-43})$$

Para fazer a integral gaussiana em  $\{u\}$ , utilizamos a transformação

$$u_{\vec{q}'} = a_1 v_{\vec{q}'} + a_2 v_{-\vec{q}'} \quad (\text{II-44})$$

com  $a_1^2 + a_2^2 = 0$ . Ao completarmos o quadrado do argumento da exponencial em (II-19), obtemos o seguinte termo de quatro spins:

$$\begin{aligned} \pi_4^{ef} &= \sum_{\substack{\vec{q}' \neq 0 \\ q_{\alpha} \neq 0}} \sum_{\alpha} \left[ - \frac{B(q') B(-q')}{4A(q')} \right] \\ &= - \frac{J_1^2}{2\kappa N} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \left[ \sum_{\substack{\vec{q}' \neq 0 \\ q_{\alpha} \neq 0}} e^{i\vec{q}' \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} \right] \delta_{\vec{R}} \delta_{\vec{R} + a\hat{e}_{\alpha}} \delta_{\vec{R}'} \delta_{\vec{R}' + a\hat{e}_{\alpha}} \quad (\text{II-45}) \end{aligned}$$

Para  $\alpha = x$ , temos

$$\sum_{\substack{\vec{q} \neq 0 \\ \vec{k} \neq 0}} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} = N \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} - N^{2/3} \delta_{Y, Y'} \delta_{Z, Z'}, \quad (\text{II-46})$$

com resultados análogos para  $\alpha = y$  ou  $z$ . Então

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_4^{\text{ef}} = & - \frac{3J_1^2}{2K} \\ & + \frac{J_1^2}{2KN^{1/3}} \left\{ \sum_{\substack{x, x' \\ y, z}} \sigma_{(x, y, z)} \sigma_{(x+a, y, z)} \sigma_{(x', y, z)} \sigma_{(x'+a, y, z)} \right. \\ & \left. + \text{termos análogos em } Y, Y' \text{ e } Z, Z' \right\}. \quad (\text{II-47}) \end{aligned}$$

Obtemos, portanto, de (II-38-40) e (II-47) a seguinte hamiltoniana efetiva completa

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\text{ef}}(\sigma^l, a) = & -J_2^L(a) \sum_L \sum_i \sigma_i^L \sigma_{i-1}^L + \frac{J_4^L}{N^{1/3}} \sum_L \left( \sum_i \sigma_i^L \sigma_{i-1}^L \right)^2 \\ & + \frac{3NK}{2} (a-a_0)^2 + \text{cte}, \quad (\text{II-48}) \end{aligned}$$

com

$$J_2^L(a) \equiv J_0 - J_1(a-a_0), \quad J_4^L \equiv \frac{J_1^2}{2K}. \quad (\text{II-49})$$

Temos um acoplamento de pares de spins ao longo de cada linha, como na condição de contorno comprimento da linha fixo, com os mesmos coeficientes de acoplamento. Apesar disso, as condições de contorno periódicas são importantes, pois nos casos de hamiltonianas elásticas menos triviais temos necessariamente que utilizar a transformação de Fourier para desacoplar as linhas (que apenas no caso desse modelo estão desacopladas).

Dois resultados são significativos, com relação aos modelos de "volume" fixo:

- (i) as hamiltonianas efetivas de spin apresentam acoplamentos entre pares de spins de sinal oposto aos acoplamentos entre pares de spins no modelo de spins rígidos na rede de volume variável.
- (ii) os acoplamentos entre pares de spins se dão entre pares de toda rede ou apenas entre pares de uma mesma linha, dependendo da forma como se fixa o "volume".

Com relação ao primeiro item, a análise proposta para o modelo de Domb sugere que o acoplamento de pares com sinal positivo favoreceria as flutuações de spin na transição. Em termos da hamiltoniana modelo original, poderíamos pensar que a possibilidade dos ions se afastarem ou aproximarem favoreceria do ponto de vista energético, inversões de spin.

### 3. Modelo de Baker-Essam II (de "volume" variável)

O efeito simultâneo de flutuações de posição e de volume pode ser analisado no caso do modelo de Baker-Essam descrito na seção anterior, relaxada a condição de "volume" constante. Podemos permitir a variação do "volume" daqueles modelos das seguintes maneiras:

- fixando as variáveis intensivas  $\{\lambda_\ell\}$  conjugadas dos comprimentos das linhas  $\{L_\ell\}$ , no caso das condições de contorno 2.1 ou 2.3.
- fixando a variável intensiva  $f$  conjugada ao comprimento global das linhas, no caso das condições de contorno 2.2

### 3.1 Comprimento variável das linhas

Uma vez que as linhas de spins são completamente independentes, do ponto de vista elástico, no modelo de Baker-Essam com comprimentos de linha  $L$  fixos, só é possível considerar como variável intensiva conjugada a força  $\lambda_\ell$  aplicada à extremidade da linha  $\ell$ . No ensemble das "forças"  $\lambda_\ell$ , a função de partição fica

$$Y(\tau, \{\lambda_\ell\}) = \prod_\ell \int d(N_\ell a_\ell) \exp(-\beta \lambda_\ell N_\ell a_\ell) Z(\tau, \{a_\ell\}), \quad (\text{II-50})$$

com

$$Z(\tau, \{N_\ell, a_\ell\}) = \sum_{\{\sigma_i^\ell\}} \exp[-\beta \mathcal{H}_\ell(\{\sigma_i^\ell\}, \{a_\ell\})], \quad (\text{II-51})$$

onde

$$\mathcal{H}_\ell(\{\sigma_i^\ell\}, \{N_\ell, a_\ell\}) = \sum_\ell \left\{ -[J_0 - J_1(a_\ell - a_0)] \sum_{i=1}^{N_\ell} \sigma_i^\ell \sigma_{i-1}^\ell + \right. \\ \left. + \frac{J_1^2}{2KN^{1/3}} \left( \sum_{i=1}^{N_\ell} \sigma_i^\ell \sigma_{i-1}^\ell \right)^2 + \frac{N^{1/3}K}{2} (a_\ell - a_0)^2 \right\} \quad (\text{II-52})$$

é a generalização imediata da hamiltoniana (II-27)



As integrais gaussianas em  $\{Na_\ell\}$  em (II-50), considerada a expressão quadrática em  $(a_\ell - a_0)$  em (II-52), conduzem a acoplamentos adicionais entre pares de spin. Esse acoplamento tem exatamente o mesmo coeficiente, mas o sinal oposto ao da expressão (II-52), cancelando o mesmo. No caso em que todas as linhas estão sob a ação da mesma força  $\lambda_\ell = \lambda$ , a função de partição no ensemble  $\{\lambda_\ell\}$  fica

$$Y(\tau, \lambda) = \sum_{\{\sigma\}} \exp \left\{ -\beta \pi_{\mathcal{L}}(\{\sigma\}, \lambda) \right\}, \quad (\text{II-53})$$

em termos de uma hamiltoniana efetiva de spins

$$\pi_{\mathcal{L}}(\{\sigma\}, \lambda) = -J_2(\lambda) \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \pi_0(\lambda) \quad (\text{II-54})$$

onde

$$J_2(\lambda) = J_0 + \frac{J_1 \lambda}{\kappa} \quad (\text{II-55})$$

e

$$\pi_0(\lambda) = \frac{3N\lambda^2}{2\kappa}.$$

Esse modelo comporta-se então como um modelo de Ising cujo coeficiente da interação de troca cresce com a "força" exercida sobre as linhas.

### 3.2 Variando o comprimento global das linhas

O comprimento médio global das linhas é considerado conjugado a uma variável intensiva  $f$  e a função de partição

fica

$$\mathcal{Y}(\tau, f) = \int d(3N^{2/3}a) \exp(-\beta f 3N^{2/3}a) \mathcal{Z}(\tau, "v"), \quad (\text{II-56})$$

onde  $\mathcal{Z}(\tau, "v")$  é dado pela expressão (II-31) e  $3N^{2/3}$  é o número de linhas da rede. Nesse caso também ocorre o cancelamento do termo de acoplamento de pares, resultando uma hamiltoniana efetiva de spins

$$\mathcal{H}(\{\sigma\}, f) = -J_2(f) \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \mathcal{H}_0(f) \quad (\text{II-57})$$

com

$$J_2(f) = J_0 + \frac{J_1 f}{\kappa},$$

em total analogia com o caso anterior, isto é, reobtem-se a hamiltoniana de Ising, porém com um acoplamento dependente da força aplicada sobre as linhas de spins.

A análise deste modelo (flutuações unidimensionais de posição + flutuações de "volume") em termos de hamiltonianas efetivas de spin ilustra com muita evidência o fato de que as flutuações de posição e as flutuações de volume tem efeitos opostos sobre as interações entre os spins: as primeiras geram um acoplamento entre pares de spin com uma determinada intensidade e as segundas geram o mesmo acoplamento "invertido". Nesse caso, em particular, os dois efeitos se cancelam, e o sistema de Ising compressível tem o comportamento do próprio modelo de Ising, com uma integral de troca a mais "ingênua" possível, isto é, uma integral de troca linearmente crescente com a força sobre o sistema.

#### 4. Modelo de Ising no "colchão de molas"

O modelo mais simples possível que garanta a estabilidade mecânica e ao mesmo tempo considere simultaneamente as flutuações elásticas microscópicas e macroscópicas do sistema é o modelo de Ising no colchão de molas, isto é, um modelo de Ising com interações elásticas entre primeiros e segundos vizinhos. Esse modelo deriva da hamiltoniana geral (II-2), incluídos os termos até ordem  $u^2$  e  $\Delta a^2$ , se consideramos as condições mencionadas, sendo que as interações de segundos vizinhos é que garantem a estabilidade mecânica, através do cisalhamento. Alternativamente, podemos fazer uma expansão do potencial elástico em torno das distâncias "naturais" entre os íons,  $a_{ij}^0$ :

$$\varphi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \simeq \varphi(a_{ij}^0) + \frac{1}{2} \varphi''(a_{ij}^0) (|\vec{r}_{ij}| - a_{ij}^0)^2 + o(|\vec{r}_{ij}| - a_{ij}^0)^3 \quad (\text{II-58})$$

e, em seguida, expandir os módulos  $\{|\vec{r}_{ij}|\}$  nos deslocamentos da posição de equilíbrio  $\{\vec{u}_{ij}\}$  da rede contraída. Essas duas expansões são equivalentes às expansões (II-2) e (II-3) e a identificação dos coeficientes correspondentes é imediata.

Vamos considerar separadamente as contribuições elásticas e magneto-elásticas, escrevendo:

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{mag-el} \quad (\text{II-59})$$

##### 4.1 Interação elástica

No apêndice B utilizamos a expansão (II-58) para uma rede ortorrômbica ( $a_x \neq a_y \neq a_z$ ). Escrevemos  $\vec{r}_i - \vec{r}_j \rightarrow \vec{r}_R + a_\alpha \hat{e}_\alpha - \vec{r}_R$  para os pares de primeiros vizinhos e  $\vec{r}_i - \vec{r}_j \rightarrow \vec{r}_R + a_\alpha \hat{e}_\alpha + a_\beta \hat{e}_\beta - \vec{r}_R$  para os pares de segundos vizinhos, com  $\alpha = x, y, z$ . Obtemos a seguinte

te hamiltoniana elástica (eq. B-9):

$$\begin{aligned}
 H_{el} \approx & \frac{N}{2} \sum_{\alpha} \kappa_{\alpha}^{\alpha} (a_{\alpha} - a_{\alpha}^0)^2 + N \sum_{\substack{\alpha \\ \beta \neq \alpha}} \kappa_{\alpha\beta}^{\alpha\beta} (a_{\alpha\beta} - a_{\alpha\beta}^0)^2 + \\
 & + \sum_{\vec{R}, \alpha} \left\{ \frac{\kappa_{\alpha}^{\alpha}}{2} (u_{\vec{R}}^{\alpha} + a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} - u_{\vec{R}}^{\alpha})^2 + \right. \\
 & + \frac{\sum_{\beta \neq \alpha} \kappa_{\alpha\beta}^{\alpha\beta}}{3} \left[ g_{\beta\alpha} \left( (u_{\vec{R}}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\alpha})^2 + (u_{\vec{R}}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \mp a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\alpha})^2 \right) \right. \\
 & \quad \left. + g_{\alpha\beta} \left( (u_{\vec{R}}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\beta})^2 + (u_{\vec{R}}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \mp a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\beta})^2 \right) \right. \\
 & \quad \left. + 2 b_{\alpha\beta} \left( (u_{\vec{R}}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\alpha}) (u_{\vec{R}}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\beta}) \right) \right. \\
 & \quad \left. \left. - (u_{\vec{R}}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \mp a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\alpha}) (u_{\vec{R}}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \mp a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{\vec{R}}^{\beta}) \right] \right\},
 \end{aligned}$$

(II-60)

onde

$$a_{\alpha\beta}^2 \equiv a_{\alpha}^2 + a_{\beta}^2,$$

$$g_{\alpha\beta} \equiv \frac{2}{1 + \frac{a_{\alpha}^2}{a_{\beta}^2}},$$

$$b_{\alpha\beta} \equiv \frac{2 a_{\alpha}^0 a_{\beta}^0}{a_{\alpha}^2 + a_{\beta}^2}.$$

(II-61)

A expressão (II-60) é equivalente à (II-2), com os seguintes coe-

ficientes, calculados em primeira ordem:

$$\kappa_1^\alpha \equiv \frac{\partial^2 \varphi(n)}{\partial n} \Big|_{n=a_0^\alpha}$$

$$\kappa_2^{\alpha\beta} g_{\alpha\beta} \equiv \frac{\partial^2 \varphi(n)}{\partial n_\alpha^2} \Big|_{\vec{n} = a_\alpha \hat{e}_\alpha + a_\beta \hat{e}_\beta}$$

(II-62)

$$\kappa_2^{\alpha\beta} b_{\alpha\beta} \equiv \pm \frac{\partial^2 \varphi}{\partial n_\alpha \partial n_\beta} \Big|_{\vec{n} = a_\alpha \hat{e}_\alpha \pm a_\beta \hat{e}_\beta}$$

Outros coeficientes, por exemplo  $\frac{\partial \varphi}{\partial r_\gamma^2} \Big|_{\vec{r} = a_\alpha \hat{e}_\alpha + a_\beta \hat{e}_\beta}$ , não aparecem na energia elástica porque são de ordem  $\Delta a$ . Observamos ainda que para uma rede cúbica simples ( $a_\alpha = a$ ), os coeficientes se simplificam, isto é,

$$\kappa_1^\alpha = \kappa_1,$$

$$\kappa_2^{\alpha\beta} = \kappa_2,$$

$$g_{\alpha\beta} = g_{\beta\alpha} = b_{\alpha\beta} = 1.$$

(II-63)

Nesse estudo, obteremos a hamiltoniana efetiva para o caso desta rede (cúbica simples), especificamente. Entretanto, as expressões para a rede ortorrômbica permitirão indicar as dificuldades de resolução do problema para casos mais gerais.

#### 4.2 Interação magneto-elástica

A interação magneto-elástica é considerada até primeira ordem nos deslocamentos, como nos modelos anteriores. Obte

MOS:

$$\mathcal{H}_{\text{mag-el}} = - \sum_{\vec{R}'\alpha} [J(u_\alpha) - J_1^\alpha (u_{\vec{R}' + a_\alpha \hat{e}_\alpha} - u_{\vec{R}'})] \sigma_{\vec{R}'} \sigma_{\vec{R}' + a_\alpha \hat{e}_\alpha} \quad (\text{II-64})$$

com

$$J(u^\alpha) \equiv J_0^\alpha - J_1^\alpha (u_\alpha - u_\alpha^0), \quad (\text{II-65})$$

e, nos termos da expansão (II-2),

$$J_0^\alpha \equiv J(u_\alpha^0),$$

$$J_1^\alpha \equiv - \frac{dJ}{da_\alpha^0}.$$

#### 4.3 Variáveis elásticas "micro" e "macro"

Vamos agora reunir  $\mathcal{H}_{\text{el}}$  e  $\mathcal{H}_{\text{mag-el}}$ . De (II-60) e (II-63) obtemos uma expressão para

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{el}} + \mathcal{H}_{\text{mag-el}}$$

que reescrevemos como

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_{\text{macro}}(\{u_\alpha\}) + \mathcal{H}_{\text{micro}}(\{u\}), \quad (\text{II-66})$$

com

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{macro}}(\{u_\alpha\}) \equiv & - \sum_{\vec{R}'\alpha} J(u_\alpha) \sigma_{\vec{R}'} \sigma_{\vec{R}' + a_\alpha \hat{e}_\alpha} \\ & + N \sum_{\alpha} \frac{\kappa_1^\alpha}{2} (u_\alpha - u_\alpha^0)^2 + N \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \beta>\alpha}} \frac{\kappa_2^{\alpha\beta}}{2} (u_{\alpha\beta} - u_{\alpha\beta}^0)^2 \end{aligned} \quad (\text{II-67})$$

e

$$\begin{aligned}
H_{\text{micro}}(\{u\}) \equiv & \sum_{\vec{R}, \alpha} J_1^\alpha (u_{\vec{R}+\alpha}^\alpha - u_{\vec{R}}^\alpha) \delta_{\vec{R}} \delta_{\vec{R}+\alpha} \\
& + \sum_{\vec{R}, \alpha} \frac{\kappa_1^\alpha}{2} (u_{\vec{R}+\alpha}^\alpha - u_{\vec{R}}^\alpha)^2 \\
& + \sum_{\vec{R}} \sum_{\substack{\alpha > \beta \\ \alpha, \beta}} \frac{\kappa_2^{\alpha\beta}}{8} \left\{ g_{\beta\alpha} (g_{\alpha\beta}) \left[ (u_{\vec{R}+\alpha}^{\alpha(\beta)} \pm a_\beta \hat{e}_\beta - u_{\vec{R}}^{\alpha(\beta)})^2 \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + (u_{\vec{R}+\alpha}^{\alpha(\beta)} \mp a_\beta \hat{e}_\beta - u_{\vec{R}}^{\alpha(\beta)})^2 \right] \right. \\
& \quad \left. + 2b_{\alpha\beta} \left[ (u_{\vec{R}+\alpha}^\alpha \mp a_\beta \hat{e}_\beta - u_{\vec{R}}^\alpha) (u_{\vec{R}+\alpha}^\beta \pm a_\beta \hat{e}_\beta - u_{\vec{R}}^\beta) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - (u_{\vec{R}+\alpha}^\alpha \mp a_\beta \hat{e}_\beta - u_{\vec{R}}^\alpha) (u_{\vec{R}+\alpha}^\beta \mp a_\beta \hat{e}_\beta - u_{\vec{R}}^\beta) \right] \right\}
\end{aligned}
\tag{II-68}$$

e as constantes definidas pelas equações (II-61) e (II-64).

#### 4.4 Tratamento das variáveis micro

Na hamiltoniana elástica  $\mathcal{H}_{\text{micro}}(\{u\})$  os deslocamentos relativos  $(u_{\vec{R}+\delta}^\alpha - u_{\vec{R}}^\alpha)$  estão acoplados através da interação entre segundos vizinhos e componentes ortogonais destes deslocamentos estão acoplados através do termo de cisalhamento de coeficiente  $b_{\alpha\beta}$ . Para poder integrar sobre esses deslocamentos na função de partição canônica é preciso fazer uma transformação de Fourier dessas variáveis e diagonalizar a hamiltoniana.

Utilizamos uma transformação de Fourier definida

por

$$\vec{u}_{R^1} = N^{-1} \sum_{\vec{q}^1} e^{i\vec{q}^1 \cdot R^1} \vec{u}_{\vec{q}^1} \quad (\text{II-69})$$

com  $u_{\vec{q}} = 0$  para fixar o centro de massa do sistema. Com essa transformação (II-68) fica:

$$\mathcal{H}_{\text{micro}}(\{u\}) = N^{-1} \sum_{\vec{q}^1 \neq 0} \left\{ \sum_{\alpha} F(\vec{q}^1, \alpha) u_{\vec{q}^1}^{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} D_{\alpha\beta}(\vec{q}^1) u_{\vec{q}^1}^{\alpha} u_{-\vec{q}^1}^{\beta} \right\}, \quad (\text{II-70})$$

onde

$$F(\vec{q}^1, \alpha) \equiv J_1^{\alpha} (e^{i\vec{q}^1 \cdot \alpha} - 1) \sum_{R^1} [\sigma_{R^1}^{\alpha} \sigma_{R^1}^{\alpha} + \alpha_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} e^{i\vec{q}^1 \cdot R^1}] \quad (\text{II-71})$$

e

$$D_{\alpha\alpha} \equiv \sum_{\beta \neq \alpha} \kappa_2^{\alpha\beta} g_{\beta\alpha} [1 - \cos(q_{\alpha} a_{\alpha}) \cos(q_{\beta} a_{\beta})] + \kappa_1^{\alpha} (1 - \cos(q_{\alpha} a_{\alpha})) \quad (\text{II-72})$$

$$D_{\alpha\beta} \equiv \sum_{\kappa \neq \beta} \kappa_2^{\alpha\beta} b_{\kappa\beta} \sin(q_{\kappa} a_{\kappa}) \sin(q_{\beta} a_{\beta}).$$

Para separar as variáveis  $\vec{q}$  e  $-\vec{q}$  utilizamos a transformação

$$u_{\vec{q}}^{\alpha} = a_1 (v_{\vec{q}}^{\alpha} + i v_{-\vec{q}}^{\alpha}) \quad (\text{II-73})$$

e obtemos



$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{\text{micro}}(\{u\}) = N^{-1} \sum_{\vec{q} \neq 0} \left\{ a_1 \sum_{\alpha} [F(\vec{q}, \alpha) + iF(-\vec{q}, \alpha)] v_{\vec{q}}^{\alpha} \right. \\
 \left. + 2ia_1^2 \sum_{\alpha, \beta} D_{\alpha\beta}(\vec{q}) v_{\vec{q}}^{\alpha} v_{\vec{q}}^{\beta} \right\}. \quad (\text{II-74})
 \end{aligned}$$

Em seguida diagonalizamos o termo quadrático através da transformação

$$\tilde{D} = C^{-1} D C \quad (\text{II-75})$$

em termos dos autovalores da matriz  $D_{\alpha\beta}$  (II-72) e

$$v_{\vec{q}}^{\alpha} = \sum_{\beta} c_{\alpha\beta} \tilde{v}_{\vec{q}}^{\beta} \quad (\text{II-76})$$

em termos dos seus autovetores. Substituindo em (II-74), obtemos

$$\mathcal{H}_{\text{micro}}(\{u\}) = N^{-1} \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{\alpha} \left\{ A(\vec{q}, \alpha) (\tilde{v}_{\vec{q}}^{\alpha})^2 + B(\vec{q}, \alpha) \tilde{v}_{\vec{q}}^{\alpha} \right\}, \quad (\text{II-77})$$

com

$$A(\vec{q}, \alpha) \equiv 2ia_1^2 \tilde{D}_{\alpha\alpha}(\vec{q}) \quad (\text{II-78})$$

e

$$B(\vec{q}, \alpha) \equiv a_1 \sum_{\beta} c_{\beta\alpha} [F(\vec{q}, \beta) + iF(-\vec{q}, \beta)]. \quad (\text{II-79})$$

Como veremos adiante, não será necessário obter explicitamente as matrizes D e C.

