

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

**ESTUDO DE MODELOS PARA SISTEMAS
MODULADOS MAGNÉTICOS E ESTRUTURAIS**

Marcelo Henrique Romano Tragtenberg



Tese apresentada ao Instituto de
Física da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de
Doutor em Ciências

*Carlos Saibiti Ori John.
Zereñeira Coldeas*

SÃO PAULO
1993

SBI-IFUSP



305M810T2062

519.23
T 765e
D
e. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Tragtenberg, Marcelo Henrique Romano
Estudo de modelos para sistemas modulados magnéticos e estruturais. São Paulo, 1993.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Departamento de Física Experimental.
Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Prof. Dr. Carlos Seihi Orii Yokoi

Unitermos: 1. Modelo ANNNI; 2. Modelo de Frenkel-Kontorova; 3. Transição comensurável-incomensurável; 4. Interações competitivas; 5. Fases moduladas.

USP/IF/SBI - 73/93

À Marcia, ao João e ao Mariel,

meus amores

Agradecimentos

- Ao prof. Carlos S. O. Yokoi, pela orientação dedicada e atenciosa.
- Aos professores e funcionários do departamento de Física da UFSC, pelo apoio e incentivo.
- À CAPES, pelo apoio financeiro.
- Aos professores, funcionários e estudantes do Instituto de Física da USP, pelo convívio e pelo apoio.
- À Bia e ao Maurício, pelo estímulo ao estudo, desde cedo.
- À Marcia, ao Mariel e ao João , pela paciência, solidariedade, compreensão e por tudo o mais.

Resumo

Estudamos o comportamento de modelos para sistemas modulados magnéticos e estruturais. A primeira parte deste trabalho é dedicada ao modelo de Ising com interações competitivas numa rede de Bethe, no limite de coordenação infinita, num campo magnético. Focalizamos nossa atenção no comportamento das fases comensuráveis na presença de campo. Obtivemos vários diagramas $T - H$ utilizando algoritmos numéricos muito mais eficientes do que a simples iteração do mapeamento associado ao modelo. Na segunda parte estudamos o modelo de Frenkel-Kontorova com primeiro e segundo harmônicos no potencial externo. Encontramos e investigamos transições de segunda ordem no interior das fases comensuráveis de período ímpar. Essas transições, denominadas simétrica-assimétricas, estão associadas à quebra da simetria por reflexão que ocorre para potenciais suficientemente fortes.

Abstract

We studied the behavior of models for magnetically and structurally modulated systems. The first part of this work is dedicated to the study of the Ising model with competing interactions on a Bethe lattice, in the infinite coordination limit, in a magnetic field. We focused our attention on the behavior of the commensurate phases in the presence of a field. We obtained various $T - H$ phase diagrams using numerical methods far more efficient than simple iteration of the mapping associated to the model. In the second part we studied the Frenkel-Kontorova model with first and second harmonics in the external potential. We found and investigated the second order transitions within the commensurate phases of odd periodicity. These transitions, called symmetric-asymmetric transitions, are related to the breaking of reflection symmetry which occurs at high potentials.

Índice

1	Introdução geral	9
I	MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS NUMA REDE DE BETHE NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO	17
2	Introdução à parte I	18
3	Descrição do modelo, relações de recorrência e atratores	27
3.1	Descrição do modelo	27
3.2	Relações de recorrência	31
3.3	Atratores do mapeamento	39
4	Métodos para determinação das fronteiras de fases comensuráveis	42
4.1	Introdução	42
4.2	Procedimento baseado no método de Newton	43
4.3	Método baseado na minimização da função ϕ	46
5	Diagrama de fases a campo nulo	49
5.1	Introdução	49
5.2	Limites de estabilidade da fase paramagnética a campo nulo	49

5.3	Limite de estabilidade da fase ferromagnética a campo nulo	52
5.4	Características adicionais do diagrama de fases a campo nulo	54
5.5	Atratores estranhos a campo nulo	61
6	Diagramas de fases na presença de campo	65
6.1	Introdução	65
6.2	Estado fundamental do modelo	66
6.3	Limite de estabilidade da fase paramagnética na presença de campo magnético	69
6.4	Diagramas de fases do modelo na presença de campo magnético	72
6.5	Coexistência de fases comensuráveis de mesmo número de onda e estruturas diferentes	99
6.6	Coexistência de fases moduladas de diferentes números de onda	105
6.7	Fases incomensuráveis na presença de campo	110
6.8	Atratores estranhos na presença de campo	112
6.9	Comparação com o diagrama de fases do modelo ANNNI na presença de um campo magnético	119

II TRANSIÇÕES SIMÉTRICA-ASSIMÉTRICA NO MODELO DE FRENKEL-KONTOROVA DUPLO **123**

7	Introdução à parte II	124
8	O modelo FK e suas extensões	130
8.1	Descrição do modelo FK	130
8.2	Solução na “aproximação contínua”	131

8.3	Método dos potenciais efetivos	136
8.4	“Escadas do diabo” no modelo FK	144
8.5	Extensões do modelo de Frenkel-Kontorova	147
9	Novos resultados para o modelo FKD	156
9.1	Diagrama de fases do modelo FKD	156
9.2	Estudo das transições simétrica-assimétrica	161
10	Considerações finais	172
11	Apêndice : Método de Eckmann-Ruelle para o cálculo dos expoentes de Lyapunov	175
12	Referências	179

Capítulo 1

Introdução geral

Uma série de sistemas na natureza apresentam um tipo de ordem que se afasta da noção mais familiar de ordem, associada à homogeneidade e uniformidade: o *ordenamento modulado*. No caso do magnetismo, por exemplo, considera-se usualmente como ordenado um sistema ferromagnético, onde os momentos magnéticos atômicos estão, em média, alinhados numa mesma direção. A ordem modulada se realiza, no contexto magnético, quando os momentos magnéticos atômicos oscilam em torno de um valor médio ao longo de uma das direções do espaço. A figura 1.1 mostra a variedade de formas pelas quais se realiza essa ordem, muitas delas existentes em compostos de terras-raras e de manganês, conforme relatado em Cooper (1968) e Izyumov (1984). A estrutura modulada pode ser caracterizada, *grosso modo*, pelo vetor de onda q do harmônico principal. Uma fase modulada é classificada como comensurável ou incomensurável conforme a razão entre o comprimento de onda $\lambda = 2\pi/q$ e o parâmetro da rede seja um número racional ou irracional, respectivamente.

Sistemas magnéticos são apenas uma das classes de sistemas que exibem esse comportamento modulado. Os artigos de revisão de Bak (1982), Yeomans (1988), Selke (1988) e Pynn (1979) trazem uma extensa

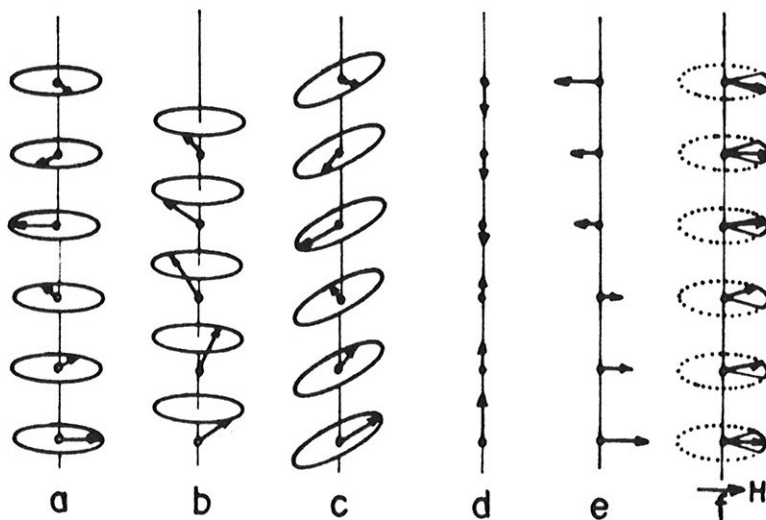


Figura 1.1: Tipos de magnetização modulada: (a) helicoidal, (b) espiral ferromagnética, (c) hélice inclinada, (d) onda de spin longitudinal, (e) onda de spin transversal, (f) leque. H indica o campo magnético aplicado. (Izyumov, 1984).

fenomenologia de sistemas que possuem ordem modulada. O arranjo dos átomos num cristal, adsorção de monocamadas em substratos, ligas binárias, ferroeletricidade e cristais líquidos são outros campos de estudo em que se detecta a existência desse tipo de estrutura ordenada.

Átomos de gás nobre adsorvidos numa superfície de grafite também formam estruturas moduladas, como está representado na figura 1.2. A baixas temperaturas e baixas pressões, os átomos de criptônio ocupam uma das subredes A, B ou C da rede planar do grafite, formando a chamada fase $\sqrt{3}$ da figura 1.2a. Com o aumento da pressão, a fase pode vir a se tornar incomensurável (figura 1.2b).

Camadas de grafite podem ser intercaladas com camadas metálicas, numa extensão tridimensional de gases nobres adsorvidos em grafite. A figura 1.3 mostra como é feita esta intercalação. Observa-se que a

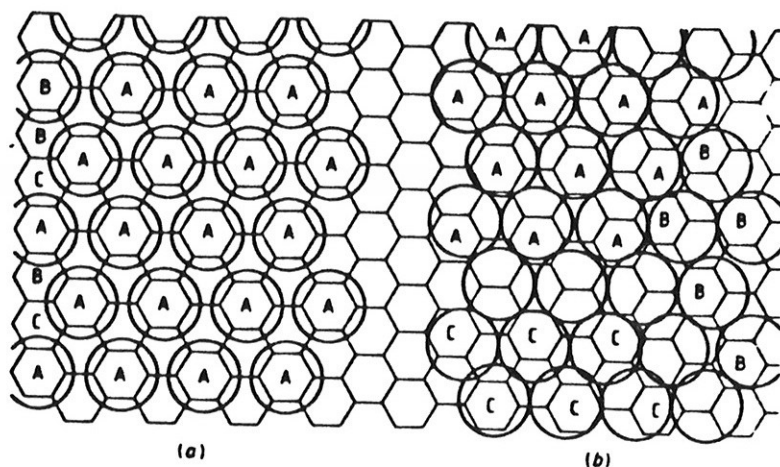


Figura 1.2: Criptônio adsorvido em grafite. (a) estrutura comensurável $\sqrt{3}$. Os átomos de criptônio ocupam 1/3 das células hexagonais do grafite. (b) fase incomensurável. (Bak, 1982).

baixas temperaturas os íons metálicos formam uma rede tridimensional que pode ser comensurável ou incomensurável com a do grafite.

A modulação pode assumir outro aspecto: ela pode ser uma distorção periódica numa rede regular. Na figura 1.4 a distorção refere-se à posição dos átomos relativamente a uma outra rede cristalina. Esse tipo de modulação foi observada em isolantes como o NaNO_2 (Yamada *et al.*, 1963) ou K_2SeO_4 (Iizumi, 1977) e também em metais como o TaSe_2 (Wilson *et al.*, 1975) e TTF-TCNQ (Comes *et al.*, 1975). No caso dos metais, os elétrons de condução produzem uma onda de densidade de carga elétrica que acompanha a distorção periódica.

Em geral, o número de onda varia conforme variam os campos termodinâmicos como temperatura, pressão, campo magnético, campo elétrico, etc. Os comportamentos básicos do número de onda conforme um campo termodinâmico x varia de x_1 a x_2 estão representados na figura

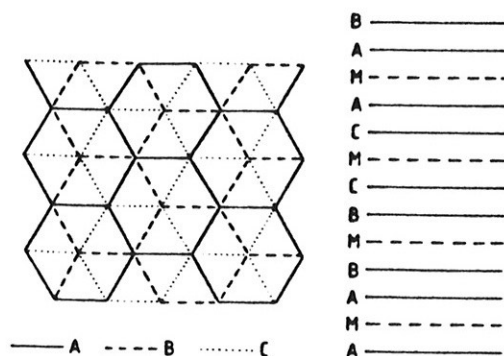


Figura 1.3: Empilhamento de metal (M) entre bicamadas de grafite (A, B, C) formando um composto de intercalação como o CsC_{24} . A ordem intracamada pode ser comensurável ou incomensurável como mostrada na figura 1.2. (Bak, 1982).

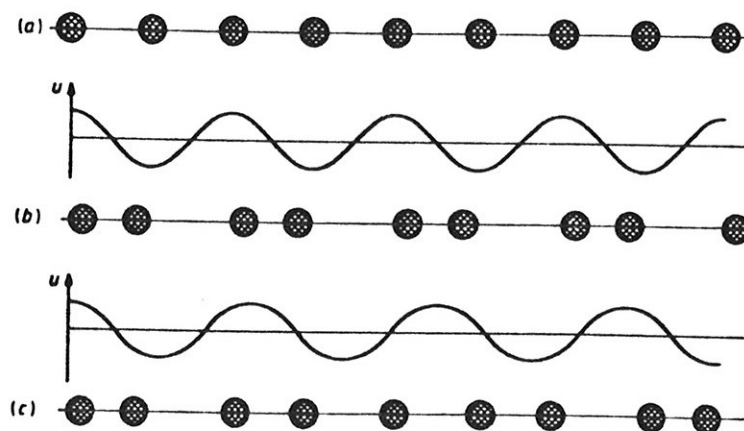


Figura 1.4: Cadeias de átomos espacialmente moduladas. (a) cadeia uniforme (b) estrutura comensurável "dimerizada" (c) modulação incomensurável. As curvas sobre as cadeias representam o deslocamento u dos átomos em relação à cadeia uniforme. (Bak, 1982).

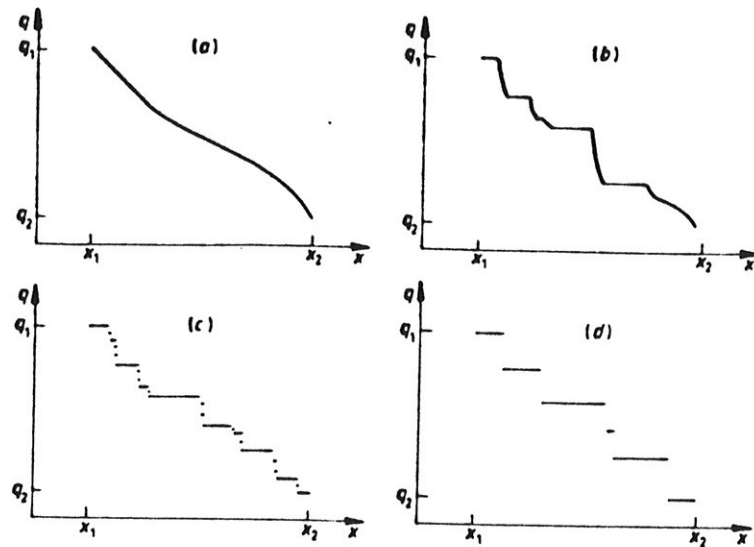


Figura 1.5: Variação do número de onda q em função de um campo termodinâmico x . (a) comportamento analítico, (b) “escada do diabo incompleta”, (c) “escada do diabo completa”, (d) “escada inofensiva”. (Bak, 1982).

1.5. Ele pode variar de uma forma suave, analítica, como na figura 1.5a. Essa situação ocorre, por exemplo, em duas dimensões nas fases chamadas “flutuantes”. Em geral, entretanto, a rede periódica na qual está inserida a modulação tende a travá-la numa estrutura comensurável, de modo que ela seja estável num intervalo de valores do parâmetro x . A figura 1.5b procura representar um caso em que a modulação apresenta travamento para todos os números racionais no intervalo (x_1, x_2) , que se traduz nos platôs do gráfico. Se existem fases incomensuráveis entre as fases comensuráveis e elas ocupam uma medida não nula no intervalo (x_1, x_2) a função é chamada de “escada do diabo incompleta” (Aubry, 1978). A figura 1.5c procura representar uma “escada do diabo completa”, onde cada platô está associado a uma fase comensurável e a medida dos platôs é igual à do intervalo. Portanto, as fases incomensuráveis têm medida nula. A transição entre as fases comensuráveis é quase-contínua, havendo entre duas fases comensuráveis sempre uma terceira fase comensurável. Final-

mente a figura 1.5d representa uma “escada inofensiva” onde há apenas um número finito de fases comensuráveis, sendo as transições entre elas de primeira ordem.

Outro tipo de transição de fases está relacionada à mudança da natureza de uma fase incomensurável, que pode se apresentar sob duas formas: deslizante ou travada. Na forma deslizante, a grandeza física modulada, por exemplo, a posição dos átomos em relação a um substrato, assume continuamente todos os valores reais num certo intervalo. Os átomos podem ser deslizados continuamente sem acarretar nenhum custo na energia. Na forma travada, os átomos não podem mais ocupar os máximos da senóide da figura 1.6, que representa um potencial externo. Neste caso, eles tendem a ocupar as posições mais próximas aos mínimos, porque custam menos energia. Aubry (1978) batizou esta transição de “transição por quebra de analiticidade”, que será explicada com mais detalhes no capítulo 7.

A causa do ordenamento modulado reside na competição entre interações que, se atuassem isoladamente, resultariam num tipo de ordem uniforme ou, no máximo, numa ordem do tipo antiferromagnético (oscilatório de período 2). Esse efeito é conhecido como frustração, e é também um ingrediente básico da ordem tipo vidro de spin (Toulouse, 1977). No caso dos compostos de terras raras e de manganês, por exemplo, a interação entre os momentos magnéticos atômicos é intermediada pelos elétrons de condução, a chamada interação de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida ou RKKY (Ashcroft e Mermin, 1976). Esta interação é oscilante no sinal e sua amplitude decai com o inverso do cubo da distância. Portanto, as interações podem ser tanto ferromagnéticas quanto antiferromagnéticas, dando origem à frustração.

Os modelos mais populares para descrever os sistemas modula-

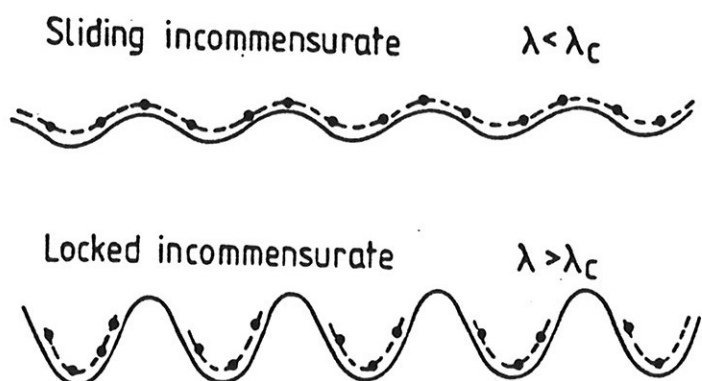


Figura 1.6: Fases incommensuráveis deslizante (“sliding”) e travada (“locked”). O parâmetro λ representa a intensidade de um potencial externo. (Selke, 1992).

dos trazem esse ingrediente básico que é a frustração. São eles o modelo ANNNI, acrônimo de “Axial Next-Nearest-Neighbor Ising”, e o modelo de Frenkel-Kontorova, que passaremos a chamar de modelo FK.

O modelo ANNNI na rede cúbica simples será discutido em detalhe no capítulo 1, mas seu traço marcante é a competição entre a interação ferromagnética entre spins primeiros vizinhos e antiferromagnética entre spins segundos vizinhos, ao longo de uma direção espacial. Ele foi proposto originalmente por Elliott (1961) para explicar a ordem magnética modulada no érbio, mas seus aspectos mais relevantes só foram revelados a partir da década de 70.

O modelo FK, proposto por Frenkel e Kontorova (1938), consiste basicamente em átomos ligados por molas interagindo com um potencial externo senoidal. Este modelo pode ser interpretado como descrevendo a adsorção de átomos num substrato unidimensional. A frustração, neste modelo, surge devido à competição entre o comprimento natural

da mola e o período do potencial externo. Uma solução na aproximação contínua foi obtida por Frank e van der Merwe em 1949, mas a riqueza das transições a ele associadas só começou a ser esclarecida a partir do trabalho de Aubry (1978). Os aspectos mais específicos deste modelo serão detalhados no capítulo 8.

Embora os modelos ANNNI e FK sejam muito diferentes, representando sistemas físicos totalmente distintos, os seus comportamentos podem ser analisados com base num mesmo paradigma da teoria dos sistemas modulados. Este aspecto será mais explorado ao longo deste trabalho.

A parte I desta tese registra o estudo do comportamento de um sistema de spins com interações competitivas, definidas numa árvore de Cayley, na presença de um campo magnético externo. Este modelo pode ser considerado como sendo um análogo do modelo ANNNI numa árvore.

A parte II trata de fases moduladas estruturais num modelo unidimensional de átomos ligados por molas, na presença de um potencial senoidal com primeiro e segundo harmônico. Este modelo é uma extensão do modelo FK.

Parte I

MODELO DE ISING COM INTERAÇÕES COMPETITIVAS NUMA REDE DE BETHE NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO

Capítulo 2

Introdução à parte I

Para explicar a fase modulada do érbio, Elliott propôs em 1961 um modelo que no seu hamiltoniano simulava a interação RKKY por meio de competição entre spins primeiros e segundos vizinhos ao longo de uma direção espacial, o já citado modelo ANNNI. Ele está representado na figura 2.1. Elliott também determinou a linha de transição entre a fase paramagnética e as fases ordenadas.

O modelo ANNNI é composto por spins de Ising, que podem assumir valores $\sigma = \pm 1$, dispostos numa rede cúbica simples, com interações descritas pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j,k} [J_0 \sigma_{i,j,k} (\sigma_{i+1,j,k} + \sigma_{i,j+1,k}) + J_1 \sigma_{i,j,k} \sigma_{i,j,k+1} + J_2 \sigma_{i,j,k} \sigma_{i,j,k+2} + H \sigma_{i,j,k}], \quad (2.1)$$

onde os índices i , j e k indicam as coordenadas do sítio ao longo dos eixos x , y e z , respectivamente, J_0 é a interação entre spins primeiros vizinhos no plano xy , J_1 é a interação entre spins primeiros vizinhos ao longo da direção z , J_2 é a interação entre spins segundos vizinhos ao longo da direção z , e H é a intensidade do campo magnético. O caso mais estudado

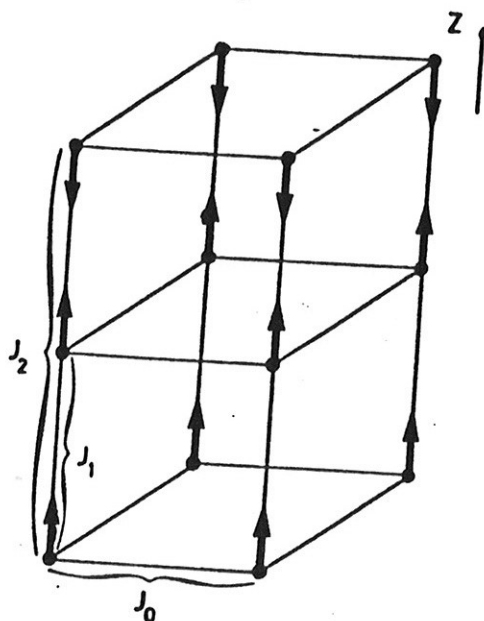


Figura 2.1: O modelo ANNNI numa rede cúbica simples. (Selke, 1992).

é quando os parâmetros J_0 e J_1 são iguais e ferromagnéticos, $J_0 = J_1 > 0$, enquanto o parâmetro J_2 é antiferromagnético, $J_2 < 0$.

Fisher e Selke (1980 e 1981), que cunharam o nome ANNNI, utilizando expansões em série de baixas temperaturas, mostraram que este modelo exhibe uma infinidade de fases comensuráveis que se encontram num ponto de multifases a temperatura e campo magnético nulos e parâmetro de competição $p = -J_2/J_1 = 0,5$ (figura 2.2).

Bak e von Boehm (1980) determinaram o diagrama de fases $T-p$ a campo nulo deste modelo na aproximação de campo médio. Jensen e Bak (1983) propuseram olhar para a solução de campo médio como um mapeamento quadridimensional, embora esta abordagem apresente problemas porque as fases termodinamicamente estáveis são instáveis ao mapeamento. O diagrama de fases por eles obtido está representado na figura 2.3.

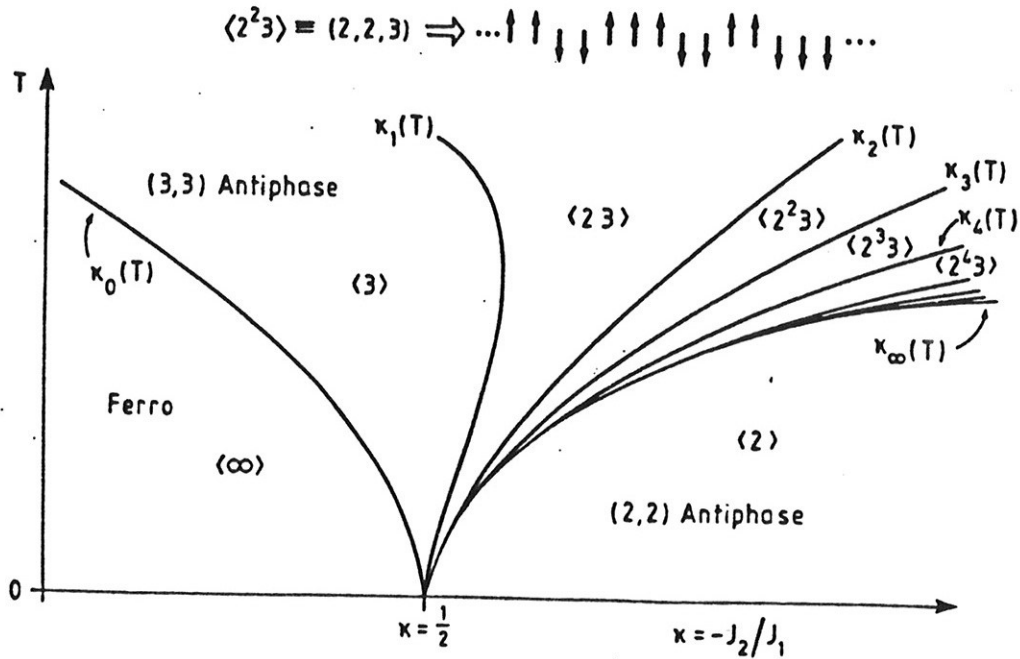


Figura 2.2: Diagrama de fases esquemático do modelo ANNNI nas vizinhanças do ponto de multifases. Aqui, o parâmetro que mede a competição entre as interações entre primeiros e segundos vizinhos é indicado por $\kappa = -J_2/J_1$ (Fisher e Selke, 1980).

Selke e Duxbury (1984), partindo de uma outra abordagem da aproximação de campo médio, determinaram um diagrama de fases semelhante ao de Jensen e Bak (1983). Interessamos ressaltar a diferença de comportamento das fases moduladas entre a fase ferromagnética e a fase $\langle 3 \rangle$, quando próximas da fronteira com a fase paramagnética. Este tópico será retomado no capítulo 5.

Uma pequena explicação sobre os rótulos das fases se faz necessária: os rótulos $1/6$ da figura 2.3 e $\langle 3 \rangle$ da figura 2.4 indicam a mesma fase. $\langle 3 \rangle$ significa que três planos com magnetizações orientadas para cima são seguidos por três planos com magnetizações orientadas para baixo e assim por diante, de modo que corresponde a uma fase com número de onda $q/2\pi = 1/6$:

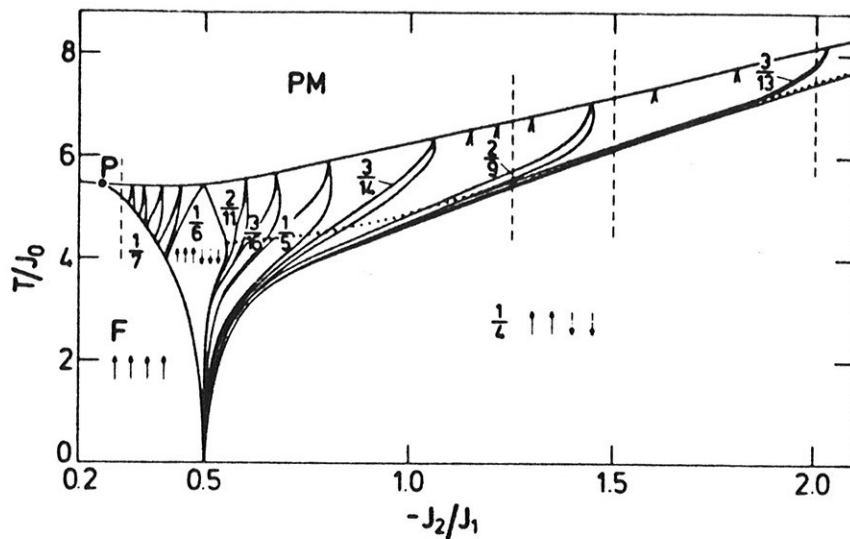


Figura 2.3: Diagrama de fases do modelo ANNNI, na aproximação de campo médio, segundo Jensen e Bak (1983).