A hamiltoniana (II-77) está pronta para ser integrada nas variáveis elásticas  $V_{\vec{q}}^{\alpha}$ . Reescrevendo (II-77) na forma

$$H_{\text{micro}}(\{v\}) = N^{-1} \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{\alpha} A(\vec{q}, \alpha) \left[ \tilde{v}_{\vec{q}}^{\alpha} + \frac{B(\vec{q}, \alpha)}{A(\vec{q}, \alpha)} \right]^2 - N^{-1} \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{\alpha} \left[ \frac{B^2(\vec{q}, \alpha)}{A(\vec{q}, \alpha)} \right], \quad (\text{II-80})$$

verificamos que a integração em  $\{V_{\vec{q}}\}$  gera um termo de quatro spins através do termo em  $B^2$  (ver II-79 e II-71).

#### 4.5 Hamiltoniana efetiva ( $\mathcal{H}_4^{\text{micro}}$ ) na função de partição do ensemble canônico

A função de partição canônica do sistema em estudo é dada por

$$\begin{aligned} Z(T, \{a_{\alpha}\}) &= \frac{\pi}{R^3} \int d\vec{R} \frac{T_{\vec{R}}}{\{s\}} e^{-\beta \mathcal{H}(\{\vec{R}\}, \{s\})} \\ &= (\text{cte}) \frac{T_{\vec{R}}}{\{s\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{macro}}(\{a_{\alpha}\}, \{s\})} \prod_{\vec{q}} \int d\vec{v}_{\vec{q}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{micro}}(\{v_{\vec{q}}\})} \end{aligned} \quad (\text{II-81})$$

com  $\mathcal{H}_{\text{macro}}$  dado por (II-64) e  $\mathcal{H}_{\text{micro}}$  dado por (II-80). A integração em  $\{V_{\vec{q}}\}$  permite reescrever  $Z(T, \{a_{\alpha}\})$  em termos de uma hamiltoniana efetiva de spins da seguinte maneira:

$$\mathcal{Z}(\tau, \{a_\alpha\}) = (\text{cte}) \prod_{\{r\}} T_n e^{-\beta [\mathcal{H}_{\text{macro}}(\{a_\alpha\}, \{r\}) + \mathcal{H}_4^{\text{micro}}(\{r\})]} \quad (\text{II-82})$$

onde definimos

$$\mathcal{H}_4^{\text{micro}}(\{r\}) = -N^{-1} \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{\alpha} \left[ \frac{B^2(\vec{q}, \alpha)}{A(\vec{q}, \alpha)} \right]. \quad (\text{II-83})$$

Como vimos para os modelos anteriores, o coeficiente do termo de quatro spins,  $\mathcal{H}_4^{\text{micro}}$ , é fundamental para determinar o efeito global das flutuações mecânicas. Vamos, portanto, efetuar uma análise cuidadosa da expressão (II-83), levando em conta a restrição  $\vec{q} \neq 0$  na somatória.

Substituindo (II-78), (II-79) e (II-71) em (II-83), obtemos:

$$\mathcal{H}_4^{\text{micro}}(\{r\}) = N^{-1} \sum_{\vec{q} \neq 0} \sum_{\mu, \nu} A_{\mu\nu}(\vec{q}) g_{\mu\nu}(\vec{q}, \{r\}), \quad (\text{II-84})$$

onde definimos

$$A_{\mu\nu} \equiv \sum_{\alpha} \frac{C_{\mu\alpha} C_{\nu\alpha}}{\tilde{D}_{\alpha\alpha}} \quad (\text{II-85})$$

e

$$g_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{\beta} J_1^\mu J_1^\nu \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} \sigma_{\vec{R}}^\mu \sigma_{\vec{R}'}^\nu + a_\mu \hat{e}_\mu \sigma_{\vec{R}'}^\mu \sigma_{\vec{R}''}^\nu + a_\nu \hat{e}_\nu \times$$

$$\times \left\{ e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} + \vec{R}')} f_{\mu\nu}^{++} + i e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} - \vec{R}')} f_{\mu\nu}^{+-} \right.$$

$$\left. + i e^{i\vec{q} \cdot (-\vec{R} + \vec{R}')} f_{\mu\nu}^{-+} - e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{R} + \vec{R}')} f_{\mu\nu}^{--} \right\}. \quad (\text{II-86})$$

com

$$f_{\mu\nu}^{++} \equiv (e^{iq_{\mu}a_{\mu}} - 1)(e^{iq_{\nu}a_{\nu}} - 1),$$

(II-87)

$$f_{\mu\nu}^{+-} \equiv (e^{iq_{\mu}a_{\mu}} - 1)(e^{-iq_{\nu}a_{\nu}} - 1).$$

e expressões análogas para  $f_{\mu\nu}^{-+}$  e  $f_{\mu\nu}^{--}$ .

Na expressão de  $g_{\mu\nu}$  temos o acoplamento de pares de spins, com uma estrutura complicada. Não podemos expandir esse coeficiente em  $\vec{q}$ , porque  $\vec{q}$  é o vetor de onda associado às flutuações elásticas que, em princípio, não se tornam críticas na transição.

Vamos fazer uma transformação de Fourier das variáveis de spin. Definindo

$$\sigma_{\vec{R}} = N^{-1} \sum_{\vec{R}'} \sigma_{\vec{R}'} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (\text{II-88})$$

e aplicando a transformação na expressão de  $g_{\mu\nu}$  (II-86), obtemos, para  $H_4^{\text{micro}}(\{\sigma\})$  (II-84):

$$\begin{aligned} H_4^{\text{micro}}(\{\sigma\}) &= N^{-3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \frac{iJ_1^{\mu} J_1^{\nu}}{\delta} \sigma_{\vec{k}_1} \sigma_{\vec{k}_2} \times \\ &\times \sum_{\mu, \nu} e^{i(k_{1\mu} + k_{2\nu})} \sum_{\vec{q} \neq 0} A_{\mu\nu}(\vec{q}) \left\{ f_{\mu\nu}^{++}(\vec{q}) \sigma_{-\vec{q}-\vec{k}_1} \sigma_{-\vec{q}-\vec{k}_2} \right. \\ &- f_{\mu\nu}^{-+}(\vec{q}) \sigma_{\vec{q}-\vec{k}_1} \sigma_{\vec{q}-\vec{k}_2} + i [ f_{\mu\nu}^{+-}(\vec{q}) \sigma_{-\vec{q}-\vec{k}_1} \sigma_{\vec{q}-\vec{k}_2} \\ &\left. + f_{\mu\nu}^{-+}(\vec{q}) \sigma_{\vec{q}-\vec{k}_1} \sigma_{-\vec{q}+\vec{k}_2} ] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II-89})$$

Vamos utilizar o fato de que, de (II-87),

$$f_{\mu\nu}^{++}(\vec{q}) = f_{\mu\nu}^{--}(-\vec{q}) \quad (\text{II-90})$$

$$f_{\mu\nu}^{+-}(\vec{q}) = f_{\mu\nu}^{-+}(-\vec{q})$$

e, do apêndice C,

$$A_{\mu\nu}(\vec{q}) = A_{\mu\nu}(-\vec{q}), \quad (\text{II-91})$$

para escrever, finalmente,

$$\begin{aligned} H_4^{\text{micro}}(\beta) = & -\frac{N^{-3}}{4} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_{\vec{q} \neq 0} \left\{ \left[ \sum_{\mu, \nu} J_1^\mu J_1^\nu e^{i(k_{1\mu} + k_{2\nu})} \right. \right. \\ & \left. \left. \times A_{\mu\nu}(\vec{q}) f_{\mu\nu}^{+-}(\vec{q}) \right] \delta_{\vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2} \delta_{-\vec{q} - \vec{k}_1} \delta_{\vec{q} - \vec{k}_2} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II-92})$$

Nos modelos discutidos nas sessões anteriores, as vibrações microscópicas dos íons produziam um acoplamento de pares de spins através de um termo do tipo  $(\sum_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R}+\vec{q}})^2$  na hamiltoniana efetiva. Em termos da transformada de Fourier esse termo escreve-se  $(\sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}})^2$ . Um termo desse tipo está excluído da hamiltoniana efetiva que obtivemos, através da restrição  $\vec{q} \neq 0$ . Nosso objetivo final é analisar o comportamento crítico do modelo. Na transição, a contribuição importante vem dos grandes comprimentos de onda: vamos fazer uma expansão em torno de  $\vec{k}_1 = 0$  e  $\vec{k}_2 = 0$  para obter o termo esperado. Expandimos então

$$e^{i(k_{1\mu} + k_{2\nu})} \sim 1 + i(k_{1\mu} + k_{2\nu}) - \frac{1}{2}(k_{1\mu} + k_{2\nu})^2 + \dots \quad (\text{II-93})$$

para obter

$$H_4^{macro}(\sigma^i) = -\frac{1}{4N^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \left[ \sum_{\vec{q} \neq 0, \mu, \nu} J_1^\mu J_1^\nu A_{\mu\nu}(\vec{q}) f_{\mu\nu}^{+-}(\vec{q}) \right] \cdot (1 + o(k_1^2, k_2^2, k_1, k_2)) \sigma_{\vec{k}_1}^- \sigma_{\vec{k}_2}^- \sigma_{-\vec{q}-\vec{k}_1}^- \sigma_{\vec{q}-\vec{k}_2}^- \quad (II-94)$$

Definindo

$$L(\vec{q}) \equiv \sum_{\mu, \nu} J_1^\mu J_1^\nu A_{\mu\nu}(\vec{q}) f_{\mu\nu}^{+-}(\vec{q}) \quad (II-95)$$

e fazendo a troca de variáveis

$$\vec{k}_3 \rightarrow \vec{q} - \vec{k}_2,$$

obtemos

$$H_4^{macro}(\sigma^i) = \frac{L(0)}{4N} \left[ N^{-1} \sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}}^- \sigma_{-\vec{k}}^- \right]^2 - \frac{1}{4N^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} L(\vec{k}_1 + \vec{k}_3) \left[ 1 + o(k_1^2, \dots) (1 - \sigma_{\vec{k}_1, \vec{k}_3}^-) \right] \sigma_{\vec{k}_1}^- \sigma_{\vec{k}_2}^- \sigma_{\vec{k}_3}^- \sigma_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3}^- \quad (II-96)$$

se L(0) tiver um limite bem definido. Como mostramos no apêndice C, para redes de simetria cúbica na fase desordenada,

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} L(\vec{q}) = \frac{2J_1^2}{K_1 + 2K_2} \quad (II-97)$$

portanto podemos obter a seguinte hamiltoniana efetiva, no ensemble canônico:

$$H_{ef}(\sigma^i, \sigma^j) = H_{macro}(\sigma^i) + \frac{J_1^2}{2(K_1 + 2K_2)N} \left[ N^{-1} \sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}}^- \sigma_{-\vec{k}}^- \right]^2 -$$

$$- \frac{J_1^2 N^{-3}}{4} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} L(\vec{k}_1 + \vec{k}_3) (1 + o(k_1^2 \dots)) \sigma_{\vec{k}_1} \sigma_{\vec{k}_2} \sigma_{\vec{k}_3} \sigma_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3}.$$

(II-98)

Pode-se observar, com relação a essa hamiltoniana efetiva que

- há um termo de acoplamento de pares de coeficiente positivo, como no caso do modelo de Baker-Essam;
- há um termo adicional de quatro spins.

#### 4.6 Hamiltoniana efetiva ( $\mathcal{H}_4^{\text{macro}}$ ) na função de partição do ensemble das pressões

A função de partição no ensemble das pressões escreve-se

$$Y(\tau, \{p_\alpha\}) \propto \int \prod_\alpha da_\alpha \exp \left\{ -\beta [\mathcal{H}^{\text{eff}}(\{a_\alpha\}, \{v\}) + \frac{V_0}{a_0} \sum_\alpha p_\alpha \Delta a_\alpha] \right\}, \quad (\text{II-99})$$

onde  $p_\alpha$  é a força por unidade de área na direção  $\alpha$  e  $\Delta a_\alpha \equiv a_\alpha - a_\alpha^0$ , no caso em que as forças incidentes sobre o sistema de simetria cúbica tem direções apenas perpendiculares às superfícies do mesmo (19).

Para efetuar as integrais nos  $\{a_\alpha\}$  vamos expandir  $a_{\alpha\beta}$  na expressão de  $\mathcal{H}_{\text{macro}}(\{a_\alpha\})$  (eq. II-67), em torno de  $\Delta a_\alpha$ . Obtemos:

$$\sum_{\substack{\alpha \\ \beta > \alpha}} (a_{\alpha\beta} - a_{\alpha\beta}^0)^2 \simeq \sum_{\alpha, \beta} R_{\alpha\beta} (1 + o(\epsilon a)) \partial a_\alpha \Delta a_\beta \quad (\text{II-100})$$

onde

$$R_{\alpha\beta} \equiv \frac{\kappa_2}{2} (1 + \delta_{\alpha\beta}), \quad (\text{II-101})$$

para uma rede de simetria cúbica na fase desordenada.

Vamos agora reescrever (II-99):

$$Y(T, \{p_\alpha\}) = \int_{\{\sigma\}} \tau_N e^{-\beta u e^T(\{p_\alpha\}, \{\sigma\})}, \quad (\text{II-102})$$

onde, de (II-67)

$$\mathcal{H}^T(\{p_\alpha\}, \{\sigma\}) \equiv -J_0 \sum_{\vec{R}, \alpha} \sigma_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R} + a_\alpha \hat{e}_\alpha} + \mathcal{H}_4^{\text{micro}}(\{\sigma\}) + \mathcal{H}'(\{p_\alpha\}, \{\sigma\}), \quad (\text{II-103})$$

com

$$\begin{aligned} \exp[-\beta \mathcal{H}'(\{p_\alpha\}, \{\sigma\})] &\equiv \int_{\{a_\alpha\}} \pi \int da_\alpha \exp\{-\beta \mathcal{H}'(\{a_\alpha\}, \{\sigma\})\} = \\ &= \int_{\{a_\alpha\}} \pi \int da_\alpha \exp\{-\beta [\sum_{\vec{R}, \alpha} J_1 \Delta a_\alpha \sigma_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R} + a_\alpha \hat{e}_\alpha} + N \sum_{\alpha} \frac{\kappa_\alpha}{2} \Delta a_\alpha^2 \\ &\quad + N \sum_{\alpha, \beta} \kappa_2^{\alpha\beta} (a_{\alpha\beta} - a_{\alpha\beta})^2 + \frac{V_0}{a_0} \sum_{\alpha} p_\alpha \Delta a_\alpha]\}. \end{aligned} \quad (\text{II-104})$$

Utilizando (II-100) na definição de  $\mathcal{H}'(\{a_\alpha\}, \{\sigma\})$ , obtemos

$$\mathcal{H}'(\{a_\alpha\}, \{\sigma\}) = \sum_{\alpha} F_\alpha \Delta a_\alpha + N \sum_{\alpha, \beta} M_{\alpha\beta} \Delta a_\alpha \Delta a_\beta \quad (\text{II-105})$$

com

$$M_{\alpha\beta} \equiv R_{\alpha\beta} + \frac{\kappa_1}{2} \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{II-106})$$

e

$$F_\alpha \equiv J_1 \sum_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R} + a_\alpha \hat{e}_\alpha} - \frac{V_0}{a_0} p_\alpha \quad (\text{II-107})$$



Como no caso da seção anterior, temos que diagonalizar o termo quadrático e eliminar o termo linear. Utilizando exatamente o mesmo procedimento, obtemos, em (II-104):

$$H'(\{p_\alpha\}, \{\sigma\}) = -\frac{1}{4N} \sum_{\beta, \gamma} F_\beta F_\gamma \left[ \sum_{\alpha} \frac{u_{\beta\alpha} u_{\gamma\alpha}}{\tilde{M}_{\alpha\alpha}} \right], \quad (\text{II-108})$$

onde  $\tilde{M}_{\alpha\alpha}$  é a matriz de auto-valores de  $M_{\alpha\beta}$  e a matriz  $U$  é definida por

$$U^{-1} M U = \tilde{M}. \quad (\text{II-109})$$

Da expressão de  $F_\alpha$  acima (II-107), vemos que a hamiltoniana efetiva no ensemble das pressões conterá um termo de acoplamento de pares de spins de coeficiente negativo (como nos modelos anteriores) e uma contribuição dependente da pressão para o termo de exchange (também como nos modelos anteriores). Utilizando o resultado do apêndice C para o cálculo do colchete na expressão (II-108), e a transformada de Fourier para as variáveis de spin (II-88), obtemos:

$$H'(\{p_\alpha\}, \{\sigma\}) = -\frac{J_1}{2} a_0^2 \sum_{\beta, \gamma} p_\beta p_\gamma A_{\beta\gamma} \cdot N^{-1} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}} \quad (\text{II-110})$$

$$- \frac{N a_0^4}{4} \sum_{\beta, \gamma} p_\beta p_\gamma A_{\beta\gamma} + H_4^{\text{mauo}}(\{p_\alpha\}, \{\sigma\}),$$

com

$$H_4^{\text{mauo}}(\{p_\alpha\}, \{\sigma\}) = -\frac{3J_1^2}{2N} \frac{1}{k_1 + 4k_2} \left[ N^{-1} \sum_{\vec{k}} (1 + \cos(k_2)) \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}} \right]^2. \quad (\text{II-111})$$

O termo de acoplamento de pares neste ensemble é composto de duas contribuições (eqs. II-96,97 e II-111) e é dado por:

$$\begin{aligned} H_4^{(2)} &= H_4^{\text{maio}} - H_4^{\text{miao}} \\ &= - \frac{J_1^2}{N\kappa_1} \left[ \frac{1+\lambda}{(1+4\lambda)(1+2\lambda)} \right] \left( \sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{II-112})$$

com

$$\lambda \equiv \frac{\kappa_2}{\kappa_1}$$

A hamiltoniana efetiva completa é obtida a partir de (II-103), substituindo-se as expressões (II-110) e (II-112):

$$\begin{aligned} \pi_4(p, \delta) &= -N^{-1} \sum_{\vec{k}} J(p, \vec{k}) \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}} \\ &\quad - \frac{J_4}{N} \left( N^{-1} \sum_{\vec{k}} \sigma_{\vec{k}} \sigma_{-\vec{k}} \right)^2 \\ &\quad - g N^{-3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} \sigma_{\vec{k}_1} \sigma_{\vec{k}_2} \sigma_{\vec{k}_3} \sigma_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3}, \end{aligned} \quad (\text{II-113})$$

com

$$J(\vec{k}) \equiv \left[ J_0 + \frac{3}{5} J_1 p a^2 \right] \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \delta} \quad (\text{II-114})$$

$$J_4 \equiv \frac{3J_1^2}{2} \left[ \frac{1}{\kappa_1 + 4\kappa_2} \right] \quad (\text{II-115})$$

e

$$g \equiv \frac{1}{4} L(0). \quad (\text{II-116})$$

Com relação a este resultado deve-se observar que:

- o termo de acoplamento de pares tem coeficiente de sinal negativo;
- o termo da interação de troca é modificado pela existência de pressão;
- surge um termo adicional de quatro spins (como nos trabalhos em <sup>(12,14)</sup> que as oscilações mecânicas são tratadas para um meio contínuo).

Notamos ainda que (i) <sup>sob pressão uniforme,</sup> a hamiltoniana efetiva (II-113) reduz-se à hamiltoniana efetiva utilizada por Bruno e Sak <sup>(12)</sup> para um meio elástico contínuo e isotrópico no caso em que  $K_1 = K_2$  e (ii) que foi possível obter a hamiltoniana efetiva a pressão constante para um meio elástico de simetria cúbica, ao contrário do que afirmam Bergman e Halperin <sup>(14)</sup> para um meio elástico contínuo.

### III. ORDEM DA TRANSIÇÃO MAGNÉTICA - TRÊS TRATAMENTOS

- III.1 Solução de campo médio - modelo de Domb p. III-1
- 1.1 Função de partição no ensemble canônico
  - 1.2 Função de partição no ensemble das pressões
  - 1.3 Transição magnética - expansão de Landau
  - 1.4 Instabilidade mecânica
- III.2 Solução exata em  $d = 2$  para as hamiltonianas efetivas p. III-15
- 2.1 Hamiltonianas efetivas  $\mathcal{H}_a$  e  $\mathcal{H}_b$
  - 2.2 Solução exata em  $d = 2$  para  $\mathcal{H}_a$
  - 2.3 A ordem de transição para  $\mathcal{H}_a$
  - 2.4 Renormalização de Fisher para  $\mathcal{H}_a$
  - 2.5 Solução exata em  $d = 2$  para  $\mathcal{H}_b$
- III.3 Soluções de grupo de renormalização p. III-24
- 3.1 Estudo de  $\mathcal{H}_a$
  - 3.2 Comportamento crítico dos modelos descritos por  $\mathcal{H}_a$
  - 3.3 Tratamento da hamiltoniana  $\mathcal{H}_b$
- III.4 Discussão das soluções exata e de grupo de renormalização p. III-35

### III. ORDEM DA TRANSIÇÃO MAGNÉTICA - TRÊS TRATAMENTOS

Vamos considerar três tratamentos para os modelos compressíveis apresentados no capítulo anterior. Vamos discutir as soluções de campo médio de Curie-Weiss<sup>(20)</sup> para o modelo de Domb, nos ensembles canônico e das pressões; e as soluções "exata"<sup>(10)</sup> e de grupo de renormalização no espaço de momentos<sup>(21)</sup> para as hamiltonianas efetivas de spin (II-9), (II-27) e (II-32).

#### 1. Solução de campo médio - modelo de Domb

Vamos analisar o comportamento do modelo de Domb em dois ensembles diferentes, No ensemble canônico consideraremos a função de partição  $Z(T, v, h)$  dada por

$$\begin{aligned} Z(T, v, h) &\equiv \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_0(\{\sigma\}, v)} \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[ \beta J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \beta \frac{N \kappa}{2} (a - a_0)^2 + \beta h \sum_i \sigma_i \right] \end{aligned} \quad (\text{III-1})$$

e no ensemble das pressões a função de partição  $Y(T, p, h)$ , que é dada por

$$\begin{aligned} Y(T, p, h) &= \int dv e^{-\beta p v} Z(T, v, h) \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \exp \left[ \beta J_2 \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \frac{\beta J_4}{N} \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 + \beta h \sum_i \sigma_i \right] \cdot \\ &\quad \cdot \exp N \left( p v_0 - \frac{p^2}{2\kappa} \right), \end{aligned} \quad (\text{III-2})$$

onde

$$J(a) \equiv J_0 - J_1 \Delta a, \quad (\text{III-3})$$

$$J_2 \equiv J_0 + J_1 \frac{p}{\kappa} , \quad (\text{III-4})$$

$$J_4 \equiv \frac{J_1^2}{2\kappa} , \quad (\text{III-5})$$

com  $\Delta v \equiv v - v_0$ .

### 1.1 Cálculo da função de partição no ensemble canônico

O modelo de Curie-Weiss consiste em considerar as interações de spin de longo alcance. Para manter finita a energia por spin é necessário dividir o coeficiente da interação de troca por  $N$ . A hamiltoniana  $\mathcal{H}_D$  em (III-1) fica

$$\mathcal{H}_D^{\text{c.w.}} = - \frac{J(a)}{2N} \left( \sum_i \sigma_i \right)^2 + \frac{3N\kappa}{2} (\Delta a)^2 - h \sum_i \sigma_i . \quad (\text{III-6})$$

A transformação gaussiana

$$e^{-a^2/2} = (2\pi)^{-1/2} \int \exp\left(-\frac{x^2}{2} + ax\right) dx \quad (\text{III-7})$$

é utilizada para reescrevermos a função de partição. Obtemos, realizada a soma sobre configurações,

$$\begin{aligned} Z(\tau, \nu, h) = & \left( \frac{N\beta J}{2\pi} \right)^{1/2} \int dy \exp \left\{ -\frac{N\beta J}{2} y^2 + \right. \\ & \left. + N \ln [2 \cosh(\beta J y + \beta h)] - \frac{3\beta N \kappa}{2} \Delta a^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{III-8})$$

com

$$\left(\frac{\beta J}{N}\right)^{1/2} x \equiv \beta J y. \quad (\text{III-9})$$

No limite  $N \rightarrow \infty$  utilizamos uma solução do tipo ponto de sela para obter

$$Z_{N \rightarrow \infty}(\tau, h, v) = \left(\frac{N\beta J}{2\pi}\right)^{1/2} \left\{ \exp\left[-\frac{N\beta J}{2} \bar{y}^2 + N \ln [2 \cosh(\beta J \bar{y} + \beta h)] - \frac{3\beta N K}{2} \delta a^2\right] \right\}, \quad (\text{III-10})$$

onde  $\bar{y}$  maximiza o expoente em (III-8) e é dado por

$$\bar{y} = \tanh(\beta J \bar{y} + \beta h). \quad (\text{III-11})$$

A variável  $\bar{y}$  pode ser identificada com a magnetização por íon do modelo, verificando-se que

$$m(\tau, h, v) = - \frac{\partial f}{\partial h}(\tau, h, v), \quad (\text{III-12})$$

onde  $f(T, v, h) = - \frac{kT}{N} \ln Z(T, v, h)$ , que é a energia livre do sistema a campo magnético fixo, obedece a equação (III-11). A energia livre para magnetização fixa é a transformada de Legendre de  $f(T, v, h)$  com relação a  $h$ ,

$$f(\tau, v, m) = \sup_h [f(\tau, v, h) + mh], \quad (\text{III-13})$$

obtendo-se

$$f(T, v, m) = -\frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{J(a)}{2} m^2 + \frac{1}{2\beta} \ln(1-m^2) +$$

$$+ \frac{1}{2\beta} m \ln \frac{1+m}{1-m} + \frac{\kappa}{2} (\Delta a)^2 \quad (\text{III-14})$$

Para comparação com resultados da seção seguinte, queremos ainda obter a energia livre do modelo para pressão e magnetização fixos  $g(T, p, m)$ . A pressão  $p = -\frac{\partial f(T, v, m)}{\partial v}$  é

$$p = -\frac{J_1}{2} m^2 - \kappa \Delta a \quad (\text{III-15})$$

Substituindo a expressão de  $p$  em

$$g(T, p, m) = \sup_v [f(T, v, m) + pv] \quad , \quad \text{temos}$$

$$g(T, p, m) = -\frac{1}{\beta} \ln 2 - \frac{p^2}{2\kappa} + pv_0$$

$$- \left[ \frac{J_0}{2} + \frac{J_1 p}{2\kappa} \right] m^2 - \frac{J_1^2}{2\kappa} m^4$$

$$+ \frac{1}{2\beta} \ln(1-m^2) + \frac{1}{2\beta} m \ln \frac{1+m}{1-m} \quad . \quad (\text{III-16})$$

## 1.2 Cálculo da função de partição no ensemble das pressões

Nesse caso, a transformação gaussiana (III-7) e o método do ponto de sela são utilizados para reescrevermos a função de partição  $Y(T, p, h)$ , dada por (III-2), da seguinte maneira:

$$Y(T, p, h) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \exp \left\{ -N\beta J_0 \bar{x}^2 + \ln \bar{Z}_1(\bar{x}) + N(pv_0 \cdot \frac{p^2}{2\kappa}) \right\} \quad , \quad (\text{III-17})$$



onde  $\bar{x}$  deve obedecer a equação

$$-2\beta J_4 \bar{x} + \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial y} [\ln Z_I(\bar{x})] \Big|_{\bar{y}} = 0. \quad (\text{III-18})$$

$Z_I(x)$  é a função de partição do modelo de Ising com constante de acoplamento  $J(x)$  dada por

$$K(x) \equiv \beta J(x) \equiv \beta J_2 + 2\beta J_4 x. \quad (\text{III-19})$$

Podemos agora adotar a solução de Curie-Weiss para obter  $Z_I(x)$ . Basta substituir  $\beta J(v)$  por  $\beta J(x)$  na expressão (III-8) e ignorar os termos dependentes do volume. Temos

$$\bar{z}_{N \rightarrow \infty} = \left( \frac{NK(x)}{2\pi} \right)^{1/2} \left\{ \exp \left[ -\frac{NK(x)}{2} \bar{y}^2 + N \ln [2 \cosh (K(x)\bar{y} + \beta h)] \right] \right\}, \quad (\text{III-20})$$

onde

$$\bar{y} = \tanh (K(x)\bar{y} + \beta h). \quad (\text{III-21})$$

Da condição de ponto de sela (III-18), no limite  $N \rightarrow \infty$ , obtemos

$$\bar{x} = \frac{\bar{y}^2(x^-)}{2}, \quad (\text{III-22})$$

então

$$g(r, p, h) = \frac{J_2}{2} m^2 + \frac{3}{4} J_4 m^4 - kT \ln \left\{ 2 \cosh [\beta (J_2 m + J_4 m^3 + h)] \right\} + p v_0 - \frac{p^2}{2\kappa} \quad (\text{III-23})$$

e a magnetização é

$$m(\tau, h) = \tanh \left[ \beta (J_2 m + J_4 m^3 + h) \right] \quad (\text{III-24})$$

pois  $\bar{y}$  é novamente identificado com a magnetização do modelo.

Para analisarmos o comportamento crítico do modelo no contexto da teoria de Landau, precisamos da energia livre à magnetização fixa:

$$g(\tau, p, m) = \frac{e^{\beta t}}{\beta} [g(\tau, p, h) + m h] \quad (\text{III-25})$$

De (III-23) e (III-24), obtemos

$$g(\tau, p, m) = -k\tau \ln 2 - \frac{J_2}{2} m^2 - \frac{J_4}{4} m^4 + \frac{k\tau}{2} \ln(1-m^2) + \frac{m}{2\beta} \ln \frac{1+m}{1-m} + p\sigma_0 - \frac{p^2}{2k} \quad (\text{III-26})$$

Essa expressão para  $g(\tau, p, m)$  é idêntica à expressão obtida na seção anterior se substituirmos  $J_2$  e  $J_4$  pelas expressões correspondentes dadas pelas equações (III-4) e (III-5).

### 1.3 Transição magnética - expansão de Landau

Segundo a teoria de Landau<sup>(22,23)</sup>, as condições termodinâmicas para o comportamento crítico ou tricrítico de um sistema podem ser obtidas a partir da expansão de sua energia livre no parâmetro de ordem. Assim, para um sistema cuja energia livre é dada pela função  $\psi(T, \gamma, \phi)$  das variáveis termodinâmicas  $(T, \gamma)$  e do parâmetro de ordem  $\phi$ , temos:

$$\Psi(T, \sigma, \phi) \sim A_0(T, \sigma, 0) + A_2(T, \sigma, 0) \phi^2 + A_4(T, \sigma, 0) \phi^4 + o(\phi^6), \quad (\text{III-27})$$

no caso em que a energia livre é função par do parâmetro de ordem e em que o campo  $\eta$  conjugado ao parâmetro de ordem é nulo. Para a análise da transição de fase é necessário distinguir duas situações: (i)  $\gamma$  é um campo termodinâmico (pressão, potencial químico, etc.) e (ii)  $\gamma$  é uma densidade (densidade volumétrica, concentração, etc.).

(i)  $\gamma$  é um campo termodinâmico  $\lambda$ . Essa é a situação habitual nas expansões de Landau para transições magnéticas<sup>(24)</sup>. O campo  $\lambda$  é o mesmo em duas fases que coexistem e a análise do comportamento do modelo na transição é muito mais simples. A linha crítica (transição de segunda ordem) no diagrama de fases  $(T, \lambda)$  é dada pela condição

$$A_2(T_c, \lambda_c) = 0, \quad A_4(T_c, \lambda_c) > 0 \quad (\text{III-28})$$

e um ponto tricritico é definido por

$$A_4(T_t, \lambda_t) = A_4(T_t, \lambda_c) = 0, \quad A_6(T_t, \lambda_c) > 0. \quad (\text{III-29})$$

Nas proximidades do ponto tricrítico, a linha de coexistência pode ser obtida a partir da condição

$$A_4^2(T_{cx}, \lambda_{cx}) = 4 A_2(T_{cx}, \lambda_{cx}) \cdot A_6(T_{cx}, \lambda_{cx}) \quad (\text{III-30})$$

e a descontinuidade no parâmetro de ordem ao longo desta linha é dada por

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} \right)_{cx} = - \frac{A_4(T_{cx}, \lambda_{cx})}{2 A_6(T_{cx}, \lambda_{cx})}. \quad (\text{III-31})$$

As duas últimas condições são obtidas impondo-se a solução de equilíbrio para  $\phi$  e igualando as energias livres das duas fases que coexistem.

- (ii)  $\gamma$  é uma densidade  $\rho$ . Neste caso, a densidade não é a mesma para duas fases que coexistem, o que é evidente se escrevemos  $\rho = \rho(T, \lambda, \phi)$ . A linha de coexistência do diagrama  $(T, \lambda)$  transforma-se numa região de coexistência no diagrama  $(T, \rho)$ . A região de coexistência é limitada por duas linhas  $\rho_I(T; \phi=0)$  e  $\rho_{II}(T; \phi \neq 0)$ , que se encontram com a linha crítica no ponto tricrítico. A linha crítica no diagrama de fases  $(T, \rho)$  ainda é definida pela forma analítica do termo quadrático da expansão (III-27), isto é,

$$A_2(T_c, \rho_c) = 0, \quad (\text{III-32})$$

condição que corresponde ao surgimento de uma solução não nula para o parâmetro de ordem no equilíbrio termodinâmico, dada por  $\frac{\partial \psi}{\partial \phi} = 0$ . Entretanto, um coeficiente positivo para o termo quártico,  $A_4(T_c, \rho_c) > 0$ , não garante a inexistência de ponto tricrítico<sup>(23)</sup>.

Para determinar o término da linha crítica e o início das linhas  $\rho_I(T, 0)$  e  $\rho_{II}(T, \phi)$  é necessário verificar a possibilidade de soluções  $\rho_I \neq \rho_{II}$ . Isto é feito considerando-se simultaneamente três condições:

$$\frac{\partial \psi}{\partial \phi} \Big|_{\bar{\phi}} = 0 \quad (\text{III-33})$$

que impõe o equilíbrio termodinâmico,

$$\gamma_I(T, \rho_I; 0) - \rho_I \frac{\partial \gamma_I(T, \rho_I; 0)}{\partial \rho_I} = \gamma_{II}(T, \rho_{II}, \bar{\phi}) - \rho_{II} \frac{\partial \gamma_{II}(T, \rho_{II}, \bar{\phi})}{\partial \rho_{II}}, \quad (\text{III-34})$$

que corresponde a igualar as energias livres de Gibbs

$$\gamma_I(T, \lambda; 0) = \gamma_{II}(T, \lambda; \bar{\phi}), \text{ pois } \gamma(T, \lambda) = \text{ext} [\gamma(T, \rho) - \lambda \rho],$$

e

$$\frac{\partial \gamma_I(T, \rho_I)}{\partial \rho_I} = \frac{\partial \gamma_{II}(T, \rho_{II})}{\partial \rho_{II}}, \quad (\text{III-35})$$

que corresponde a igualar os campos  $\lambda$  sobre a linha de coexistência. A partir destas três condições obtém-se  $\rho_I(T; 0)$ ;  $\rho_{II}(T; \bar{\phi})$  e  $\delta\phi \equiv \phi(\rho_{II})$ . Na ausência de soluções  $\rho_I \neq \rho_{II}$ , as condições (III-34) e (III-35) são automaticamente satisfeitas e a primeira condição determina a linha crítica, na forma da equação (III-32).

Vamos então considerar as expansões de Landau das energias livres  $g(T, p; m)$  (eq. III-16) e  $f(T, v; m)$  (eq. III-13), utilizando os critérios expostos acima.

#### Expansão de $g(T, p; m)$

A expansão da energia livre do modelo de Domb em função da pressão,  $g(T, p, m)$ , equação (III-16) (ou III-26), na magnetização, dá

$$g(T, p, m) \sim g(T, p, 0) + \frac{k_B T}{2} \left(1 - \frac{J_2}{k_B T}\right) m^2 + \frac{k_B T}{12} \left(1 - \frac{3J_4}{k_B T}\right) m^4 + \frac{k_B T}{30} m^6 + \dots \quad (\text{III-36})$$

Verifica-se, então, a existência de uma linha crítica para

$$k_B T_c = J_2^c = J_0 + \frac{J_1}{\kappa} p_c, \quad k_B T_c > 3J_4 \equiv \frac{3J_1^2}{2\kappa} \quad (\text{III-37})$$

e de um ponto tricrítico para

$$k_B T_t = \frac{3J_1^2}{2\kappa}, \quad p_t = \kappa \left[ \frac{k_B T_t}{J_1} - \frac{J_0}{J_1} \right]. \quad (\text{III-38})$$

Podemos determinar a linha de coexistência,  $p_{cx}(T_{cx})$ , nas proximidades do ponto tricrítico, utilizando a condição (III-30):

$$1 - \beta_{cx} \left( J_0 + \frac{J_1}{\kappa} p_{cx} \right) = \frac{5}{48} \left( 1 - 3\beta_{cx} J_4 \right)^2. \quad (\text{III-39})$$

A descontinuidade da magnetização ao longo dessa linha, segundo a equação (III-31), é dada por:

$$\delta m^2 = -\frac{5}{4} \left( 1 - 3\beta_{cx} J_4 \right). \quad (\text{III-40})$$

#### Expansão de $f(T, v; m)$

A expansão em  $m$  da energia livre dependente do volume,  $f(T, v; m)$ , da equação (III-14), dá:

$$f(T, v, m) \sim f(T, v, 0) + \frac{k_B T}{2} \left( 1 - \frac{J(a)}{k_B T} \right) m^2 + \frac{k_B T}{12} m^4 + \frac{k_B T}{30} m^6 + \dots \quad (\text{III-41})$$

Deve-se notar que nesta expansão o coeficiente do termo quártico em  $m$  é sempre positivo, e, no entanto, como vimos acima, o sistema pode apresentar transição de primeira ordem.

Vamos utilizar as condições (III-33)-(III-35) para determinar o diagrama de fases no plano  $T$ - $v$ . A solução ferromagnética para a equação (III-33) dá

$$1 - \beta J_0 + \beta J_1 \Delta a_I + \frac{m^2}{3} + \frac{m^4}{5} = 0 \quad (\text{III-42})$$

para  $\Delta a_{II} \equiv a - a_0$  na fase ferromagnética. As condições (III-34) e (III-35) levam, respectivamente, às equações:

$$a_{II}^2 - a_I^2 = \frac{1}{3\kappa\beta} \left\{ [1 - \beta J_0 - \beta J_1 a_0] m^2 + \frac{m^4}{6} + \frac{m^6}{15} \right\} \quad (\text{III-43})$$

e

$$\Delta a_I - \Delta a_{II} = \frac{J_1}{6\kappa} m^2. \quad (\text{III-44})$$

Resolvendo o sistema de três equações (III-42 a 44), para  $\Delta \equiv a_I - a_{II}$  (que é identificado com a descontinuidade do volume sobre a linha de coexistência), obtemos as seguintes soluções

$$\Delta = 0, \quad \Delta a_I = \Delta a_{II} = -\frac{kT}{J_1} - \frac{J_0}{J_1}, \quad \text{para } k_B T \geq J_4 \quad (\text{III-45})$$

e

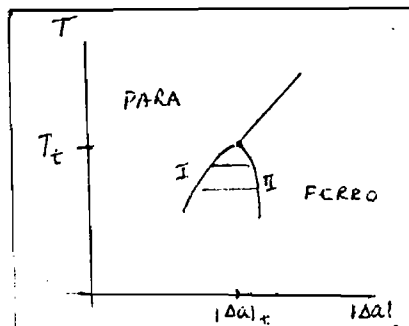
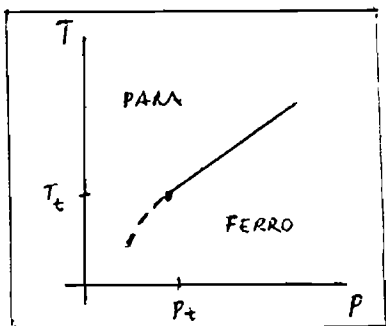
$$\Delta = -\frac{5J_1}{24} (1 - \beta J_4), \quad \text{para } k_B T < J_4. \quad (\text{III-46})$$

A solução (III-45) corresponde à linha crítica no diagrama  $(T, v)$ . Pode-se verificar que é a solução correspondente da linha crítica

no diagrama (T,p), substituindo-se a equação (III-15) na eq. (III-37). Obtemos ainda o ponto tricrítico para  $k_B T_t = J_4$ , como antes. A equação (III-46) dá a descontinuidade do volume na linha de coexistência  $p_{cx}(T_{cx})$ , como também a descontinuidade da magnetização, se utilizarmos a eq. III-44, que é  $\delta m^2 = -\frac{5}{4}(1-\beta J_4)$ , como na eq. III-40. Podem ainda ser obtidas as linhas  $a_I(T;0)$  e  $a_{II}(T;m)$  a partir da equação (III-46) e da equação

$$\Delta a_I = \frac{1-\beta J_0}{\beta J_1} - \frac{5}{36} (1-\beta J_4)^2. \tag{III-47}$$

Todos estes resultados estão ilustrados, qualitativamente, nas figuras abaixo.



#### 1.4 Instabilidade mecânica

No trabalho original de Domb<sup>(1)</sup>, o autor mostra, através de relações termodinâmicas, que um modelo de Ising cuja constante de troca  $J(v)$  dependesse genericamente do volume, apresentaria uma instabilidade mecânica através de uma compressibilidade negativa, caso sua suscetibilidade divergisse.



No caso do modelo em discussão podemos analisar a compressibilidade do modelo a partir das expressões (III-15) para a pressão e  $m = \tanh[\beta J(v)m]$  (de III-11 e III-12), para a magnetização a campo nulo. Obtemos:

$$\frac{1}{k} \left( \frac{\partial p}{\partial v} \right)_T = -1 + \frac{(\beta J_1^2 / k) m^2 (1 - m^2)}{1 - \beta J(a) (1 - m^2)} \quad (\text{III-48})$$

A compressibilidade é constante acima da temperatura crítica e varia com a temperatura abaixo da temperatura crítica. Para verificar a possibilidade de uma compressibilidade negativa ( $\frac{\partial p}{\partial v} > 0$ ), vamos analisar o segundo termo da expressão acima, assintoticamente próximo da transição, isto é, para  $\Delta \equiv \frac{T_c - T}{T} \ll 1$ . Nessa região, podemos escrever para a magnetização

$$m^2 \sim \frac{3\Delta t}{[\beta J(a)]^2} \quad (\text{III-49})$$

Substituindo (III-49) na expressão (III-48), obtemos como condição para uma compressibilidade negativa,

$$\frac{3\beta J_1^2}{k} \frac{1}{[\beta J(a) [-\beta^2 J^2(a) + 3]]} > 1.$$

Mas  $\beta_c J(v) = 1$ , portanto devemos ter:

$$k_0 T_c < \frac{3J_1^2}{2k}$$



que é precisamente a condição discutida na seção anterior para o surgimento de um ponto tricrítico no diagrama de fases da transição magnética.

Com relação aos resultados de campo médio, cabe observar que

- (i) A existência de um ponto tricrítico para o modelo de Domb, na aproximação de campo médio, é um resultado conhecido<sup>(12)</sup>. Ressalte-se, entretanto, que a transição de primeira ordem e o ponto tricrítico só existirão para uma constante de acoplamento fortemente dependente da distância, isto é,

$$\frac{J_0}{J_1} \ll 1,$$

pois, de (III-37) devemos ter  $\frac{3J_1^2}{2K} > J_0$ . Por outro lado, nosso modelo é válido para pequenas variações de volume  $\Delta v$ . De (III-15), isso requer  $\frac{J_1}{2K} \ll 1$ , donde segue que  $\frac{J_0}{J_1} \ll 1$ . Para  $\frac{J_0}{J_1} > 1$ , portanto, coerente com a expansão linear de  $J(r)$ , haverá apenas a linha crítica.

- (ii) O estudo da expansão de Landau nos dois ensembles, do campo  $p$  e da densidade  $a$ , permitiu verificar a equivalência dos dois ensembles e auxiliou a compreender o papel das hamiltonianas efetivas de spin no ensemble das densidades. Além disso, a análise da expansão de Landau com coeficientes dependentes de uma densidade é dispensável no caso dos sistemas em estudo, pois na situação física real o parâmetro a ser fixado é o campo (no caso, a pressão). Entretanto, essa forma da expansão pode ser útil em situações em que o parâmetro físico fixo é uma densidade, como, por exemplo, a concentração.

### III.2 Solução exata em $d = 2$ para as hamiltonianas efetivas

#### 2.1 Hamiltonianas efetivas

Vamos considerar uma solução exata em duas-dimensões para os modelos com as seguintes hamiltonianas efetivas:

$$\mathcal{H}_a = -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{J_4}{N} \left( \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right)^2 - h \sum_i \sigma_i, \quad (\text{III-50})$$

com interações entre pares de spins de toda rede, nas duas situações,  $J_4 > 0$  e  $J_4 < 0$ , e

$$\mathcal{H}_b = -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \frac{J_4'}{N^2} \sum_{\ell} \left( \sum_i \sigma_i^{\ell} \sigma_{i-1}^{\ell} \right)^2 - h \sum_i \sigma_i, \quad (\text{III-51})$$

com interações entre pares de spins ao longo das linhas e  $J_4' > 0$ . A solução que vamos utilizar foi proposta por Oitmaa e Barber<sup>(10)</sup> e utilizada por eles para analisar a hamiltoniana  $\mathcal{H}_a$  com  $J_4 > 0$ . O surgimento de um acoplamento de longo alcance entre pares de spins já era conhecido, para sistemas magneto-elásticos com cisalhamento, mas havia dificuldades em obter uma expressão exata para o coeficiente da interação. Os autores propõem-se então a estudar o comportamento do modelo com um coeficiente constante para essa interação, sem no entanto justificar a escolha do sinal de  $J_4$  ( $J_4 > 0$ ).

Discutiremos posteriormente a relação entre o comportamento crítico destas hamiltonianas modelo e o comportamento crítico dos modelos discutidos no capítulo II.

#### 2.2 A solução exata em $d = 2$ para $\mathcal{H}_a$

A solução de Oitmaa e Barber consiste basicamente em utilizar a transformação Gaussiana (III-7), o método do ponto

de sela e a solução exata para o modelo de Ising em duas dimensões.