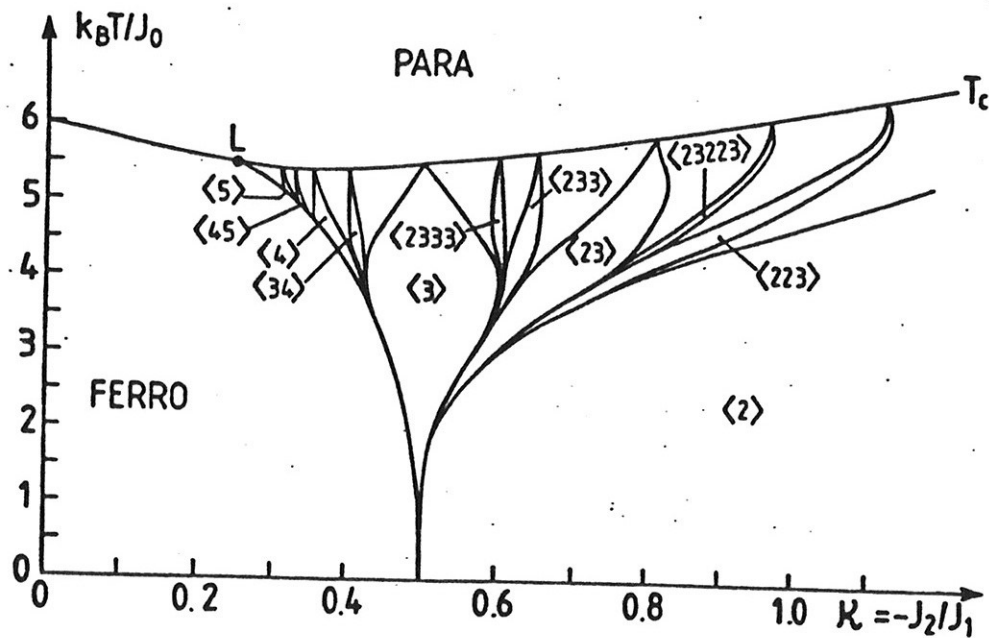


Figura 2.4: Diagrama de fases do modelo ANNNI, na aproximação de campo médio, segundo Selke e Duxbury (1984).

$$\cdots \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow \cdots \implies \text{fase } \langle 3 \rangle \text{ ou } q/2\pi = 1/6$$

Analogamente, a fase $\langle 45 \rangle$ corresponde a uma fase com número de onda $q/2\pi = 1/9$:

$$\cdots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow \cdots \implies \text{fase } \langle 45 \rangle \text{ ou } q/2\pi = 1/9$$

Um exemplo mais complicado é a fase $\langle 223 \rangle$ ou $\langle 2^23 \rangle$ que corresponde a uma fase com número de onda $q/2\pi = 3/14$:

$$\cdots \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow \cdots \implies \text{fase } \langle 223 \rangle \text{ ou } q/2\pi = 3/14$$

Observamos que neste último exemplo o comprimento de onda é $\lambda = 2\pi/q = 14/3$, enquanto o período é 14. A distinção entre o comprimento de onda e o período é importante. Numa fase comensurável P/Q , Q é a distância entre dois planos equivalentes na estrutura modulada, enquanto P é o número de ondas, ou a metade do número de mudanças no sinal da magnetização, presentes numa distância Q . Portanto Q define o período, enquanto $\lambda = Q/P$ define o comprimento de onda médio da fase comensurável. No caso $q/2\pi = 3/14$, o período é 14, pois a translação de 14 planos deixa invariante a estrutura modulada. Já o comprimento de onda é $14/3$ pois há 3 ondas num período.

O ponto P na figura 2.3 ou o ponto L na figura 2.4 é um ponto multicrítico proposto em 1975 por Hornreich, Luban e Shtrikman, o ponto

de Lifshitz. Ele é o encontro de uma linha crítica para-ferromagnética, uma linha de segunda ordem para-modulada e uma linha ferro-modulada, de primeira ordem. O ponto de Lifshitz no modelo ANNNI foi investigado por outras técnicas, como expansões em série de altas temperaturas (Redner e Stanley, 1977) e método de Monte Carlo (Selke, 1980).

Um outro aspecto do diagrama de fases do modelo ANNNI está relacionado à existência de fases incomensuráveis. A baixas temperaturas, segundo o resultado de Fisher e Selke mostrado na figura 2.2, o gráfico do número de onda $q/2\pi$ versus p será uma “escada inofensiva” onde só há fases comensuráveis e a transição entre elas é de primeira ordem, exceto na fronteira com a fase $\langle 2 \rangle$ quando se torna “quase-contínua”. À medida que a temperatura sobe, surgem mais e mais fases comensuráveis, de modo que podemos esperar que ela se torne uma “escada do diabo” completa, com um degrau para cada número racional no intervalo. Entretanto, para temperaturas mais altas, as fases comensuráveis tornam-se cada vez mais estreitas, de sorte que devem surgir fases incomensuráveis que, acima de uma certo limite, estimado por Jensen e Bak (1983) como sendo a linha pontilhada da figura 2.3, passam a ocupar maior porção do diagrama de fases e a “escada do diabo” se tornará incompleta.

Embora haja investigações detalhadas do modelo ANNNI na ausência do campo magnético, não existe ainda um estudo comparável na presença de um campo. O trabalho de Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981), utilizando a aproximação de campo médio, contém alguns diagramas de fases, mas como eles trabalharam com número máximo de apenas 20 equações de campo médio, somente algumas fases foram detectadas. Por outro lado, existem diversos estudos de expansões de baixas temperaturas na presença de um campo magnético (Pokrovsky e Uimin, 1982a e 1982b; Smith e Yeomans, 1982 e 1983; Uimin, 1984 e Szpilka, 1985). Ou-

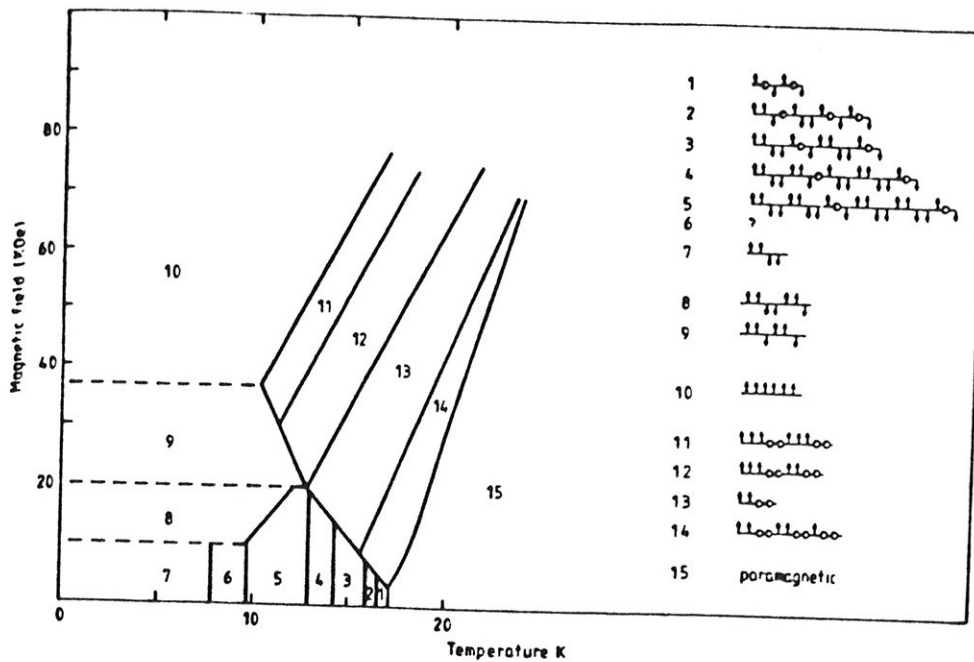


Figura 2.5: Diagrama $H - T$ do CeSb, obtido por Rossat-Mignod *et al.* (1980).

tros aspectos da influência do campo magnético no modelo ANNNI foram estudados por Öttinger (1983). Falta, entretanto, determinar o diagrama de fases global detalhado, como fizeram Selke e Duxbury (1984) a campo nulo.

O comportamento de fases moduladas na presença de campo externo também tem sido investigado experimentalmente. O *CeSb* (Rossat-Mignod *et al.*, 1980), por exemplo, exibe um rico diagrama $H - T$, mostrado na figura 2.5. Ferroelétricos também têm estruturas moduladas que dependem do campo elétrico e da temperatura, como o *NaNO₂* (Yamada *et al.*, 1963), cujo diagrama $E - T$ está mostrado na figura 2.6.

Nosso objetivo, na primeira parte deste trabalho, é o de levantar diagramas de fase globais, na presença de campo magnético, para um modelo de spins com interações competitivas definidas numa rede de

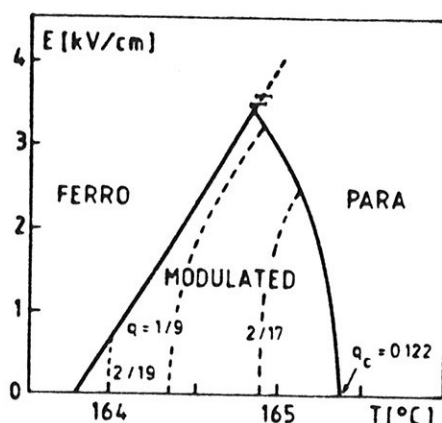


Figura 2.6: Diagrama $E - T$ do NaNO_2 , obtido por Yamada *et al.* (1963).

Bethe. A rede de Bethe é a região central de uma árvore de Cayley, uma rede hierárquica sem ciclos fechados (Baxter, 1982). Este modelo é análogo ao modelo ANNNI numa árvore, que tem a vantagem de ser mais simples de resolver que o modelo ANNNI numa rede cúbica e de apresentar diagramas de fases bastante semelhantes. Entretanto, devido à isotropia da árvore, o modelo por nós considerado seja talvez mais próximo ao modelo INNNI, acrônimo de “Isotropic Next-Nearest Neighbor Ising”, proposto por Upton e Yeomans (1989). As interações entre spins de Ising são competitivas em todas as direções, o que permite a ocorrência de fases moduladas inclusive segundo as direções diagonais. O modelo na rede de Bethe mais próximo ao modelo ANNNI talvez seja o proposto por Moreira e Salinas (1987). Nele há interações competitivas ao longo dos ramos da rede, e no interior de cada camada há interação ferromagnética entre todos os spins do tipo campo médio, tentando simular a interação no interior dos planos do modelo ANNNI.

A abordagem que seguiremos teve origem no trabalho pioneiro de Vannimenus (1981). Ele estudou um modelo com interações competitivas e isotrópicas na rede de Bethe de coordenação três, e obteve um

diagrama de fases contendo fases moduladas comensuráveis e incomensuráveis, além de um ponto de Lifshitz a temperatura nula. Thompson (1982) propôs estudar modelos na rede de Bethe como mapeamentos nas magnetizações locais. Além disto, mostrou que quando o número de ordenação da rede tendia a infinito e a interação entre os spins a zero, recuperava-se a aproximação de campo médio para ferromagnetos e antiferromagnetos. Em 1983, Inawashiro, Thompson e Honda estudaram o modelo de Vannimenus acrescido de interação entre os spins de uma mesma geração, encontrando resultados similares a Vannimenus. Yokoi, de Oliveira e Salinas (1985) estudaram o limite de coordenação infinita do modelo de Vannimenus, conforme a abordagem de Thompson (1982). Além de um ponto de multifases, um ponto de Lifshitz a temperatura finita e um grande número de fases comensuráveis, eles encontraram também fases caóticas.

O modelo de Inawashiro *et al.* (1983) foi estudado na presença de um campo magnético por Mariz, Tsallis e Albuquerque em 1985, mas nenhum estudo detalhado do diagrama de fases foi apresentado. Um outro modelo, definido na rede de Bethe, que exhibe fases moduladas na presença de campo magnético foi estudado por Horiguchi e Morita (1983). Embora o modelo deles guarde pouca relação com o nosso, os diagramas de fases dos dois modelos apresentam certas semelhanças .

Capítulo 3

Descrição do modelo, relações de recorrência e atratores

3.1 Descrição do modelo

Inicialmente, definiremos o tipo de spin e a rede em que ele está distribuído para, num segundo momento, descrevermos as interações entre os spins.

O sistema tratado é composto por spins de Ising, que podem assumir valores $\sigma = \pm 1$, localizados em uma rede de Bethe. A rede de Bethe corresponde à região central de uma árvore de Cayley num sentido que precisaremos mais adiante (Baxter, 1982). O aspecto atraente de se estudar um problema numa rede de Bethe, contrariamente às redes cristalinas, é a inexistência de ciclos, o que permite sua solução exata. A solução exata numa rede de Bethe é de interesse pois equivale, ao menos nos casos de interações restritas aos primeiros vizinhos, à aproximação de Bethe em redes cristalinas.

Uma árvore de Cayley, com número de coordenação z e N gerações, está ilustrada na figura 3.1 para $z = 3$ e $N = 3$. Ela pode ser construída da seguinte forma: a) toma-se um sítio, doravante chamado de sítio central, e a ele se conecta z sítios, que comporão a primeira geração

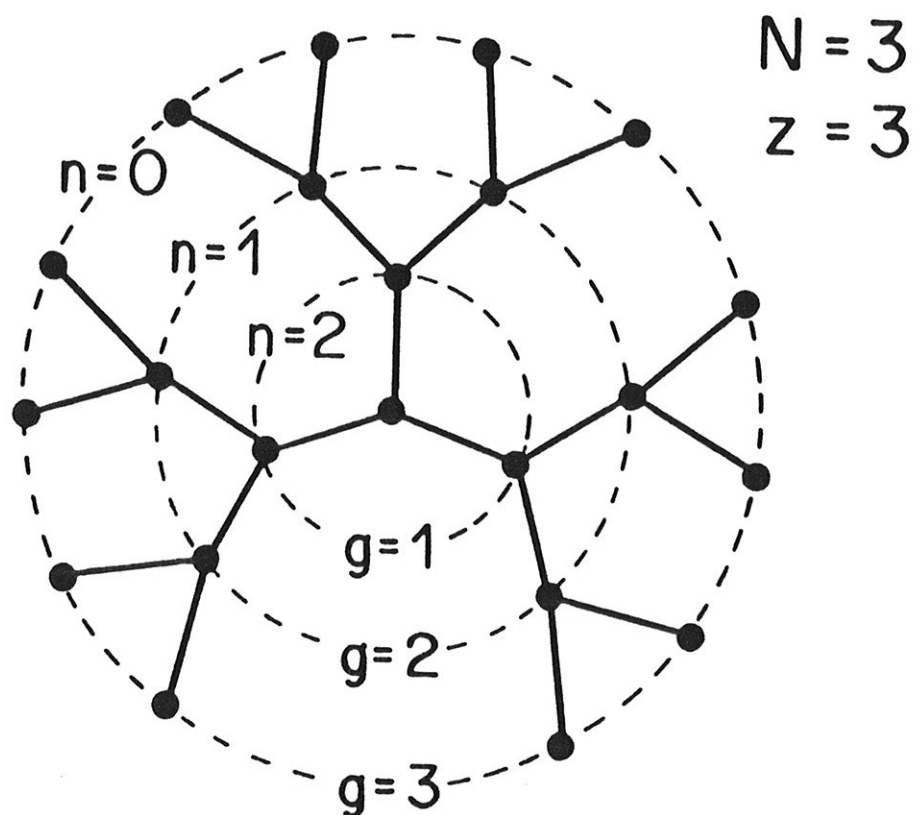


Figura 3.1: Árvore de Cayley com $z = 3$ e $N = 3$.

da árvore; b) a cada um dos sítios da primeira geração liga-se $r = z - 1$ sítios, que constituirão a segunda geração (r é a razão de ramificação da árvore), e assim sucessivamente, até completar N gerações.

É bem conhecido que, no contexto de Mecânica Estatística, só pode haver transição de fases no limite termodinâmico, quando uma função termodinâmica pode se tornar não analítica (Stanley, 1971). Em todos os sistemas reais, nesse limite, o número de elementos em sua superfície é desprezível em relação ao do volume por ela envolvido. Logo, no cálculo estatístico dos potenciais termodinâmicos, ao se tomar o limite termodinâmico do sistema, os efeitos de superfície desaparecem. Vejamos o que ocorre na árvore de Cayley. Tomar o limite termodinâmico, no caso da árvore de Cayley, significa fazer $N \rightarrow \infty$. O número de sítios na su-

perfície de uma árvore de Cayley de N gerações e número de coordenação z é

$$N_S = z(z - 1)^{N-1}, \quad (3.1)$$

e o número de sítios total é

$$N_T = \frac{z(z - 1)^N - 2}{z - 2}. \quad (3.2)$$

Logo, no limite termodinâmico, a razão entre eles é dada por

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_S}{N_T} = \frac{z - 2}{z - 1}, \quad (3.3)$$

sendo, portanto, diferente de zero. Devido ao fato do número de sítios na superfície ser comparável ao do volume, o que se obtém são comportamentos não usuais para a árvore como um todo (Müller-Hartmann e Zittartz, 1974; Eggarter, 1974 e Matsuda, 1974). Mas isto não nos deve levar a descartar a árvore de Cayley como se fora um sistema totalmente desprovido de interesse. Runnels (1967) mostrou que sistemas com interações entre primeiros vizinhos nesta rede apresentam comportamentos locais, na região central da árvore, que são idênticos ao da *aproximação de Bethe* (Bethe, 1935). Thompson (1982) estendeu o resultado de Runnels e mostrou que se fizermos a soma sobre as configurações dos spins da geração mais externa, isto resultará num campo efetivo que atuará nos spins das gerações que interagem com ela. É possível assim obter uma relação de recorrência entre os campo efetivos ao longo das gerações da

árvore, da superfície em direção à região central. Esses campos efetivos *locais* tornam-se, na região central da árvore, equivalentes aos campos efetivos da aproximação de Bethe. Assim, convencionou-se que, quando falamos em rede de Bethe, estamos interessados nas propriedades locais na região central de uma árvore de Cayley, e não nas propriedades globais da árvore. Essa distinção entre rede de Bethe e árvore de Cayley foi proposta por Chen *et al.* (1974).

Outro aspecto da rede de Bethe foi também apontado por Thompson (1982). No caso do modelo de Ising com interações ferromagnéticas ou antiferromagnéticas entre primeiros vizinhos, no limite de coordenação infinita $z \rightarrow \infty$ com $J \rightarrow 0$ de tal forma que $zJ = \text{constante}$, a aproximação de Bethe torna-se idêntica à *aproximação de campo médio* (Bragg e Williams, 1934). Observemos que, no limite de coordenação infinita, a razão entre N_S e N_T é 1, de modo que praticamente todos os sítios estão na superfície. Nesta situação é claramente importante a distinção entre o que ocorre na região central da árvore (rede de Bethe) e o que ocorre na rede como um todo (árvore de Cayley).

As interações entre os spins do modelo definido numa árvore de Cayley de coordenação z e N gerações são descritas pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{((i,j))} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{(i)} \sigma_i, \quad (3.4)$$

onde (i, j) denota spins primeiros vizinhos separados de uma geração, $((i, j))$ denota spins segundos vizinhos separados de duas gerações, e H é a intensidade do campo magnético, como ilustrado na figura 3.2.

Na próxima seção resolveremos o modelo para um número de coordenação arbitrária z e depois particularizaremos para o limite de

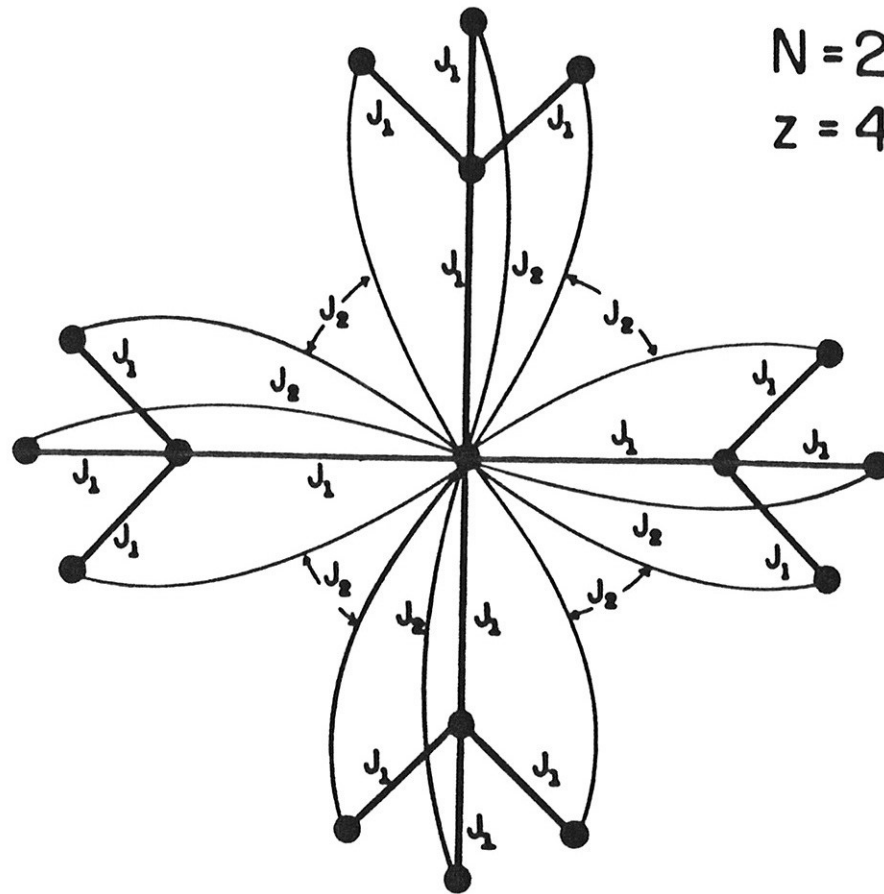


Figura 3.2: Interações entre spins numa árvore de Cayley com $N = 2$ e $z = 4$. Spins primeiros vizinhos de gerações adjacentes interagem através da constante de troca J_1 . Spins segundos vizinhos separados de duas gerações interagem através da constante de troca J_2 .

coordenação infinita $z \rightarrow \infty$.

3.2 Relações de recorrência

A solução do modelo será obtida sob a forma de relações de recorrência para os campos efetivos nas gerações da árvore de Cayley, como fizeram Inawashiro, Thompson e Honda (1983). Para simplificar as discussões convém reindexar as gerações da árvore de Cayley em termos

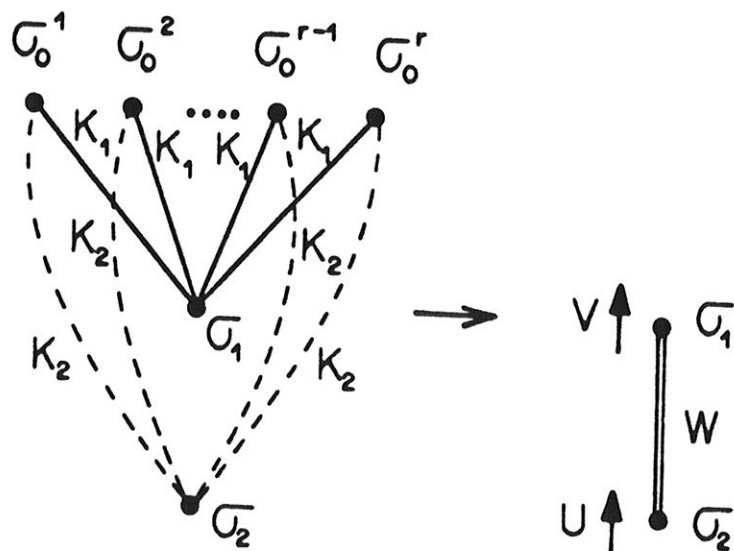


Figura 3.3: Representação esquemática do processo de traço parcial sobre os spins da geração mais externa de uma árvore de Cayley.

de *camadas* de tal modo que a geração g é equivalente à camada $n = N - g$. Assim os spins da superfície que pertencem à geração $g = N$ correspondem à camada $n = 0$, os spins da geração anterior $g = N - 1$ correspondem à camada $n = 1$, e assim sucessivamente, até atingir o spin central da geração $g = 0$, que corresponde à camada $n = N$.

A estratégia que seguiremos consiste em efetuar traços parciais sucessivos sobre os spins começando pelos spins da camada $n = 0$ e progredindo em direção ao centro da árvore. O efeito de se tomar o traço sobre os spins da camada $n = 0$ é o de fazer aparecer campos efetivos atuando sobre os spins das duas camadas seguintes $n = 1$ e $n = 2$, bem como interações efetivas entre spins dessas camadas, conforme representado na figura 3.3 para um ramo da árvore de Cayley. $\sigma_0^1, \sigma_0^2, \dots, \sigma_0^r$ denotam os r spins da superfície, e σ_1 e σ_2 são os spins das camadas $n = 1$ e $n = 2$ nesse ramo. Efetuando-se o traço sobre os spins mais

externos $\sigma_0^1, \sigma_0^2, \dots, \sigma_0^r$ resulta

$$\sum_{\sigma_0^1} \sum_{\sigma_0^2} \cdots \sum_{\sigma_0^r} \exp[(K_1\sigma_1 + K_2\sigma_2 + B)(\sigma_0^1 + \sigma_0^2 + \cdots + \sigma_0^r)] = C \exp(W\sigma_1\sigma_2 + U\sigma_2 + V\sigma_1), \quad (3.5)$$

onde

$$K_1 = \frac{J_1}{kT}, \quad K_2 = \frac{J_2}{kT}, \quad B = \frac{H}{kT}, \quad (3.6)$$

sendo k a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. Os coeficientes U , V , W e C são dados por

$$U(B, K_1, K_2) = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{f(1, 1)f(-1, 1)}{f(1, -1)f(-1, -1)} \right], \quad (3.7)$$

$$V(B, K_1, K_2) = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{f(1, 1)f(1, -1)}{f(-1, 1)f(-1, -1)} \right], \quad (3.8)$$

$$W(B, K_1, K_2) = \frac{1}{4} \ln \left[\frac{f(1, 1)f(-1, -1)}{f(1, -1)f(-1, 1)} \right], \quad (3.9)$$

$$C(B, K_1, K_2) = [f(1, 1)f(1, -1)f(-1, 1)f(-1, -1)]^{\frac{1}{4}}, \quad (3.10)$$

onde

$$f(\sigma, \sigma') = [2 \cosh(K_1\sigma + K_2\sigma' + B)]^r. \quad (3.11)$$

Definamos

$$\begin{aligned} B_0 &= B, \\ A_0 &= K_1. \end{aligned} \tag{3.12}$$

Então, após o traço sobre os spins da camada $n = 0$, o campo magnético total agindo sobre os spins da camada $n = 1$ é

$$B_1 = B + V(B_0, A_0, K_2), \tag{3.13}$$

enquanto o campo total sobre os spins da camada $n = 2$ é

$$B_2 = B + rU(B_0, A_0, K_2), \tag{3.14}$$

onde o fator r vem do fato de que um spin da camada $n = 2$ está ligado a r spins da camada $n = 1$, sendo que cada spin contribui com um campo efetivo U . Por outro lado, a interação efetiva entre os spins das camadas $n = 1$ e $n = 2$ é dada por

$$A_1 = K_1 + W(B_0, A_0, K_2). \tag{3.15}$$

Claramente pode se continuar este processo sem dificuldades. Após o traço sobre os spins da camada $n = 1$, o campo total sobre os spins da camada $n = 2$ será

$$B_2 = B + rU(B_0, A_0, K_2) + V(B_1, A_1, K_2), \tag{3.16}$$

e o campo total sobre os spins da camada $n = 3$ será

$$B_3 = B + rU(B_1, A_1, K_2), \quad (3.17)$$

enquanto a interação efetiva entre os spins das camadas $n = 2$ e $n = 3$ será dada por

$$A_2 = K_1 + W(B_1, A_1, K_2). \quad (3.18)$$

Em geral, após o traço sobre os spins das camadas $n = 0$ a $n - 1$, o campo total B_n sobre os spins da camada n e a interação A_n entre os spins das camadas n e $n + 1$ serão dados por

$$B_n = B + V(B_{n-1}, A_{n-1}, K_2) + rU(B_{n-2}, A_{n-2}, K_2), \quad (3.19)$$

$$A_n = K_1 + W(B_{n-1}, A_{n-1}, K_2).$$

Essas relações de recorrência simplificam-se consideravelmente no limite de coordenação infinita $z \rightarrow \infty$ com $J_1 \rightarrow 0$ e $J_2 \rightarrow 0$, de tal forma que

$$\lim_{z \rightarrow \infty} zJ_1 = \tilde{J}_1, \quad (3.20)$$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} z^2J_2 = \tilde{J}_2, \quad (3.21)$$

onde \tilde{J}_1 e \tilde{J}_2 são constantes não-nulas. É fácil verificar que, neste limite, a função $f(\sigma, \sigma')$ é dada, em ordem dominante, por

$$f(\sigma, \sigma') \approx [2 \cosh B]^r \exp[r(K_1\sigma + K_2\sigma') \tanh B], \quad (3.22)$$

de forma que

$$U(B, A, K_2) \approx rK_2 \tanh B, \quad (3.23)$$

$$V(B, A, K_2) \approx rK_1 \tanh B, \quad (3.24)$$

$$W(B, A, K_2) \approx 0. \quad (3.25)$$

Substituindo esses resultados nas relações de recorrência (3.19) obtemos no limite $z \rightarrow \infty$

$$B_n = B + \tilde{K}_1 \tanh B_{n-1} + \tilde{K}_2 \tanh B_{n-2}, \quad (3.26)$$

$$A_n = K_1, \quad (3.27)$$

onde

$$\tilde{K}_1 = \frac{\tilde{J}_1}{kT}, \quad (3.28)$$

$$\tilde{K}_2 = \frac{\tilde{J}_2}{kT}. \quad (3.29)$$

Observamos que, no limite de coordenação infinita, as interações entre os primeiros vizinhos de camadas sucessivas não são alteradas. Portanto, nesse limite, ao invés das duas relações de recorrência (3.19), precisamos considerar apenas a relação de recorrência (3.26). Isso simplifica bastante a análise matemática do modelo sem, entretanto, introduzir modificação significativa do ponto de vista físico.

A magnetização por spin na n -ésima camada, resultante do campo efetivo devido a todos os spins das camadas anteriores, é dada por

$$M_n = \tanh B_n. \quad (3.30)$$

Numericamente, é mais conveniente trabalhar com as variáveis M_n que são limitadas ($|M_n| \leq 1$), além de serem as variáveis que nos interessam diretamente na identificação das fases moduladas. É possível, então, reescrever a relação de recorrência (3.26) em termos das magnetizações nas camadas sob a forma

$$M_n = \tanh \frac{1}{T} (M_{n-1} - pM_{n-2} + H), \quad (3.31)$$

onde adotamos o sistema de unidades em que

$$\tilde{J}_1 = 1 \quad \text{e} \quad k = 1, \quad (3.32)$$

além de termos introduzido o parâmetro que mede a competição entre as interações entre primeiro e segundos vizinhos,

$$p = -\frac{\tilde{J}_2}{\tilde{J}_1}. \quad (3.33)$$

Definindo-se

$$\begin{aligned} x_n &\equiv M_{n-1}, \\ y_n &\equiv M_n, \end{aligned} \quad (3.34)$$

a relação de recorrência (3.31) pode ser reescrita sob a forma de um mapeamento bidimensional:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= y_n, \\ y_{n+1} &= \tanh \left[\frac{1}{T} (y_n - px_n + H) \right]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

A escolha do ponto inicial do mapeamento (x_1, y_1) é equivalente à escolha das condições de contorno sobre as magnetizações da primeira e segunda camadas na árvore. Podemos ainda escrever o mapeamento (3.35) sob a forma matricial

$$\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{X}_n), \quad (3.36)$$

onde

$$\mathbf{X}_n = \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

e

$$F(\mathbf{X}_n) = \left(\begin{array}{c} y_n \\ \tanh \frac{1}{T}(y_n - px_n + H) \end{array} \right). \quad (3.38)$$

3.3 Atratores do mapeamento

Após um número suficiente de iterações, os pontos do mapeamento convergem para as proximidades dos atratores do mapeamento. Estes atratores representam as estruturas moduladas estáveis na rede de Bethe, ou seja, no interior profundo da árvore de Cayley. Essas estruturas moduladas serão denominadas de *fases*, mas devemos observar que essa denominação não implica necessariamente que essas estruturas na rede de Bethe apresentem as propriedades das fases no sentido termodinâmico usual aplicável a sistemas reais.