Para maior clareza, mencionamos algumas etapas de cálculo já discutidas em detalhe nas seções III.1.1 e III.1.2. A transformação gaussiana

$$e^{\frac{a^2}{2}} = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + ax\right) dx \quad (\text{III-52})$$

pode ser utilizada para "separar" os pares na hamiltoniana  $a'$ , escolhendo-se  $a$  real para  $J_4 > 0$  e  $a = ib$ ,  $b$  - real para  $J_4 < 0$ . Então a função de partição

$$Z_N^{(a)} \equiv \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left\{ K_2 \sum \sigma_i \sigma_j + \frac{K_4}{N} \left( \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \right)^2 + \beta h \sum \sigma_i \right\} \quad (\text{III-53})$$

fica, após a integração pelo método do ponto de sela

$$Z_N^{(a)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} i \left( \frac{\pm 2K_4}{L''(\bar{x})} \right)^{1/2} e^{NL(\bar{x})}, \quad (J_4 \geq 0) \quad (\text{III-54})$$

com as definições

$$K_i \equiv \beta J_i \quad (\text{III-55})$$

$$L(x) \equiv \pm K_4 x^2 + \gamma_I(K(x)) \quad (\text{III-56})$$

$$K(x) = K_2 + 2 \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix} K_4 x \quad (\text{III-57})$$

e a seguinte equação para o ponto de sela

$$\bar{x} = \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \psi_I(K(\bar{x})). \quad (\text{III-58})$$

A função  $\psi_I(K(x))$  é proporcional à energia livre de Gibbs do modelo de Ising na presença de um campo e é definida por

$$Z_{\text{Ising}}(K) = e^{N \psi_{\text{Ising}}(K)} \quad (\text{III-59})$$

onde  $Z_{\text{Ising}}(K)$  é a função de partição do modelo de Ising com constante de troca  $K = \beta J$ .

### 2.3 A ordem da transição

A ordem da transição do modelo pode ser discutida a partir da condição de ponto de sela (III-58) que reescremos, utilizando (III-57), da seguinte maneira

$$\frac{1}{2g} \left( \frac{\bar{K}}{K_2} - 1 \right) = \psi_I'(K) \quad (\text{III-60})$$

onde definimos  $\bar{K} = K(\bar{x})$  e

$$g \equiv \frac{K_4}{K_2}.$$

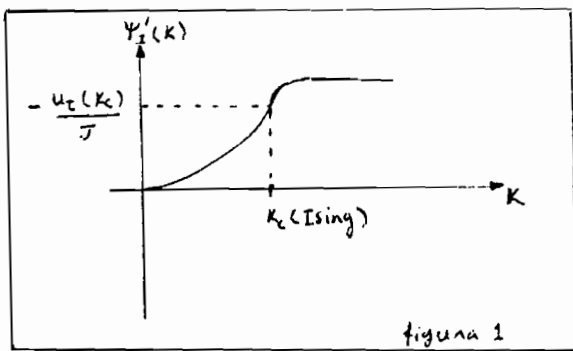
Vamos utilizar a solução exata do modelo de Ising numa rede quadrada para analisar graficamente essa equação. É preciso notar que (i) a função  $\psi_I'(K)$  é proporcional à energia interna por spin do modelo de Ising a campo nulo com constante de acoplamento  $K$ , pois

$$-\frac{u_E}{J} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial K} \{ \ln Z_I(K) \} = \psi_I'(K) \tag{III-61}$$

e (ii) a magnetização do sistema é dada pela mesma função que descreve a magnetização do modelo de Ising  $m_I(K=BJ)$ , com o argumento  $BJ$  substituído pela solução  $\bar{K}$  da equação (III-60), isto é,

$$m \equiv - \frac{\partial}{\partial h} \left[ - \frac{1}{\beta N} \ln Z_N^h \right]_{h=0} = m_I(\bar{K}) \tag{III-62}$$

onde  $\bar{K}$  é uma função complicada da temperatura. Destes dois argumentos segue que a temperatura crítica do modelo, se existente, corresponde ao ponto de inflexão na curva de  $\psi_I'(K)$  da figura 1,



uma vez que é neste ponto que o calor específico do modelo de Ising, dado por

$$C_I = -K^2 \frac{\partial (u_E/J)}{\partial K} = K^2 \psi_I''(K) \tag{III-63}$$

diverge. Então,

$$m(K < K_c) = 0 \quad \text{e} \quad m(K > K_c) > 0. \tag{III-64}$$

Vamos agora analisar graficamente a solução para  $\bar{K}$  da equação (III-60). Para completeza, apresentamos a solução de Oitmaa e Barber para o caso  $K_4 > 0$ .

$$\underline{K_4 > 0}$$

Como mostraram Oitmaa e Barber, há três soluções na região intermediária de temperaturas, como ilustra a figura 2. Das três soluções, apenas uma maximiza a

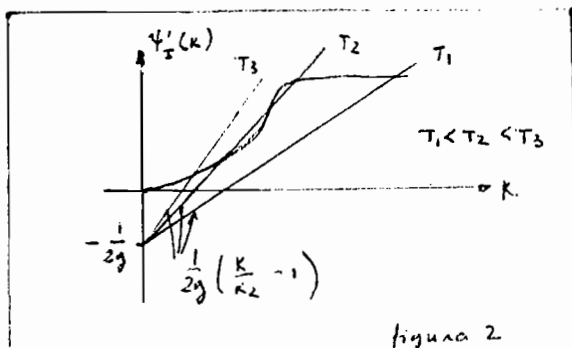


figura 2

função  $L(K(x))$  (eq.III-56). É fácil perceber que há uma descontinuidade na solução para  $\bar{K}$ , e portanto uma descontinuidade na magnetização, definida pela equação (III-62) e condição (III-64). Isso

significa que a transição é, nesse caso, de primeira ordem.

$\underline{K}_4 < 0$

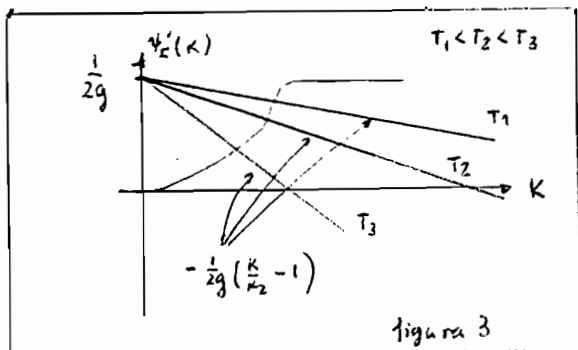


figura 3

A solução gráfica da figura 3 mostra que nesse caso só há uma solução, a qualquer temperatura. Não há descontinuidade na solução para  $\bar{K}$  e a transição é de segunda ordem.

Observe-se, porém, como ilustra a figura 4, que não há transição para  $g \equiv \frac{J_4}{J_2}$  suficientemente grande ( $\frac{1}{2g} \leq u_I(K_c)$ ), pois as soluções para  $\bar{K}$

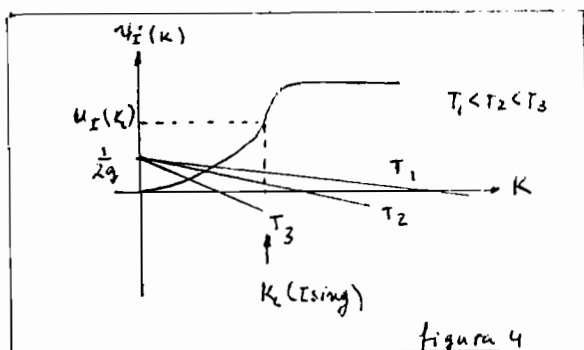


figura 4

limitam-se à região  $K < K_c$  e portanto a magnetização  $m = m_I(K)$  será nula a qualquer temperatura. Pode-se verificar este fato também a partir da equação (III-60).

Uma vez que a temperatura crítica do modelo é definida pelo cruzamento entre a reta e o ponto singular da curva  $\psi_I(K)$ , podemos es

crever

$$\frac{1}{2g} \left( 1 - \frac{K_c(\text{Ising})}{\beta J_L} \right) = \gamma'_I(K_c(\text{Ising}))$$

ou

$$k_B T_c = \frac{J_L}{K_c(\text{Ising})} \left\{ 1 - 2g \gamma'_I(K_c(\text{Ising})) \right\}.$$

Obviamente a temperatura crítica do modelo torna-se nula para  $g \geq \frac{1}{2\psi'_I(K_c(\text{Ising}))}$ .

#### 2.4 Renormalização de Fisher

O modelo de Baker-Essam com comprimento das linhas fixo apresenta renormalização de Fisher<sup>(16)</sup>, isto é, os expoentes críticos do modelo são diferentes dos expoentes críticos do modelo de Ising. Por exemplo, o calor específico apresenta um expoente  $\alpha = -\alpha_I/(1-\alpha_I)$ , onde  $\alpha_I$  é o expoente crítico para o calor específico do modelo de Ising. Vamos verificar que o mesmo ocorre para o modelo de spins descritos pela hamiltoniana  $a$  (eq. III-50)

O calor específico por spin, pode ser escrito em função do calor específico do modelo de Ising (eq. III-63). Observamos que a energia livre por íon do modelo é, de (III-54),

$$f = -\frac{1}{\beta} L(\bar{K}(\bar{x})), \quad (\text{III-65})$$

com  $L(\bar{K})$  dado por (III-56). Utilizando ainda a equação (III-57), obtemos para o calor específico por spin



$$c = \frac{\partial u}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial^2(\beta h)}{\partial \beta} = \frac{\bar{K}^2 \psi''_I(\bar{K})}{1 - 2K_4 \psi''_I(\bar{K})}, \quad (\text{III-66})$$

Escrevendo  $\psi''_I(\bar{K}) \sim (\Delta \bar{K})^{-\alpha_I}$ ,

com  $\Delta \bar{K} \equiv \bar{K} - \bar{K}_C$ , obtemos

$$c \sim \frac{1}{2K_4} + \frac{1}{4K_4^2} (\Delta \bar{K})^{\alpha_I}. \quad (\text{III-67})$$

Lembrando, de (III-57) e (III-58), que

$$\bar{K} = k_2 + 2K_4 \psi'_I(\bar{K}), \quad (\text{III-68})$$

obtemos

$$\Delta \bar{K} \sim (\Delta \beta)^{\frac{1}{1-\alpha_I}}. \quad (\text{III-69})$$

Substituindo em (III-67), temos

$$c \sim (\Delta \bar{K})^{-\left[-\frac{\alpha_I}{1-\alpha_I}\right]} \quad (\text{III-70})$$

isto é, obtemos para o calor específico o expoente crítico renormalizado

$$\alpha = -\frac{\alpha_I}{1-\alpha_I}. \quad (\text{III-71})$$

2.5 Solução exata em  $d = 2$  para  $\mathcal{H}_b$ 

Vamos reescrever a hamiltoniana  $\mathcal{H}_b$  como uma soma sobre linhas  $l$ :

$$\mathcal{H}_b = \sum_l \left\{ -J_2 \sum_{i=1}^N \sigma_i^l \sigma_{i-1}^l + |J_4'|/N \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i^l \sigma_{i-1}^l \right)^2 \right\}. \quad (\text{III-72})$$

Podemos então aplicar a transformação gaussiana dada por (III-52) para cada linha de spin, para obtermos a seguinte função de partição:

$$\mathcal{Z}_{N,d}^{(b)} = (N|K_4'|/\pi)^{dN^{d-1}} \sum_{\{z\}} \prod_l \int dz_l \exp \left\{ -N|K_4'|z_l^2 - K_l \sum_{i=1}^N \sigma_i^l \sigma_{i-1}^l \right\}, \quad (\text{III-73})$$

com

$$K_l = K_2 + 2iz_l |K_4'|. \quad (\text{III-74})$$

Nesse caso, o método de ponto de sela deve ser aplicado à integral múltipla da função de  $dN^{d-1}$  variáveis

$$f(z_1, z_2, \dots, z_{dN^{d-1}}) = \sum_{\{z\}}^{dN^{d-1}} \left\{ -N|K_4'|z_l^2 + N\Upsilon(K_1, K_2, \dots) \right\} \quad (\text{III-75})$$

onde

$$\Upsilon(K_1, K_2, \dots) \equiv \frac{1}{N} \ln \left\{ \sum_{\{z\}} \exp \left[ \sum_l K_l \sum_{i=1}^N \sigma_i^l \sigma_{i-1}^l \right] \right\}.$$

Teremos  $dN^{d-1}$  equações para o ponto de sela, definido por  $(\bar{z}_1, \bar{z}_2, \dots)$ ,

$$-2K_4' \bar{z} + \frac{\partial \psi}{\partial \bar{z}} = 0. \quad (\text{III-76})$$

Utilizando a relação (III-74) verificamos que

$$\bar{z} = \frac{\partial \psi}{\partial K_4} = \langle \sigma_i^z \sigma_{i-1}^z \rangle_{\text{Ising}(\bar{K}_1, \bar{K}_2, \dots)}, \quad (\text{III-77})$$

onde  $\langle \sigma_i^z \sigma_{i-1}^z \rangle_{\text{Ising}(\bar{K}_1, \bar{K}_2, \dots)}$  é a correlação de spins do modelo de Ising com constantes de acoplamento  $(\bar{K}_1, \bar{K}_2, \dots)$ . Como as soluções são idênticas, a função de partição fica

$$Z_N \sim \exp \left\{ dN^d \left[ |K_4'| \bar{z}^2 + \psi(\bar{K}) \right] \right\}, \quad (\text{III-78})$$

com

$$\frac{1}{2g} \left( 1 - \frac{\bar{K}}{K_2} \right) = \psi'_{\pm}(\bar{K}), \quad g \equiv \frac{|K_4'|}{K_2}, \quad (\text{III-79})$$

como no caso da hamiltoniana  $\mathcal{H}_a(K_4 < 0)$  (vide equações III-54, III-56 e III-60). Podemos, a partir deste resultado, atribuir ao modelo de hamiltoniana  $\mathcal{H}_b$  o mesmo comportamento termodinâmico do modelo da hamiltoniana  $\mathcal{H}_a(K_4 < 0)$ , discutidos nas duas seções anteriores: transição de segunda ordem e renormalização dos expoentes críticos.

### III.3 Soluções de grupo de renormalização

Vamos considerar um tratamento de grupo de renormalização no espaço dos momentos<sup>(21)</sup> para as hamiltonianas modelo  $\mathcal{H}_a$  e  $\mathcal{H}_b$  da seção III.2.

A idéia do grupo de renormalização consiste basicamente em integrar, na função de partição, os graus de liberdade associados com flutuações de "curtas" distâncias, dentro de um bloco de volume  $v$ , digamos, e assim obter uma hamiltoniana efetiva que incorpora menos graus de liberdade. Na criticalidade, o comprimento de correlação entre spins é infinito e a hamiltoniana efetiva é a mesma, qualquer que seja o tamanho do bloco de spins. Assim, integrando o bloco de spins obtemos a mesma interação e a mesma hamiltoniana efetiva. Isso corresponde a um ponto fixo das relações de recorrência que definem a transformação (bloco de volume  $v$ )  $\rightarrow$  (bloco de volume  $2v$ ). Assim, o cálculo de grupo de renormalização consiste em obter as relações de recorrência, a partir da renormalização da hamiltoniana na função de partição e estudar os pontos fixos da transformação.

O grupo de renormalização foi desenvolvido para estudar o comportamento crítico e as transições de segunda ordem. Numa transição de primeira ordem, o comprimento de correlação não é infinito e portanto o argumento do grupo de renormalização não se aplica, isto é, não deve haver ponto fixo na transição. Entretanto, pode-se identificar uma transição de primeira ordem<sup>(25)</sup> através de uma situação "runaway" no diagrama de fluxos no espaço de parâmetros que representa graficamente as relações de recorrência.

Neste trabalho, (i) verificamos que as transformações preparatórias para a aplicação do grupo de renormalização no espaço de momentos da hamiltoniana  $\mathcal{H}_a$  conduzem a uma hamiltonia

na efetiva já estudada por Rudnick et al<sup>(9)</sup> e por Sak<sup>(12)</sup> e Bruno e Sak<sup>(12)</sup>. No primeiro trabalho, os autores consideraram um modelo de Ising com uma constante de acoplamento dependente de um parâmetro  $\lambda$ , com o vínculo  $N\lambda / \langle \sum_{\vec{q}} s(\vec{q}) s(-\vec{q}) \rangle = \theta$ , sem justificativa para a existência do vínculo. No caso dos dois outros trabalhos, os autores consideraram um modelo de Ising vinculado a um meio elástico isotrópico, com superfícies livres.

(ii) Obtemos uma hamiltoniana efetiva para o caso  $b$  diferente de hamiltonianas efetivas conhecidas por nós. Obtemos as relações de recorrência para esta hamiltoniana que verificamos ser as mesmas do caso  $\mathcal{H}_a$ . Assim, as duas hamiltonianas modelo conduzem ao mesmo comportamento crítico.

### 3.1 Estudo de $\mathcal{H}_a$

Vamos reescrever a hamiltoniana  $\mathcal{H}_a$  (eq. III-50) na forma

$$\mathcal{H}_a = -\frac{J_2}{2} \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{\delta}} S_{\vec{R}} S_{\vec{R}+\vec{\delta}} - \frac{J_4}{N} \left( \sum_{\vec{R}} \sum_{\vec{\delta}} S_{\vec{R}} S_{\vec{R}+\vec{\delta}} \right)^2, \quad (\text{III-79})$$

onde  $\vec{\delta}$  indica a posição relativa de spins vizinhos. Segundo o esquema de grupo de renormalização de Wilson<sup>(21)</sup>, os spins são considerados como variáveis contínuas e a soma sobre configurações, na função de partição, substituída por uma integral, atribuindo-se uma função distribuição para os spins  $p(S)$  dada por

$$p(S) = \exp \left( -\frac{\tilde{r}}{2} S^2 - \tilde{u} S^4 \right), \quad (\text{III-80})$$

com  $\tilde{u}$  e  $\tilde{r}$  arbitrários. (No limite  $\tilde{u} \rightarrow \infty$  e  $\tilde{r} \rightarrow -\infty$ , com  $\tilde{r} = -4\tilde{u}$ , reobtem-se os spins de Ising,  $S = \pm 1$ . No entanto,

próximo do ponto fixo supomos que a transformação de grupo de re-normalização conduz a hamiltoniana crítica a valores pequenos de  $\bar{u}$  (21).

Alternativamente, podemos fazer a transformação das variáveis de spin para variáveis contínuas utilizando sucessivamente a transformação gaussiana (III-52) e a sua generalização (26),

$$\exp \left( \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_i A_{ij} v_j \right) = (2\pi)^{-N/2} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i x_i^2 - \sum_{i,j} x_i (A^{1/2})_{ij} v_j \right\} \prod_{j=1}^N dx_j \quad (III-81)$$

Obtemos, para a função de partição

$$\mathcal{Z} = (2\pi)^{-(N+1)/2} \left[ \prod_{j=1}^N \int dx_j \right] \int dy \cdot \exp \left\{ -y^2 - \frac{1}{2} \sum_i x_i^2 - \sum_{i,j} x_i (A^{1/2})_{ij} v_j \right\} \quad (III-82)$$

com

$$A_{ij} \equiv (K_2 + 2y K_4)^{1/2} \sum_{\delta} \delta_{i,j+\delta}, \quad K_2 \equiv \beta J_2, \quad K_4 \equiv \frac{\beta J_4}{N} \quad (III-83)$$

Fazendo a soma sobre configurações, obtemos

$$\mathcal{Z} = (2\pi)^{-(N+1)/2} \left[ \prod_{j=1}^N \int dx_j \right] dy \cdot \exp \left[ -f(y, \{x_i\}) \right] \quad (III-84)$$

$$= \prod_{j=1}^N \int \frac{dx_j}{(2\pi)^{1/2}} \int \frac{dy_j}{(2\pi)^{1/2}} \exp \left\{ -y^2 - \frac{1}{2} \sum_j x_j^2 + \sum_j \ln [2 \cosh z_j] \right\},$$

com

$$z_j \equiv \sum_i x_i (A^{1/2})_{ij} \quad (III-85)$$

Vamos expandir o integrando em torno do ponto de sela, que é dado pela solução das equações

$$x_i = \sum_j A_{ij}^{1/2}(y) \tanh [\beta_j(y)] \quad (\text{III-86})$$

$$y = \frac{K_4^{1/2}}{2K(y)} \sum_{j,l} A_{jl}^{1/2}(y) x_l \tanh [\beta_j(y)]. \quad (\text{III-87})$$

Expandimos o funcional definido pela eq. (III-84) em torno da solução paramagnética  $x_i = 0$ ,  $y = 0$  para obter

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(y, \{x\}) = & -y^2 - \frac{1}{2} \sum_i x_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{j,k} A_{jk}(y=0) x_j x_k + \\ & + \frac{K_4^{1/2}}{K_2} y \sum_{j,k} A_{jk}(y=0) x_j x_k \\ & - \frac{1}{12} \sum_{j,k,l,m} \left[ \sum_i A_{ji}^{1/2}(0) A_{ki}^{1/2}(0) A_{li}^{1/2}(0) A_{mi}^{1/2}(0) \right] x_j x_k x_l x_m + \dots \end{aligned} \quad (\text{III-88})$$

Integramos em  $y$ , para obter, finalmente

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} \sim \prod_{j=1}^N \int dx_j \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i x_i^2 + \frac{K_2}{2} \sum_{\langle ij \rangle} x_j x_k + \right. \\ \left. + \frac{K_4}{4} \left( \sum_{\langle ij \rangle} x_i x_j \right)^2 \right. \\ \left. - \frac{1}{12} \sum_{j,k,l,m} \left[ \sum_i A_{ji}^{1/2}(0) A_{ki}^{1/2}(0) A_{li}^{1/2}(0) A_{mi}^{1/2}(0) \right] x_j x_k x_l x_m + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (\text{III-89})$$

A transformação de grupo de renormalização será aplicada no espaço  $\vec{q}$ , portanto tomamos as transformações de Fourier dos  $x_i$ , de

finidas por:

$$x = N^{-1} \sum_{\vec{q}} x_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \quad (\text{III-90})$$

e o limite de  $\vec{q}$  contínuo

$$\sum_{\vec{q}} \rightarrow \int \frac{d^d q}{(2\pi/L)^d} = (2\pi)^{-d} V \int d^d q \equiv V \int_{\vec{q}} \quad (\text{III-91})$$

para obter

$$\begin{aligned} Z \sim \int \prod_{\vec{q}} x_{\vec{q}} \exp \left\{ - \frac{a^d}{2} \int_{\vec{q}} [1 - A(\vec{q})] x_{\vec{q}} x_{-\vec{q}} + \right. \\ \left. + \frac{a^{2d} K_4}{4} \left[ \int_{\vec{q}} A(\vec{q}) x_{\vec{q}} x_{-\vec{q}} \right]^2 - \right. \\ \left. - \frac{a^{3d}}{12} \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \int_{\vec{q}''} A^{1/2}(\vec{q}) A^{1/2}(\vec{q}') A^{1/2}(\vec{q}'') A^{1/2}(-\vec{q} - \vec{q}' - \vec{q}'') \right. \\ \left. \cdot x_{\vec{q}} x_{\vec{q}'} x_{\vec{q}''} x_{-\vec{q} - \vec{q}' - \vec{q}''} + \dots \right\} \quad (\text{III-92}) \end{aligned}$$

com

$$A(\vec{q}) \equiv K_2 \sum_{\vec{\delta}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\delta}} \quad (\text{III-93})$$