Uma caracterização importante dos atratores do mapeamento é fornecida pelos expoentes de Lyapunov (Lichtenberg e Lieberman, 1983). Os expoentes de Lyapunov medem a taxa de convergência ou divergência das trajetórias dos pontos do mapeamento nas vizinhanças do atrator. Os expoentes de Lyapunov são definidos por

$$\lambda_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |\Lambda_i| \quad (i = 1, 2), \quad (3.39)$$

onde Λ_i ($i = 1, 2$) são os autovalores da matriz \mathbf{L} , produto das matrizes jacobianas do mapeamento

$$L = J(X_N)J(X_{N-1}) \cdots J(X_2)J(X_1), \quad (3.40)$$

onde as matrizes jacobianas são dadas por

$$J(X_n) = \frac{\partial(x_{n+1}, y_{n+1})}{\partial(x_n, y_n)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{p}{T}(1 - y_{n+1}^2) & \frac{1}{T}(1 - y_{n+1}^2) \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Por conveniência, ordenamos os expoentes de Lyapunov segundo a magnitude

$$\lambda_1 \geq \lambda_2. \quad (3.42)$$

Verificamos, numericamente, que os seguintes tipos de atratores são possíveis para o mapeamento (3.35), em função de diferentes valores dos parâmetros p , T e H :

1. *Pontos fixos*: representam fases uniformemente ordenadas, que podem ser tanto paramagnéticas quanto ferromagnéticas. Neste caso $\lambda_2 \leq \lambda_1 < 0$, revelando a contração no espaço de fases nas duas direções.
2. *Ciclos-Q*: representam fases moduladas comensuráveis de período Q . Também neste caso $\lambda_2 \leq \lambda_1 < 0$.
3. *Órbitas aperiódicas*: representam fases moduladas incomensuráveis, com $\lambda_1 = 0$ e $\lambda_2 < 0$. Neste caso, o mapeamento preserva o volume no espaço de fases numa das direções e o contrai na outra.

4. *Atratores estranhos*: representam fases moduladas caóticas. Neste caso $\lambda_1 > 0$ e $\lambda_2 < 0$.

A região de estabilidade de um dado atrator no espaço $p-T-H$ é a região onde a fase correspondente a este atrator é estável. Pode acontecer que, para certos valores dos parâmetros p , T e H , os pontos do mapeamento convirjam para atratores diferentes dependendo da escolha do ponto inicial. Fisicamente, isso significa que a fase que se realiza no interior profundo da árvore de Cayley depende das condições iniciais impostas nas duas camadas mais externas da árvore de Cayley. A superposição das regiões de estabilidade dos atratores ocupa em geral um volume no espaço $p-T-H$, e dizemos que nessa região há a *coexistência de fases* correspondentes a esses atratores. Aparentemente isso contradiz a regra de fase de Gibbs (Callen, 1985), segundo a qual só poderia haver coexistência de fases sobre uma região bidimensional (superfícies) no espaço $p-T-H$. A contradição se resolve se lembrarmos que estamos estudando as propriedades do sistema numa rede de Bethe, e que portanto as considerações termodinâmicas usuais válidas para sistemas reais não se aplicam.

O principal objetivo da primeira parte da tese é a determinação das regiões de estabilidade dos atratores ou fases dos tipos (1) e (2), e a construção dos diagramas de fases no plano $T-H$ para diferentes valores do parâmetro de competição p . Também estudamos a ocorrência e propriedades dos atratores dos tipos (3) e (4).

Capítulo 4

Métodos para determinação das fronteiras de fases comensuráveis

4.1 Introdução

A investigação do diagrama de fases de sistemas modulados é, em geral, uma tarefa extremamente complexa e laboriosa. Isto é verdade também nos modelos relativamente mais simples definidos em árvores, de modo que utilizamos um arsenal de métodos para essa tarefa, conforme passamos a descrever.

Um aspecto atraente do estudo de sistemas definidos em árvores é que a iteração do mapeamento a ele associado fornece automaticamente a fase que se realiza na rede de Bethe. É o processo geralmente empregado na determinação do diagrama de fases desse tipo de sistemas, e é inegavelmente útil no estudo exploratório do diagrama de fases, na determinação do comportamento do número de onda e no estudo de atratores estranhos, entre outras tarefas. Entretanto muitas vezes a velocidade de convergência do mapeamento torna-se proibitivamente lenta, tornando inviável um estudo detalhado do diagrama de fases. Isso ocorre, por exemplo, na região de altas temperaturas e também próximo à fronteira de estabilidade das fases comensuráveis. Essa é uma limitação particu-

larmente severa para os nossos propósitos, já que estamos interessados em levantar um grande número de diagramas de fases que contém largas regiões em que a convergência do mapeamento é extremamente lenta.

Para superar o problema de lenta convergência do mapeamento elaboramos um procedimento baseado no método de Newton que permite a determinação da fronteira de uma fase comensurável com muito maior velocidade e precisão. Esse método está discutido detalhadamente na seção 4.2. O procedimento mencionado é aplicável sempre que a largura da fase comensurável não seja desprezível, dentro da precisão adotada nos cálculos numéricos. Entretanto, a largura das fases comensuráveis torna-se muitas vezes extremamente delgada, especialmente para períodos longos e a temperaturas altas. Nestes casos, desenvolvemos um procedimento baseado na minimização de uma função ϕ , que apresenta também vantagens de maior velocidade e precisão em relação à simples iteração do mapeamento. Esse procedimento está detalhado na seção 4.3. Todos os cálculos desta parte da tese foram feitos num PC 386/DX, sem nenhuma dificuldade quanto ao tempo de convergência, o que pode dar uma noção da eficácia destes métodos.

No caso particular dos atratores serem pontos fixos do mapeamento, correspondendo portanto a fases para ou ferromagnéticas, as suas fronteiras de estabilidade podem ser determinadas analiticamente, como o faremos nos capítulos 5 (para campo nulo) e 6 (na presença do campo).

4.2 Procedimento baseado no método de Newton

Um ciclo de período Q é caracterizado pelo fato de que após Q iterações retorna-se ao ponto inicial, ou seja,

$$\mathbf{X}_{n+Q} = \mathbf{X}_n. \quad (4.1)$$

Os pontos do ciclo são portanto soluções da equação

$$\mathbf{X} = \underbrace{F(F(\dots(F(\mathbf{X})))\dots)}_{Q \text{ vezes}} = F^{(Q)}(\mathbf{X}). \quad (4.2)$$

É claro que num ciclo- Q existirão Q soluções distintas desta equação correspondendo aos Q pontos distintos do ciclo. O sistema não linear de duas equações representado por (4.2) pode ser resolvido pelo método de Newton. Seja $\mathbf{X}_0^{(i)}$ uma solução tentativa na proximidade de uma das soluções da equação (4.2), e definamos

$$\mathbf{X}_0^{(i+1)} = \mathbf{X}_0^{(i)} + \delta\mathbf{X}_0^{(i)}. \quad (4.3)$$

Substituindo $\mathbf{X}_0^{(i+1)}$ na equação (4.2), e expandindo-se em primeira ordem em $\delta\mathbf{X}_0^{(i)}$, obtemos

$$\mathbf{X}_0^{(i)} + \delta\mathbf{X}_0^{(i)} = F^{(Q)}(\mathbf{X}_0^{(i)} + \delta\mathbf{X}_0^{(i)}) \approx \mathbf{X}_Q^{(i)} + \mathbf{L}\delta\mathbf{X}_0^{(i)}, \quad (4.4)$$

onde \mathbf{L} é a matriz definida em (3.40). Portanto a correção $\delta\mathbf{X}_0^{(i)}$ que move $\mathbf{X}_0^{(i)}$ mais perto da solução da equação (4.2) é dada por

$$\delta\mathbf{X}_0^{(i)} = (\mathbf{L} - \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{X}_0^{(i)} - \mathbf{X}_Q^{(i)}). \quad (4.5)$$

Em geral, o processo iterativo representado pelas equações (4.3) e (4.5) converge muito rapidamente para uma solução desde que se esteja no interior da região de existência de um ciclo- Q , enquanto fora dessa região não se observa nenhuma convergência, cujo critério adotado foi

$$\max(|\delta x_0^{(i)}|, |\delta y_0^{(i)}|) < 10^{-9}. \quad (4.6)$$

O número máximo de iterações escolhido foi 20, ou seja, se o processo não convergisse dentro de 20 iterações considerava-se que se estava fora da região de existência de um ciclo- Q . Assim, partindo-se de um ponto no interior da região de existência de um ciclo- Q e um ponto fora, determinamos a fronteira da fase por meio de um processo de bissecção (Press *et al.*, 1986).

Em certas regiões do diagrama de fases o processo iterativo converge para um *repulsor* do mapeamento. Este tipo de órbita não pode ser obtida por meio de iteração do mapeamento, vale dizer, não se realiza na rede de Bethe, e portanto não tem interesse físico. A distinção entre atratores e repulsores pode ser feita sem dificuldades por meio do cálculo do expoente de Lyapunov. Esta distinção será importante na seção 6.6, quando estudaremos as regiões de instabilidade no interior de certas fases comensuráveis.

É claro que a convergência do processo iterativo pode depender do ponto inicial escolhido, e que a falta de convergência não significa necessariamente que a fase não exista. Entretanto a experiência mostra que essas fases problemáticas preenchem apenas pequenas regiões do diagrama de fases, e que partindo-se de um conjunto abrangente de pontos iniciais podemos obter resultados confiáveis.

Um outro aspecto a considerar é que diferentes condições iniciais podem convergir para diferentes ciclos- Q . Neste caso dizemos que coexistem diferentes fases comensuráveis com um mesmo período. Esse aspecto será estudado em maior detalhe na seção 6.5.

4.3 Método baseado na minimização da função ϕ

As regiões de estabilidade de fases comensuráveis tornam-se muito estreitas para períodos longos, e também nas regiões de altas temperaturas. Muitas vezes, a largura dessas fases torna-se menor que a precisão numérica adotada nos cálculos. O procedimento discutido na seção anterior, que dependia de se conhecer um ponto no interior da região de existência da fase, torna-se claramente inaplicável nestas circunstâncias. Nestes casos, um procedimento alternativo revelou-se de extrema valia.

Definamos a função

$$\phi(T, p, H, Q) = \min_{\mathbf{X}_0} \|\mathbf{X}_Q - \mathbf{X}_0\|^2, \quad (4.7)$$

onde $\mathbf{X}_Q = \mathbf{F}^{(Q)}(\mathbf{X}_0)$, e $\|\mathbf{X}\| = \|(x, y)\| = \sqrt{x^2 + y^2}$. A função ϕ representa a menor “distância ao quadrado” entre os pontos \mathbf{X}_0 e $\mathbf{X}_Q = \mathbf{F}^{(Q)}(\mathbf{X}_0)$, e portanto tem a propriedade de se anular na região onde existe um ciclo- Q . Para a minimização da função de duas variáveis utilizamos a rotina DUMCGG do IMSL (1987), baseada no método do gradiente conjugado. A figura 4.1 mostra um exemplo da função ϕ para uma fase comensurável que apresenta uma largura apreciável, a fase 4/23. Observamos que existe um intervalo onde a função ϕ se anula, correspondendo à região onde existe o ciclo- Q . A fronteira de estabilidade pode ser determinada pelo método da secante (Press *et al.*, 1986) aplicado à

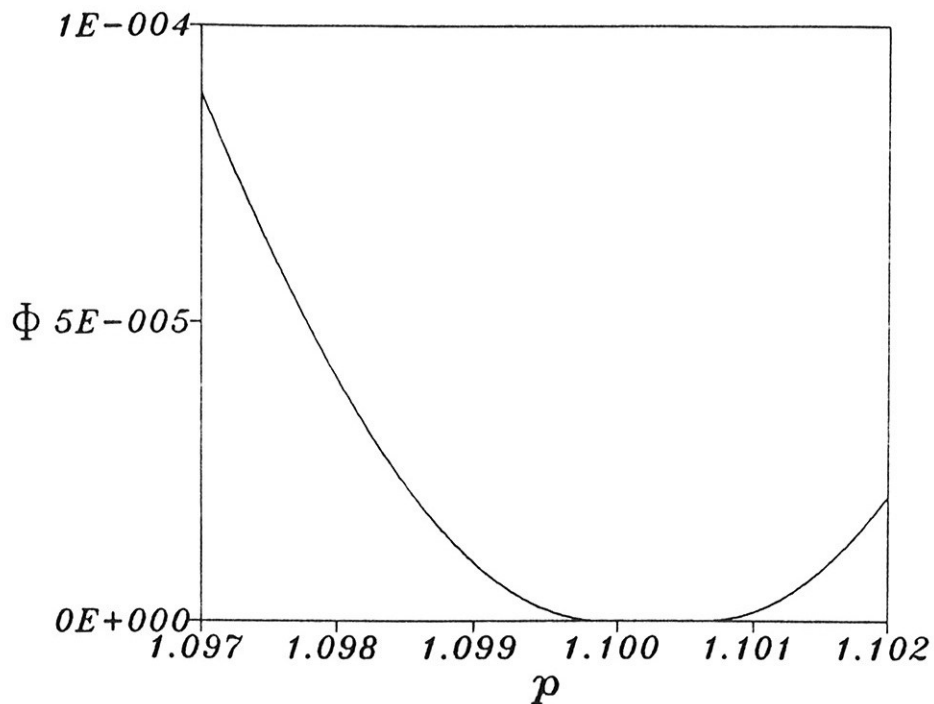


Figura 4.1: Função $\phi(p)$ para $Q = 23$, para $H = 0$, $T = 0,25$ e condições iniciais $(x_1, y_1) = (1, 1)$.

equação $\phi = 0$, partindo-se de dois pontos fora da fase comensurável. A figura 4.2 mostra um exemplo da função ϕ para uma fase que nessa região é muito estreita, a fase $27/155$, não havendo uma largura detectável dentro da precisão numérica adotada. A solução da equação $\phi = 0$ localiza a posição dessa fase dentro da precisão numérica considerada.

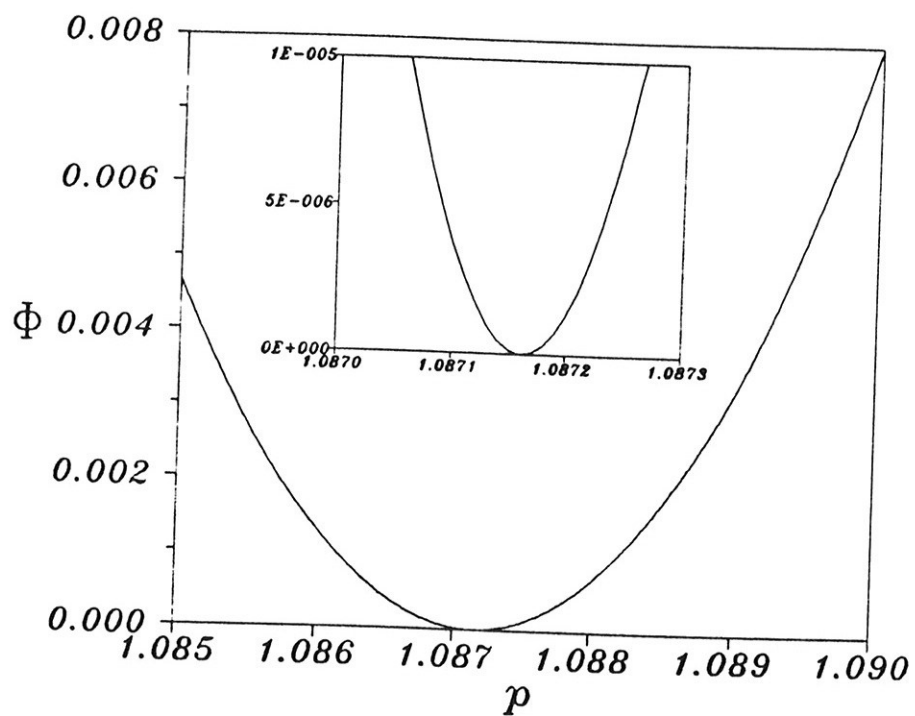


Figura 4.2: Função $\phi(p)$ para $Q = 155$, $H = 0$, $T = 0,6$ e condições iniciais $(x_1, y_1) = (1, 1)$.

Capítulo 5

Diagrama de fases a campo nulo

5.1 Introdução

O modelo de Ising com interações competitivas na rede de Bethe, no limite de coordenação infinita, foi estudado na ausência de campo por Yokoi, de Oliveira e Salinas (1985). A figura 5.1 mostra o diagrama de fases global por eles determinado.

Além de resultados numéricos obtidos por iteração do mapeamento, eles também calcularam analiticamente as regiões de estabilidade das fases paramagnética e ferromagnética. Por uma questão de completeza, esses cálculos serão reproduzidos nas seções 5.2 e 5.3. Na seção 5.4 discutiremos algumas características adicionais do diagrama de fases que serão importantes na compreensão do modelo na presença do campo. Na seção 5.5 compararemos os atratores estranhos por nós obtidos com o de Yokoi *et al.* (1985).

5.2 Limites de estabilidade da fase paramagnética a campo nulo

A fase paramagnética a campo nulo corresponde ao ponto fixo trivial $x^* = y^* = 0$. A matriz do mapeamento linearizado L definida

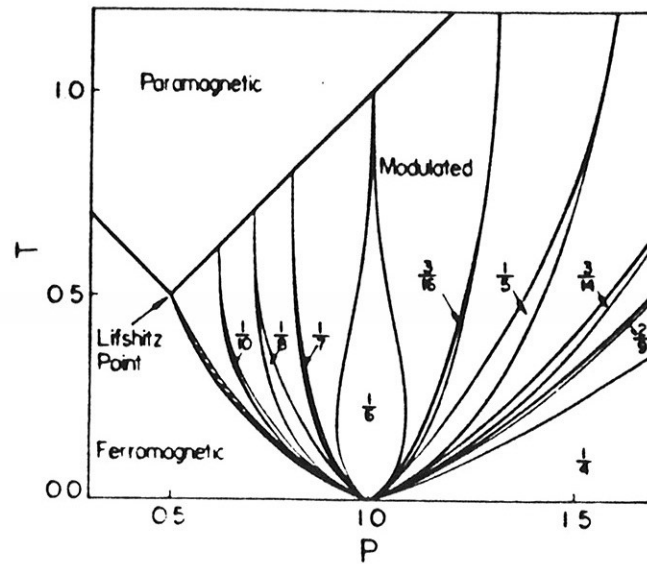


Figura 5.1: Diagrama de fases do modelo a campo nulo (Yokoi, de Oliveira e Salinas, 1985).

em (3.40) coincide, nesse caso, com a matriz jacobiana J calculada no ponto fixo trivial. Da fórmula (3.41) obtemos imediatamente que

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{p}{T} & \frac{1}{T} \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Portanto os autovalores da matriz L são dados por

$$\left. \begin{matrix} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2T} (1 \pm \sqrt{1 - 4pT}). \quad (5.2)$$

Vemos que os autovalores Λ_i são reais à esquerda da curva $4pT = 1$, enquanto são complexos à direita dessa curva. Essa curva corresponde à chamada curva de desordem (Stephenson, 1970). A natureza real ou complexa dos autovalores se reflete no modo como os pontos do mapeamento

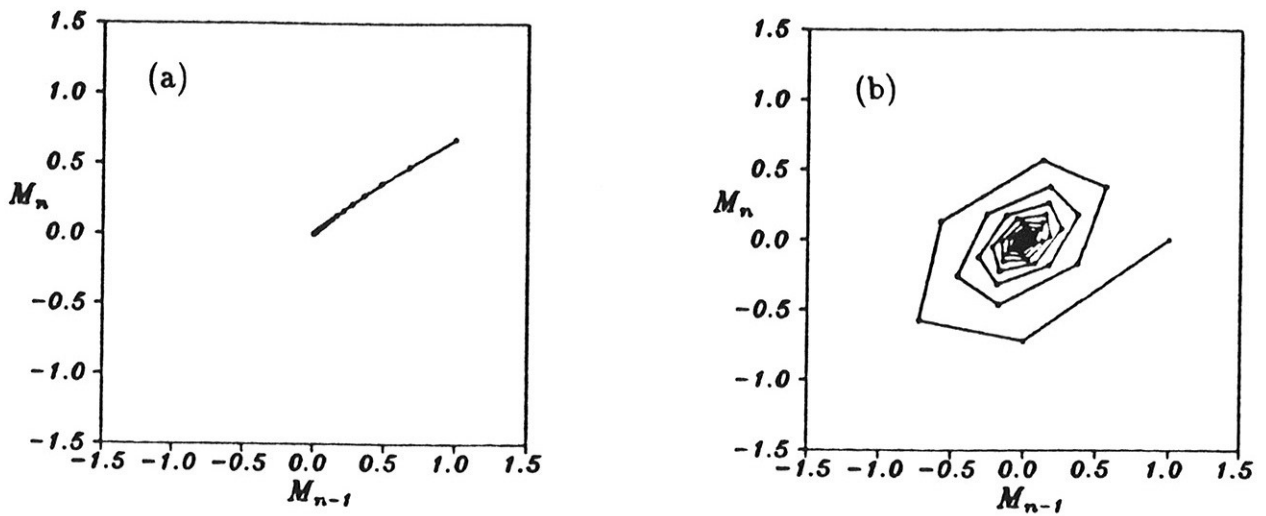


Figura 5.2: Convergência do mapeamento ao ponto fixo paramagnético, a campo nulo. Estão representadas as primeiras 1.000 iterações . (a) $p = 0,1$ e $T = 1,1$. (b) $p = 1$ e $T = 1,1$.

se aproximam do ponto fixo. No caso em que eles são reais e positivos, a aproximação se dá de forma monótona, como mostrado na figura 5.2a. No entanto, se eles são complexos a aproximação se dá em espiral, como na figura 5.2b.

A fase paramagnética é estável desde que $\max\{|\Lambda_1|, |\Lambda_2|\} < 1$. Para $p < 1/2$ a fase paramagnética torna-se instável ao longo da linha

$$T = 1 - p, \quad (5.3)$$

sobre a qual os autovalores são reais e iguais a 1. Já para $p > 1/2$, a fase paramagnética torna-se instável ao longo da linha

$$T = p, \quad (5.4)$$

sobre a qual os autovalores são números complexos de módulo unitário, dados por

$$\left. \begin{array}{l} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{array} \right\} = e^{\pm i q_c}, \quad (5.5)$$

onde

$$q_c = \cos^{-1} \left(\frac{1}{2p} \right). \quad (5.6)$$

Portanto para $p < 1/2$ a fase paramagnética torna-se instável frente à fase ferromagnética, e para $p > 1/2$ frente à fase modulada. q_c é o chamado *número de onda crítico*, que determina o número de onda da estrutura modulada que se encontra imediatamente abaixo da linha de transição para a fase paramagnética.

O ponto de intersecção das linhas para-ferro e para-modulada, de coordenadas $(p, T) = (1/2, 1/2)$, corresponde ao ponto de Lifshitz (Hornreich, Luban e Shtrikman, 1975).

5.3 Limite de estabilidade da fase ferromagnética a campo nulo

A fase ferromagnética corresponde ao ponto fixo da forma $x^* = y^* = M \neq 0$. A matriz L é, neste caso,

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{p}{T}(1 - M^2) & \frac{1}{T}(1 - M^2) \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

onde M é a magnetização local dada por

$$M = \tanh \left(\frac{1-p}{T} M \right). \quad (5.8)$$

Os autovalores da matriz L são

$$\left. \begin{array}{l} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{array} \right\} = \frac{1-M^2}{2T} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4pT}{1-M^2}} \right). \quad (5.9)$$

A condição de estabilidade da fase ferromagnética é dada por $\max\{|\Lambda_1|, |\Lambda_2|\} < 1$. Para $p < 1/2$, o limite de estabilidade da fase ferromagnética coincide com o da fase paramagnética determinada na seção anterior. Para $p > 1/2$, o limite de estabilidade é demarcado pela curva

$$T = p(1 - M^2), \quad (5.10)$$

onde M é determinada pela equação (5.8). Essa curva está representada na figura 5.3. Observamos que existe uma região onde a fase ferromagnética e as fases moduladas coexistem. Este fato já tinha sido observado por Yokoi *et al.* (1985). A figura 5.3 mostra que uma porção considerável da fase modulada 1/14 coexiste com a fase ferromagnética.

O limite de estabilidade das fases moduladas em relação à fase ferro não pode ser calculado de forma simples, pois há uma infinidade de fases moduladas cujo período aumenta quanto mais próxima ela é da fase ferromagnética. A alternativa adotada foi determinar numericamente este limite, iterando o mapeamento e observando até onde a fase modulada penetra no interior da fase ferromagnética. A curva que representa o

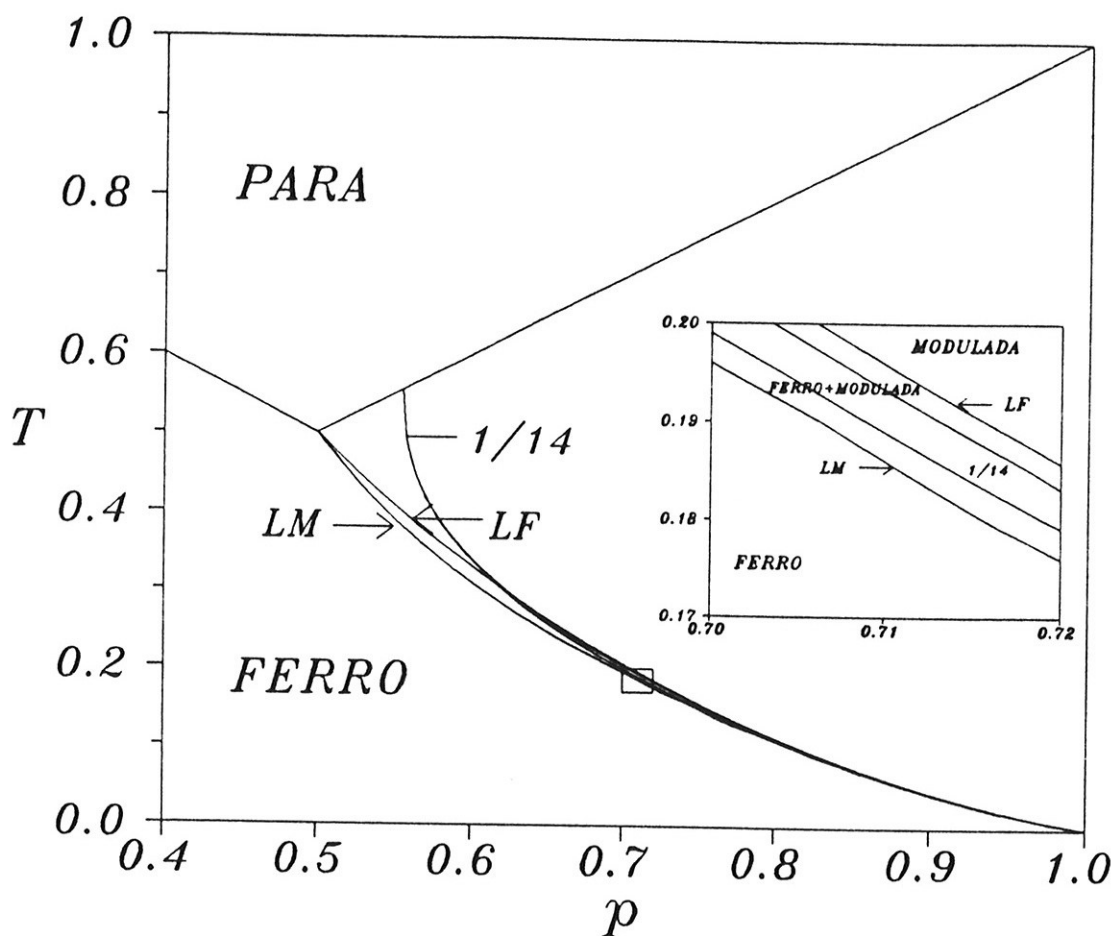


Figura 5.3: Fase 1/14 a campo nulo na região de coexistência com a fase ferromagnética. A linha LM representa o limite de estabilidade das fases moduladas e a linha LF representa o limite de estabilidade da fase ferromagnética.

limite de estabilidade da fase modulada também está representada na figura 5.3.

5.4 Características adicionais do diagrama de fases a campo nulo

Trataremos nesta seção de alguns detalhes do diagrama de fases do modelo a campo nulo. Eles nos interessam pois permitem uma melhor compreensão do comportamento do modelo na presença de campo

magnético.

Inicialmente, trataremos da forma das fronteiras de fases comensuráveis perto da fase 1/6. As figuras 5.4 e 5.5 exibem detalhes das fases comensuráveis à esquerda da fase 1/6, para valores de p próximos de 1. O mesmo detalhamento, para fases à direita da fase 1/6, está nas figuras 5.6 e 5.7. De forma geral, podemos dizer que as fases comensuráveis perto da fase 1/6 tendem a acompanhar a curvatura da fase 1/6 a baixas temperaturas, mas desta se afastam a altas temperaturas¹. Isto significa que, para um valor fixo de p , podemos encontrar uma mesma fase comensurável para diferentes temperaturas. Por exemplo, como mostrado na figura 5.5, aumentando-se a temperatura a partir de 0, para $p = 0,9$, encontramos a fase 5/32 duas vezes, e a fase 12/77 três vezes. Comportamentos semelhantes são ilustrados na figura 5.7, para o valor de $p = 1,1$, quando encontramos as fases 4/23, 27/155 e 34/195 duas vezes, e a fase 7/40 três vezes.

Outra forma de visualizar o que ocorre com as fases moduladas nessa região é calcular o número de onda em função da temperatura, para um valor fixo de p . A determinação do número de onda foi feita através do método usual baseado na iteração do mapeamento (Vannimenus, 1982), partindo do fato de que

$$\frac{q}{2\pi} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{2N}, \quad (5.11)$$

onde n é o número de vezes que a magnetização muda de sinal ao longo de N iterações do mapeamento (3.35). Na prática, descartamos 10.000 iterações iniciais e calculamos q baseados nas 10.000 iterações subseqüentes.