Na criticalidade, a contribuição fundamental vem dos modos com comprimento de onda grandes, e podemos expandir  $A(\vec{q})$  em  $\vec{q}$ , tomando apenas as contribuições em ordem mais baixa. Fazendo esta expansão para uma rede hiper-cúbica e renormalizando os spins de



forma que o coeficiente de  $q^2$  no primeiro termo seja a unidade, obtemos, em termos das variáveis  $\sigma_{\vec{q}} \equiv (K_2 a^{2+d})^{1/2} x_{\vec{q}}$ ,

$$Z \sim (K_2 a^{2+d})^{-N/2} \int [d\sigma] e^{\bar{H}_a(\sigma)} \quad (\text{III-94})$$

com

$$\begin{aligned} \bar{H}_a(\sigma) \equiv & -\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} (\kappa + q^2 + o(q^4)) \sigma_{\vec{q}} \sigma_{-\vec{q}} + \\ & + \frac{t}{N} \left[ \int_{\vec{q}} (1 + o(q^2)) \sigma_{\vec{q}} \sigma_{-\vec{q}} \right]^2 - \\ & - u \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \int_{\vec{q}''} (1 + o(q^2)) \sigma_{\vec{q}} \sigma_{\vec{q}'} \sigma_{\vec{q}''} \sigma_{-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''} + \\ & + o(\sigma^6) \end{aligned}$$

(III-95)

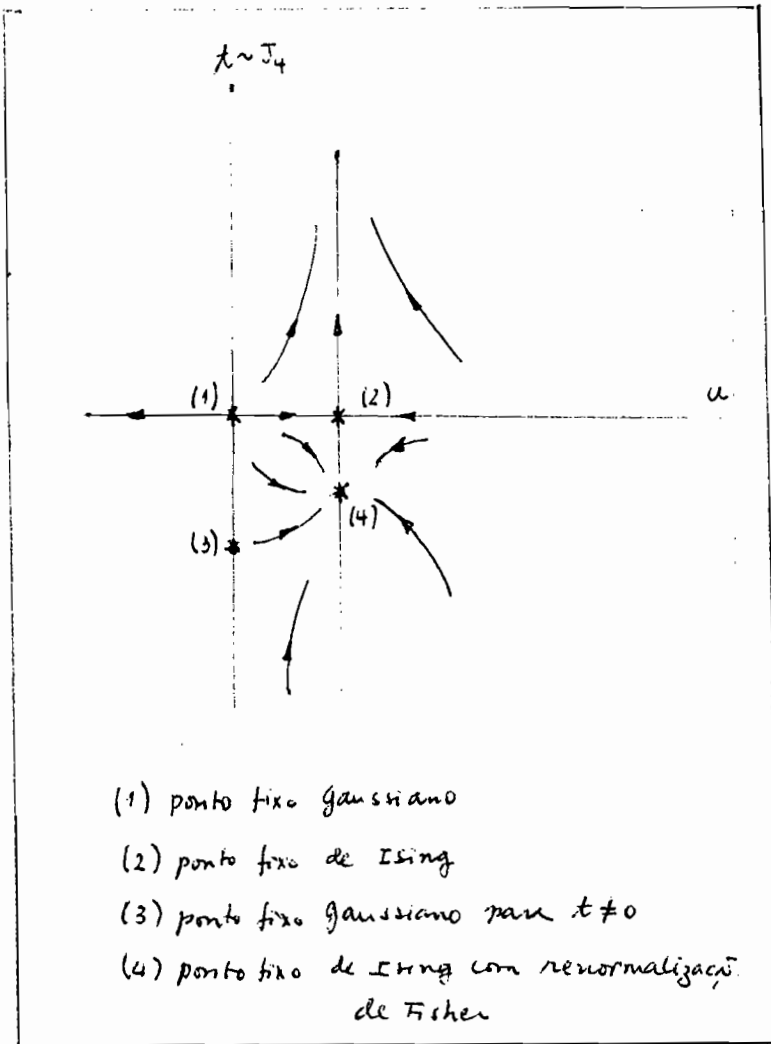
com

$$\kappa \equiv \frac{1-2dK_2}{K_2 a^{2+d}}, \quad t \equiv d^2 a^{-4} N K_4, \quad u \equiv \frac{d^2}{3} a^{d-4}. \quad (\text{III-96})$$

Como mencionamos na introdução a essa seção, a hamiltoniana  $\bar{H}_a$  é a mesma considerada por alguns autores<sup>(9,12)</sup>. As relações de recorrência e os pontos fixos são portanto os mesmos e não vamos reobtê-los aqui. Vamos utilizar seus resultados para analisar a ordem da transição nos modelos com hamiltoniana  $H_a$ .

### 3.2 Comportamento crítico dos modelos descritos por $H_a$

O diagrama de fluxos no espaço  $t - u$  no plano



$r = r_{\text{crítico}}$  ilustra perfeitamente o comportamento crítico dos modelos descritos pela hamiltoniana  $\mathcal{H}_a$ . Um coeficiente positivo no termo de acoplamento de pares de spin ( $t > 0$ ) leva a uma situação de "runaway", que pode ser associada a uma transição de primeira ordem. Um coeficiente negativo ( $t < 0$ ) leva a um ponto fixo, portanto uma transição de segunda ordem, com expoentes críticos que apresentam a renor

malização de Fisher. Não há possibilidade de cruzamento entre as regiões  $t > 0$  e  $t < 0$ .

### 3.3 Tratamento da hamiltoniana $\mathcal{H}_b$

Neste caso, utilizaremos a função peso de Wilson, definida por (III-80), para poder tratar as variáveis de spin como variáveis contínuas. Definimos  $\bar{H}_b$  por

$$\mathcal{Z} \equiv \int_{\{s\}} \mathcal{T} \mathcal{N} e^{-\beta \mathcal{H}_b} \sim \int [d\sigma] e^{-\bar{H}_b(\sigma)} \tag{III-97}$$

e utilizando as transformações III-90, III-91 e o "reescalonamen

to" dos spins  $(S_{\vec{q}} \rightarrow (K_2 a^{d+2})^{1/2} \sigma_{\vec{q}})$ , obtemos

$$\begin{aligned} \bar{H}_b = & -\frac{i}{2} \int_{\vec{q}} [\kappa + q^2 + o(q^4)] \sigma_{\vec{q}} \sigma_{-\vec{q}} \\ & + \frac{\kappa_0}{N^{1/d}} \int_{\vec{q}_1} \int_{\vec{q}_3} \int_{q_{2y}} \int_{q_{2z}} \sigma_{\vec{q}_1} \sigma_{(-q_{1x}, q_{2y}, q_{2z})} \sigma_{\vec{q}_3} \sigma_{(-q_{3x}, -q_{3y} - q_{2y} - q_{2z}, -q_{3z} - q_{2z} - q_{2z}, \dots)} \\ & - u \int_{\vec{q}_1} \int_{\vec{q}_2} \int_{\vec{q}_3} \sigma_{\vec{q}_1} \sigma_{\vec{q}_2} \sigma_{\vec{q}_3} \sigma_{-\vec{q}_1 - \vec{q}_2 - \vec{q}_3} \end{aligned} \quad (\text{III-98})$$

com

$$\kappa \equiv (\tilde{r} - 2dK_2) / a^2 K_2,$$

$$\kappa_0 \equiv J_4' / J_2^2 \quad (\text{III-99})$$

e

$$u \equiv \frac{\tilde{u} a^{d-4}}{K_2^2}.$$

Agora podemos iniciar a transformação de grupo de renormalização. No espaço de momentos, essa operação consiste em obter hamiltonianas efetivas integrando-se os momentos "grandes". Mais precisamente, a função de partição (III-97) é fatorada em

$$\mathcal{Z} = C \int^< [d\sigma] \int^> [d\sigma] e^{\bar{H}_b(\sigma)}, \quad (\text{III-100})$$

onde a segunda integral se refere às variáveis de spin  $\sigma_{\vec{q}}$  cujos vetores de onda  $\vec{q}$  estão na camada externa da zona de Brillouin (isto é,  $\frac{1}{b} < |\vec{q}| < 1$ , com  $b < 1$ ). (Restringimos a integração a uma zona de Brillouin de raio unitário, o que não deve influir no comportamento crítico, pois este depende dos valores de  $\vec{q}$  próximos à origem). Assim, definimos a hamiltoniana efetiva por

$$\exp(\bar{H}') = \int^{\gamma} [d\sigma] e^{\bar{H}} \quad (\text{III-101})$$

e

$$\bar{Z} = C \int^{\gamma} [d\sigma] e^{H'} \quad (\text{III-102})$$

Transformações sucessivas desse tipo levam ao ponto fixo, isto é,

$$\exp(\bar{H}^*) = \int^{\gamma} [d\sigma] \exp(\bar{H}^*) \quad (\text{III-103})$$

Na formulação de Wilson, supõe-se que após algumas transformações, surjam novos acoplamentos de spins, então

$$\begin{aligned} \bar{H}' = & -\frac{1}{2} \int u_2(\vec{q}) \sigma_{\vec{q}} \sigma_{-\vec{q}} - \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \int_{\vec{q}''} \int_{\vec{q}'''} u_4(\vec{q}, \dots) \sigma_{\vec{q}} \sigma_{\vec{q}'} \sigma_{\vec{q}''} \sigma_{\vec{q}'''} + \\ & + \text{termos de 6 spins} + \dots \end{aligned} \quad (\text{III-104})$$

que vamos escrever

$$\bar{H} = \bar{H}_2 + \bar{H}_4 + \bar{H}_6 + \dots + \bar{H}_{2-2} \quad (\text{III-105})$$

onde  $\bar{H}_{2-2}$  é o termo de acoplamento de pares. Na criticalidade supõe-se que  $u_4 \sim 0(\epsilon)$ ,  $t \sim 0(\epsilon)$ , onde  $\epsilon \ll 1$  e expande-se a exponencial, resultando

$$\exp \bar{H}' \sim \int^{\gamma} [d\sigma] e^{\bar{H}_2} \{ 1 + (\bar{H}_4 + \bar{H}_{2-2} + \bar{H}_6 + \dots) + \dots \} \sim$$

$$\begin{aligned}
 & \sim \exp \bar{H}_2 \left\{ \int^7 [d\sigma] e^{\bar{H}_2'} - \right. \\
 & \quad - \int_{q_1^1, \dots, q_4^1} u_4(q_1^1, \dots) \int^7 [d\sigma] \sigma_{q_1^1} \sigma_{q_2^1} \sigma_{q_3^1} \sigma_{q_4^1} e^{\bar{H}_2'} - \\
 & \quad \left. - \int_{q_1^2, q_2^2} \frac{x}{N^{1/4}} (q_1^2, \dots) \int^7 [d\sigma] \sigma_{q_1^2} \sigma_{q_2^2} \sigma_{q_3^2} \sigma_{q_4^2} e^{\bar{H}_2'} + \dots \right\}. \tag{III-106}
 \end{aligned}$$

As integrais nos produtos de spin podem ser efetuadas, utilizando-se a propriedade da hamiltoniana quadrática

$$\int^7 [d\sigma] e^{\bar{H}_2'} \sigma_{q_1^1} \dots \sigma_{q_k^1} = Z^7(0) \sum_{\mu_1, m} \frac{1}{u_2(q_1^1)} \dots \frac{1}{u_2(q_{k-1}^1)} \delta(q_1^1 + q_2^1) \dots \delta(q_{k-1}^1 + q_k^1), \tag{III-107}$$

onde

$$Z^7(0) \equiv \int^7 [d\sigma] e^{\bar{H}_2'} \tag{III-108}$$

Reescrevemos (III-106) na forma

$$\begin{aligned}
 e^{\bar{H}'} = e^{\bar{H}_2'} Z^7(0) \left\{ 1 + I_1(u_4) + I_2(t_0) + I_3(u_6) \right. \\
 \left. + I_4(u_4^2) + I_5(u_4 t_0) + I_6(t_0^2) + \dots \right\}. \tag{III-109}
 \end{aligned}$$

A relação (III-107) mostra que integrais de quatro spins vão gerar integrais de dois spins e novas integrais de quatro spins, e assim analogamente para cada termo da expressão acima. Cada integral contribui com um número muito grande de termos, por isso a contagem é feita diagramaticamente. A contagem de diagramas está apresentada no apêndice, mas vale a pena mencionar o que ocorre

com os termos do tipo  $t_0/N^{1/d}$ .

Vamos reescrever o termo de coeficiente  $t_0/N^{1/d}$  em (III-98) da seguinte maneira:

$$\frac{t_0}{N^{1/d}} \int_{q_1}^{q_1} \int_{q_4}^{q_4} \delta(q_{1x} + q_{2x}) \delta(q_{3x} + q_{4x}) \delta(q_{1y} + q_{2y} + q_{3y} + q_{4y}) \delta(q_{1z} + q_{2z} + q_{3z} + q_{4z}) \times$$

$$\dots \sigma_{q_1}^{\rightarrow} \sigma_{q_2}^{\rightarrow} \sigma_{q_3}^{\rightarrow} \sigma_{q_4}^{\rightarrow}$$

(III-110)

Observe que há dois deltas para as componentes  $q_x$ . Ao aplicar mos a propriedade (III-107) para resolver a integral, teremos algumas soluções em que "sobra" um  $\delta(q_x)$  o qual contribui, por sua vez, com um fator  $N^{1/d}$ . Assim sendo, essa integral terá

- duas contribuições do tipo  $t_0 \sigma_{\vec{q}}^{\rightarrow} \sigma_{-\vec{q}}^{\rightarrow}$
- e quatro contribuições do tipo  $\frac{t_0}{N^{1/d}} \sigma_{\vec{q}}^{\rightarrow} \sigma_{-\vec{q}}^{\rightarrow}$ .

Devido ao fator  $N^{-1/d}$ , somente as primeiras contribuições geram "novas" integrais de dois spins. Consideradas as outras integrais, verificamos que as integrais de coeficiente em  $t_0$  geram as seguintes contribuições, na representação diagramática (v. Apêndice D):

$$\text{termo r: } 2t_0 \alpha + 16 \frac{t_0^2}{2} \alpha\alpha + 48 t_0 u_2 \alpha\alpha$$

termo u: não há contribuição (III-111)

$$\text{termo } t_0: 8 \frac{t_0^2}{2} \alpha\alpha + 24 t_0 u_2 \alpha\alpha$$

Utilizando este resultado e os resultados para as outras integrais do apêndice, obtemos as seguintes relações de recorrência

$$r' \approx b^2 (r + 12 A_1 u - 4 A_1 t_0)$$

$$u' \approx b^6 (u - 36 A_2 u^2)$$

$$t_0' \approx b^6 (t_0 - 24 A_2 t_0 u + 4 A_2 t_0^2)$$

(III-112)

com

$$A_1 \equiv \int_{q^{-1}} [u_2(q^{-1})] J^{-1}$$

$$A_2 \equiv \int_{q^{-1}} [u_2(q^{-1})] J^{-2}$$

(III-113)

Estas relações de recorrência são exatamente as mesmas apresentadas pela hamiltoniana modelo  $\mathcal{H}_a$ , substituindo-se  $t$  por  $t_0$ . O diagrama de pontos fixos e fluxos será o mesmo e portanto a discussão que fizemos na seção 3.2 se aplica a este caso: para  $t_0$  negativo a transição é de segunda ordem com expoentes renormalizados.

### III.4 Discussão das soluções exata e de grupo de renormalização

As soluções exata e de grupo de renormalização a apresentam os mesmos resultados, com relação ao comportamento magnético das hamiltonianas efetivas  $\mathcal{H}_a$  e  $\mathcal{H}_b$ , os quais podem ser resumidos da seguinte maneira:

- um acoplamento entre pares de spins  $-J_4 \left( \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j \right)^2$  de coeficiente  $J_4 > 0$  induz uma transição magnética de primeira ordem. (esse resultado já havia sido obtido através da solução exata, por Oitmaa e Barbar<sup>(10)</sup>, e através da solução de grupo de renormalização por Rudnick et al<sup>(9)</sup> - nossa contribuição, nesse caso, limitou-se à obtenção da hamiltoniana reduzida através da transformação gaussiana<sup>(26)</sup>, que, no entanto, não é diferente da hamiltoniana efetiva que se obtém introduzindo-se arbitrariamente a função peso de Wilson<sup>(21)</sup>);
- um acoplamento entre pares de spins de coeficiente  $J_4 > 0$ , seja em toda a rede (A), seja ao longo das linhas (B), induz uma transição de segunda ordem com os expoentes de Ising renormalizados (resultado verificado por nós no caso da solução exata. No caso do grupo de renormalização, estendemos o resultados conhecido para (A) e ao caso (B)).

Podemos utilizar estes resultados para analisar o comportamento crítico das hamiltonianas efetivas discutidas no capítulo II. Antes disso, porém, é necessário ressaltar que o comportamento crítico das hamiltonianas efetivas de spin  $\mathcal{H}_a$  e  $\mathcal{H}_b$ , com acoplamentos constantes, corresponde ao comportamento crítico dos modelos que têm a mesma hamiltoniana nos ensembles das pressões. Quanto aos ensembles canônicos, essa correspondência só existe no caso em que a transição no ensemble de campos é de segunda ordem. É fácil verificar, no caso da solução exata, para hamil



tonianas do tipo

$$\mathcal{H}(V, \{\sigma\}) = \frac{NK}{2} (\Delta V)^2 - J(\sigma) \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j - \frac{J_4}{N} \left( \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j \right)^2, \quad (\text{III-114})$$

que

- a) a compressibilidade pode tornar-se negativa para um acoplamento elástico  $K$  suficientemente pequeno com relação à constante de acoplamento  $|J_4|/J_1^2$ . Neste caso, parte das soluções gráficas discutidas para  $J_4 < 0$  (seção 2.3) tornam-se instáveis termodinamicamente, e fica-se limitado a soluções a esquerda e a direita do gráfico da figura 3, correspondendo, respectivamente, a  $m(T,0) = 0$  e  $m(T,0) > 0$ , isto é, obtém-se uma descontinuidade da magnetização na transição (vale lembrar que neste caso  $K = K_0 - K_1 \Delta V$ , e a descontinuidade em  $K$  corresponde a uma descontinuidade no volume);
- b) se a compressibilidade é sempre positiva, as flutuações de volume não modificam a solução encontrada.

Levando em conta estas considerações, podemos concluir que:

- o modelo de Baker-Essam<sup>(5)</sup> apresenta transição de segunda ordem com expoentes de Ising renormalizados no ensemble das densidades e expoentes ideais no ensemble de campos. Nos termos da hamiltonianas (III-114), a constante elástica  $K$ , associada às flutuações de volume, não é suficientemente pequena, com relação ao acoplamento  $J_4$ , gerado pelas flutuações (exageradas) nas posições dos íons, e portanto a compressibilidade do sistema é sempre positiva. (A renormalização dos expoentes críticos deste modelo já era conhecida. Nosso trabalho consistiu em examinar o modelo a luz das hamiltonianas efetivas e a analisar a

escolha do ensemble de campos, refutando a possibilidade de expoentes críticos renormalizados a pressão constante<sup>(15)</sup>).

- o modelo de Domb<sup>(1)</sup> tem sempre transição de primeira ordem: já conhecido, esse resultado foi obtido para a hamiltoniana efetiva de spins, no ensemble das pressões.
- o modelo de Ising no colchão de molas cúbico, sob pressão hidrostática (inclusive  $p=0$ ), apresenta sempre transição de primeira ordem. Embora ao modelo corresponda uma hamiltoniana modelo com acoplamento  $J_4$  positivo, no ensemble canônico, situação análoga à do modelo de Baker-Essam, a solução no ensemble das pressões determina a transição como de primeira ordem. No contexto da hamiltoniana (III-114), o acoplamento elástico é pequeno o suficiente para provocar uma compressibilidade negativa, aplicando-se a discussão que fizemos no item (a) acima.
- com relação ao tratamento de grupo de renormalização, a solução para o ensemble efetivo no ensemble canônico, tanto para o modelo de Domb, quanto para o modelo de Ising no colchão de molas, teria que levar em conta, de alguma maneira, na transformação, as flutuações de volume.

IV. MODELO COMPRESSÍVEL COM  $S = 1$

- IV.1 Modelo de Baker-Essam (comprimento das linhas variável) de  $s = 1$  - hamiltoniana efetiva p. IV-1
- IV.2 Tratamento de campo médio p. IV-2
- 2.1 Energia livre
  - 2.2 Expansão de Landau
- IV.3 Tratamento de grupo de renormalização p. IV-6
- 3.1 Transformação para variáveis de spin contínuas
  - 3.2 Resultados de grupo de renormalização e comportamento crítico

#### IV. MODELO COMPRESSÍVEL COM $S = 1$

O modelo de Baker-Essam com spins  $S > \frac{1}{2}$  apresenta uma hamiltoniana efetiva de spins com um acoplamento adicional entre spins do tipo  $-\sum_{(i,j)} \sigma_i^2 \sigma_j^2$ . Esse termo aparece na hamiltoniana efetiva na integração das variáveis elásticas locais, mas representa uma energia constante no caso de  $s = \frac{1}{2}$ . Um acoplamento desse tipo aparentemente inibe as flutuações de spin, pois favorece as configurações  $(+1,+1)$  no interior dos domínios e as configurações  $(+1,-1)$  entre domínios. Poderia, em princípio, induzir uma mudança na ordem da transição, ou um ponto tricrítico.

Neste trabalho, consideramos uma hamiltoniana de Ising com este acoplamento adicional, o que corresponde ao modelo de Baker e Essam com comprimento variável das linhas de spin. Efetuamos um estudo do comportamento crítico da hamiltoniana modelo sob os pontos de vista de campo médio e de grupo de renormalização. No caso deste modelo, o tratamento de campo médio correto indica a permanência da transição de segunda ordem. No tratamento de grupo de renormalização, a utilização da função peso de Wilson<sup>(21)</sup> indicaria a existência de um ponto tricrítico. Entretanto, uma transformação gaussiana das variáveis de spin para variáveis contínuas<sup>(26)</sup> permite estabelecer que o ponto tricrítico é inacessível a partir do espaço de parâmetros do modelo.

##### IV.1 Modelo de Baker-Essam (comprimento das linhas variável) de $S = 1$

O modelo de Baker-Essam corresponde à hamiltoniana dada pela equação (II-12). Para obter a hamiltoniana efetiva que queremos (comprimento das linhas variável), temos que:

(i) integrar as variáveis elásticas microscópicas. Podemos utilizar todos os resultados da seção II.2 (eqs. II-14 a II-19) e, da seção II.2.1, as equações (II-20 a II-30), para obter a seguinte hamiltoniana efetiva, no ensemble das linhas de comprimento fixo,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ef}(L) = & \mathcal{H}_0(L) - J_2(L) \sum_{\ell} \sum_{i=1}^N s_i^{\ell} s_{i-1}^{\ell} \\ & + \frac{J_4}{N} \sum_{\ell} \left( \sum_{i=1}^N s_i^{\ell} s_{i-1}^{\ell} \right)^2 + \frac{J_4^2}{K} \sum_{\ell} \sum_{i=1}^N (s_i^{\ell})^2 (s_{i-1}^{\ell})^2. \end{aligned} \quad (IV-1)$$

Para  $s = \frac{1}{2}$ , o último termo é uma constante. Neste caso,

$$\mathcal{H}_0(L) = \frac{dN^d}{2} (a - a_0)^2$$

e  $J_2(L)$  e  $J_4$  são dados pelas expressões (II-28) e (II-29).

(ii) integrar as flutuações de comprimento das linhas. Para isso, podemos utilizar o procedimento descrito na seção II.3.1, substituindo a  $\mathcal{H}^{ef}(L)$  da eq.(II-52) pela eq.(IV-1), para obter, no ensemble das forças,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ef}(\{s\}, \lambda) = & -J_2(\lambda) \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \frac{J_4^2}{K} \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 + \\ & + \mathcal{H}_0(\lambda), \end{aligned} \quad (IV-2)$$

com  $J_2(\lambda)$  e  $\mathcal{H}_0(\lambda)$  dados por (II-55).