¹Neste detalhe, nossos resultados se aproximam mais dos de Selke e Duxbury (1984) do que dos de Jensen e Bak (1983) para o modelo ANNNI, como podemos ver nas figuras 2.3 e 2.4.

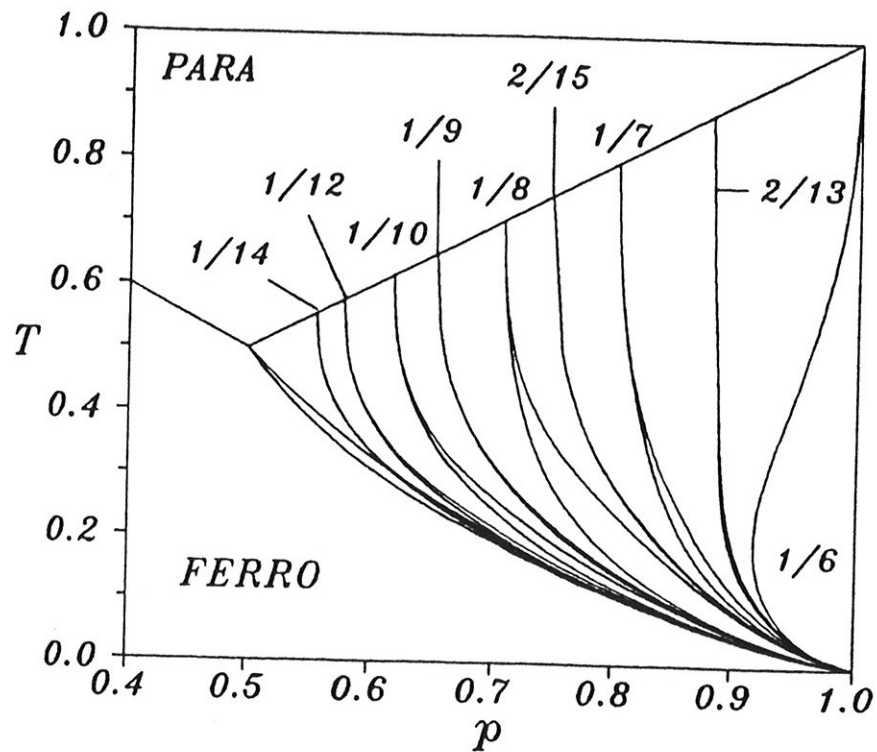


Figura 5.4: Detalhe do diagrama de fases global para $p < 1$.

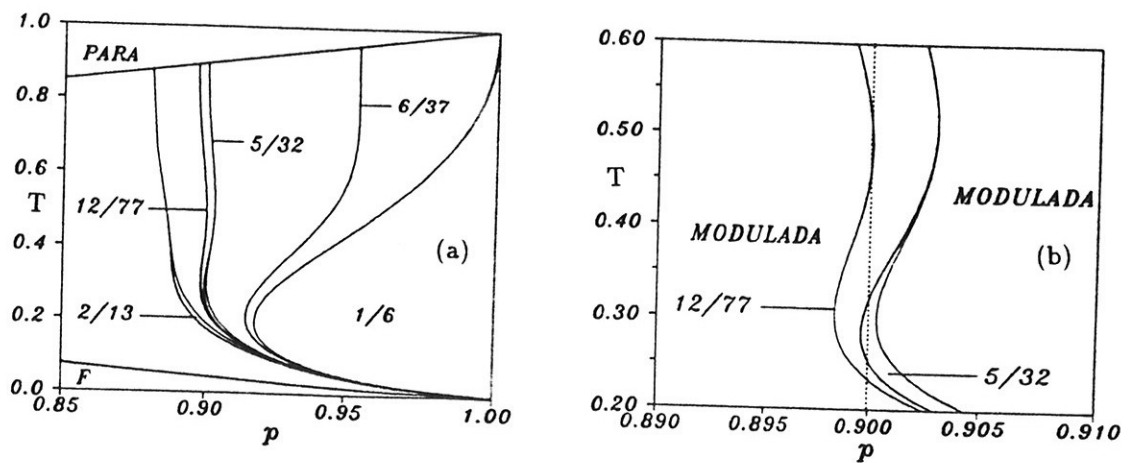


Figura 5.5: Detalhes do diagrama anterior. Em (a) observamos a forma geral de algumas fases próximas à fase $1/6$. Em (b) registra-se as três interseções da fase $12/77$ com a reta $p = 0,9$ e a região de intersecção da fase $5/32$ com a referida reta.

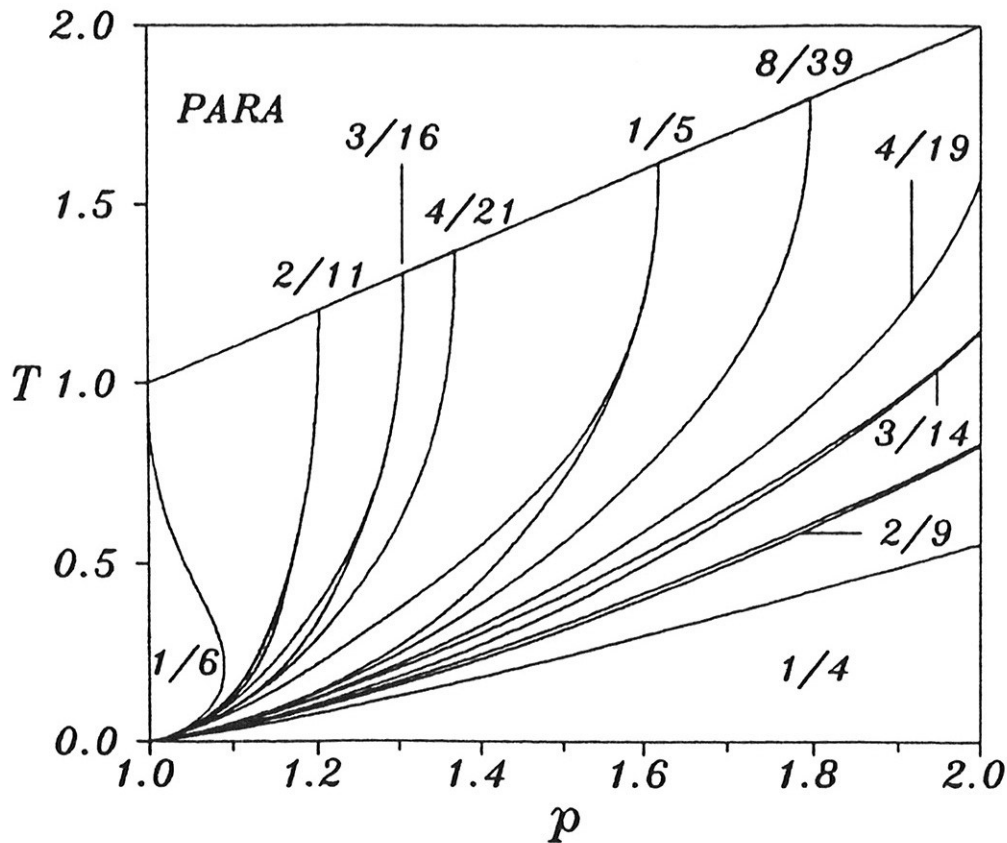


Figura 5.6: Detalhe do diagrama de fases global para $p > 1$.

Os diagramas q versus T para $p = 0,9$ e $p = 1,1$ estão mostrados na figura 5.8. O aspecto mais notável é a ausência de monotonicidade do número de onda, relacionada ao retorno de uma mesma fase comensurável para diferentes temperaturas. Um fenômeno análogo também foi observado na teoria de campo médio do modelo ANNNI (Bak e von Boehm, 1980).

Yokoi *et al.* (1985) estudaram como varia o número de onda q em função de p , para temperatura fixa. Eles determinaram a dimensão fractal (D_F) associada às fases incomensuráveis e mostraram que a baixas temperaturas predominam as fases comensuráveis ($D_F < 1$) e a altas

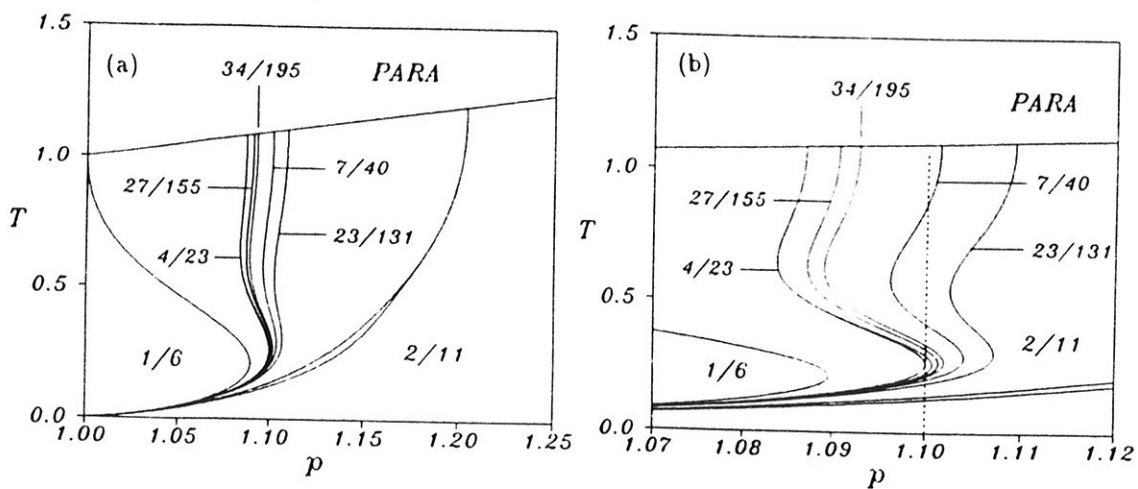


Figura 5.7: Detalhes do diagrama anterior. Em (a) mostra-se a forma geral das fases próximas à fase 1/6. Em (b) observa-se as múltiplas intersecções das fases 7/40, 27/155, 34/195 e a região de intersecção da fase 4/23 com a reta $p = 1, 1$.

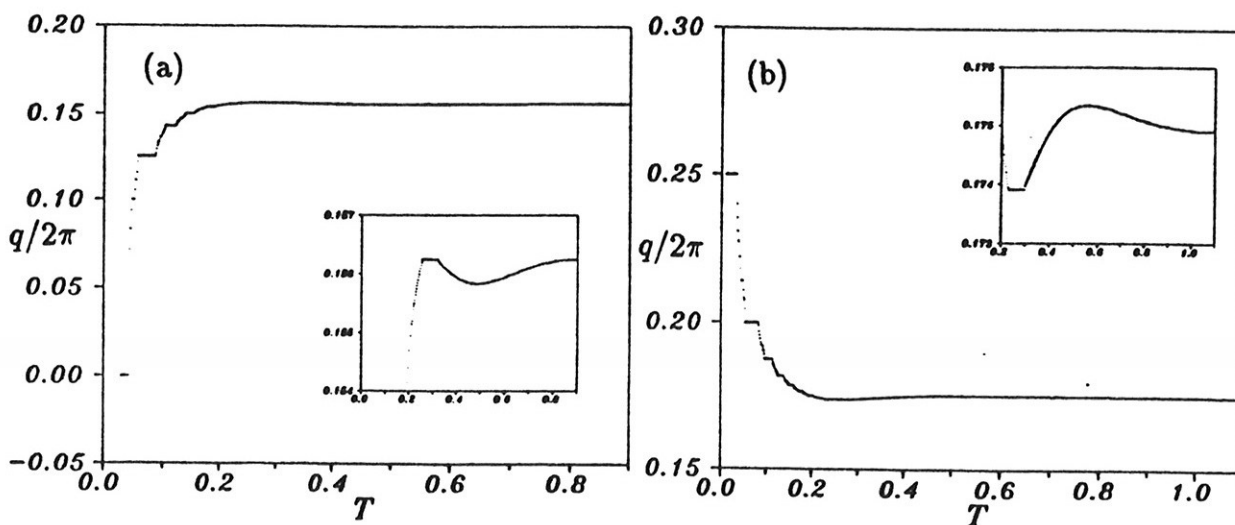


Figura 5.8: $q/2\pi$ versus T para (a) $p = 0,9$ e (b) $p = 1,1$.

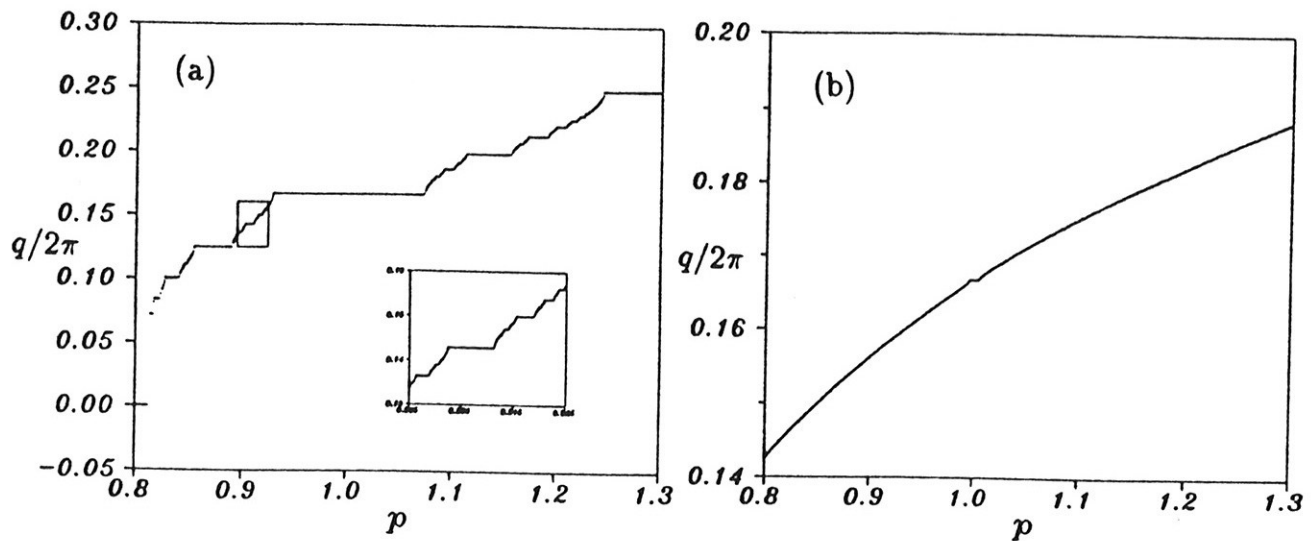


Figura 5.9: $q/2\pi$ versus p para (a) $T = 0, 1$ e (b) $T = 0, 8$.

temperaturas predominam as fases incomensuráveis ($D_F = 1$). As figuras 5.9a e 5.9b mostram a diferença de comportamento a baixas e altas temperaturas.

As fases incomensuráveis são qualitativamente diferentes a baixas e altas temperaturas. A altas temperaturas elas são representadas por um atrator unidimensional, e correspondem a fases incomensuráveis deslizantes (figura 5.10a). A baixas temperaturas, a órbita adquire um aspecto mais desconexo, havendo aparentemente regiões que jamais são visitadas. Ela deve corresponder a uma fase incomensurável travada (figura 5.10b).

Há uma diferença entre as fases comensuráveis de período par e aquelas de período ímpar. Nas fases de período ímpar coexistem dois tipos de estruturas moduladas distintas, relacionadas entre si por uma inversão global das magnetizações (figuras 5.11 e 5.12). Um caso trivial é a fase ferromagnética, que pode ter magnetização positiva ou negativa. No caso das fases com período par, por outro lado, esses dois tipos de estruturas são idênticas (figura 5.13). Essa diferença entre fases com

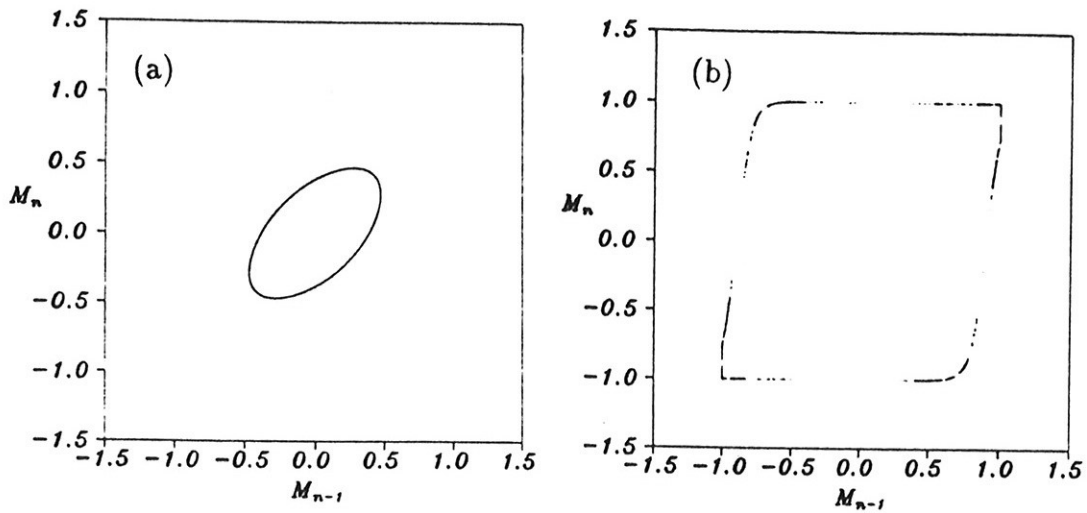


Figura 5.10: Fases incomensuráveis a campo nulo: (a) deslizante, para $p = 0,85$ e $T = 0,8$ e (b) travada, para $p = 0,902328$ e $T = 0,1$.

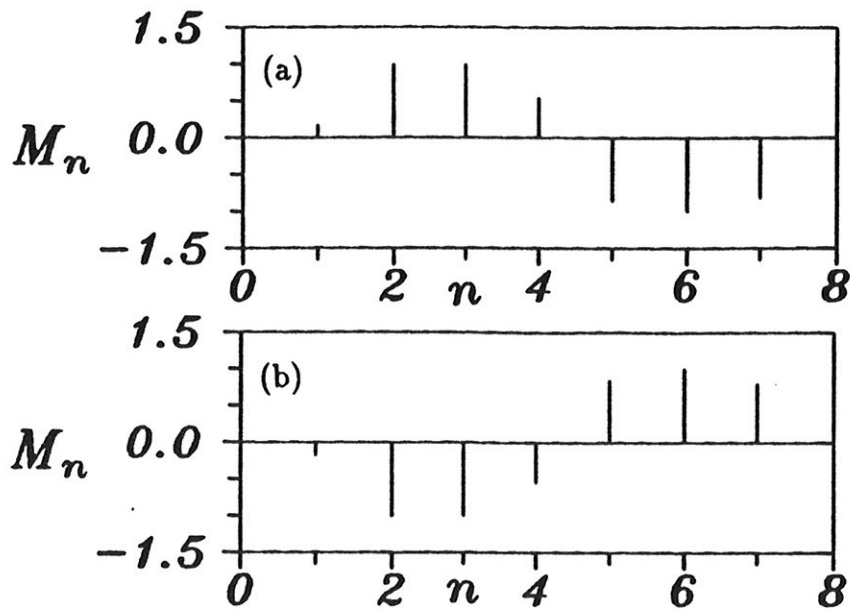


Figura 5.11: Configurações diferentes da fase $1/7$ a campo nulo, para $p = 0,85$, $T = 0,25$ e condições iniciais (a) $(x_1, y_1) = (1, 1)$ e (b) $(x_1, y_1) = (1, -1)$.

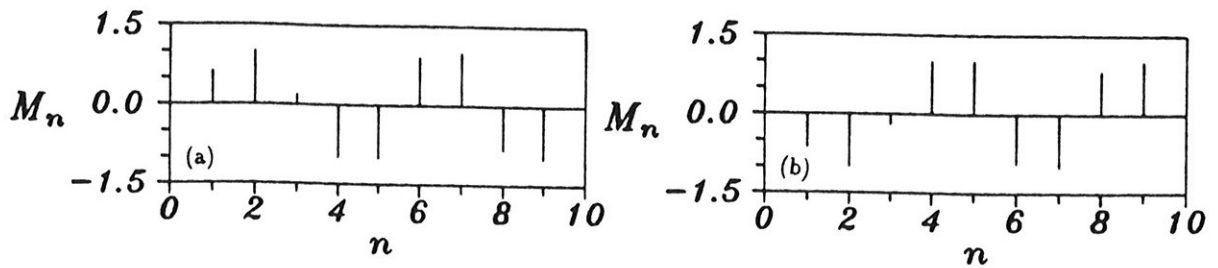


Figura 5.12: Configurações diferentes da fase 2/9 a campo nulo, para $p = 1, 5$, $T = 0, 32$ e condições iniciais (a) $(x_1, y_1) = (1, -1)$ e (b) $(x_1, y_1) = (1, 1)$.

períodos pares e ímpares tem importantes conseqüências no diagrama de fases na presença do campo magnético, como veremos no capítulo 6.

5.5 Atratores estranhos a campo nulo

A região de coexistência de fases ferro-modulada abriga estruturas moduladas caóticas, correspondendo a atratores estranhos. Eles podem ser detectados pelo cálculo do maior expoente de Lyapunov do mapeamento que, nestes casos, é positivo. Yokoi *et al.* (1985) encontraram o atrator estranho representado na seqüência de diagramas da figura 5.14, que mostra a sua natureza auto-similar. Prado e Fiedler-Ferrari (1989) calcularam a dimensão fractal do atrator, obtendo o valor $1,11 \pm 0,01$. Neste caso, o valor não concorda com aquele obtido através da conjectura de Kaplan-Yorke, que é de $1,182 \pm 0,001$.

A temperaturas mais baixas, podemos observar atratores estranhos com estruturas ligeiramente diferentes, exibindo mais lacunas, como na figura 5.15. Veremos, no capítulo 6, que comportamento semelhante ocorre na presença de campo magnético. Este tipo de atrator já foi observado por Curry e Yorke (1978), para o caso de um mapeamento que

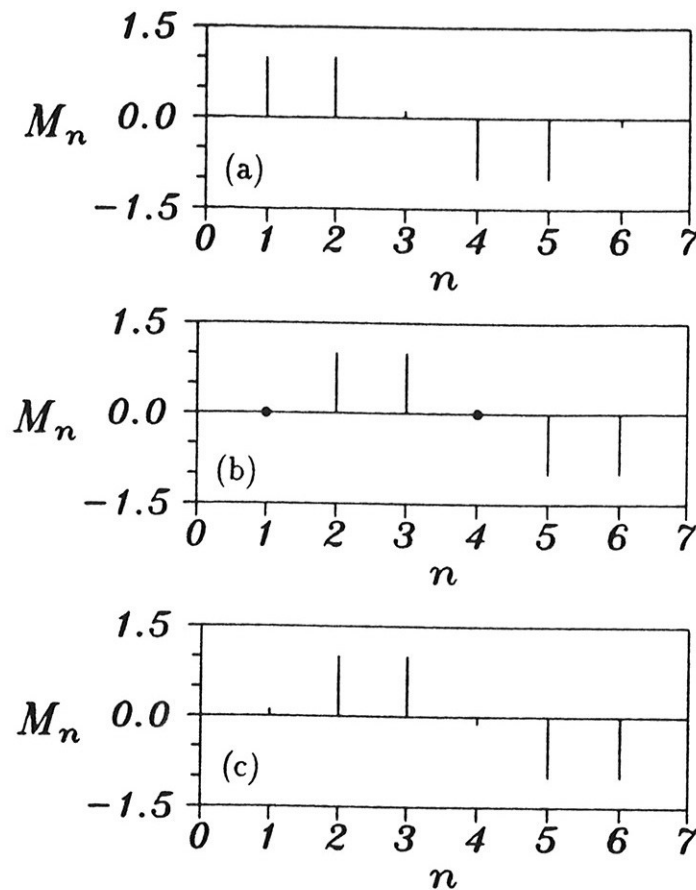


Figura 5.13: Configurações da fase 1/6 a campo nulo, para $T = 0,3$ e (a) $p = 0,97$, (b) $p = 1$ e (c) $p = 1,03$. Note-se que elas são invariantes por uma inversão global das magnetizações.

exibe órbitas unidimensionais que tornam-se atratores estranhos com a variação contínua de um parâmetro.

Alguns autores atribuem à fase vidro de spins um aspecto caótico (MacKay, Berker e Kirkpatrick, 1982; Bray e Moore, 1987). Baseados nesta hipótese, Carneiro e Wreszinski (1991) mostraram que os atratores estranhos deste modelo são bons candidatos a representar este tipo de ordem vítrea.

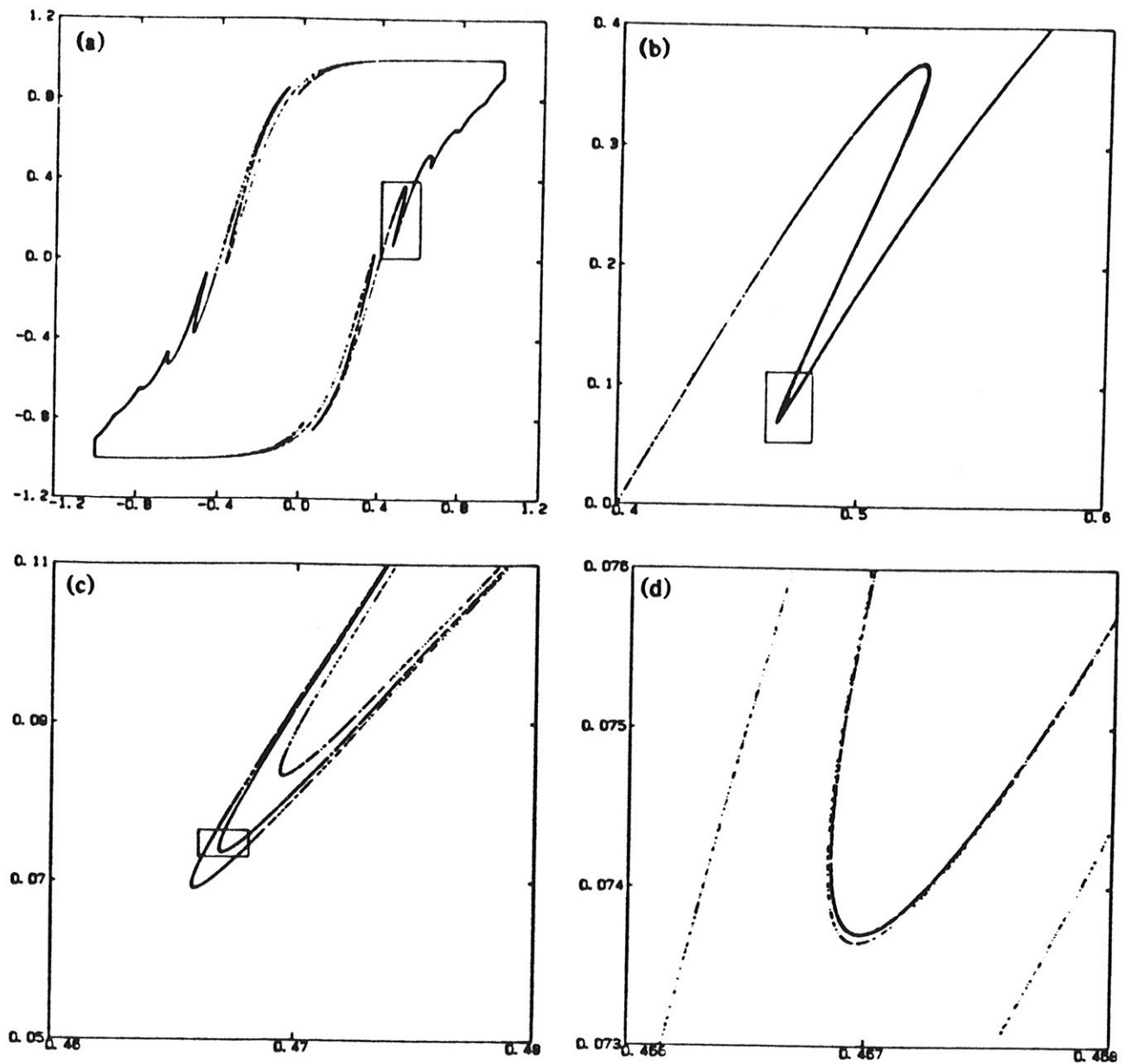


Figura 5.14: Atrator estranho obtido por Yokoi *et al.* (1985) a campo nulo, para $p = 0,69662$, $T = 0,2$ e condições iniciais $(x_1, y_1) = (1, 1)$.

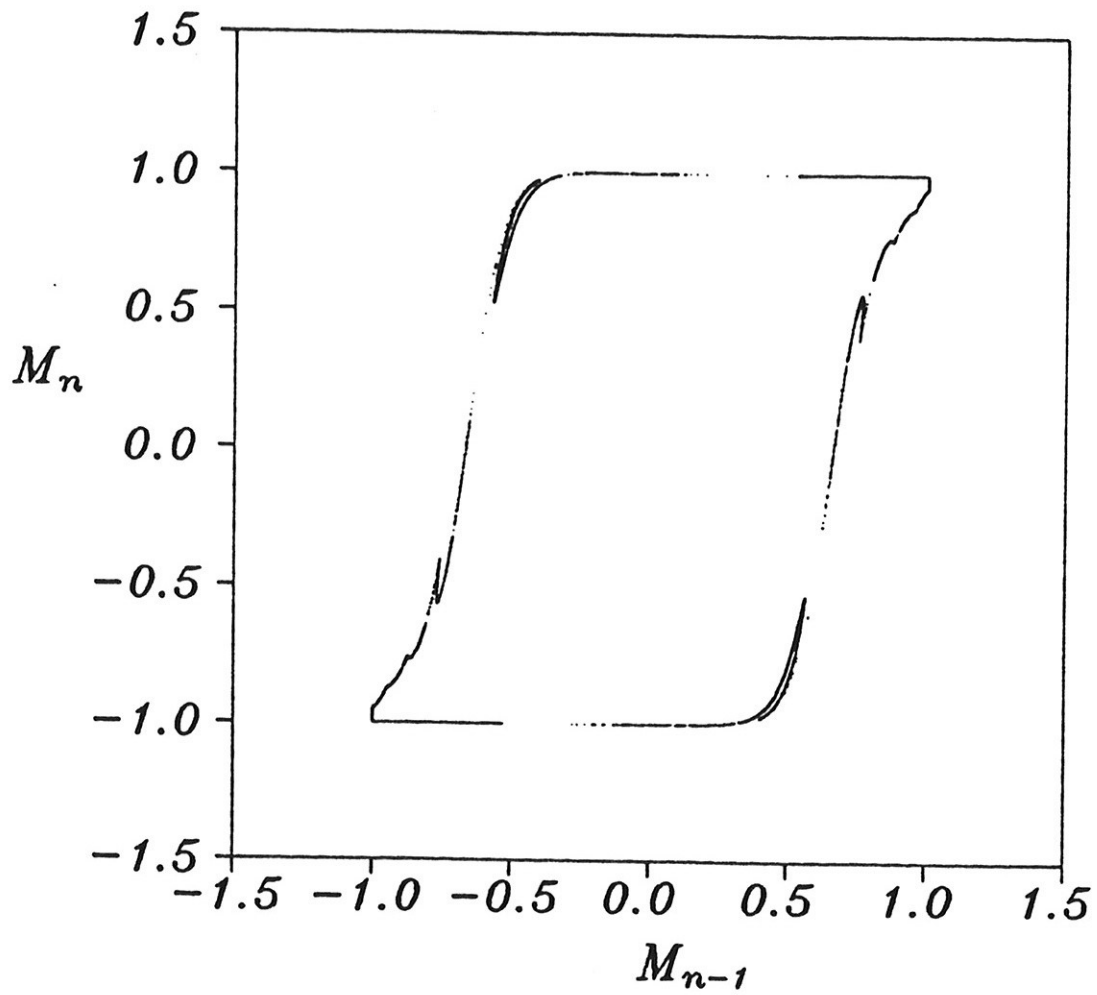


Figura 5.15: Atrator estranho com lacunas, a campo nulo, para $p = 0,8158$, $T = 0,1$ e condições iniciais $(x_1, y_1) = (1, 1)$. As primeiras 10.000 iterações foram descartadas, e estão representadas as 50.000 seguintes. O maior expoente de Lyapunov associado a este atrator é 0,06.