## IV.2 Tratamento de campo médio

Vamos considerar o comportamento crítico da hamil

toniana

$$\mathcal{H} = -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \tilde{J}_4 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 \quad (\text{IV-3})$$

## 2.1 Energia livre

A expressão de campo médio para a energia livre de Gibbs por spin,  $g(T,h)$ , pode ser obtida a partir da desigualdade de Bogoliubov<sup>(27)</sup>

$$Ng \leq G_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \equiv \Phi \quad (\text{IV-4})$$

onde  $G_0 \equiv -k_B T \ln \left( \sum_{\{S_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_0) \right), \quad (\text{IV-5})$

$\mathcal{H}_0$  é uma hamiltoniana de tentativa e as médias  $\langle \dots \rangle_0$  são efetuadas com relação a  $\mathcal{H}_0$ . Consideramos duas hamiltonianas de tentativa distintas:

$$\mathcal{H}_0 = -\eta \sum_i S_i \quad (\text{IV-6})$$

e

$$\mathcal{H}_0 = -\eta_1 \sum_i S_i - \eta_2 \sum_i S_i^2, \quad (\text{IV-7})$$

onde  $\eta$ ,  $\eta_1$  e  $\eta_2$  são parâmetros variacionais com relação aos quais devemos minimizar  $\Phi$  para obter a energia livre de Gibbs, na aproximação de campo médio.

A primeira hamiltoniana de tentativa leva a uma energia livre que apresenta uma linha crítica que termina num pon

to tricrítico dado por

$$\frac{k_B \bar{T}}{q J_2} = \frac{4}{3} \quad e \quad p \equiv \frac{\tilde{J}_4}{J_2} = 3. \quad (\text{IV-8})$$

A segunda hamiltoniana de tentativa, com dois parâmetros variacionais, associados a  $S_i$  e  $S_i^2$ , respectivamente, é sugerida pelos cálculos de grupo de renormalização da seção seguinte. Obtemos

$$g(T, h) = -k_B \bar{T} \ln \left\{ 1 + 2 \cosh \beta [q J_2 m_1(T, h) + h] e^{\delta m_2(T, h)} \right\} + \\ + \frac{q J_2}{2} [m_1(T, h)]^2 + \frac{\delta}{2\beta} [m_2(T, h)]^2, \quad (\text{IV-9})$$

onde

$$m_1(T, h) = \frac{2 \operatorname{sech} [\beta (q J_2 m_1(T, h) + h)]}{e^{-\delta m_2(T, h)} + 2 \cosh [\beta (q J_2 m_1(T, h) + h)]} \quad (\text{IV-10})$$

e

$$m_2(T, h) = \left\{ 1 + \frac{1}{2} e^{-\delta m_2(T, h)} \operatorname{sech} [\beta (q J_2 m_1(T, h) + h)] \right\} \delta \quad (\text{IV-11})$$

com

$$\delta \equiv \beta q \tilde{J}_4.$$

A função  $m_1(T, h)$  pode ser identificada com a magnetização do modelo, através da relação termodinâmica  $m = -\frac{\partial g}{\partial h}$ .

## 2.2 Expansão de Landau

Para analisar a expansão de Landau é preciso obter a transformada de Legendre de  $g(T, h)$ ,

$$f(T, m) = \sup_h [g(T, h) + hm] \quad (\text{IV-12})$$

O comportamento crítico a campo nulo pode ser obtido a partir da expansão de  $f(T, m)$  na magnetização (o parâmetro de ordem), isto é, em  $m_1$ . É portanto necessário obter  $m_2(T, m_1)$  e  $h(T, m_1)$ , a partir de (IV-10) e (IV-11). Como não é possível fazer isso analiticamente, e estamos interessados na região  $m_1 \geq 0$ , expandimos estas equações em  $m_1$ . Desta maneira, obtemos para a energia livre de Landau, no caso da segunda hamiltoniana de tentativa,

$$A_2 = \frac{k_B T}{2} (\theta^{-1} - \beta q J_2) \quad (\text{IV-13})$$

com

$$A_4 = \frac{k_B T}{24 \theta^3} \frac{-1 + 3\theta - 2\theta^2(1-\theta)}{1 - 8\theta(1-\theta)} \quad (\text{IV-14})$$

e  $\theta$  é a solução da equação

$$\theta = 2(1-\theta) \exp(\beta q \theta) \quad (\text{IV-15})$$

Temos uma linha crítica no espaço  $T$  vs  $p$ , dada pela condição



$$\theta(p) \cdot \beta q J_2 = 1. \quad (\text{IV-16})$$

A condição para um ponto tricrítico,

$$A_4(A_2=0) = \frac{k_B T}{24} \frac{2e^p - p - \frac{1}{2}}{(e^p + \frac{1}{2})^2 (e^p + \frac{1}{2} - \frac{p}{2})} > 0 \quad (\text{IV-17})$$

não pode ser satisfeita para valores reais de  $p$ .

Assim, na solução de campo médio com a hamiltoniana de tentativa (IV-18), o sistema não tem ponto tricrítico. O mesmo resultado é obtido para a versão Curie-Weiss do modelo, como no trabalho de Tanaka e Mannari<sup>(28)</sup>. A função energia livre que obtivemos é também idêntica à obtida por Lajzerowicz e Sivar-dièr<sup>(29)</sup> em um cálculo de campo médio no esquema de Bragg-Williams.

### IV.3 Tratamento de grupo de renormalização

#### 3.1 Transformação para variáveis de spin contínuas

O tratamento de grupo de renormalização requer uma transformação dos spins para variáveis contínuas, como descrevemos na seção 3.1. Isto pode ser feito atribuindo-se arbitrariamente uma função distribuição para os spins. Entretanto, em uma transformação deste tipo, com coeficientes arbitrários no argumento da função peso, não é possível verificar quais os pontos fixos do diagrama de fluxos, na solução do grupo de renormalização, acessíveis a partir do espaço de parâmetros inicial. Como veremos mais adiante, essa análise será fundamental para determinar os possíveis comportamentos críticos da hamiltoniana (IV-3).

Alternativamente, pode-se utilizar uma transformação gaussiana, conhecida como transformação de Hubbard-Stratonovich<sup>(30)</sup>:

$$\begin{aligned} \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{ij} S_i K_{ij} S_j \right] &= \\ &= (\text{const}) \prod_{k=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{ij} x_i K_{ij}^{-1} x_j + \right. \\ &\quad \left. + \sum_i S_i x_i \right] \end{aligned} \quad (\text{IV-19})$$

Para a maioria dos sistemas de spin, entretanto,  $K_{ii} = 0$  e a transformação não é bem definida (pois  $T \sim K = 0$ , o que leva a autovalores negativos ou nulos para a matriz  $K$ ). Para  $s = \frac{1}{2}$ ,  $s_i^2 = 1$ , então podemos adicionar a  $K_{ij}$  um elemento de matriz constante arbitrário,  $C\delta_{ij}$ , o que apenas adiciona uma constante,  $CN$ , à energia total do sistema. Para  $S$  qualquer ( $S \neq \frac{1}{2}$ ), temos que recorrer a uma outra versão da fórmula gaussiana<sup>(26)</sup>,

$$\exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{ij} S_i K_{ij} S_j \right] = \quad (\text{IV-20})$$

$$= \prod_{k=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_k}{(\alpha\pi)^{1/2}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_i x_i^2 - \sum_{ij} x_i K_{ij}^{1/2} S_j \right],$$

a qual vale para qualquer matriz simétrica  $K_{ij}$ , onde  $K_{ij}^{1/2}$  satisfaz a equação

$$\sum_j K_{ij}^{1/2} K_{jk}^{1/2} = K_{ik} \quad (\text{IV-21})$$

A função de partição associada à hamiltoniana (IV-3)

é dada por

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{ij} K_{ij} s_i s_j + \frac{1}{2} \sum_{ij} L_{ij} s_i^2 s_j^2 \right\} \quad (\text{IV-22})$$

onde

$$K_{ij} \equiv \beta J_2 \quad , \quad L_{ij} \equiv \beta \tilde{J}_4$$

para primeiros vizinhos e

$$K_{ij} = L_{ij} = 0$$

nos outros casos. Utilizando a transformação (IV-20), obtemos

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \prod_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX_k}{(2\pi)^{1/2}} \frac{dY_k}{(2\pi)^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i X_i^2 - \frac{1}{2} \sum_i Y_i^2 - \sum_{ij} X_i K_{ij}^{1/2} s_j - \sum_{ij} Y_i L_{ij}^{1/2} s_j^2 \right\} \quad (\text{IV-23})$$

com

$$K_{ij}^{1/2} = \beta J_2^{1/2}$$

$$L_{ij}^{1/2} = \beta \tilde{J}_4^{1/2}.$$

(IV-24)

Notamos que as variáveis contínuas  $X_i$  e  $Y_i$  ficam associadas às variáveis  $s_i$  e  $s_i^2$ , respectivamente. Efetuando a soma sobre configurações, obtemos

$$Z = \int dX dY \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i X_i^2 - \frac{1}{2} \sum_i Y_i^2 + \sum_i \ln [1 + 2e^{-w_i} \cosh x_i] \right\} \quad (\text{IV-25})$$

onde

$$w_i \equiv \sum_j Y_j L_{ji}^{1/2}, \quad x_i \equiv \sum_j X_j K_{ji}^{1/2} \quad (\text{IV-26})$$

e

$$\int dX dY \equiv \prod_{k=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX_k}{(2\pi)^{1/2}} \frac{dY_k}{(2\pi)^{1/2}} \quad (\text{IV-27})$$

Agora expandimos o integrando de (IV-25) em torno do ponto de sela, que deve obedecer às equações

$$-X_i + \sum_j \frac{2e^{-w_j} \sinh x_j}{1 + 2e^{-w_j} \cosh x_j} K_{ij}^{1/2} = 0 \quad (\text{IV-28})$$

e

$$-Y_i - \sum_j \frac{2e^{-w_j} \cosh x_j}{1 + 2e^{-w_j} \cosh x_j} L_{ij}^{1/2} = 0 \quad (\text{IV-29})$$

As expressões (IV-28) e (IV-29) tornam-se idênticas às expressões de campo médio para a magnetização  $m_1(T, h)$  (eq. IV-10) e  $m_2(T, h) \equiv \langle \sigma_i^2 \rangle$  (eq. IV-11), se tomamos  $X_i$  e  $Y_i$  independentemente das posições ( $m_1 \rightarrow X/(q\beta J_2)^{1/2}$  e  $m_2 \rightarrow Y/(q\beta J_4)^{1/2}$ ). Poderíamos, alternativamente à desigualdade de Bogoliubov da seção 2.1, ter utilizado o funcional (IV-25) como ponto de partida para

a solução de campo médio e a expansão de Landau.

Identificamos, portanto, uma solução trivial, para magnética, dada por  $X_i = 0$  e  $Y_i = Y_0$ , onde  $Y_0$  deve obedecer à equação

$$-Y_0 = \frac{L_0^{1/2}}{1 + \frac{1}{2} e^{Y_0 L_0^{1/2}}} \quad (\text{IV-30})$$

e  $L_0^{1/2} = \sum_j L_{ij}^{1/2}$  é a transformada de Fourier de  $L_{ij}^{1/2}$  para momento zero. A expansão em torno da solução paramagnética leva à equação

$$Z = \exp(\bar{H}_0) \int \mathcal{D}X \mathcal{D}Y \exp(\bar{H}), \quad (\text{IV-31})$$

onde

$$\bar{H}_0 = -\frac{N}{2} Y_0^2 + N \ln [1 + 2 \exp(-Y_0 L_0^{1/2})] \quad (\text{IV-32})$$

e a hamiltoniana reduzida, até termos de quarta ordem em  $X_i$  e  $\delta Y_i \equiv Y_i - Y_0$ , é dada por

$$\begin{aligned} \bar{H} = & -\frac{1}{2} \sum_i X_i^2 + A_{xx} \sum_{ij} X_i K_{ij} X_j - \frac{1}{2} \sum_i \delta Y_i^2 + \\ & + A_{yy} \sum_{ij} \delta Y_i L_{ij} \delta Y_j - A_{xxy} \sum_{ij,k,l} (X_j K_{ji}^{1/2}) (\delta Y_k L_{ki}^{1/2}) (X_l K_{li}^{1/2}) + \\ & + A_{yyy} \sum_{ij,k,l} (\delta Y_e L_{je}^{1/2}) (\delta Y_k L_{ki}^{1/2}) (\delta Y_l L_{li}^{1/2}) + \\ & - A_{xxxx} \sum_{ij,k,l,m} (X_j K_{ji}^{1/2}) (X_k K_{ki}^{1/2}) (X_l K_{li}^{1/2}) (X_m K_{mi}^{1/2}) - \end{aligned}$$

$$- A_{xxxx} = \sum_{i,j,k,l,m} (x_j k_{ji}^{1/2}) (x_k k_{ki}^{1/2}) (\delta Y_e L_{ei}^{1/2}) (\delta Y_m L_{mi}^{1/2})$$

$$- A_{yyyy} = \sum_{i,j,k,l,m} (\delta Y_j L_{ji}^{1/2}) (\delta Y_k L_{ki}^{1/2}) (\delta Y_e L_{ei}^{1/2}) (\delta Y_m L_{mi}^{1/2}),$$

(IV-33)

com  $w_0 \equiv Y_0 L_0^{1/2} e$ 

$$A_{xx} = - \frac{Y_0}{2 L_0^{1/2}}, \quad A_{yy} = \frac{Y_0^2 e^{w_0}}{4 (L_0^{1/2})^2}, \quad A_{xy} = \frac{Y_0^2 e^{w_0}}{4 (L_0^{1/2})^2},$$

$$A_{yyy} = - \frac{Y_0^3 e^{w_0} (2 - e^{w_0})}{24 (L_0^{1/2})^3},$$

$$A_{xxxx} = - \frac{Y_0^3 (8 + 2e^{w_0} - e^{2w_0})}{96 (L_0^{1/2})^3},$$

$$A_{xxyy} = - \frac{Y_0^3 e^{w_0} (2 - e^{w_0})}{16 (L_0^{1/2})^3},$$

$$A_{yyyy} = \frac{Y_0^4 e^{w_0} (8e^{w_0} - 4 - e^{2w_0})}{192 (L_0^{1/2})^4}.$$

(IV-34)

Introduzindo as transformadas de Fourier d-dimensionais

$$X_{\vec{k}} \equiv \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} x_{\vec{r}}, \quad Y_{\vec{k}} \equiv \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \delta y_{\vec{r}}, \quad (\text{IV-35})$$

onde  $\vec{r}$  indica a posição do sítio na rede, obtemos

$$\begin{aligned} \bar{H} = & -\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} X_{\vec{k}} X_{-\vec{k}} + \frac{A_{xx}}{N} \sum_{\vec{k}} K(\vec{k}) X_{\vec{k}} X_{-\vec{k}} - \\ & -\frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} Y_{\vec{k}} Y_{-\vec{k}} + \frac{A_{yy}}{N} \sum_{\vec{k}} L(\vec{k}) Y_{\vec{k}} Y_{-\vec{k}} - \\ & -\frac{A_{xy}}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} K^{1/2}(\vec{k}_1) X_{\vec{k}_1} K^{1/2}(\vec{k}_2) X_{\vec{k}_2} L^{1/2}(-\vec{k}_1 - \vec{k}_2) Y_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2} + \\ & + \frac{A_{yyx}}{N^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} L^{1/2}(\vec{k}_1) Y_{\vec{k}_1} L^{1/2}(\vec{k}_2) Y_{\vec{k}_2} L^{1/2}(-\vec{k}_1 - \vec{k}_2) Y_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2} - \\ & -\frac{A_{xxx}}{N^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} K^{1/2}(\vec{k}_1) X_{\vec{k}_1} K^{1/2}(\vec{k}_2) X_{\vec{k}_2} K^{1/2}(\vec{k}_3) X_{\vec{k}_3} \cdot \\ & \cdot K^{1/2}(-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3) X_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} - \\ & -\frac{A_{yyy}}{N^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} L^{1/2}(\vec{k}_1) Y_{\vec{k}_1} L^{1/2}(\vec{k}_2) Y_{\vec{k}_2} L^{1/2}(\vec{k}_3) Y_{\vec{k}_3} \cdot \\ & \cdot L^{1/2}(-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3) Y_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 - \frac{A_{yyyy}}{N^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3} L^{1/2}(\vec{k}_1) Y_{\vec{k}_1} L^{1/2}(\vec{k}_2) Y_{\vec{k}_2} L^{1/2}(\vec{k}_3) Y_{\vec{k}_3} \cdot \\
 \cdot L^{1/2}(-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3) Y_{-\vec{k}_1 - \vec{k}_2 - \vec{k}_3} ,
 \end{aligned}
 \tag{IV-36}$$

onde

$$\begin{aligned}
 K(\vec{k}) &= \frac{2J_2}{k_B T} \sum_{i=1}^d \cos k_i a , \\
 L(\vec{k}) &= \frac{2J_4}{k_B T} \sum_{i=1}^d \cos k_i a
 \end{aligned}
 \tag{IV-37}$$

e  $a$  é o espaçamento da rede hipercúbica. A notação vetorial e de transformadas de Fourier foi suprimida na equação (IV-36), para simplificar. Como as flutuações de spin relevantes ocorrem próximo a  $k = 0$ , expandimos os coeficientes quadráticos para pequenos momentos. Obtemos então

$$1 - 2A_{xx} K(\vec{k}) = \frac{T - T_1}{T} + \frac{2A_{xx} J_2 a^2}{k_B T} k^2 + \dots
 \tag{IV-38a}$$

e

$$1 - 2A_{yy} L(\vec{k}) = \frac{T - T_2}{T} + \frac{2A_{yy} J_4 a^2}{k_B T} k^2 + \dots ,
 \tag{IV-38b}$$



onde  $T_1 \equiv \frac{4A_{xx} J_2 d}{k_B}$  e  $T_2 \equiv \frac{4A_{yy} J_4 d}{k_B}$  .

Nos coeficientes dos termos cúbicos e quártico mantemos apenas o termo em ordem mais baixa da expansão em momentos. Definindo

$$X_k \equiv a^{-d/2} \left[ \frac{k_B T}{2A_{xx} J_2 a^2} \right]^{1/2} \sigma_{1,k}$$

e

(IV-39)

$$Y_k \equiv a^{-d/2} \left[ \frac{k_B T}{2A_{yy} J_4 a^2} \right]^{1/2} \sigma_{2,k}$$

obtemos, finalmente,

$$\begin{aligned} \bar{H} = & -\frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{2} (N_1 + k^2) \sigma_{1,k} \sigma_{1,-k} - \frac{1}{V} \sum_k \frac{1}{2} (N_2 + k^2) \sigma_{2,k} \sigma_{2,-k} - \\ & - \frac{1}{V^2} \sum_{k_1, k_2} (w_1 \sigma_{1,k_1} \sigma_{1,k_2} \sigma_{2,-k_1-k_2} - w_2 \sigma_{2,k_1} \sigma_{2,k_2} \sigma_{1,-k_1-k_2}) - \\ & - \frac{1}{V^3} \sum_{k_1, k_2, k_3} (u_{11} \sigma_{1,k_1} \sigma_{1,k_2} \sigma_{1,k_3} \sigma_{1,-k_1-k_2-k_3} + \\ & + 2u_{12} \sigma_{1,k_1} \sigma_{1,k_2} \sigma_{2,k_3} \sigma_{2,-k_1-k_2-k_3} \\ & + u_{22} \sigma_{2,k_1} \sigma_{2,k_2} \sigma_{2,k_3} \sigma_{2,-k_1-k_2-k_3}), \end{aligned} \quad \text{(IV-40)}$$

onde

$$\nu_1 = k_B(T-T_1)/2A_{xx}J_2a^2, \quad \nu_2 = k_B(T-T_2)/2A_{yy}J_4a^2,$$

$$\omega_1 = a^{\frac{d}{2}-3} A_{xxy} d^{3/2} / A_{xx} A_{yy}^{1/2},$$

$$\omega_2 = a^{\frac{1}{2}-3} A_{yyy} d^{3/2} / A_{yy}^{3/2},$$

$$u_{11} = a^{d-4} A_{xxxx} d^2 / A_{xx}^2,$$

(IV-41)

$$u_{22} = a^{d-4} A_{yyyy} d^2 / A_{yy}^2,$$

$$2u_{12} = a^{d-4} A_{xxyy} d^2 / A_{xx} A_{yy}, \quad Na^d = V.$$

### 3.2 Grupo de renormalização e comportamento crítico

A hamiltoniana reduzida da equação (IV-40) corresponde à hamiltoniana reduzida obtida por Nelson e Fisher<sup>(31)</sup> para o meta-magneto de Ising na ausência de campo alternado (ver eq. (3.3) do trabalho desses autores, para  $r_{12} = w_3 = w_4 = 0$ ). Algumas diferenças, tais como o sinal de  $w_2$ , estão associadas a variáveis irrelevantes, que desaparecem depois de algumas iterações. A análise de grupo de renormalização é portanto inteiramente análoga à de Nelson e Fisher, e utilizamos seus resultados para descrever o comportamento crítico do modelo em questão.

Definindo

$$z \equiv \frac{\omega_1^2}{\nu_2}, \quad (IV-42)$$

os pontos fixos do modelo são dados por

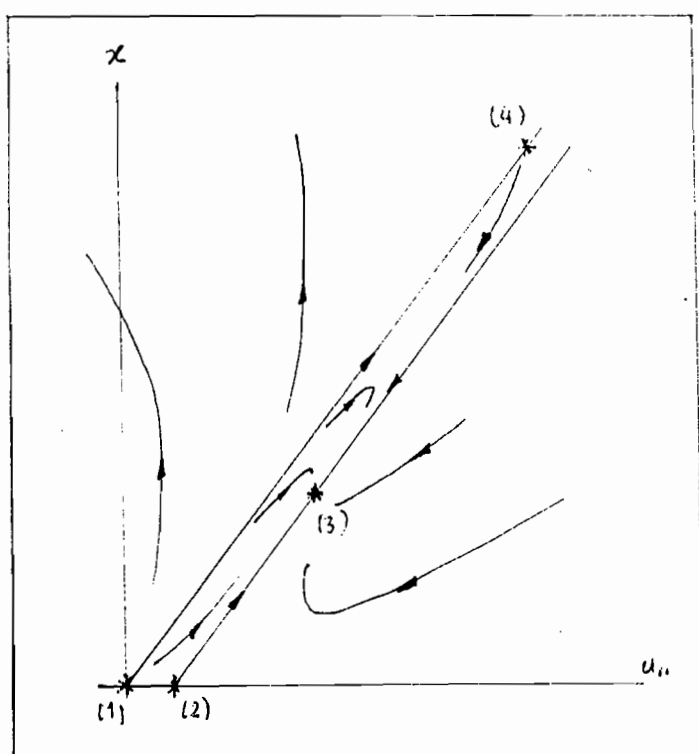
$$(1) \quad u_{11}^* = 0, \quad x^* = 0 \quad (\text{gaussiano})$$

$$(2) \quad u_{11}^* = \frac{\bar{\epsilon}}{36}, \quad x^* = 0 \quad (\text{Ising})$$

$$(3) \quad u_{11}^* = \frac{\bar{\epsilon}}{9}, \quad x^* = \frac{\bar{\epsilon}}{6} \quad (\text{Ising})$$

$$(4) \quad u_{11}^* = \frac{\bar{\epsilon}}{4}, \quad x^* = \frac{\bar{\epsilon}}{2} \quad (\text{gaussiano}),$$

representados no diagrama de fluxos da figura. O diagrama mostra que o sistema pode apresentar uma transição de segunda ordem com expoentes de Ising ( $x = 0$  ou  $x < 2U_{11}$ ), um ponto tricrítico com expoentes gaussianos para  $x = 2U_{11}$ , e uma transição de primeira ordem para  $x > 2U_{11}$ .