Capítulo 6

Diagramas de fases na presença de campo

6.1 Introdução

O comportamento das fases moduladas na presença de campo magnético externo é, neste modelo, extremamente complexo. Torna-se necessário, portanto, restringir os aspectos a serem explorados, já que não podemos ter a pretensão de esgotar esse assunto. Concentramos nossa atenção no estudo do comportamento das fases comensuráveis, através do levantamento de diagramas de fases em cortes no espaço $p - T - H$ para diferentes valores de p .

Este capítulo está assim organizado. Na seção 6.2, descrevemos o diagrama de fases do estado fundamental do modelo. Na seção 6.3 determinamos analiticamente o limite de estabilidade da fase paramagnética. Na seção 6.4 serão exibidos diagramas de fases globais nos planos $T - H$ para diversos valores de p . A coexistência de fases comensuráveis com mesmo número de onda e estruturas diferentes será objeto da seção 6.5. A seção 6.6 tratará das regiões de coexistência de fases moduladas de números de onda diferentes, que podem ser observadas para diferentes valores do parâmetro de competição. Na seção 6.7, fases

incomensuráveis na presença de campo magnético serão mostradas e seu comportamento discutido. A ocorrência de atratores estranhos na presença de campo é o tema na seção 6.8. Finalmente, a comparação dos resultados deste modelo com os do modelo ANNNI na presença de campo será feita na seção 6.9.

6.2 Estado fundamental do modelo

No limite $T \rightarrow 0$, a relação de recorrência (3.31) toma a forma

$$M_n = \text{sign}(M_{n-1} - pM_{n-2} + H), \quad (6.1)$$

onde $\text{sign}(x)$ é a função sinal de x ,

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0, \\ 0 & \text{se } x = 0, \\ -1 & \text{se } x < 0. \end{cases} \quad (6.2)$$

Não é difícil determinar os atratores desse mapeamento. O resultado está mostrado na figura 6.1.

Na região A, caracterizada por $H < 1 - p$ e $H > p - 1$, os pontos fixos $(1, 1)$ e $(-1, -1)$ são estáveis e são atingidos através de condições iniciais adequadas. Portanto nessa região coexistem as fases $+$ e $-$. Na região B, caracterizada por $H \geq 1 - p$ e $H > p - 1$, somente o ponto fixo $(1, 1)$ é estável, correspondendo à fase $+$. Inversamente, na região C, caracterizada por $H \leq p - 1$ e $H < 1 - p$, somente o ponto fixo $(-1, -1)$ é estável, correspondendo à fase $-$. Finalmente, na região D, caracterizada por $H < p - 1$ e $H > 1 - p$, o único atrator estável é um ciclo-4 correspondendo a uma antifase $(2, 2)$ da forma $\cdots ++ -- ++ -- \cdots$.

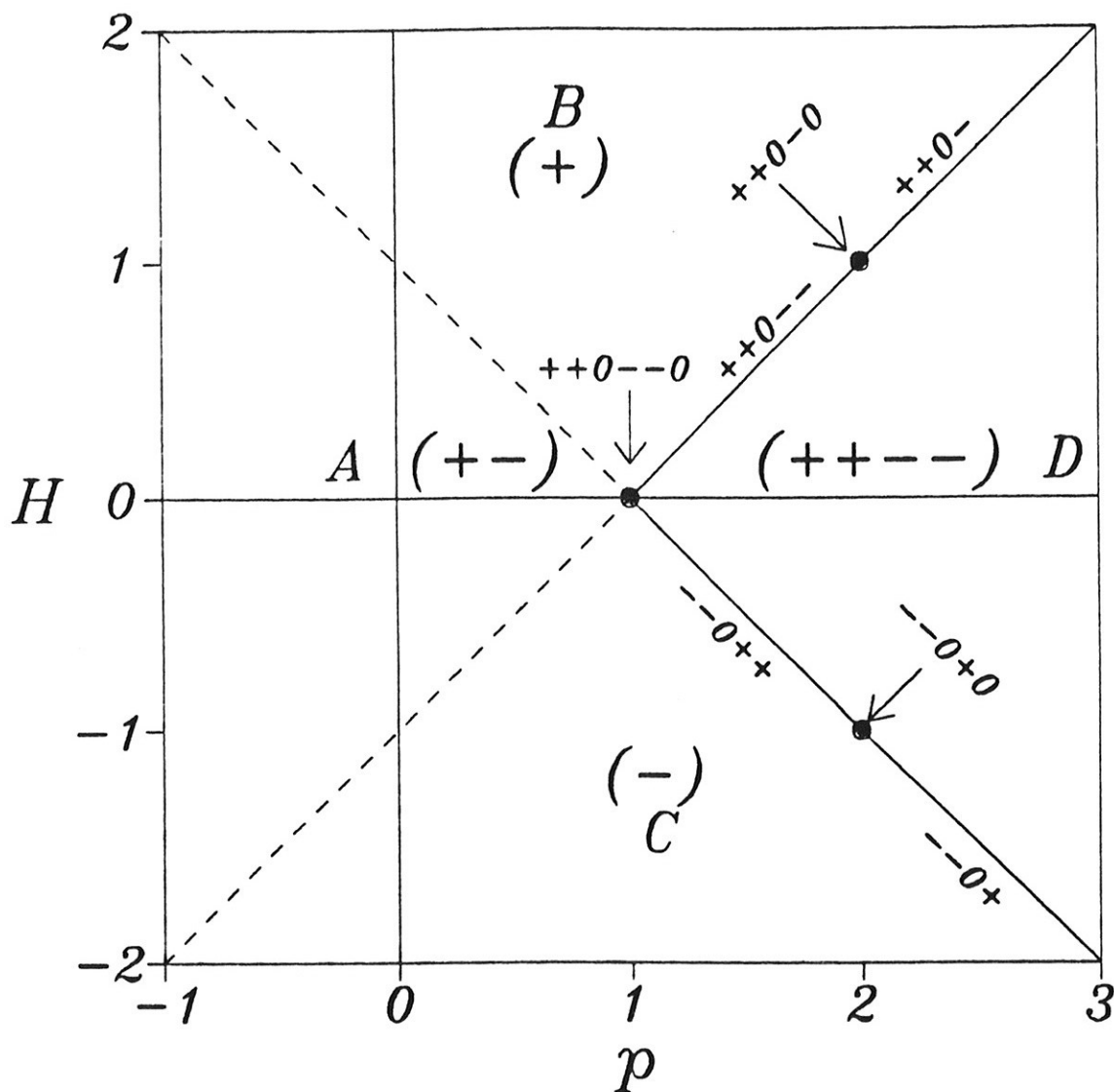


Figura 6.1: Estado fundamental do modelo.

Contrariamente ao modelo ANNNI (Yokoi *et al.*, 1981), as linhas $H = p - 1$ e $H = 1 - p$, para $p \geq 1$, não constituem linhas onde o estado fundamental é infinitamente degenerado, conhecidas como linhas de multifases. Com efeito, exatamente sobre o ponto $p = 1$ e $H = 0$ o único atrator é um ciclo-6, da forma $\cdots + +0 - -0 + +0 - -0 \cdots$. Exatamente sobre a linha $H = p - 1$ ocorre o seguinte: para $1 < p < 2$ o único atrator estável é um ciclo-5 da forma $\cdots + +0 - - + +0 - - \cdots$, para $p = 2$ o único atrator é um ciclo-5 da forma $\cdots + +0 - 0 + +0 - 0 \cdots$, e finalmente para $p > 2$ o único atrator é um ciclo-4 da forma $\cdots + +0 - + + 0 - \cdots$. Resultados idênticos, exceto por uma inversão global dos spins, repete-se sobre a linha $H = 1 - p$. Embora não haja degenerescência sobre essas linhas, veremos que a temperaturas diferentes de zero muitas, possivelmente infinitas, fases tendem a convergir para essas linhas. É dentro deste entendimento que iremos nos referir a essas linhas como sendo de multifases.

Os diagramas de fases obtidos para temperaturas maiores que zero mostram que o estado fundamental determina a fase modulada que se encontra imediatamente acima dele. O comportamento é particularmente interessante sobre as linhas de multifases. Assim, no diagrama de fases 6.12 vemos que imediatamente acima do ponto de multifases em $H = 0$ a fase que se realiza é $1/6$ e tem a estrutura mostrada na figura 5.13b. Já para $1 < p \leq 2$, como no diagrama de fases da figura 6.20, a fase que se realiza imediatamente acima do ponto de multifases $H = 0$, 5 é a fase $1/5$. Finalmente, para $p > 2$ a fase que se realiza imediatamente acima do ponto de multifases é a antifase (2,2), como no diagrama de fases 6.23.

6.3 Limite de estabilidade da fase paramagnética na presença de campo magnético

A determinação do limite de estabilidade da fase paramagnética do modelo na presença de campo é análoga à determinação do limite de estabilidade da fase ferromagnética a campo nulo. Na presença de campo magnético, o ponto fixo paramagnético tem a forma $x^* = y^* = M \neq 0$, onde M é a magnetização local dada pela solução da equação

$$M = \tanh \frac{1}{T} [(1 - p)M + H]. \quad (6.3)$$

Os autovalores da matriz linearizada do mapeamento L , calculados no ponto fixo, são dados por

$$\left. \begin{array}{l} \Lambda_1 \\ \Lambda_2 \end{array} \right\} = \frac{1 - M^2}{2T} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4pT}{1 - M^2}} \right). \quad (6.4)$$

O limite de estabilidade é determinado pela condição

$$\max \{ |\Lambda_1|, |\Lambda_2| \} = 1, \quad (6.5)$$

que fornece, como função de T e p , a magnetização M_c na fronteira de estabilidade. O campo correspondente pode ser obtido invertendo-se a equação (6.3),

$$H_c = (p - 1)M_c + \frac{1}{2}T \tanh^{-1} M_c, \quad (6.6)$$

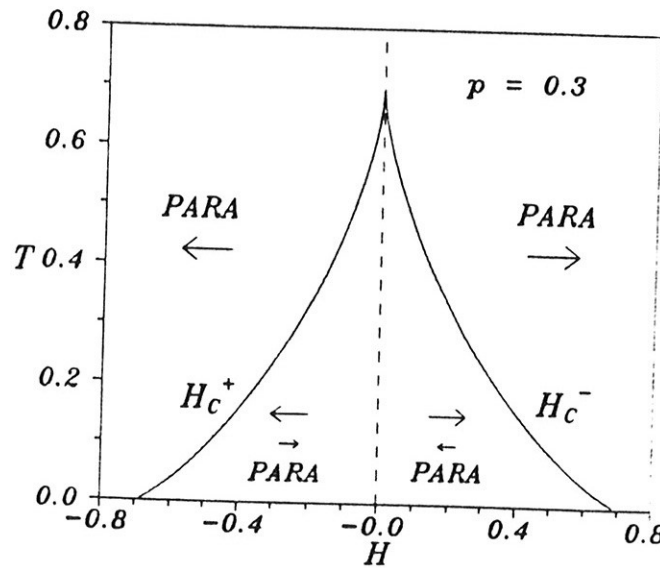


Figura 6.2: Limite de estabilidade de fases paramagnéticas para $p = 0,3$. As setas apontando para a direita (esquerda) representam magnetização positiva (negativa).

a qual determina a fronteira da região de estabilidade no plano $T - H$. Para o caso $p < 1/2$, a equação (6.5) tem as soluções

$$M_c^\pm = \pm \sqrt{1 - \frac{T}{1-p}}. \quad (6.7)$$

Substituindo essas soluções na equação (6.6) obtemos as curvas

$$H_c^+ = H_c(M_c^+) \quad e \quad H_c^- = H_c(M_c^-). \quad (6.8)$$

Essas curvas estão mostradas na figura 6.2. Fora da região delimitada por essas curvas há somente um ponto fixo paramagnético estável, correspondendo a uma magnetização paralela ao campo. Já na região interna coexistem dois pontos fixos correspondendo a magnetizações paralelas e antiparalelas ao campo.

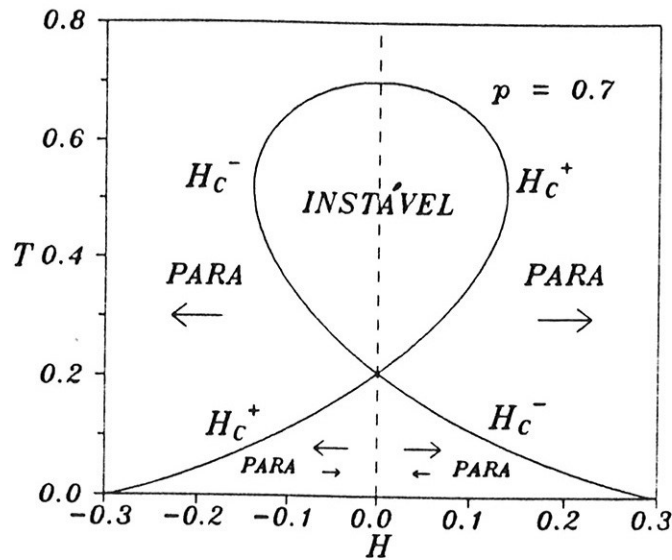


Figura 6.3: Limite de estabilidade de fases paramagnéticas para $p = 0,7$.

Para o caso $p > 1/2$ a equação (6.5) tem as soluções

$$M_c^\pm = \pm \sqrt{1 - \frac{T}{p}}. \quad (6.9)$$

A figura 6.3 mostra as curvas H_c^\pm correspondentes às magnetizações dadas pela equação (6.9) para o caso $1/2 < p < 1$. Na região na forma de bolha, a fase paramagnética é instável, enquanto na região na forma de uma tenda coexistem dois tipos de fases paramagnéticas com magnetizações em sentidos opostos. Finalmente, a figura 6.4 mostra as curvas de estabilidade para o caso $p > 1$. A fase paramagnética é instável no interior da abóbada formada por estas curvas.

Os autovalores Λ_1 e Λ_2 na fronteira de estabilidade são complexos para $p > 1/2$. O vetor de onda crítico q_c , que é também a fase das exponenciais imaginárias correspondentes a estes autovalores, é dado por

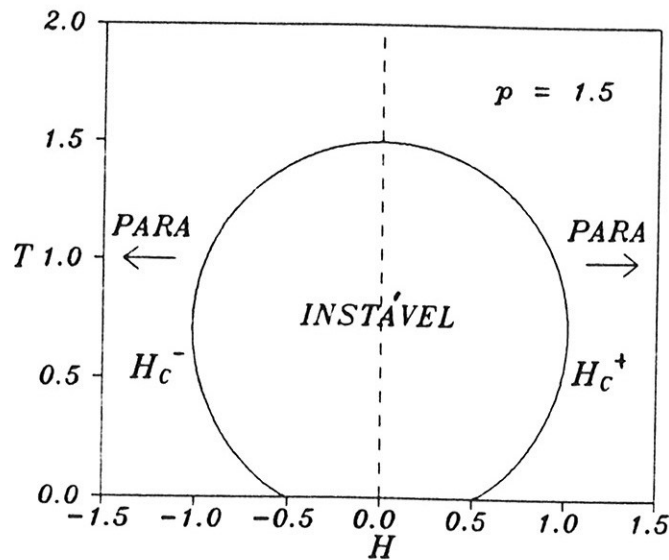


Figura 6.4: Limite de estabilidade de fases paramagnéticas para $p = 1,5$.

$$\cos q_c = \frac{1 - M_c^2}{2T} = \frac{1}{2p}. \quad (6.10)$$

q_c é o vetor de onda da fase modulada na proximidade imediata da fronteira de estabilidade. É notável que esse número de onda independe tanto da temperatura T quanto do campo magnético H . Isto obviamente se reflete no diagrama de fases, como teremos oportunidade de verificar na próxima seção. Esta propriedade do número de onda crítico é também observada na teoria de campo médio do modelo ANNNI (Yokoi *et al.*, 1981).

6.4 Diagramas de fases do modelo na presença de campo magnético

Nesta seção apresentaremos os resultados dos diagramas de fases $T - H$ obtidos para diversos valores do parâmetro p . Ressaltamos que

foi essencial o emprego dos novos métodos descritos no capítulo 3 para o levantamento desses diagramas de fases no grau de detalhamento apresentado. Este trabalho teria sido totalmente inviável se utilizássemos apenas o método baseado na iteração simples do mapeamento. Em relação aos diagramas de fases apresentados nesta seção convém observar que o fato das fases comensuráveis de períodos mais longos serem representadas por linhas, não significa que elas tenham largura nula. Significa somente que não pudemos determinar sua largura e que, dentro da precisão numérica adotada, ela é nula. O que pode ocorrer é que a largura destas fases seja mais estreita ainda do que a espessura da linha que as representa.

A seqüência de figuras 6.5—6.8 apresentam características bastante semelhantes, e representam os diagramas de fases $T - H$ para os seguintes valores do parâmetro p menores que 1: $p = 0,55$, $p = 0,6$, $p = 0,7$ e $p = 0,8$, respectivamente.

Como característica geral, observamos que todas as fases comensuráveis existentes a campo nulo sobrevivem na presença de campo até um valor máximo, próximo à fronteira paramagnética-modulada. A partir daí muitas delas dobram-se para baixo e tendem novamente a retornar ao eixo $H = 0$, descrevendo um C invertido. Nesse retorno, elas adentram uma região onde coexistem com a fase paramagnética, além de tenderem a se sobrepor, num processo de extrema complexidade. Alguns aspectos das fases comensuráveis nessa região serão discutidos na seção 6.6. O término da região de coexistência corresponde ao ponto tricrítico, assinalado por TCP nesses diagramas de fases.

Para determinar o limite de estabilidade das fases moduladas, o mapeamento (3.35) foi iterado 50.000 vezes partindo de diferentes condições iniciais para verificar a existência de fases moduladas. O limite de estabilidade das fases moduladas está representado, nas figuras 6.5, 6.6 e

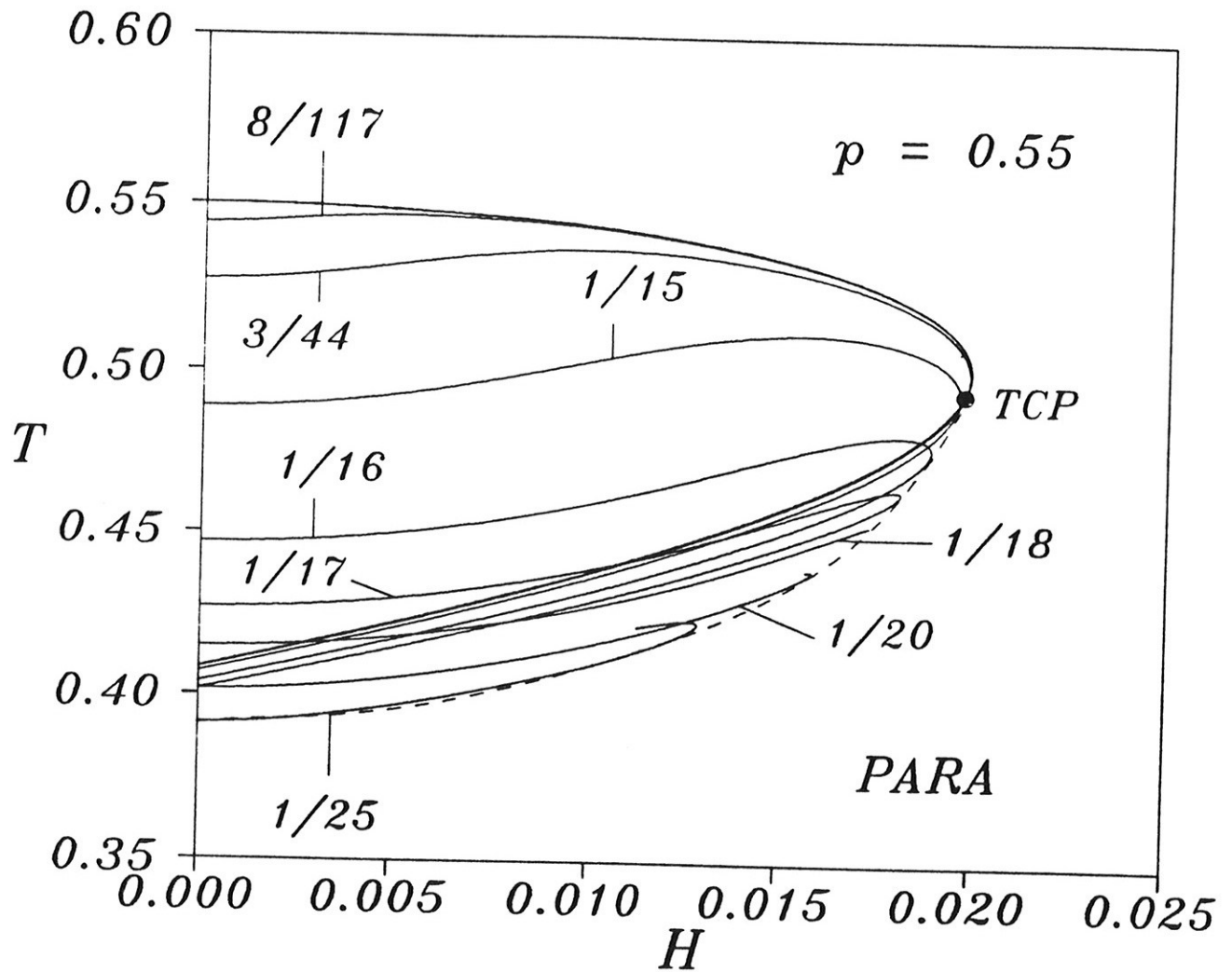


Figura 6.5: Diagrama de fases $T-H$ para $p = 0,55$. A linha tracejada representa o limite de estabilidade das fases moduladas.

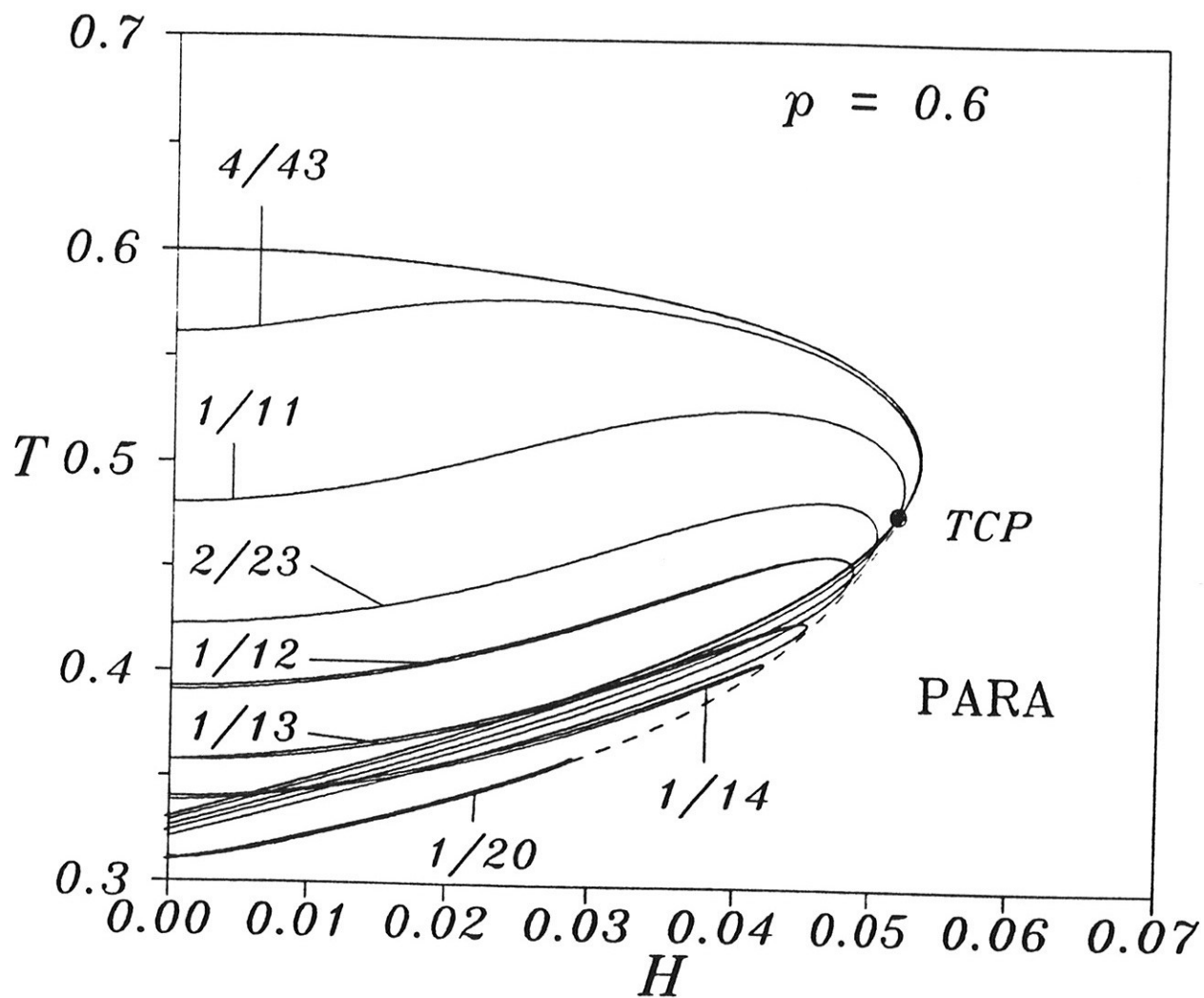
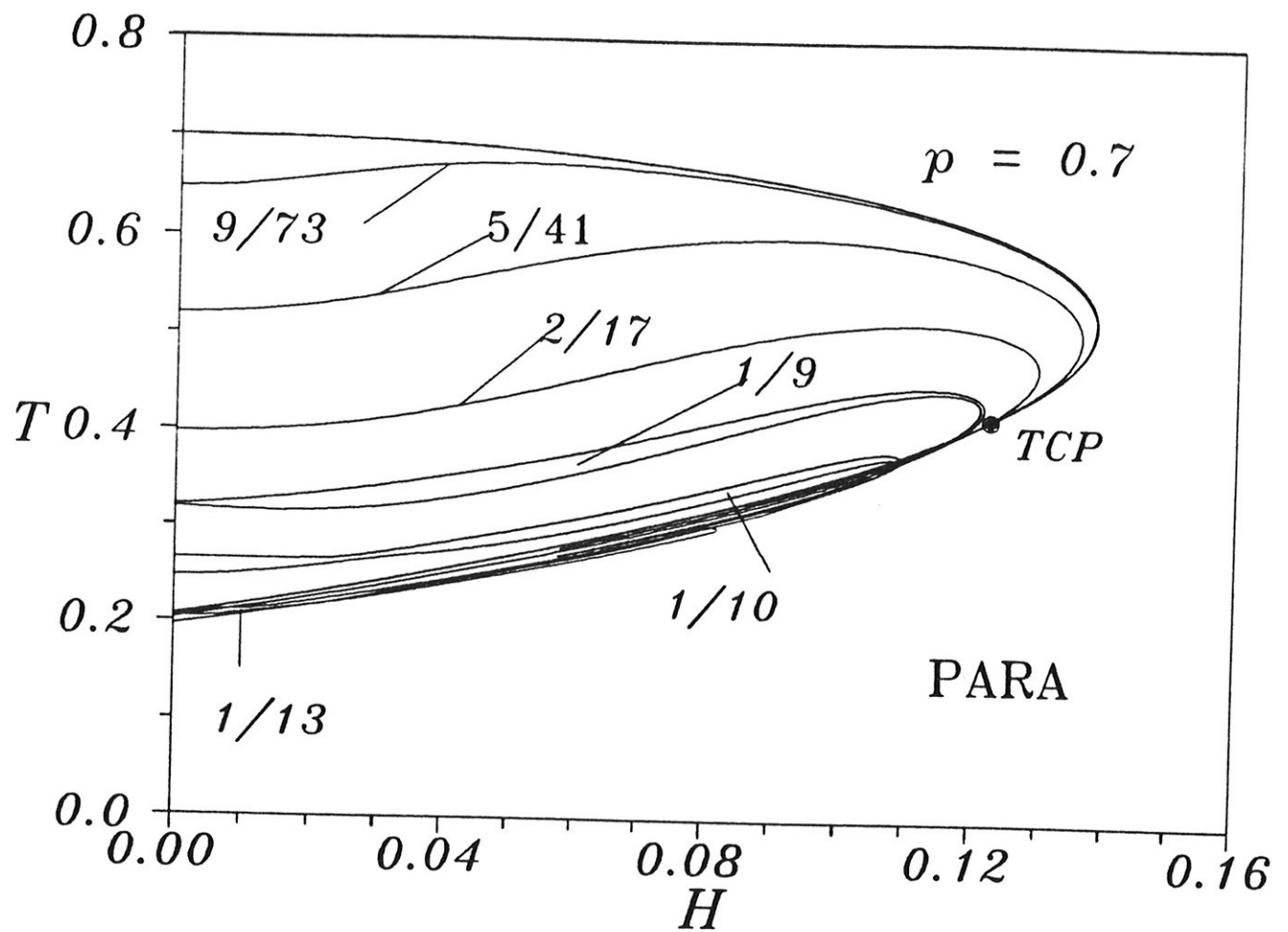
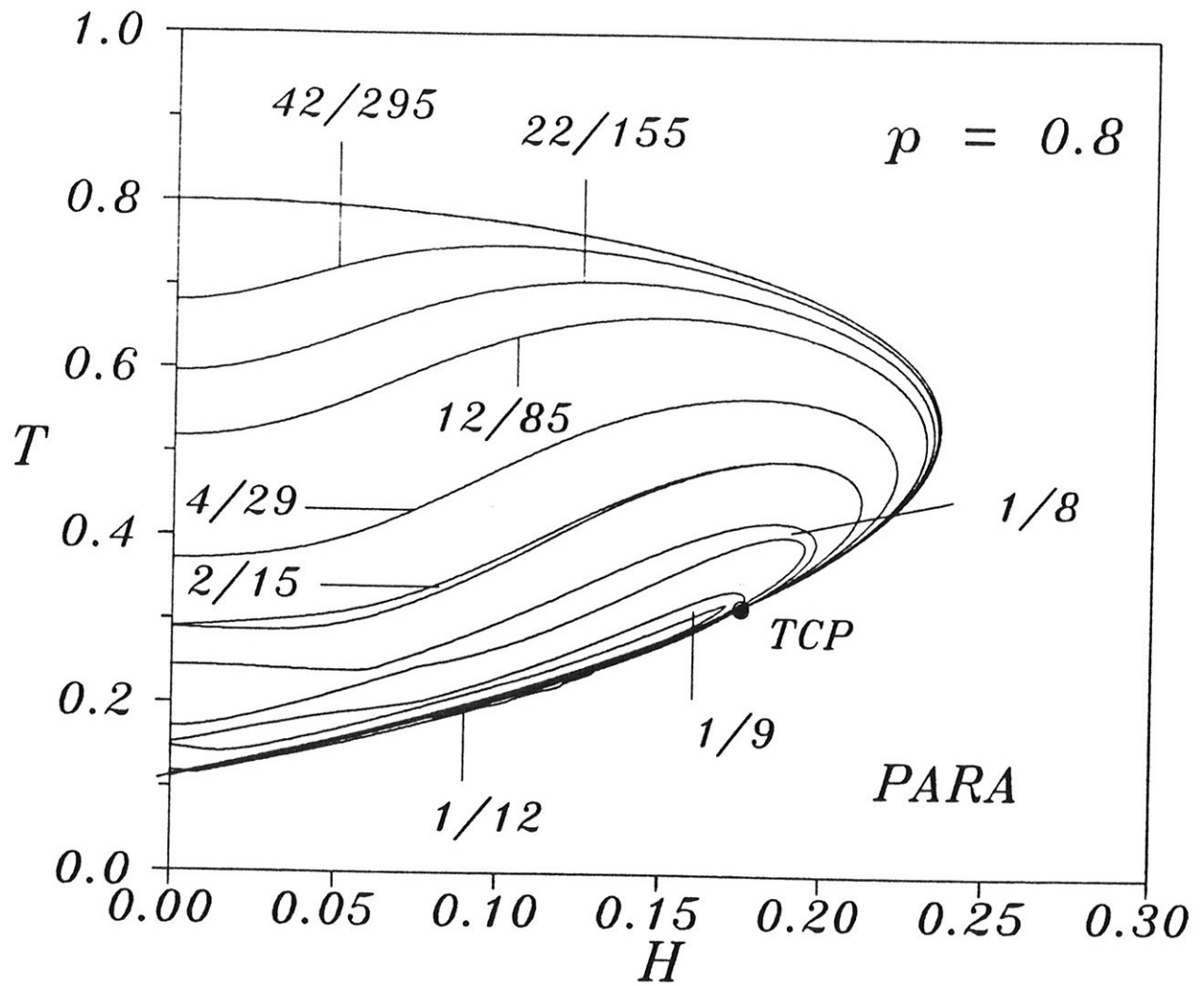


Figura 6.6: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 0,6$. A linha tracejada representa o limite de estabilidade das fases moduladas.

Figura 6.7: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 0,7$.

Figura 6.8: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 0,8$.

6.7, através de uma linha tracejada. Nos outros diagramas, os resultados que obtivemos para estas linhas eram pouco precisos, pois próximo ao limite de estabilidade, a iteração converge muito lentamente, tornando os resultados insatisfatórios. Portanto achamos por bem não representá-los nas figuras 6.8 – 6.11.

O término da região de coexistência corresponde ao ponto tricrítico, assinalado por TCP nos diagramas de fases. Os pontos tricríticos exibidos nas figuras 6.5–6.11 foram determinados através de dois métodos: intersecção do limite de estabilidade da fase modulada com o limite de estabilidade da fase paramagnética, e intersecção das fases comensuráveis de número de onda próximo mas menores que q_c com o limite de estabilidade da fase paramagnética. Este último método baseia-se no fato de que as fases comensuráveis cruzam com a linha de estabilidade da fase paramagnética após se dobrarem para baixo. Quanto maior o número de onda, maior é a temperatura em que se dá esse cruzamento. Portanto, uma fase modulada com número de onda próximo a q_c deve interseccionar o limite de estabilidade da fase paramagnética num ponto próximo ao ponto tricrítico. Em geral, estas fases são muito estreitas, e foram determinadas através do método de minimização da função ϕ . Quanto mais próximos os números de onda da fase comensurável de q_c , mais perto do ponto tricrítico se dará a intersecção dessa fase com o limite de estabilidade da fase paramagnética. Para os valores de $p = 0,55, 0,6$ e $0,7$, obtivemos os pontos tricríticos comparando os resultados dos dois métodos. No entanto, para $p = 0,8, 0,9$ e $0,95$, não foi possível utilizar este método pois a determinação das fases comensuráveis com q próximo de q_c para temperaturas baixas torna-se muito difícil.

As fases comensuráveis apresentam estruturas diferentes antes e depois da dobra, como exibidas na figura 6.9. A configuração da fase $1/9$

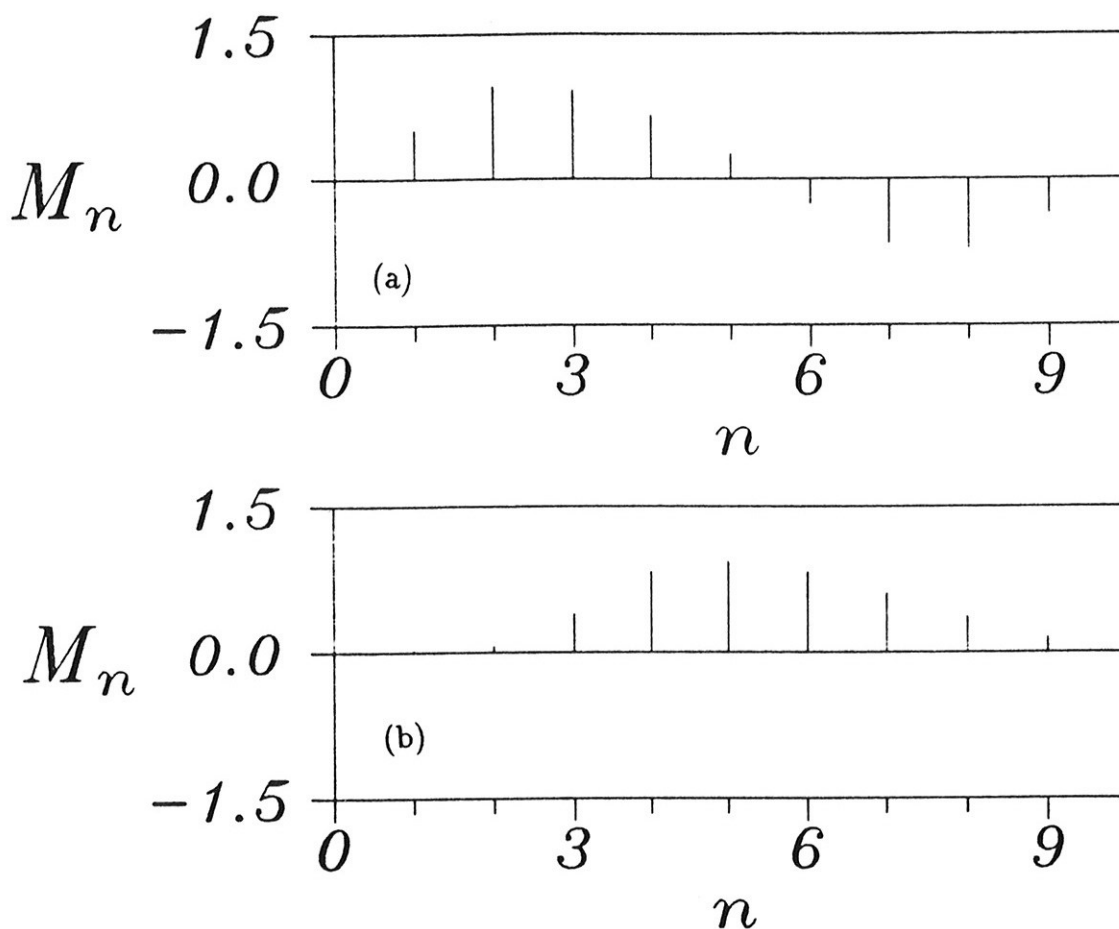


Figura 6.9: Configurações da fase 1/9 antes e depois da fase se dobrar: (a) $H = 0,095$ e $T = 0,43$. (b) $H = 0,177$ e $T = 0,4$.

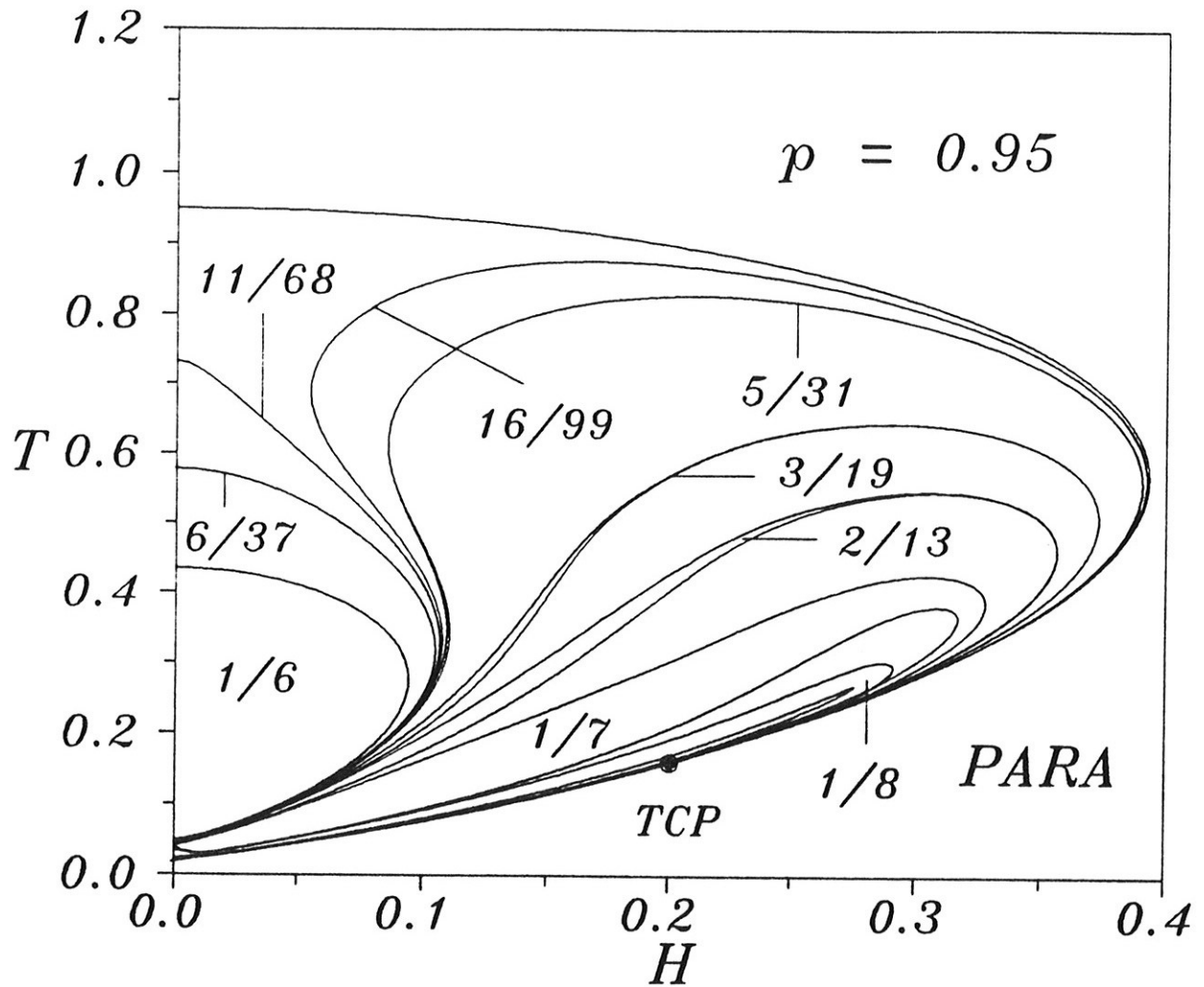
antes da dobra possui camadas com magnetização negativa, enquanto a da fase após a dobra não as possui, tendo um aspecto de marolas sobre uma superfície líquida.

Observamos também que algumas fases, como por exemplo a fase 1/8 na figura 6.8, apresentam um visível estrangulamento. Outras, como a fase 1/9 na figura 6.7, evidenciam um alargamento, para campo crescente. Esses efeitos estão relacionados à coexistência de fases comensuráveis de mesmo período mas de estruturas distintas, como será discutido em maior detalhe na seção 6.5.

Outro aspecto destes diagramas é a existência de fases que se encontram dentro da região de coexistência paramagnética-modulada em praticamente toda a sua extensão. Elas não experimentam o dobramento das fases acima referidas. Exemplo típico delas é a fase 1/20 na figura 6.6. As fases 1/13 na figura 6.7 e 1/12 na figura 6.8 também têm este comportamento.

Os diagramas obtidos para $p = 0,9$ e $0,95$, nas figuras 6.10 e 6.11, mostram fases comensuráveis que exibem um comportamento mais complexo. Por exemplo, a fase 5/32 no diagrama da figura 6.10, existe tanto numa região sob a forma de uma semi-bolha a baixas temperaturas quanto sob a forma de um C invertido para temperaturas mais altas. Por outro lado, a fase 12/77 existe tanto numa região anular a temperaturas baixas, quanto sob a forma de um C invertido a altas temperaturas. O comportamento peculiar dessas fases pode ser compreendido através do exame do diagrama de fases a campo nulo da figura 5.5, onde vemos que essas fases existem para temperaturas diferentes e mesmo valor de p . Do mesmo modo, a forma de semi-bolha da fase 1/6 figura 6.11 decorre claramente da existência dessa fase ao longo de toda a linha que é a intersecção da reta $p = 0,95$ com a região da fase 1/6, no diagrama de fases a campo nulo.

A figura 6.12 mostra o diagrama de fases no plano $T - H$ para o valor de p exatamente igual a 1. Na ausência do campo a única fase modulada é a fase 1/6. Na presença de campo, embora a fase 1/6 ocupe uma porção considerável do diagrama de fases, subsistem muitas fases moduladas de números de onda menores nas regiões de campos mais altos. Todas essas fases moduladas emanam do ponto de multifases em $(p, T, H) = (1, 0, 0)$ apresentando-se em forma de camadas estratificadas, com fases comensuráveis de números de onda maiores envolvendo outras

Figura 6.11: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 0,95$.

fases com número de onda menores.

Observamos que, conforme o número de onda das camadas mais externas tende a $2\pi(1/6)$, como ilustrado pela fase 41/247 na figura 6.12, elas tendem a encostar na fase $1/6$ e na fronteira de estabilidade das fases moduladas. Isso está consistente com o fato de que o número de onda crítico nesse caso ser igual a $2\pi(1/6)$.

A região de coexistência entre as fases modulada e paramagnética aparentemente desaparece, mas ainda existem regiões de coexistência entre fases moduladas a baixa temperatura, como pode ser visto na figura 6.12, onde é possível observar a superposição entre as fases $1/8$ e $1/7$.

A seqüência de figuras 6.13 — 6.15 mostra o que ocorre com os diagramas de fases quando aumentamos o valor de p para além de $p = 1$. Em particular, elas mostram o destino da fase $1/6$. Observemos a figura 6.13. A fase $1/6$ já não tem a forma de uma simples bolha, mas desenvolve dois apêndices, que se estendem até o ponto de multifases. Ela separa a região de fases moduladas em três partes: (a) uma região por ela envolvida cuja forma das fases lembra camadas concêntricas de uma cebola, (b) uma região acima dela e (c) uma região que contém a fase $1/5$, no canto inferior esquerdo do diagrama. A região (a) contém as fases com $q/2\pi < 1/6$, como mostrado no detalhe da figura 6.14. As regiões (b) e (c) contém as fases com $q/2\pi > 1/6$. Elas se distinguem pelo fato das fases da região (b) terem origem nas fases que, a campo nulo, estão acima da fase $1/6$ e as fases da região (c) terem origem nas que, a campo nulo, estão abaixo da fase $1/6$. Observamos também que a fronteira da fase $1/6$ apresenta-se quebrada num ponto. Isto se deve à coexistência de dois tipos de fases $1/6$ nessa região. Na figura 6.15 observamos um visível estrangulamento da fase $1/6$, indicando a iminência

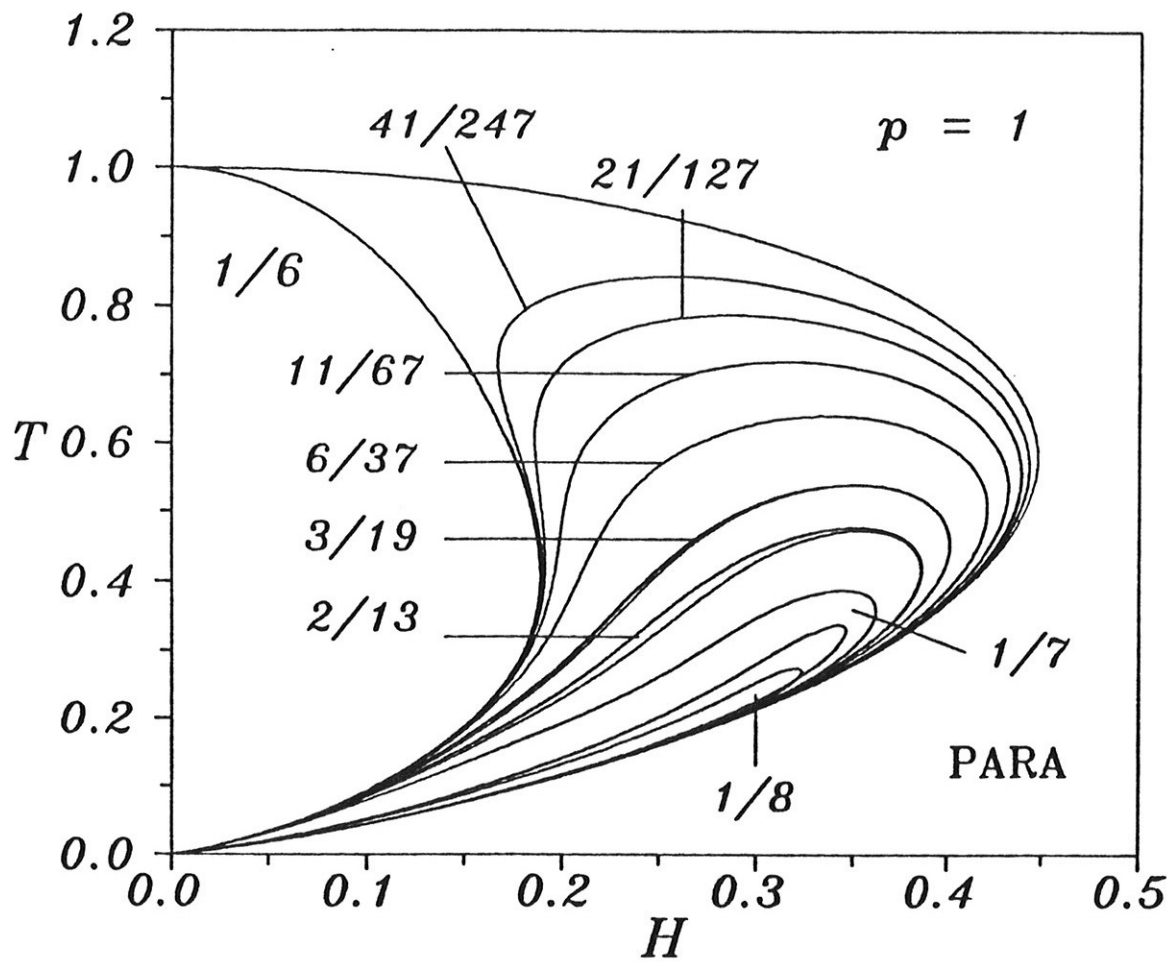


Figura 6.12: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 1$.

de seu desaparecimento a campo nulo.

As figuras 6.16 — 6.18 mostram o diagrama de fases $H - T$ para $p = 1, 1$. Observamos que a fase $1/6$ agora só existe na presença de campo sob a forma de uma camada de cebola, originando-se e terminando no ponto de multifases. É interessante observar que diversas fases, como por exemplo a fase $4/23$ mostrada na figura 6.16, existem em duas regiões desconexas, uma sob a forma de uma semi-bolha partindo da fase que já existe a campo nulo, e outra de forma de uma camada de cebolas originando-se e terminando no ponto de multifases. Outro ponto a ser destacado é que mesmo as fases tendo a mesma forma a campo nulo, como as fases $34/195$ e $27/155$, elas têm formas diversas na presença de campo, como pode ser visto no detalhe da figura 6.17.

As figuras 6.19 e 6.20 mostram os diagramas de fases $H - T$ para valores de p maiores, respectivamente, $p = 1, 2$ e $p = 1, 5$. Observamos que os comportamentos qualitativos não mudam apreciavelmente. É interessante observar que a fase $2/11$ na figura 6.19 que é extremamente delgada para campo nulo adquire uma região de estabilidade apreciável a campos altos. O mesmo efeito é visível para outras fases comensuráveis de período ímpar, como a fase $1/5$ nas figuras 6.19 e 6.20. De forma geral podemos afirmar que o campo magnético tende a inibir as fases com período par, e estimular fases com período ímpar. Isso decorre da ausência da simetria por inversão global dos spins nas fases com períodos ímpares, como foi discutido na seção 4.4. O fenômeno de estreitamento da fase $3/14$ e alargamento da fase $2/9$ que pode ser observado na figura 6.20 está relacionado à coexistência de fases comensuráveis de estruturas diferentes e mesmo q , como discutiremos em maior detalhe na seção 6.5.

A partir das figuras 6.20—6.22 podemos apreciar o que ocorre com a fase $1/5$, conforme aumentamos o valor de p passando pelo valor

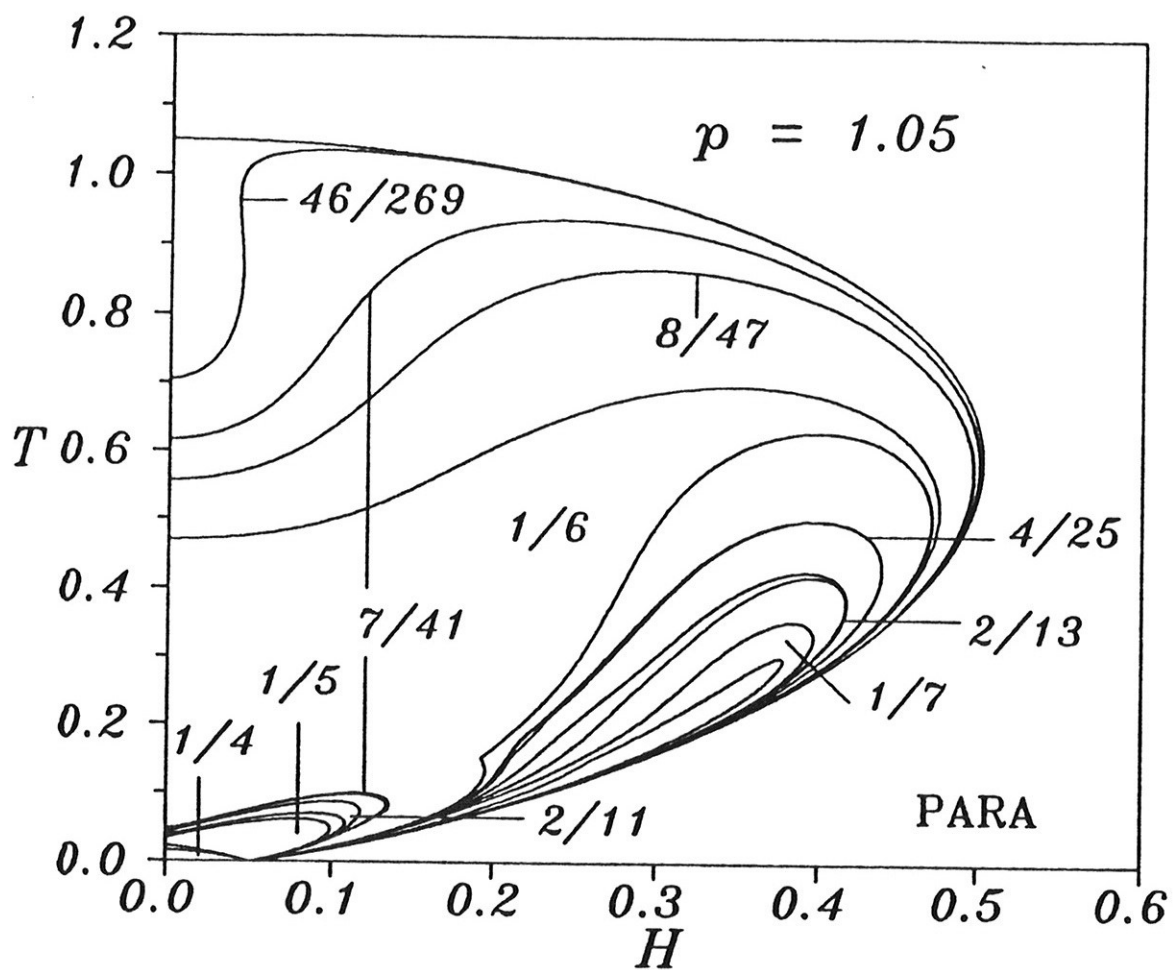


Figura 6.13: Diagrama de fases $T - H$ global para $p = 1,05$.

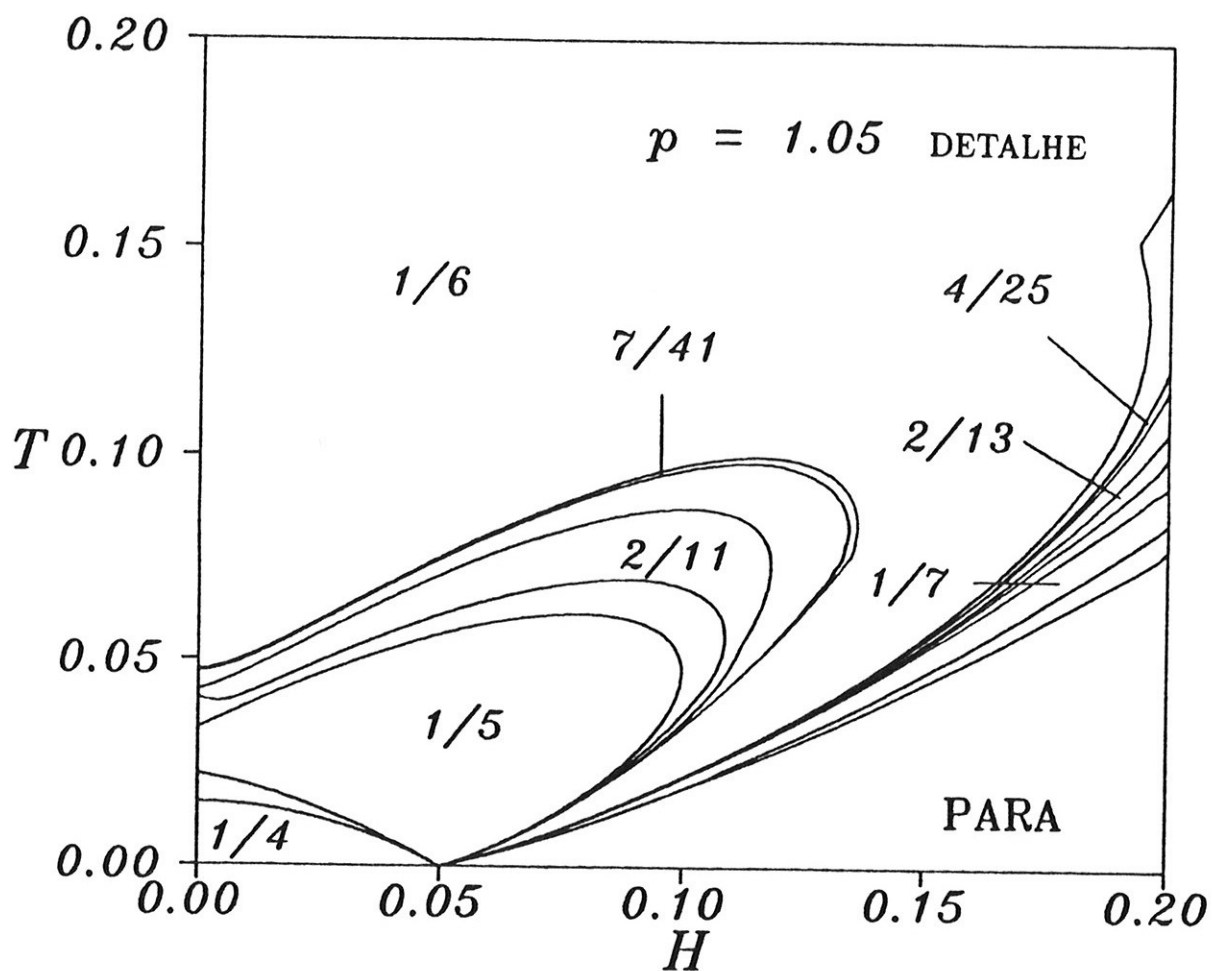


Figura 6.14: Detalhe do diagrama de fases $T - H$ para $p = 1,05$, mostrando a região (c) citada no texto.