É preciso verificar se todas as regiões do diagrama são acessíveis no caso do modelo compressível em estudo.

ponto tricritico. A condição para a existência de um ponto tricrítico é que o coeficiente  $g$  do termo quártico no campo crítico  $\sigma_1$  se anule após a integração dos campos não críticos. É fácil mostrar que

$$g = u_{11} - \frac{\omega_1^2}{2\lambda_2}.$$

(IV-43)

Utilizando as expressões para os acoplamentos, eqs. (IV-41), obtemos

$$g = \frac{a^{d-4} d^2}{A_{xx}^2} \left[ A_{xxxx} - \frac{A_{xxy}^2 d^2}{k_B (\tau - \tau_2)} \right]$$

$$= \frac{a^{d-4} d^2 (1 + 2e^p)(2e^p - p - \frac{1}{2})}{6e^p (2e^p - p + 1)}, \quad (\text{IV-44})$$

onde  $p \equiv -Y_0 L_0^{1/2}$ . Não há solução real para a equação  $g = 0$ , indicando que o ponto tricrítico encontra-se fora do espaço de parâmetros físicos acessíveis do sistema.

Concluimos então que o modelo de Baker-Essam com comprimento variável das linhas apresenta apenas transição de Ising, com expoentes ideais, no ensemble  $\lambda$ .

Deve-se acrescentar que o tratamento acima aplica-se integralmente ao modelo de Blume-Emery-Griffiths<sup>(32)</sup>, cuja hamiltoniana inclui, além dos termos de (IV-3), um termo do tipo  $D \sum_i \sigma_i^2$ . Basta fazer  $w_i = \sum_j Y_j L_{ji}^{1/2} + D$  em (IV-26) e  $p = -Y_0 L_0^{1/2} - D$  nos expoentes de expressão (IV-44). Neste caso, o ponto tricrítico é acessível ao espaço de parâmetros do modelo e obtém-se completa analogia com o modelo de Ising para o metamagneto de Ising, na criticalidade<sup>(31)</sup>.

## V. CONCLUSÕES

Neste trabalho, mostramos, com base em dois modelos muito simples, que ambos os tipos de flutuação mecânica, de posição dos íons e de volume, levam a interações efetivas de longo alcance de quatro spins,  $(-J_4(\sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j)^2)$ . Além disso, o coeficiente  $(-J_4)$  desse termo, na hamiltoniana efetiva, é negativo para flutuações de volume e positivo para flutuações de posição, o que associamos à inibição das flutuações de spin, no primeiro caso, e ao favorecimento das flutuações de spin, no segundo caso. Nas situações fisicamente plausíveis, ambos os tipos de flutuação mecânica (volume e posição) estão presentes. O sinal resultante de  $J_4^{res}$  [ $J_4^{res} = J_4(\text{volume}) - J_4(\text{posição})$ ] dependerá de qual dos dois efeitos competitivos é predominante. Nos modelos considerados na literatura, como nos trabalhos de Bruno e Sak<sup>(12)</sup> e Bergman e Halperin<sup>(14)</sup>, o efeito das flutuações de volume é predominante ( $J_4 > 0$ ). Esse é o caso também do modelo de Ising no colchão de molas, discutido no presente trabalho. Apesar disso, pensamos que o sinal de  $J^{res}$  pode mudar em decorrência de particularidades de cada modelo e que, portanto, esse resultado não pode ser generalizado (por exemplo, para pressão uniaxial), nem tampouco considerado como confirmação da hipótese termodinâmica, como no trabalho de Chen e Kardar<sup>(18)</sup>.

No caso do modelo de Baker-Essam, mostramos que diferentes condições de contorno, no ensemble das densidades, podem levar a diferentes hamiltonianas efetivas de spin. Além disso, verificamos que o comportamento crítico dos modelos depende crucialmente da escolha apropriada das variáveis de campo. O efeito das condições de contorno está presente em modelos mais "realistas", pois é necessário utilizar uma transformação de Fourier para sepa

rar as variáveis elásticas.

Ainda para o modelo de Baker-Essam, analisamos seu comportamento crítico para spin  $s = 1$ . Verificamos que o acoplamento adicional  $\sum_{(i,j)} \sigma_i^2 \sigma_j^2$  não modifica o caráter de Ising da transição. Como subproduto ainda deste trabalho, mostramos a equivalência, sob o ponto de vista do grupo de renormalização no espaço de momentos, das hamiltonianas reduzidas do metamagneto de Ising e do modelo de Blume, Emery e Griffiths<sup>(32)</sup>.

## APÊNDICE A

### Comparação entre os coeficientes elásticos associados às flutuações de volume e de posição dos íons

Na expansão (II-2) e II-3) da hamiltoniana (II-1), na aproximação quadrática, há um termo para as flutuações de volume, de coeficiente

$$K_{ij}^{\text{macro}} \equiv \varphi''(a_{ij}^0) = \frac{\partial^2 \varphi_{el}(1/\bar{n}_{ij}^0)}{\partial n_{ij}^2} \Big|_{\bar{n}_{ij}^0(a_{ij}^0)} \quad (\text{A-1})$$

e um termo para as flutuações nas posições dos íons, de coeficiente

$$K_{ij}^{\text{micro}} \equiv \varphi''_{\alpha\beta}(a_{ij}) = \frac{\partial^2 \varphi_{el}(1/\bar{n}_{ij}^0)}{\partial n_{ij}^\alpha \partial n_{ij}^\beta} \Big|_{\bar{n}_{ij}^0(a_{ij})} \quad (\text{A-2})$$

É simples mostrar que

$$K^{\text{micro}} \propto K^{\text{macro}} (1 + o(\Delta a)), \quad (\Delta a \equiv a - a^0). \quad (\text{A-3})$$

Podemos escrever, para (A-2)

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial n^\alpha \partial n^\beta} = \varphi''(a) \frac{n^\alpha n^\beta}{n^2} + \frac{\varphi'(a)}{n} \left[ \delta_{\alpha\beta} - \frac{n^\alpha n^\beta}{n^2} \right]. \quad (\text{A-4})$$

Expandimos agora  $\varphi'(a)$  e  $\varphi''(a)$  em torno de  $a = a^0$ , lembrando que  $\varphi'(a^0) = 0$ , e obtemos:

$$\varphi'(a) \simeq \varphi''(a^0) \Delta a + o(\Delta a^2) \quad (\text{A-5})$$

e

$$\varphi''(a) \simeq \varphi''(a^0) + \varphi'''(a^0) \Delta a + o(\Delta a^2) \quad (\text{A-6})$$

Substituindo (A-5) e (A-6) em (A-4), obtemos

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial n^\alpha \partial n^\beta} \right|_a = \varphi''(a^0) \frac{n^\alpha n^\beta}{r^2} \Big|_a + o(\Delta a), \quad (\text{A-7})$$

que é a verificação de (A-3).

Para uma rede cúbica simples, por exemplo, temos:

(i) para primeiros vizinhos, de (A-4),

$$\left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial n^\alpha \partial n^\beta} \right|_{\vec{r}_j = a \hat{e}_j} = \varphi''(a) \delta_{\alpha\beta} \delta_{j\gamma} + \frac{\varphi'(a)}{a} [\delta_{\alpha\beta} - \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\gamma}] ,$$

portanto

$$\varphi_{xx}(a \hat{e}_x) = \varphi''(a) \simeq \varphi''(a_0) + o(\Delta a)$$

$$\varphi_{yy}(a \hat{e}_x) = \frac{\varphi'(a)}{a} \simeq o(\Delta a)$$

$$\varphi_{xy}(a \hat{e}_x) = \varphi_{yx}(a \hat{e}_x) = 0 .$$



Observe-se que os termos de cisalhamento são da ordem de  $\Delta a$ .

(ii) para segundos vizinhos, temos:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \Big|_{\vec{R}_{ij} = a\vec{e}_x + a\vec{e}_y} = \frac{\varphi''(\sqrt{2}a)}{2} + \frac{\varphi'(2^{1/2}a)}{2^{3/2}a} \simeq \frac{\varphi''(2^{1/2}a_0)}{2} + o(\Delta a)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \Big|_{\vec{R}_{ij} = a\vec{e}_x + a\vec{e}_y} = \frac{\varphi''(2^{1/2}a)}{2} - \frac{\varphi'(2^{1/2}a)}{2^{3/2}a} \simeq \frac{\varphi''(2^{1/2}a_0)}{2} + o(\Delta a)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial z} \Big|_{\vec{R}_{ij} = a\vec{e}_x + a\vec{e}_y} = 0$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \Big|_{\vec{R}_{ij} = a\vec{e}_x + a\vec{e}_y} = \frac{\varphi'(2^{1/2}a)}{2^{1/2}a} \simeq o(\Delta a)$$



$$\simeq a_x + \Delta u_x + \frac{\Delta u_y^2}{2a^2} + \frac{\Delta u_z^2}{2a^2} + o(\Delta u^3)$$

e, portanto,

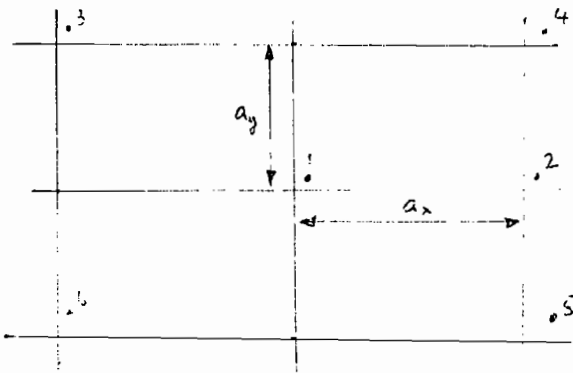
$$(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1| - a_{0x})^2 \simeq (a_x - a_{0x})^2 + 2(a_x - a_{0x})\Delta u_x + \Delta u_x^2 + \frac{a_x - a_x^0}{a_x} (\Delta u_y^2 + \Delta u_z^2) + o(\Delta u^3)$$

com  $\Delta u_\alpha \equiv u_2^\alpha - u_1^\alpha$  e  $\alpha = xy$ .

Esse resultado, válido para o par de spins 1-2 (na direção  $\hat{x}$ ) pode ser generalizado, isto é, para um par de spins na direção  $\hat{a}$ , temos

$$\begin{aligned} (|\vec{r}_{\vec{r} + a\hat{e}_\alpha} - \vec{r}'| - a_\alpha^0)^2 &\simeq (a_\alpha - a_\alpha^0)^2 + 2(a_\alpha - a_\alpha^0)(u_{\vec{r} + a\hat{e}_\alpha}^\alpha - u_{\vec{r}'}^\alpha) \\ &+ (u_{\vec{r} + a\hat{e}_\alpha}^\alpha - u_{\vec{r}'}^\alpha)^2 + \sum_{\beta \neq \alpha} \left(1 - \frac{a_\alpha^0}{a_\alpha}\right) (u_{\vec{r} + a\hat{e}_\alpha}^\beta - u_{\vec{r}'}^\beta)^2 + o(\Delta u^3). \end{aligned} \quad (\text{B-2})$$

### (ii) Interação entre segundos vizinhos



A figura ilustra a situação do spin 1 e seus quatro vizinhos no plano x-y. Utilizando definições análogas às do item anterior para  $\Delta \vec{u}$ , obtemos, para o par 1-4:

$$\begin{aligned} |\vec{r}_4 - \vec{r}_1| &= \{(a_x + \Delta u_x)^2 + (a_y + \Delta u_y)^2 + \Delta u_z^2\}^{1/2} \\ &\simeq a_{xy} \left\{ 1 + \frac{a_x}{a_{xy}} \Delta u_x + \frac{a_y}{a_{xy}} \Delta u_y + \frac{a_y^2 \Delta u_x^2 + a_x^2 \Delta u_y^2 + a_{xy}^2 \Delta u_z^2}{2 a_{xy}^4} \right. \\ &\quad \left. - \frac{a_x a_y}{a_{xy}^4} \Delta u_x \Delta u_y + o(\Delta u^3) \right\} \end{aligned}$$

com  $a_{x,y}^2 \equiv a_x^2 + a_y^2$ .

Então,

$$\begin{aligned} (|\vec{n}_4 - \vec{n}_1| - a_{xy}^0)^2 &\simeq (a_{xy} - a_{xy}^0)^2 + 2a_x \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_x + 2a_y \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_y + \\ &+ \left(1 - \frac{a_{xy}^0 a_y^2}{a_{xy}^3}\right) \Delta u_x^2 + \left(1 - \frac{a_{xy}^0 a_x^2}{a_{xy}^3}\right) \Delta u_y^2 \\ &+ \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_z^2 + \frac{2a_{xy}^0 a_x a_y}{a_{xy}^3} \Delta u_x \Delta u_y + o(\Delta u^3). \end{aligned}$$

(B-3)

Vamos ainda considerar o par 1-5, para verificar quais os termos da expansão se modificam. Obtemos

$$\begin{aligned} |\vec{n}_5 - \vec{n}_1| &= \left\{ (a_x + \Delta u_x)^2 + (-a + \Delta u_y)^2 + \Delta u_z^2 \right\}^{1/2} \\ &\simeq a_{xy} \left\{ 1 + \frac{a_x}{a_{xy}^2} \Delta u_x - \frac{a_y}{a_{xy}^2} \Delta u_y + \frac{a_y^2 \Delta u_x^2 + a_x^2 \Delta u_y^2 + a_{xy}^2 \Delta u_z^2}{2a_{xy}^4} \right. \\ &\quad \left. + \frac{a_x a_y}{a_{xy}^4} \Delta u_x \Delta u_y + o(\Delta u^3) \right\}. \end{aligned}$$

Então,

$$\begin{aligned} (|\vec{n}_5 - \vec{n}_1| - a_{xy}^0)^2 &\simeq (a_{xy} - a_{xy}^0)^2 + 2a_x \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_x - 2a_y \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_y \\ &+ \left(1 - \frac{a_{xy}^0 a_y^2}{a_{xy}^3}\right) \Delta u_x^2 + \left(1 - \frac{a_{xy}^0 a_x^2}{a_{xy}^3}\right) \Delta u_y^2 + \end{aligned}$$

$$+ \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_z^2 - \frac{2a_{xy}^0 a_x a_y}{a_{xy}^3} \Delta u_x \Delta u_y + o(\Delta u^3) .$$

(B-4)

Comparando (B-3) e (B-4), vemos que ao traçar o íon do sítio  $(\vec{R} + a_x \hat{e}_x + a_y \hat{e}_y)$  pelo íon do sítio  $(\vec{R} + a_x \hat{e}_x - a_y \hat{e}_y)$ , invertem-se os sinais dos termos lineares em  $\Delta u_y$ . É possível então escrever, para os quatro pares do plano x-y, a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \left( \left| \vec{r}_4 - \vec{r}_1 \right| - a \begin{pmatrix} 0 \\ 4 \\ 5 \\ 3 \\ 6 \end{pmatrix} \right)^2 &\simeq 4(a_{xy} - a_{xy}^0)^2 + \begin{pmatrix} + \\ + \\ - \\ - \end{pmatrix} 2a_x \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_x \\ &+ \begin{pmatrix} + \\ - \\ + \\ - \end{pmatrix} 2a_y \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_y + \left(1 - \frac{a_{xy}^0 a_y^2}{a_{xy}^3}\right) \Delta u_x^2 + \left(1 - \frac{a_{xy}^0 a_x^2}{a_{xy}^3}\right) \Delta u_y^2 + \\ &+ \left(1 - \frac{a_{xy}^0}{a_{xy}}\right) \Delta u_z^2 + \begin{pmatrix} + \\ - \\ - \\ + \end{pmatrix} \frac{2a_{xy}^0 a_x a_y}{a_{xy}^3} \Delta u_x \Delta u_y + o(\Delta u^3) . \end{aligned}$$

(B-5)

Vamos simplificar a expressão (B-5) fazendo duas considerações:

- (i) sob condições periódicas de contorno os termos lineares desaparecem.
- (ii) no tratamento utilizado nesse trabalho consideramos apenas os termos quadráticos em  $\Delta u$  e  $\Delta a_\alpha \equiv a_\alpha - a_{\alpha 0}$ . Como as flu

tuações em  $\Delta u$  e  $\Delta a$  devem ser da mesma ordem de grandeza, desprezamos os termos em ordem  $\Delta a \Delta u^2$ . Podemos reescrever os coeficientes

$$1 - \frac{a_y^2}{a_{xy}^2} = \frac{1}{1 + \frac{a_y^2}{a_x^2}} \approx \frac{1}{1 + \frac{a_y^0^2}{a_x^0^2}} + o(\Delta a)$$

$$\frac{a_x a_y}{a_{xy}} \approx \frac{a_x^0 a_y^0}{a_x^0^2 + a_y^0^2} + o(\Delta a).$$

Com essas considerações, a expressão (B-5) fica:

$$\begin{aligned} (|\vec{n}_{4,5,3,6} - \vec{n}_1| - a_{4,5,3,6}^0)^2 &\approx 4(a_{xy} - a_{xy}^0)^2 \\ &+ \frac{1}{1 + \frac{a_y^0^2}{a_x^0^2}} \Delta u_x^2 + \frac{1}{1 + \frac{a_x^0^2}{a_y^0^2}} \Delta u_y^2 + \frac{2a_x^0 a_y^0}{a_x^0^2 + a_y^0^2} \Delta u_x \Delta u_y + \\ &+ o(\Delta u^3, \Delta a \Delta u^2). \end{aligned} \quad (B-6)$$

A generalização de (B-6) para os íons nos planos y-z e x-z é imediata. Podemos escrever para a hamiltoniana elástica (B-1), utilizando (B-2) (reescrita à luz das considerações (i) e (ii) acima) e a generalização de (B-6), a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} H_{el} &\approx \sum_{R,\alpha} \frac{\kappa_1^\alpha}{2} \left\{ (a_\alpha - a_\alpha^0)^2 + (u_{R^1}^\alpha + a_\alpha \hat{e}_\alpha - u_{R^1}^\alpha)^2 \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{R,\alpha} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\kappa_2^{\alpha\beta}}{2} \left\{ 4(a_{\alpha\beta} - a_{\alpha\beta}^0)^2 + \frac{g_{\alpha\alpha}}{2} [(u_{R^1}^\alpha + a_\alpha \hat{e}_\alpha + a_\beta \hat{e}_\beta - u_{R^1}^\alpha)^2 + \right. \\ &\left. + (u_{R^1}^\alpha + a_\alpha \hat{e}_\alpha + a_\beta \hat{e}_\beta - u_{R^1}^\alpha)^2] + \frac{g_{\alpha\beta}}{2} [(u_{R^1}^\alpha + a_\alpha \hat{e}_\alpha + a_\beta \hat{e}_\beta - u_{R^1}^\alpha)^2 + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (u_{R'}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\beta})^2 ] + \\
& + b_{\alpha\beta} [ (u_{R'}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\alpha}) (u_{R'}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\beta}) - \\
& - (u_{R'}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\alpha}) (u_{R'}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\beta}) ] + \\
& + o(\Delta u^3, \Delta u \Delta u^2), \tag{B-7}
\end{aligned}$$

onde

$$g_{\alpha\beta} \equiv \frac{2}{1 + \frac{a_{\alpha}^2}{a_{\beta}^2}}, \quad b_{\alpha\beta} \equiv \frac{2a_{\alpha}^2 a_{\beta}^2}{a_{\alpha}^2 + a_{\beta}^2} \tag{B-8}$$

e o fator  $\frac{1}{2}$  no termo de interações de segundos vizinhos foi introduzido para não contarmos duas vezes a mesma interação.

Vamos ainda separar os termos de flutuação de volume dos termos de flutuação de posição. Obtemos finalmente:

$$\begin{aligned}
H_{cl} \simeq & \frac{N}{2} \sum_{\alpha} k_1^{\alpha} (a_{\alpha} - a_{\alpha}^0)^2 + N \sum_{\beta \neq \alpha} k_2^{\alpha\beta} (a_{\alpha\beta} - a_{\alpha\beta}^0)^2 + \\
& + \sum_{R', \alpha} \left\{ \frac{k_1^{\alpha}}{2} (u_{R'}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} - u_{R'}^{\alpha})^2 + \right. \\
& + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{k_2^{\alpha\beta}}{8} [ g_{\beta\alpha} ( (u_{R'}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\alpha})^2 + (u_{R'}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\alpha})^2 ) + \\
& \left. + g_{\alpha\beta} ( (u_{R'}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\beta})^2 + (u_{R'}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm a_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\beta})^2 ) \right] +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 2b_{\alpha\beta} \left( (u_{R'}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm q_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\alpha}) (u_{R'}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm q_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\beta}) \right. \\
 & \left. - (u_{R'}^{\alpha} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm q_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\alpha}) (u_{R'}^{\beta} \pm a_{\alpha} \hat{e}_{\alpha} \pm q_{\beta} \hat{e}_{\beta} - u_{R'}^{\beta}) \right) \Big] \Big\}. \quad (B-9)
 \end{aligned}$$

Vale a pena observar que na expressão de energia elástica obtida, os termos de flutuação de volume,  $\Delta a$  e os termos de flutuação de posição,  $\Delta u$ , estão associados aos mesmos coeficientes, e por isso podem ser considerados efeitos da mesma ordem de grandeza.



## APÊNDICE C

### Cálculo do coeficiente do termo de acoplamento de pares no modelo de Ising no colchão de molas

O coeficiente do termo de acoplamento de pares, no modelo de Ising no colchão de molas, é dado pelo limite para  $\vec{q} \rightarrow 0$  de  $L(\vec{q})$ , definido pela equação (II-95):

$$L(\vec{q}) = \sum_{\mu, \nu} J_1^\mu J_1^\nu A_{\mu\nu}(\vec{q}) f_{\mu\nu}^{+-}(\vec{q}), \quad (\text{C-1})$$

onde, de (II-85),

$$A_{\mu\nu} \equiv \sum_{\alpha} \frac{C_{\mu\alpha} C_{\nu\alpha}}{\tilde{D}_{\alpha\alpha}}, \quad (\text{C-2})$$

sendo  $\tilde{D}_{\alpha\alpha}$  e C definidos pela transformação linear  $V^T D V =$   
 $= V^T C C^{-1} D C C^{-1} V = \tilde{V}^T \tilde{D} \tilde{V}$  E DE (II-87),

$$f_{\mu\nu}^{+-}(\vec{q}) = (e^{iq_{\mu\alpha}} - 1) (e^{-iq_{\nu\alpha}} - 1). \quad (\text{C-3})$$

#### C1. Cálculo da matriz $A_{\mu\nu}$

Utilizaremos as seguintes propriedades das matrizes C e D para o cálculo de A:

$$\tilde{D}_{\alpha\beta} = \tilde{D}_{\alpha\alpha} \delta_{\alpha\beta} \quad (\text{C-4})$$

$$C \tilde{D} = DC \quad (C-5)$$

e

$$CC^T = I. \quad (C-6)$$

Escrevendo (C-5) em termos dos elementos das matrizes e utilizando (C-4), temos

$$\sum_{\lambda} D_{\alpha\lambda} C_{\lambda\beta} = \sum_{\gamma} C_{\alpha\gamma} \tilde{D}_{\gamma\beta} = C_{\alpha\beta} \tilde{D}_{\beta\beta},$$

portanto,

$$C_{\alpha\beta} = \frac{\sum_{\lambda} D_{\alpha\lambda} C_{\lambda\beta}}{\tilde{D}_{\beta\beta}} \quad (C-7)$$

Substituindo (C-7) em (C-6), escrita em função dos elementos da matriz, temos

$$\begin{aligned} \sum_{\delta} C_{\alpha\delta} C_{\beta\delta} &= \sum_{\gamma} \frac{\sum_{\lambda} D_{\alpha\lambda} C_{\lambda\gamma}}{\tilde{D}_{\gamma\gamma}} C_{\beta\gamma} \\ &= \sum_{\lambda} D_{\alpha\lambda} \sum_{\gamma} \frac{C_{\lambda\gamma} C_{\beta\gamma}}{\tilde{D}_{\gamma\gamma}} = \sum_{\lambda} D_{\alpha\lambda} A_{\lambda\beta} = I_{\alpha\beta}, \end{aligned} \quad (C-8)$$

isto é,

$$DA = I. \quad (C-9)$$

C2. Estudo do limite  $\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} L(\vec{q})$

A matriz D para uma rede ortorrômbica é dada pela equação (II-72):

$$D_{\alpha\alpha} = k_1^{\alpha} [1 - \cos(q_{\alpha} a_{\alpha})] + \sum_{\beta \neq \alpha} k_2^{\alpha\beta} g_{\beta\alpha} [1 - \cos(q_{\alpha} a_{\alpha}) \cos(q_{\beta} a_{\beta})] ,$$
(C-10)

$$D_{\alpha\beta} = k_2^{\alpha\beta} b_{\alpha\beta} \sin(q_{\alpha} a_{\alpha}) \sin(q_{\beta} a_{\beta}) .$$

Fazendo  $q_{\alpha} a_{\alpha} \rightarrow q_{\alpha}$ , para simplificar a notação, e expandindo para  $q < 1$ , temos:

$$D_{\alpha\alpha} \approx \frac{1}{2} \left( \lambda_{\alpha} q_{\alpha}^2 + \sum_{\beta \neq \alpha} \gamma_{\beta\alpha} q_{\beta}^2 \right) ,$$
(C-11)

$$D_{\alpha\beta} \approx m_{\alpha\beta} q_{\alpha} q_{\beta} ,$$

com

$$\lambda_{\alpha} \equiv k_1^{\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} k_2^{\alpha\beta} g_{\beta\alpha} ,$$

$$\gamma_{\alpha\beta} \equiv k_2^{\alpha\beta} g_{\alpha\beta} ,$$
(C-12)

$$m_{\alpha\beta} \equiv k_2^{\alpha\beta} b_{\alpha\beta} .$$

Devido à simetria na forma dos elementos, para verificar a analiticidade do limite  $\vec{q} \rightarrow 0$ , basta olhar para o limite efetuado de uma maneira particular, por exemplo  $q_x \rightarrow 0$ ,  $q_y \rightarrow 0$

e  $q_z \rightarrow 0$  e, por analogia, teremos os limites efetuados de outras maneiras, por exemplo,  $q_x \rightarrow 0$ ,  $q_z \rightarrow 0$  e  $q_y \rightarrow 0$ . Para obter o primeiro limite, basta obtermos os termos de  $L(\vec{q})$  que não contém termos "cruzados" ( $q_x q_z$ , etc.). Temos

$$L(\vec{q}^{-1}) = \sum_{\alpha} (J_1^{\alpha})^2 q_{\alpha}^2 A_{\alpha\alpha} + \sum_{\substack{\alpha \\ \beta \neq \alpha}} J_1^{\alpha} J_1^{\beta} q_{\alpha} q_{\beta} A_{\alpha\beta} \quad (C-13)$$

Para obter o limite  $q_x \rightarrow 0$ ,  $q_y \rightarrow 0$ , precisamos apenas do termo  $q_z^2 A_{zz}$ . De (C-9),

$$A_{zz} = \frac{D_x D_y - D_y^2}{\det D} \quad (C-14)$$

De (C-11),

$$A_{zz} = \frac{2\delta_{zx}\delta_{zy}q_z^4 + \text{termos}(q_x^4, \dots)}{\delta_{zx}\delta_{zy}\lambda_z q_z^6 + \text{termos}(q_x^6, \dots)} \quad (C-15)$$

e

$$\lim_{\substack{q_x \rightarrow 0 \\ q_y \rightarrow 0}} L(\vec{q}^{-1}) = \frac{2(J_1^z)^2}{\lambda_z} \quad (C-16)$$

Mas

$$\lambda_z = \kappa_1^z + \kappa_2^{xz} q_x z + \kappa_2^{yz} q_y z =$$

$$= K_1^3 + a_{z^0}^2 \frac{(K_2^{x_3} + K_2^{y_3}) a_{z^0}^2 + K_2^{x_3} a_x^0{}^2 + K_2^{y_3} a_y^0{}^2}{(a_j^0{}^2 + a_x^0{}^2)(a_j^0{}^2 + a_y^0{}^2)}.$$

Obviamente, o limite  $\vec{q} \rightarrow 0$  só é bem definido para o caso de simetria cúbica na fase desordenada ( $a_x^0 = a_y^0 = a_z^0$ ), com  $\lambda_\alpha = K_1 + 2K_2$  e  $J_1^\alpha = J_1$ , portanto

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} L(\vec{q}^{-1}) = \frac{2J_1^2}{K_1 + 2K_2}. \quad (\text{C-17})$$

APÊNDICE D

Contagem diagramática das integrais da solução de grupo de renormalização

As integrais nos produtos de spin  $I_1(u_4)$ ,  $I_2(t_0)$ , etc., definidas pelas equações (III-106) e (III-109) são calculadas utilizando-se a propriedade (III-107). As integrais  $I_1(u_4)$ ,  $I_3(u_6)$  e  $I_4(u_4^2)$  são as mesmas que aparecem no modelo de Ising<sup>(21)</sup>, e não vamos reobtê-las aqui. Vamos então calcular as integrais  $I_2(t_0)$ ,  $I_5(u_4 t_0)$  e  $I_6(t_0^2)$ , definidas por:

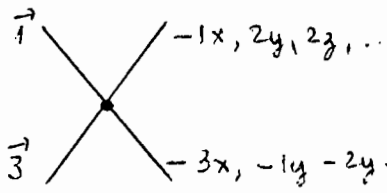
$$I_2(t_0) = \frac{t_0}{N^{1/d}} \int_1 \dots \int_4 \delta(1x+2x) \delta(3x+4x) \delta(1y+2y+3y+4y) \cdot \delta(1z+2z+3z+4z) \dots \int^7 [d\sigma] e^{\vec{H}_2 \cdot \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} , \quad (D-1)$$

$$I_5\left(\frac{u t_0}{N^{1/d}}\right) = \frac{u t_0}{N^{1/d}} \int_1 \dots \int_8 \delta(1x+2x) \delta(1y+2y+3y+4y) \dots \delta(5^z+6^z+7^z+8^z) \int^7 [d\sigma] e^{\vec{H}_2 \cdot \sigma_1 \dots \sigma_8} \quad (D-2)$$

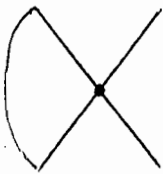
e

$$I_6\left(\frac{t_0^2}{N^{2/d}}\right) = \frac{t_0^2}{2 N^{2/d}} \int_1 \dots \int_8 \delta(1x+2x) \delta(3x+4x) \delta(5x+6x) \delta(7x+8x) \cdot \delta(1y+2y+3y+4y) \delta(5y+6y+7y+8y) \dots \int^7 [d\sigma] e^{\vec{H}_2 \cdot \sigma_1 \dots \sigma_8} , \quad (D-3)$$

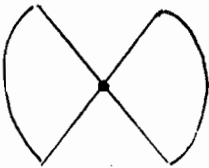
onde utilizamos a notação  $\vec{q}_1 \rightarrow \vec{1}$ ,  $q_{1x} \rightarrow 1x$ , etc. mantivemos a dependência em N nos coeficientes, pois ela será importante na contagem dos gráficos. Lembrando que as integrais  $(\int^{\vec{q}} [d\sigma])$  são efetuadas apenas sobre as variáveis de spin de vetor de onda na camada externa da zona de Brillouin  $(\int^{\vec{q}})$ , verificamos que a integral  $I_2(t_0)$ , por exemplo, resultará em novas integrais de dois e de quatro spins. Essa integral é representada pelos diagramas



- contribuição de quatro spins



- contribuição de dois spins



- contribuição onde todas as variáveis de spin foram integradas.

Nas ligações devemos levar em conta a "conservação de momento" advinda das integrais

$$\int^{\vec{1}} [d\sigma] e^{i\vec{H}_2 \cdot \vec{\sigma}_1 \dots \sigma_2} = K^2(\omega) \sum_{\text{perm}} \frac{1}{u_2(\vec{1})} \dots \frac{1}{u_2(\vec{1}-\vec{1})} \delta(\vec{1}+\vec{2}) \dots \delta(\vec{1}-\vec{1}-\vec{1}).$$

(D-4)

No caso desta hamiltoniana modelo, devemos levar em conta ainda o fato de que em algumas ligações as restrições sobre os vetores de momento geram funções delta do tipo  $\delta(\vec{1}-\vec{1})$ . Para a rede de condições periódicas de contorno, utilizamos o fato de que

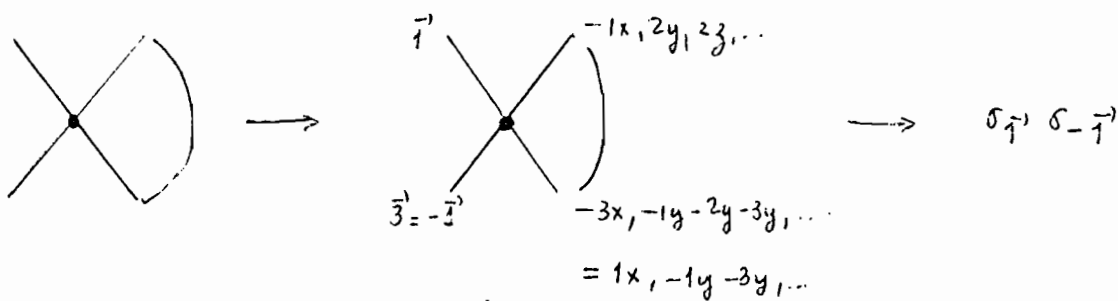
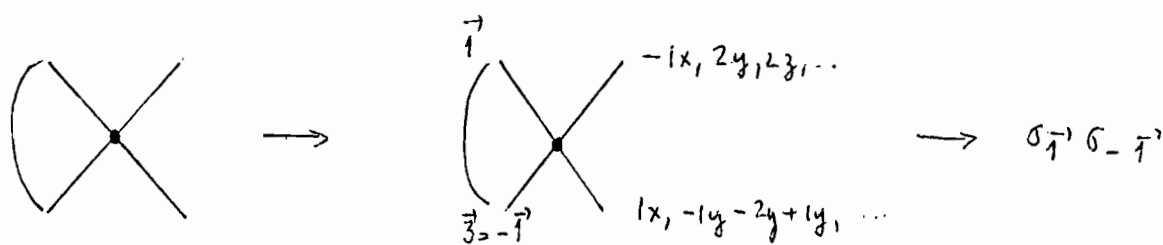
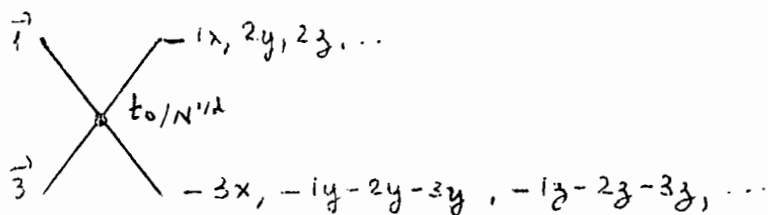
$$\int_{rede} dx e^{iq_x x} = V^{1/d} \delta_{q_x, 0} \tag{D-5}$$

para escrever

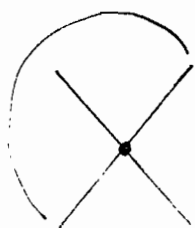
$$\delta_x(0) \equiv \delta(q_x - q_x) = V^{1/d} \delta_{q_x, q_x} = V^{1/d} \propto N^{1/d} \tag{D-6}$$

Procedemos à contagem diagramática das integrais.

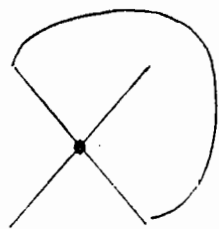
Contribuições da Integral  $I_2(t_0/N^{1/d})$



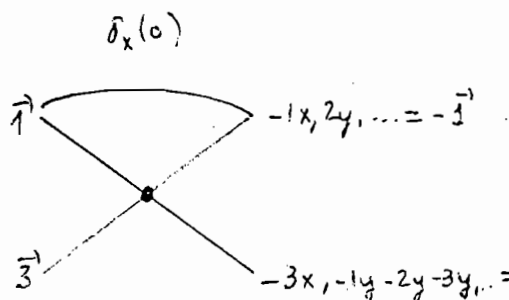
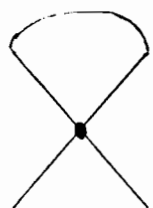




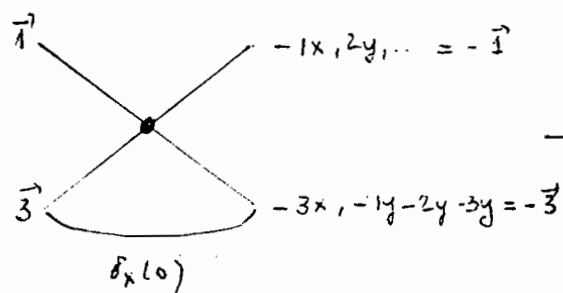
$$\rightarrow \sigma_{\vec{1}} \sigma_{-\vec{1}}$$



$$\rightarrow \sigma_{\vec{1}} \sigma_{-\vec{1}}$$



$$\rightarrow N^{1/d} \sigma_{\vec{1}} \sigma_{-\vec{1}}$$



$$\rightarrow N^{1/d} \sigma_{\vec{1}} \sigma_{-\vec{1}}$$

Temos então as contribuições

$$2\kappa_0 \int_{\vec{q}} \sigma_{\vec{q}} \sigma_{-\vec{q}}$$

e

$$\frac{4\kappa_0}{N^{1/d}} \int_{\vec{q}} \sigma_{\vec{q}} \sigma_{-\vec{q}}$$

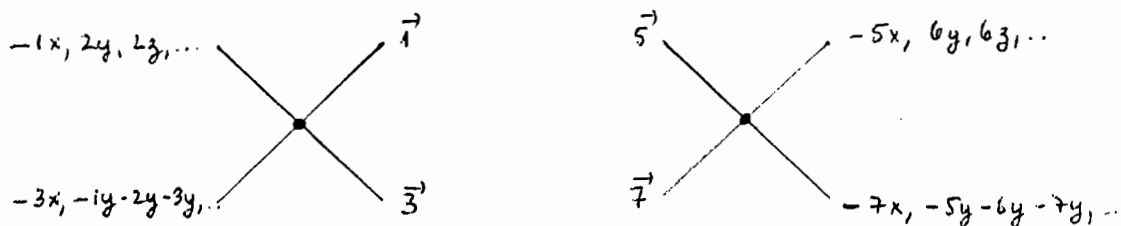
Devido ao fator  $N^{-1/d}$  apenas as primeiras contribuem para os a coplamentos quadráticos da hamiltoniana renormalizada, isto é, o termo  $t_0/N^{1/d}$  contribui com dois diagramas para o termo r.

### Contribuições da integral $I_6(t_0^2/N^{2/d})$

Como esse termo tem coeficiente de ordem  $N^{-2/d}$ , somente as integrais que apresentam  $[\delta_x(0)]^2$  e  $[\delta_x(0)]$  contribuem, respectivamente, para os termos r e u, e  $t_0/N^{1/d}$ , da hamiltoniana renormalizada. Consideramos os diagramas de quatro e dois spins:



Escrevendo os dois vértices na forma



verificamos que:

- (i) entre os diagramas apenas aqueles que unem duas "pernas" superiores com outras duas superiores ou inferiores ( $\overline{\alpha\alpha}$  e  $\alpha\alpha$ ), e vice-versa, contribuem, pois apresentam um fator  $\delta_x(0)$ . São oito os diagramas desse tipo, que contribuem para o termo em  $t_0/N^{1/d}$ ;

- (ii) os diagramas  $\alpha\alpha$  não existem;

(iii) para calcular a contribuição dos diagramas  $\text{XX}$ , utilizamos o resultado (i), isto é que cada diagrama  $(N^{1/d} \text{XX})$ , pode gerar dois diagramas  $(N^{2/d} \text{XX})$ , portanto são 16 contribuições  $t_0^2$  para o termo em  $r$ ;

(iv) os diagramas  $(\text{X}\text{X})$  não existem.

Concluindo, temos

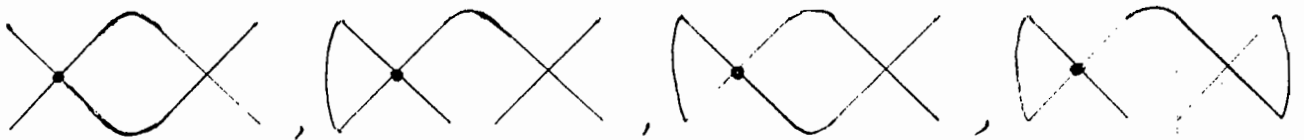
$$\frac{t_0^2}{N^{2/d}} \left[ \int_{\vec{q}} \delta_{\vec{q}} \delta_{-\vec{q}} \right]^4 \longrightarrow \frac{8 t_0^2}{N^{1/d}} \left[ \int_{\vec{q}} \delta_{\vec{q}} \delta_{-\vec{q}} \right]^2 + 16 t_0^2 \int_{\vec{q}} \delta_{\vec{q}} \delta_{-\vec{q}}.$$

(D-2)

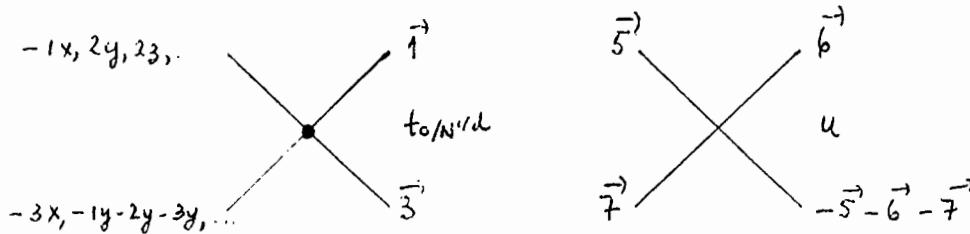
Contribuições da integral  $I_5(ut_0/N^{1/d})$

Nesse caso, somente as integrais que apresentam um fator  $\delta_{\vec{x}}(0)$  contribuem para os termos em  $r$  e  $u$ .

Vamos considerar os diagramas



Escrevendo os vetores das pernas na forma



Verifica-se que:

- (i) os diagramas  $\alpha X$ ,  $(\alpha X)$  e  $(\alpha X)$  não existem;
- (ii) entre os diagramas,  $X X$ , as ligações do tipo  $X X = X$  prescindem do fator  $\delta_x(0)$  e as ligações do tipo  $X X = X$  aparecem em 24 integrais.
- (iii) os diagramas  $\alpha X$  que contém um fator  $\delta_x(0)$  são todos aqueles que derivam dos diagramas  $X X$  que, no item (ii), contribuem para o termo em  $t_0/N^{1/d}$ . Como cada um daqueles diagramas pode ser ligado de duas maneiras diferentes, temos 48 contribuições de  $t_0 u/N^{1/d}$  para o termo  $r$ .

Reunindo as contribuições das três integrais, obtemos o resultado (III-11).

## BIBLIOGRAFIA

1. Domb, C., J.Chem.Phys. 25, 783 (1956)
2. Rice, O.K., J.Chem.Phys. 22, 1535 (1954)
3. Bean, C.P. e Rodbell, D.S., Phys.Rev. 126, 104 (1962)
4. Mattis, D.C. e Schultz, T.D., Phys.Rev. 129, 175 (1963)
5. Baker, G.E. e Essam, J.W., Phys.Rev.Lett. 24, 447 (1970)
6. Matsudaira, N., J.Phys.Soc.Jap. 25, 1225 (1968); Pokrooski, V.L., Sov.Phys. - Sol.St. 10, 2852 (1969); Wagner, H. e Swift, J., Z.Phys. 239, 182 (1970); Bolton, H.C. e Lee, B.S., J.Phys. C3, 1433 (1970)
7. Aharony, A., Phys.Rev. B8, 4314 (1973)
8. Salinas, S.R., J.Phys. C 7, 241 (1974)
9. Rudnick, J., Bergman, D.J. e Imry, Y., Phys.Lett. 46A, 449 (1974)
10. Oitmaa, J. e Barber, M.N., J.Phys. c 8, 3653 (1975)
11. Larkin, A.I. e Pikin, S.A., Sov.Phys. - JETP 29, 891 (1969)
12. Bruno, J. e Sak, J., Phys.Rev. B22, 3302 (1980)
13. Wegner, F.J., J.Phys.C 7, 2109 (1974)
14. Bergman, D.J. e Halperin, B.I., Phys.Rev. B13, 2145 (1976)
15. Bergman, D.J., Imry, Y. e Gunther, L., J.Stat.Phys. 7, 337 (1973)
16. Fisher, M.E., Phys.Rev. 176, 257 (1968)
17. Salinas, S.R., "Considerações sobre algumas variantes do modo estatístico de Ising", tese de Livre Docência, USP, 1977.

18. Chen, Z-Y. e Kardar, M., Phys.Rev. B30, 4113 (1984)
19. Callen, H.B., "Thermodynamics", Wiley, 1970, cap. 13.
20. Baxter, R.J., "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics", Academic Press, 1982, cap. 3.
21. Wilson, K.G, e Kogut, J., Phys.Rep. 12C, 77 (1974); Fisher, M.E., Rev.Mod.Phys. 46, 597 (1974)
22. Landau, L.D. e Lifshitz, E.M., "Statistical Physics", Pergamon, 1969, cap. 8; Griffiths, R.B. e Wheeler, J.C., "Thermodynamics of Phase Transitions", notas particulares.
23. Landau, L.D., "Collected Papers", Gordon and Breach, 1967
24. Aharony, A., "Critical Phenomena", Lecture Notes in Physics nº 186, Springer-Verlag, 1983
25. Bak, P., Krinsky, S. e Mukamel, D., Phys.Rev.Lett. 36, 52 (1976)
26. Baker, G.E., Phys.Rev. 126, 2061 (1962)
27. Falk, H., Am.J.Phys. 38, 858 (1970)
28. Tanaka, M. e Mannari, I, J.Phys.Soc.Jap. 41, 741, (1976)
29. Lajzerowicz, J. e Sivardière, J., Phys.Rev. A11, 2079, 1975
30. Hubbard, J., Phys.Lett. A39, 365, 1972
31. Nelson, D.R. e Fisher, M.E., Phys.Rev. B11, 1030, (1975)
32. Blume, M., Emery, V.J. e Griffiths, R.B., Phys.Rev. A4, 1071 (1971)