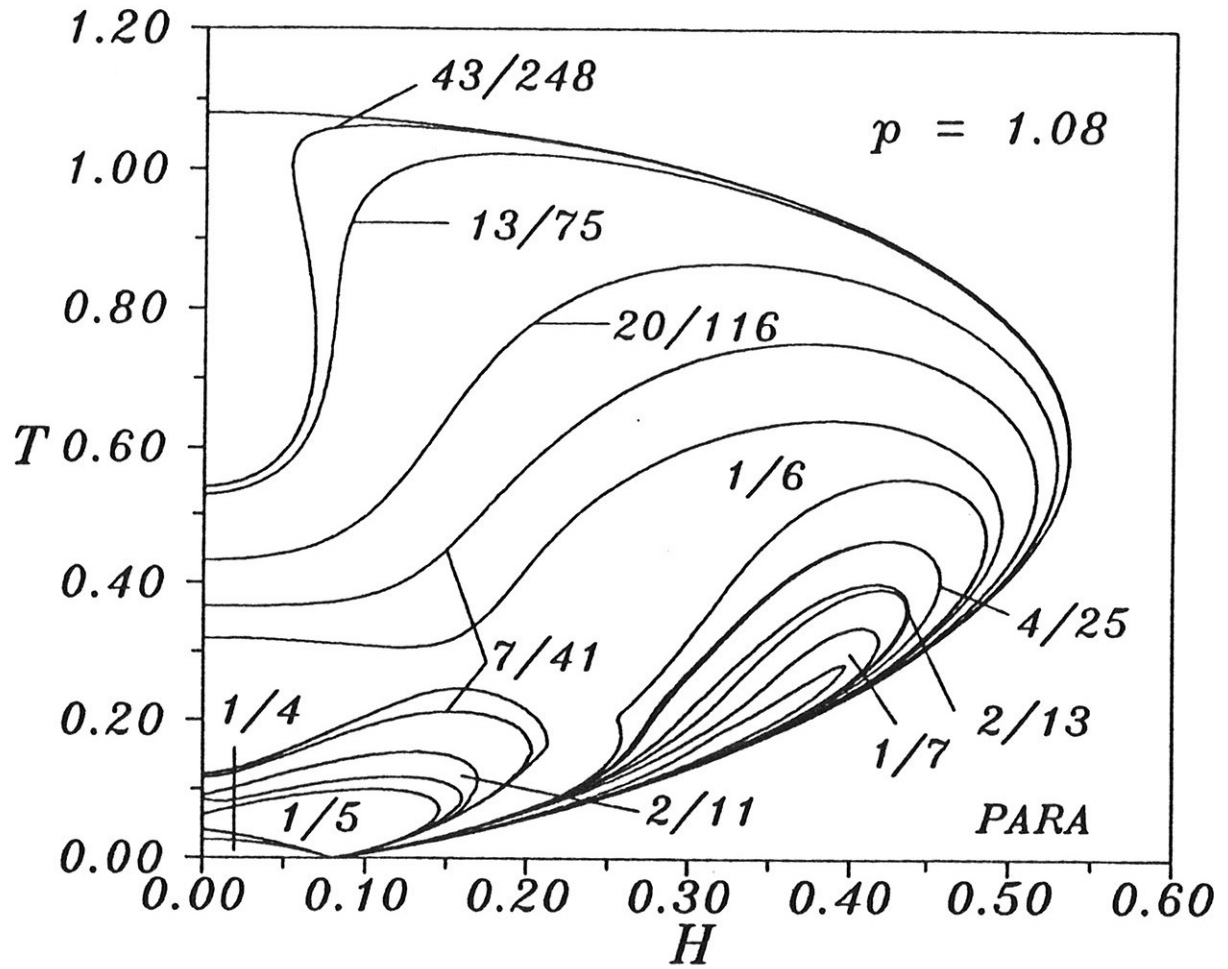


Figura 6.15: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 1,08$.

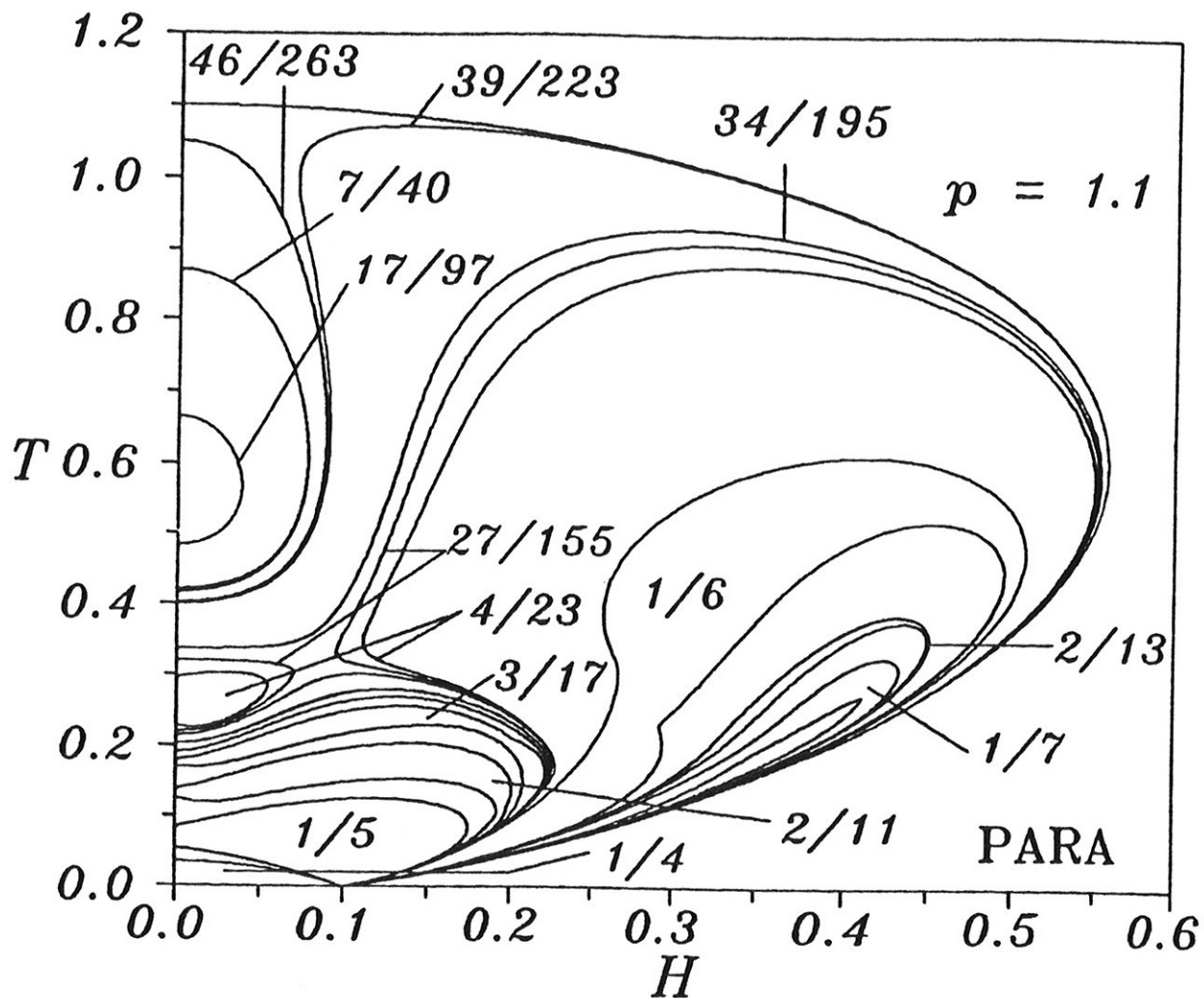


Figura 6.16: Diagrama de fases global $T - H$ para $p = 1, 1$.

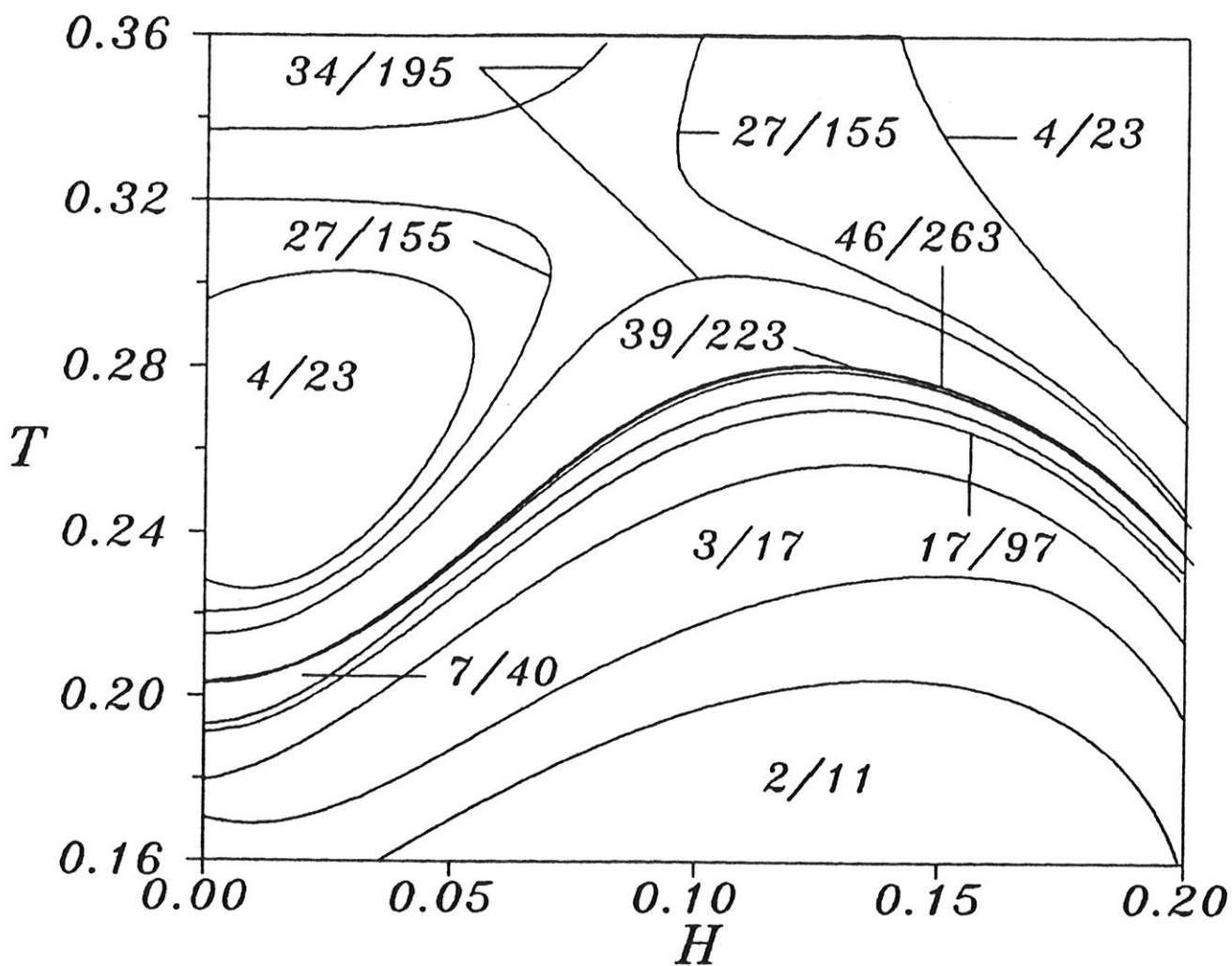


Figura 6.17: Detalhe do diagrama de fases $T - H$ para $p = 1, 1$. As fases 7/40, 17/97, 46/263 e 39/223 estão rotuladas para mostrar a existência delas a baixas temperaturas.

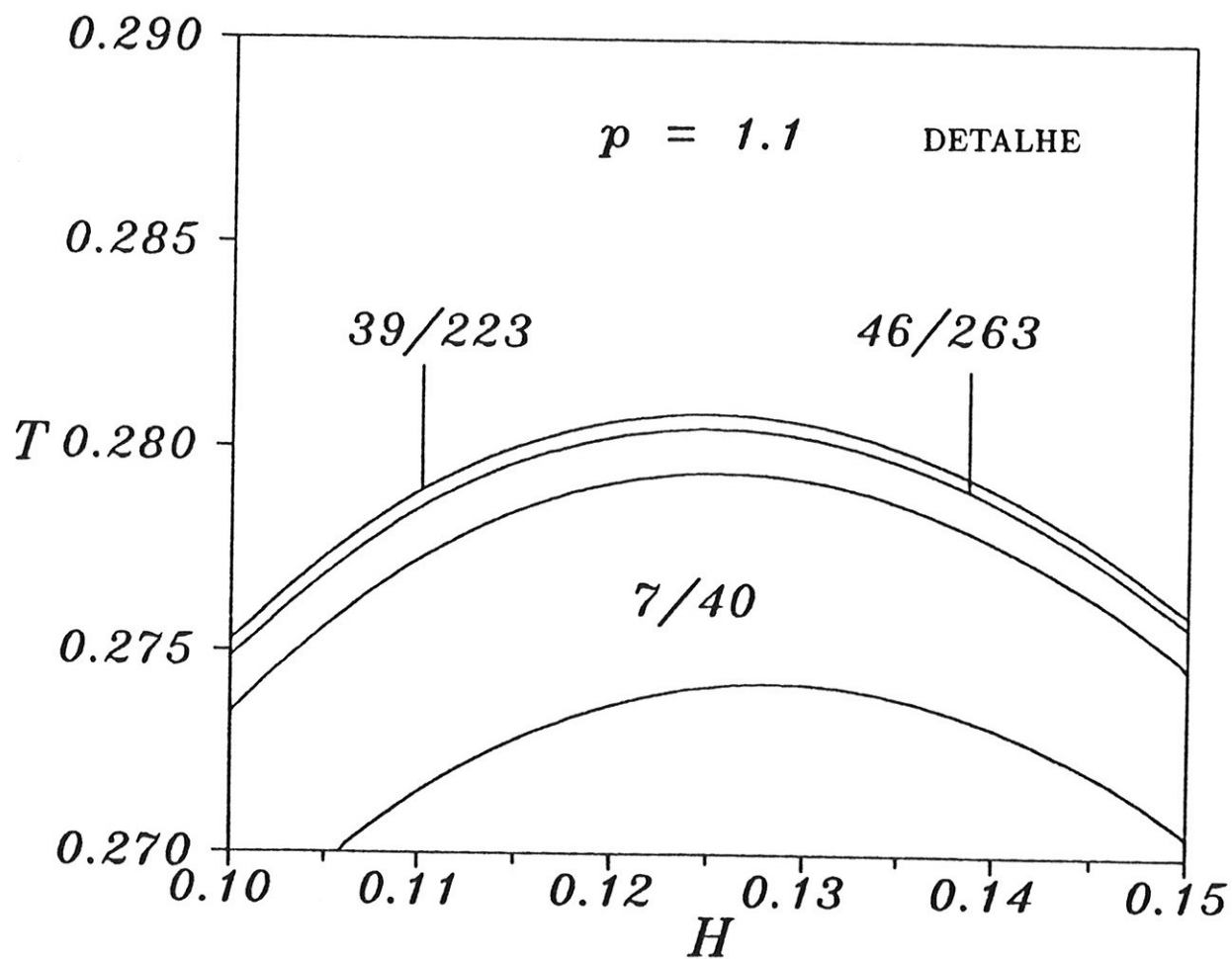


Figura 6.18: Detalhe do diagrama de fases $T - H$ para $p = 1, 1$. As fases 39/223 e 46/263 têm formas semelhantes nesta região do diagrama de fases, ao contrário do que ocorre a temperaturas mais altas.

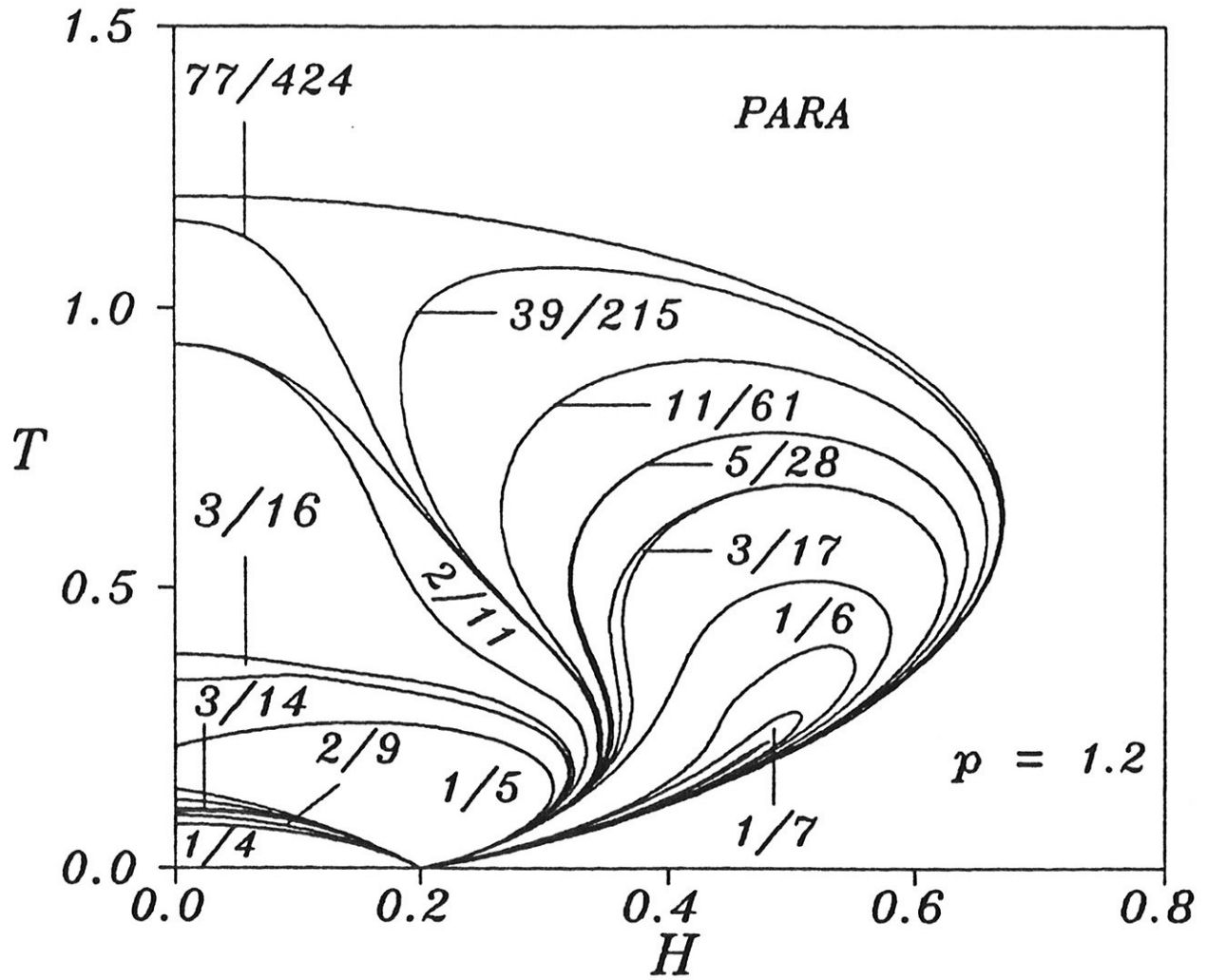
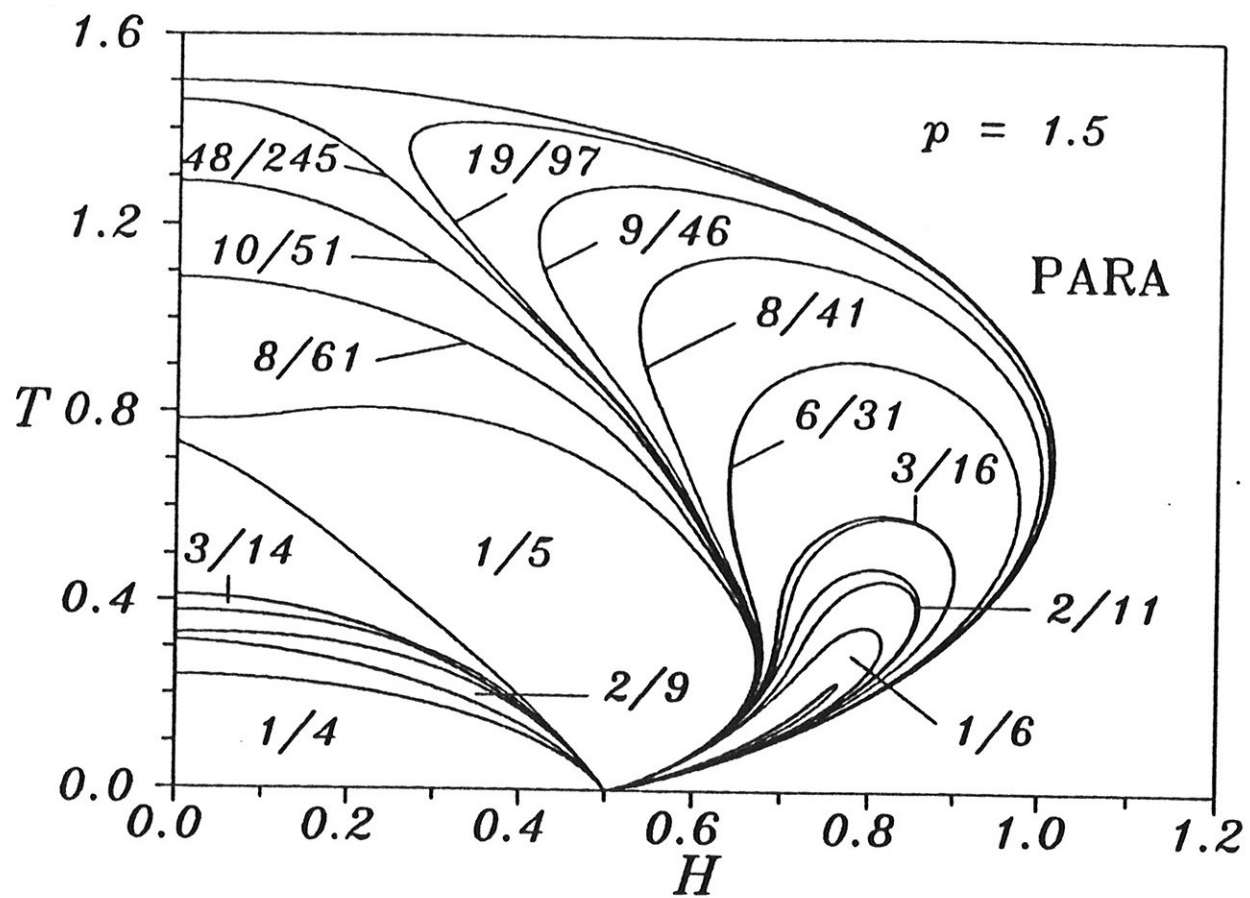


Figura 6.19: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 1, 2$.

Figura 6.20: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 1,5$.

$p_c = 1/2 \cos(\frac{2\pi}{5}) = 1,618033988749895 \dots$. Para $p < p_c$, a fase $1/5$ existe a campo nulo, e sob o efeito do campo ela torna-se mais estável, alargando a sua região de estabilidade e terminando no ponto de multifases, como mostrado na figura 6.20. Para $p > p_c$, entretanto, a fase $1/5$ não existe a campo nulo, e a sua ocorrência na presença de um campo está limitada a uma região com a forma de uma camada de cebola que se origina e termina no ponto de multifases, como mostrado na figura 6.22. O caso limite $p = p_c$ está mostrado na figura 6.21.

À medida que aumenta o valor do parâmetro p , a fase $1/4$ vai aumentando sua região de estabilidade relativamente às outras fases moduladas. Para mostrar isto, definiremos $T_c(\frac{1}{4})$ como a maior temperatura, para $H = 0$, em que podemos encontrar a fase $1/4$, e T_c como a temperatura crítica da transição modulada-paramagnética a campo nulo. Por exemplo, para $p = 1,5$ ela é estável até $T_c(\frac{1}{4}) = 0,239 \dots$. Logo, a razão $T_c(\frac{1}{4})/T_c$ é igual a $0,159 \dots$. Já para $p = 2$, esta razão sobe para $0,2785 \dots$. Para valores de p maiores, aumenta ainda mais a participação relativa dessa fase na região modulada. A figura 6.23 mostra ainda outra característica dos diagramas de fases para $p \gg 1$. Aparentemente desapareceram todas as fases tipo camadas de cebola que emanam do ponto de multifases. Na realidade, como mostrado na figura 6.24, elas ainda existem, mas são estáveis numa região muito pequena em relação à escala global do diagrama de fases. No limite $p \rightarrow \infty$, o modelo torna-se duas redes de Bethe antiferromagnéticas desacopladas. Neste limite, a fase $1/4$ (que representa a fase antiferromagnética), deve ser a única fase modulada remanescente.

A figura 6.25 mostra a fronteira de estabilidade da fase $1/4$ para valores crescentes de p na proximidade do ponto de multifases. Essa seqüência mostra a forma pela qual a fase $1/4$ finalmente envolve as fases

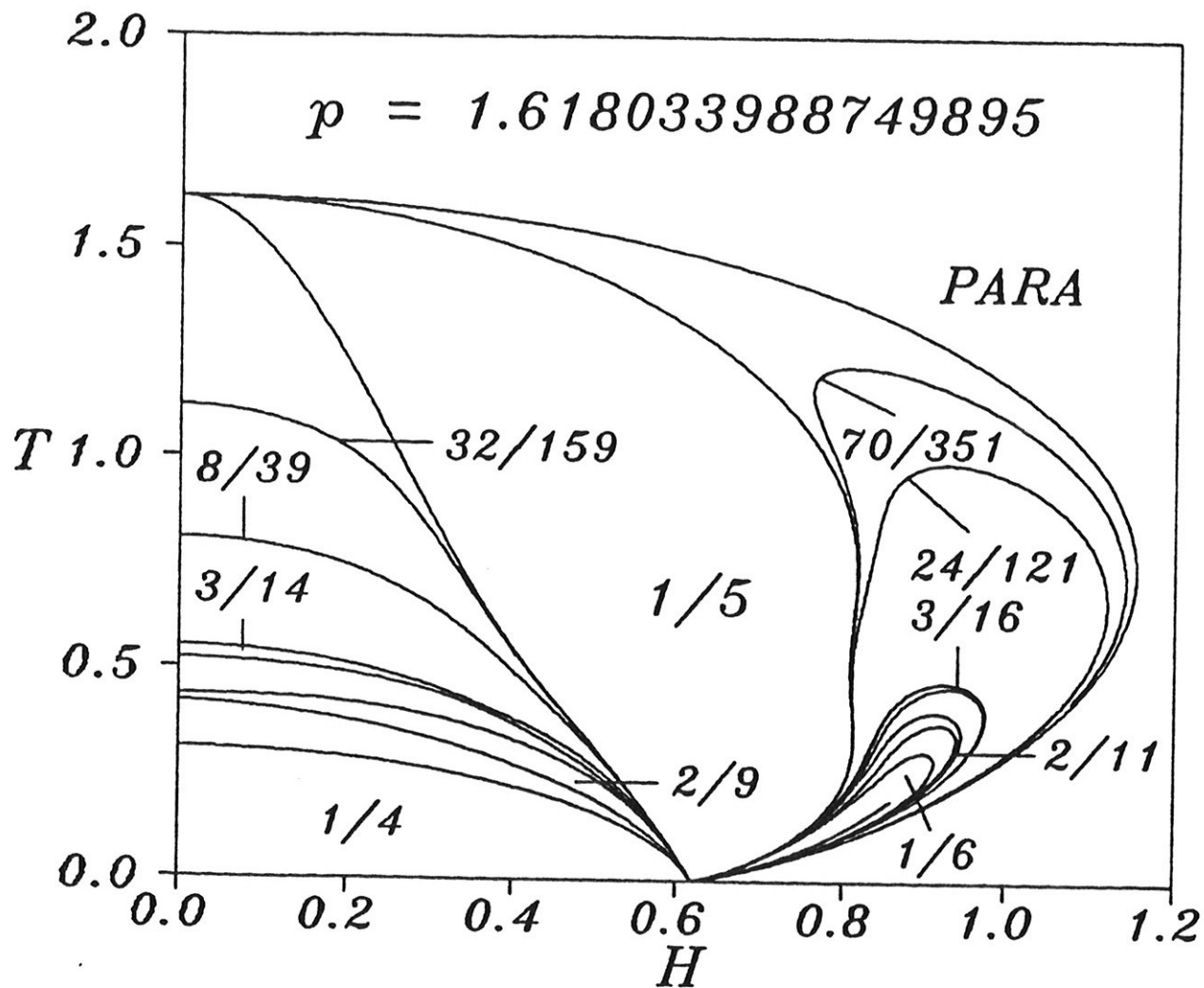
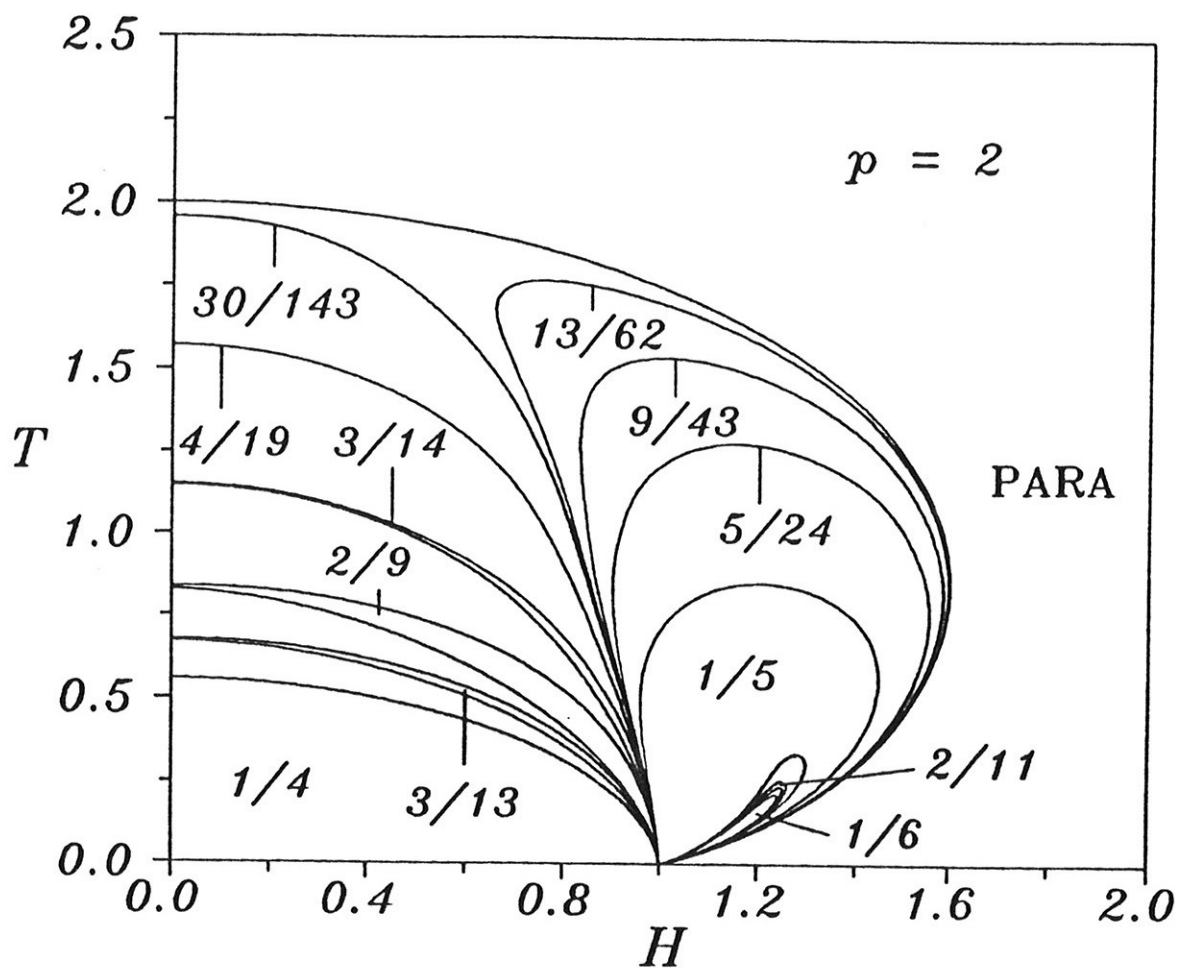
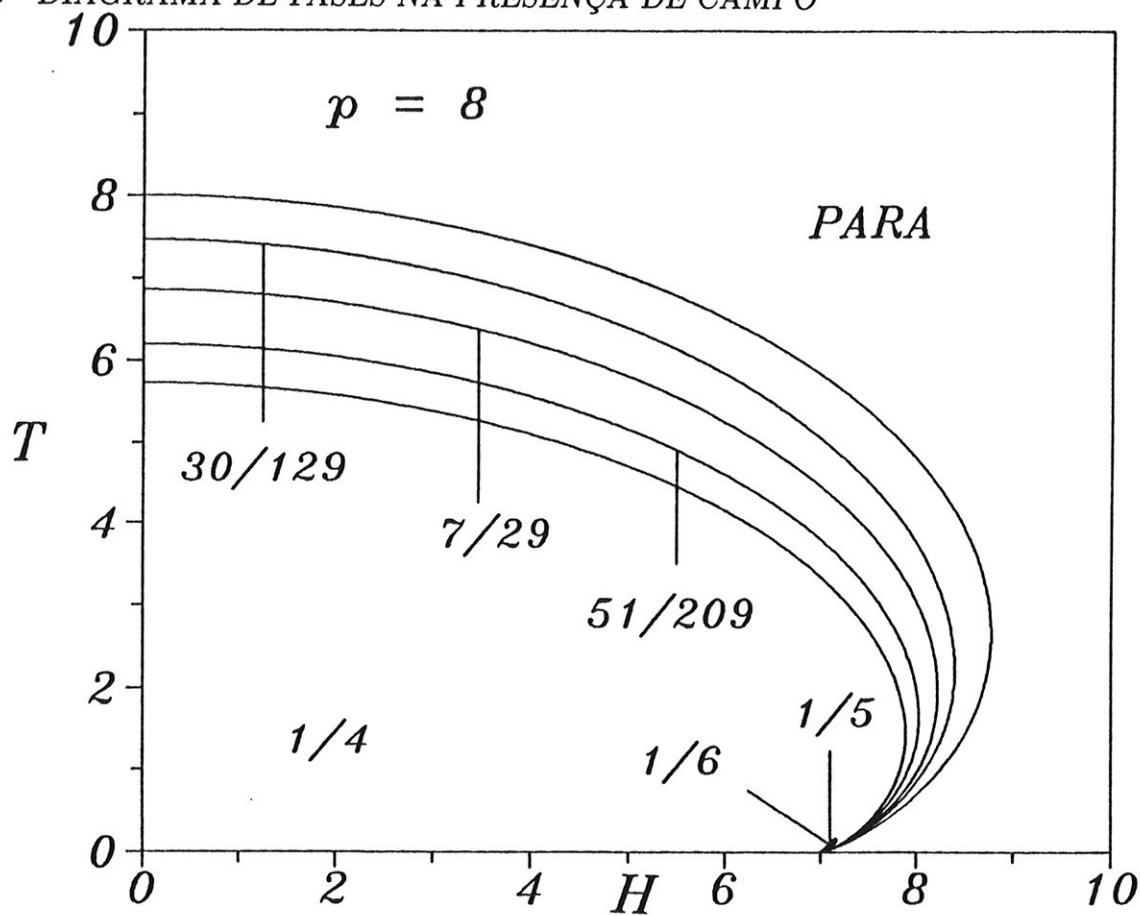
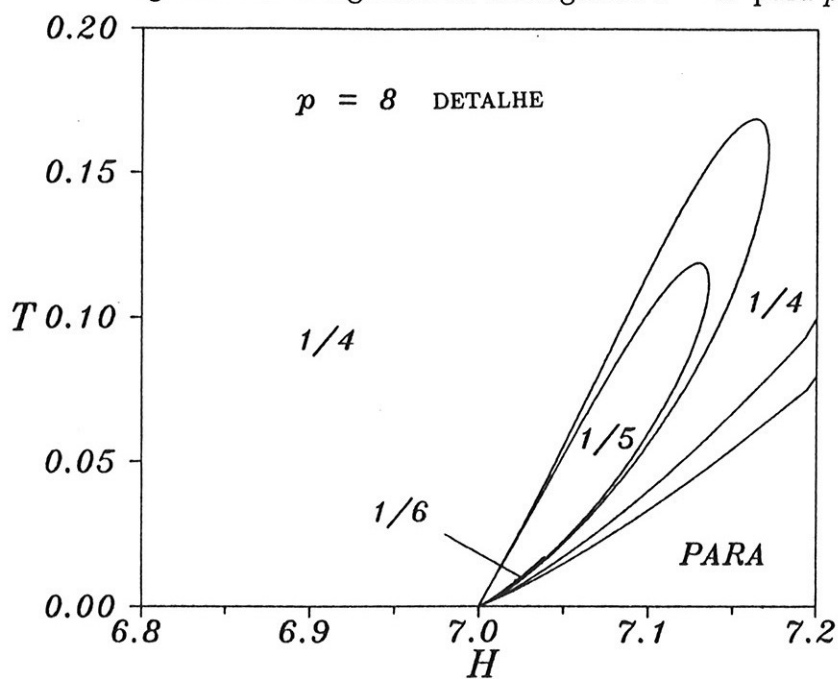


Figura 6.21: Diagrama de fases $T - H$ para $p = p_c(1/5) = 1.618033988749895$.

Figura 6.22: Diagrama de fases $T - H$ para $p = 2$.

Figura 6.23: Diagrama de fases global $T - H$ para $p = 8$.Figura 6.24: Detalhe do diagrama de fases global $T - H$ para $p = 8$. A pequena bolha na fase $1/4$ contém as fases com $q < \cos^{-1}(1/16)$.

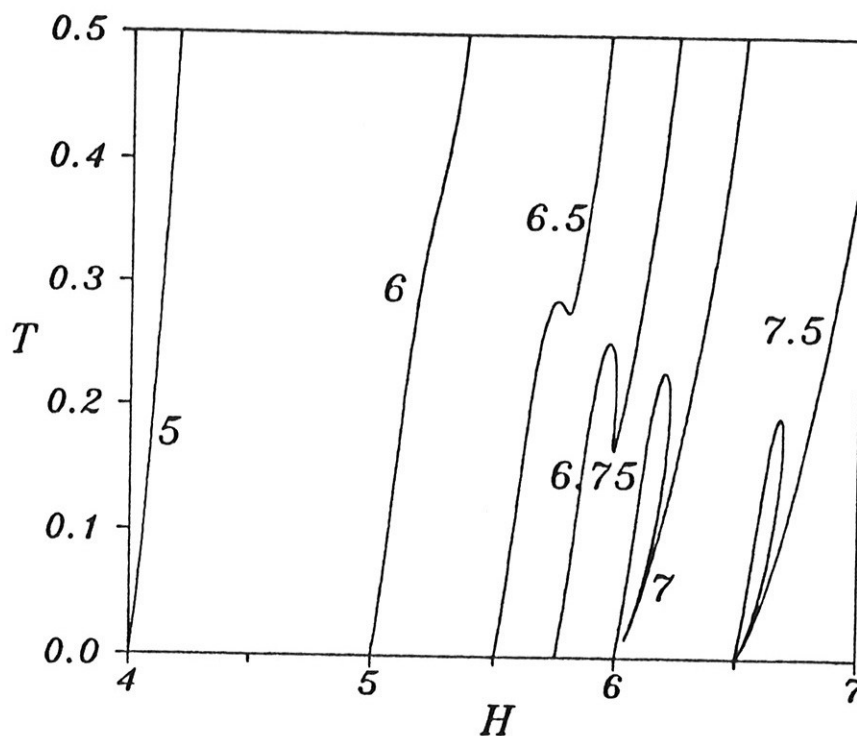


Figura 6.25: Envolvimento de fases moduladas pela fase 1/4 para p crescente.

moduladas com números de onda menores que $q_c = \cos^{-1}(\frac{1}{2p})$.

Para finalizar, tentaremos classificar as formas básicas das fases comensuráveis nos diagramas $T - H$ baseando-nos nos resultados obtidos nesta seção .

Em geral, num diagrama $T - H$, uma fase comensurável com número de onda q apresentará formas diferentes conforme q seja maior ou menor que o comprimento de onda crítico $q_c(p) = \cos^{-1}(\frac{1}{2p})$ correspondente ao valor de p do diagrama $T - H$.

Assim, para $p < 1$ mas não muito próximo de 1, somente estão presentes as fases com número de onda $q < q_c(p)$. Essas fases partem do eixo T e tendem a se dobrar para baixo para campos grandes, adquirindo a forma de um C invertido. Algumas fases, entretanto, que penetram bastante na região de estabilidade da fase paramagnética, deixam de ser estáveis antes de se dobrarem, adquirindo a forma de uma língua.

Para $p > 1$ mas não muito próximo de 1, as fases com número de onda $q > q_c(p)$ partem do eixo T e terminam no ponto de multifases. Já as fases com número de onda $q < q_c(p)$ surgem e terminam no ponto de multifases, formando uma sobreposição em forma de camadas de uma cebola, onde as camadas mais internas possuem números de onda menores.

Na proximidade de $p = 1$, o diagrama de fases $T - H$ sofre uma forte influência da fase $1/6$. Assim, as fases com números de onda $q/2\pi$ próximos a $1/6$ tendem a estar presentes em várias temperaturas diferentes a campo nulo. Isso faz com que, além dos comportamentos discutidos até agora, surjam outras duas possibilidades. Se a fase está presente a campo nulo numa região conexa, então a fase adquirirá a forma de uma semi-bolha no plano $T - H$. Por outro lado, se a fase está presente em duas regiões desconexas a campo nulo, então ela assumirá a forma anular na presença do campo. Uma fase que existe para diferentes temperaturas a campo nulo pode apresentar mais de um tipo de comportamento dentre os acima descritos.

6.5 Coexistência de fases comensuráveis de mesmo número de onda e estruturas diferentes

Analisando mais detidamente os diagramas $T - H$ da seção 6.4, notamos que certas fases comensuráveis apresentam mudanças bruscas na forma de suas fronteiras de fases. Por exemplo, na figura 6.20 podemos observar o nítido afunilamento da fase $3/14$. Esse tipo de efeito está associado à coexistência de fases comensuráveis de mesmo número de onda, mas de estruturas distintas. Um exemplo destas estruturas, observadas no caso da fase $3/14$, está mostrado na figura 6.26. Estas estruturas

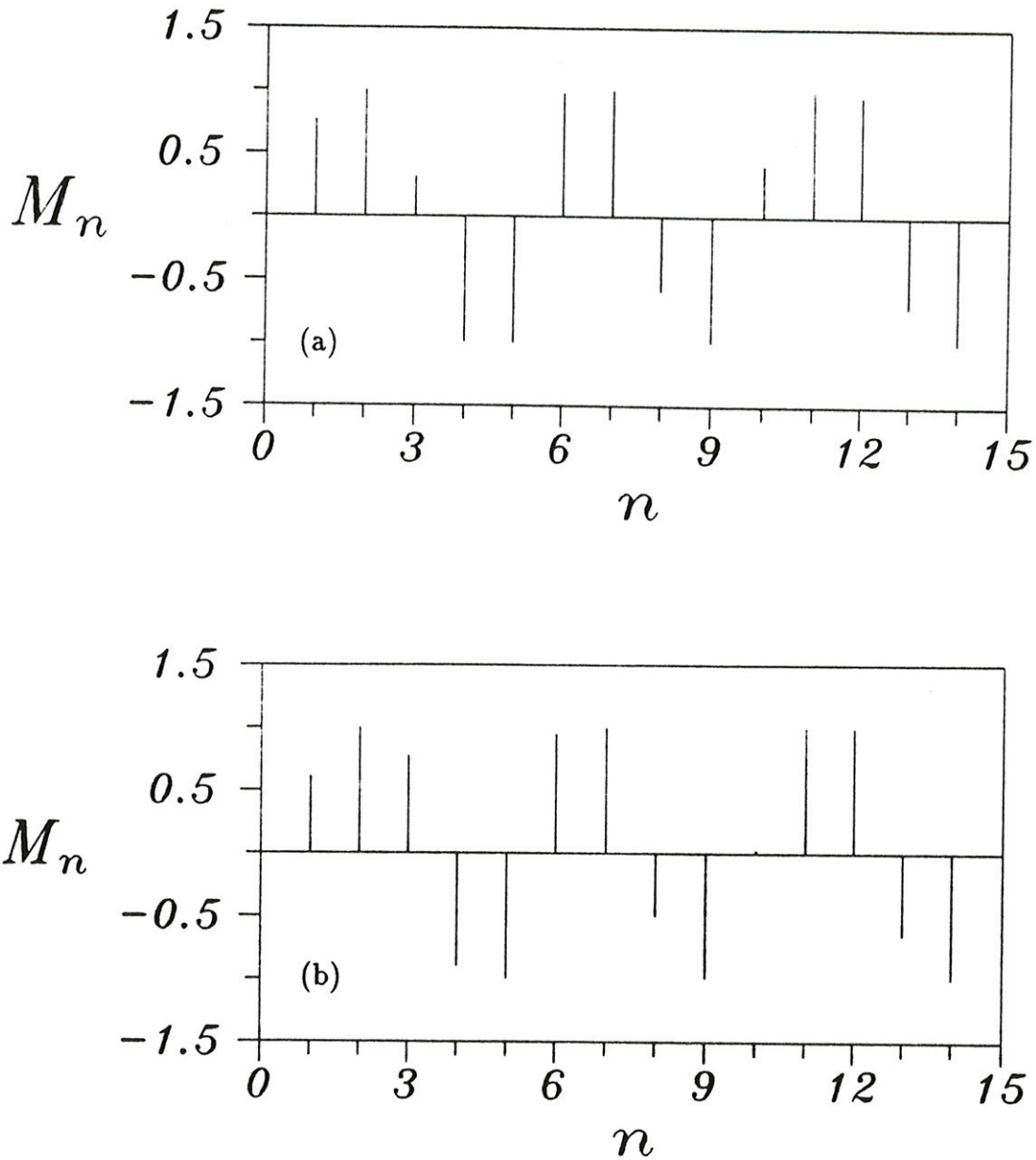


Figura 6.26: Estruturas diferentes da fase $3/14$, na presença de campo magnético, para $p = 1,5$, $T = 0,322$, $H = 0,25$ e condições iniciais (a) $(x_1, y_1) = (1, 1/2)$ e (b) $(x_1, y_1) = (1, 1)$.



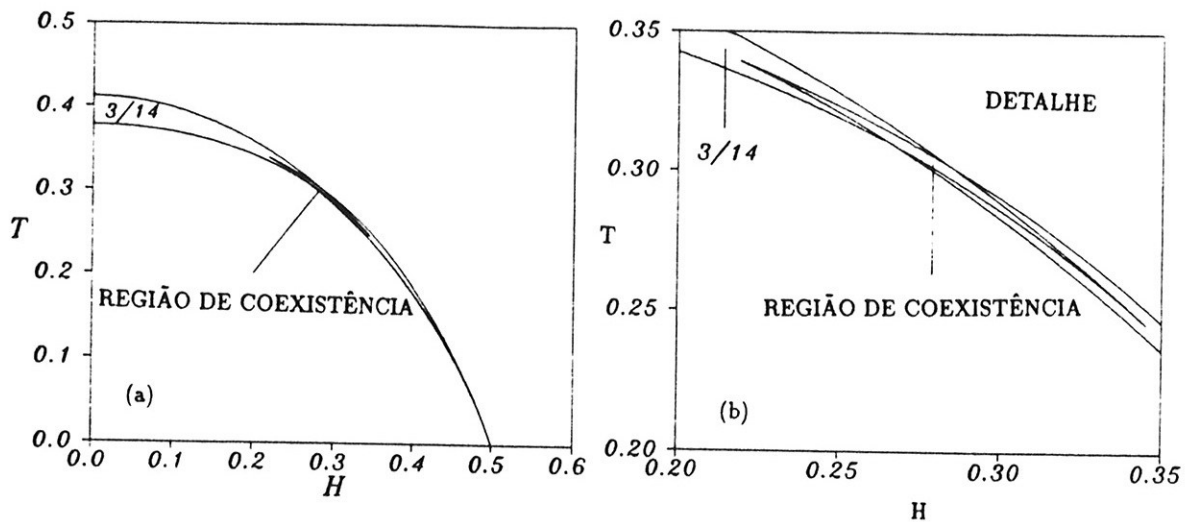


Figura 6.27: Localização da região de coexistência na fase 3/14. (a) diagrama global. (b) detalhe.

correspondem a atratores distintos mas de número de onda $q/2\pi = 3/14$.

Há toda uma região do plano $T - H$ em que coexistem estas duas fases, e que está mostrada na figura 6.27. Para obtê-la, analisamos o maior expoente de Lyapunov associado aos atratores da fase 3/14, para diferentes valores do campo magnético, conforme está representado na seqüência de gráficos da figura 6.28.

Este fenômeno de coexistência de fases representa uma transição de fases de primeira ordem no interior da fase comensurável. Uma analogia com a transição líquido-gás num fluido poderá auxiliar no entendimento do que está ocorrendo nesse modelo. Em ambos os casos trata-se de uma transição entre duas fases de mesma simetria. No diagrama de fases pressão-temperatura é possível passar da fase líquida para gasosa sem experimentar nenhuma transição. Esta situação corresponde, neste modelo, à figura 6.28a-b. Por outro lado, pode haver uma transição de segunda ordem no ponto crítico, o que é análogo ao que acontece nesse modelo na figura 6.28c e 6.28g. Nestas figuras, o ponto em que o

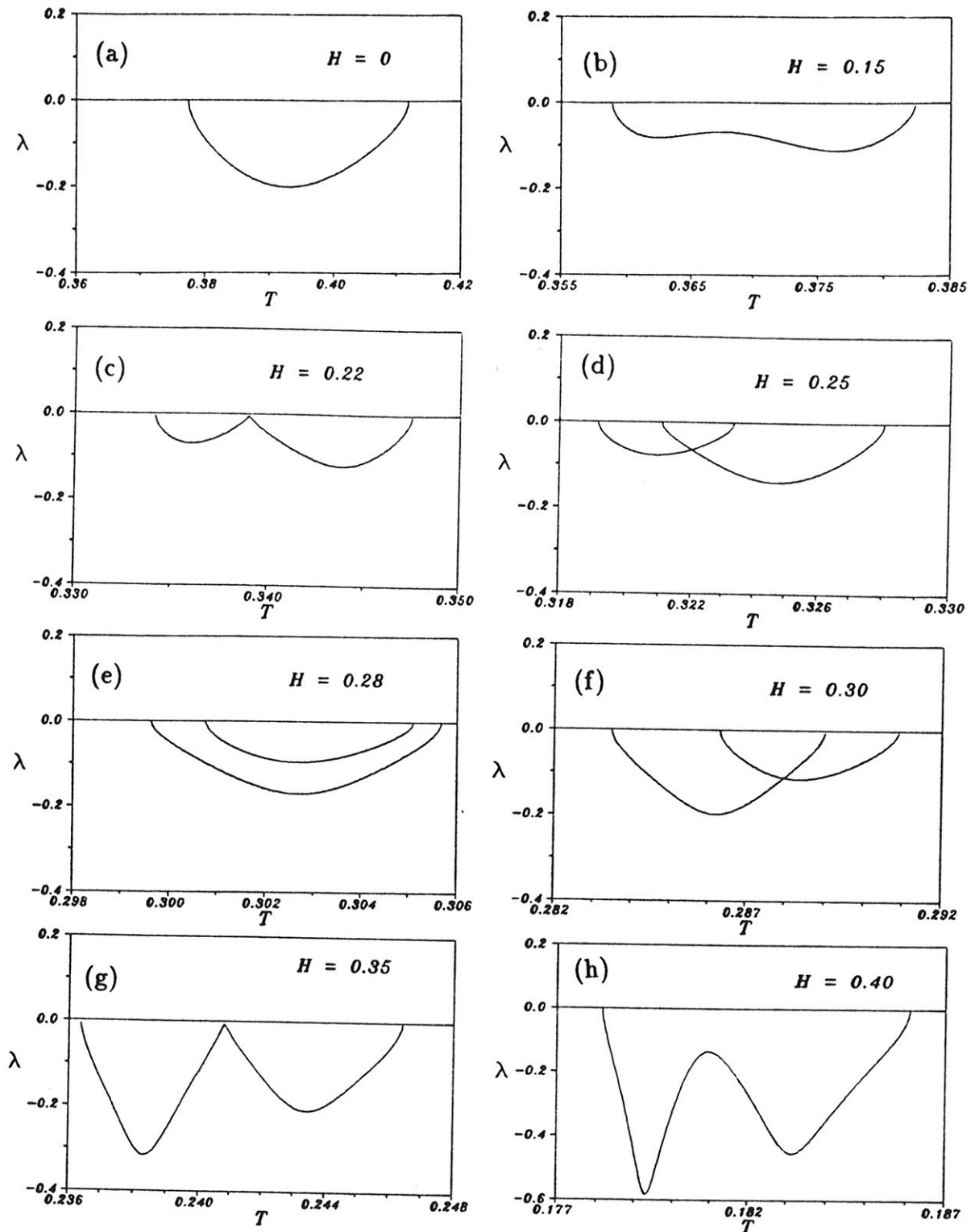


Figura 6.28: Maior expoente de Lyapunov do mapeamento, em função da temperatura, para a fase $3/14$, $p = 1,5$ e H igual a: (a) 0, (b) 0,15, (c) 0,22, (d) 0,25, (e) 0,28, (f) 0,30, (g) 0,35 e (h) 0,40.

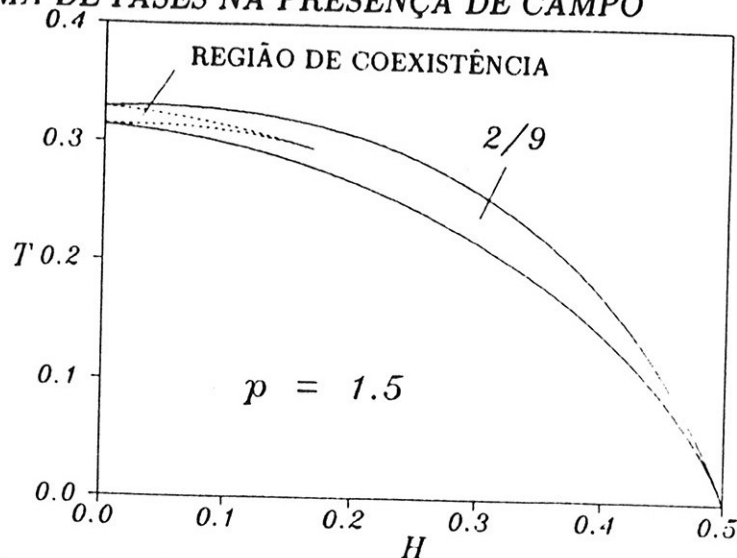


Figura 6.29: Localização da região de coexistência na fase $2/9$.

o maior expoente de Lyapunov é zero e tem expoentes negativos à direita e à esquerda representa o ponto crítico. Uma terceira possibilidade é a existência de uma transição de primeira ordem líquido-vapor, que corresponderia no nosso modelo às figuras 6.28d-f. Nelas observa-se uma coexistência de fases, ou configurações diferentes com mesmo número de onda.

A existência de regiões de coexistência de fases no interior das fases comensuráveis deve ser um fenômeno comum, embora muitas vezes eles não sejam denunciadas pela forma da fronteira de fases. Um exemplo desse tipo é a região de coexistência presente na fase $2/9$ da figura 6.20. Uma análise cuidadosa revela que essa região ocorre para campos magnéticos fracos, como pode ser confirmado pelo estudo do maior expoente de Lyapunov dos ciclos de período 9, mostrados na figura 6.30. A figura 6.29 mostra a região de coexistência na fase $2/9$. Podemos compreender a existência dessa região como sendo uma extensão, para campo não nulo, da coexistência entre estruturas diferentes já existentes a campo nulo (figura 5.12).

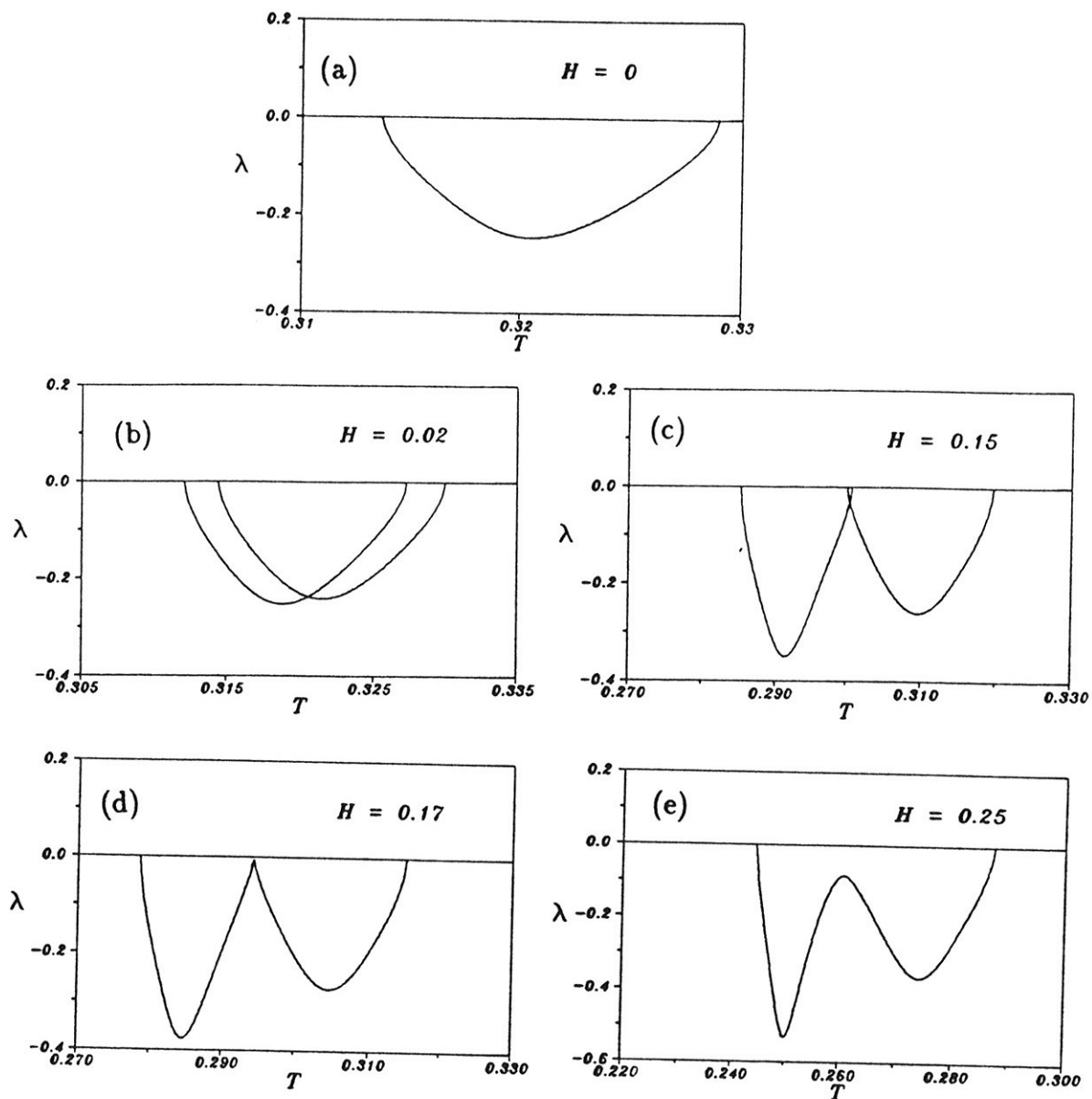


Figura 6.30: Maior expoente de Lyapunov do mapeamento, em função da temperatura, para a fase 2/9 e $p = 1,5$ e H igual a: (a) 0, (b) 0,02, (c) 0,15, (d) 0,17 e (e) 0,25.

6.6 Coexistência de fases moduladas de diferentes números de onda

Em todos os diagramas de fases $T - H$ do modelo há regiões onde coexistem diferentes fases moduladas ou fases moduladas e a fase paramagnética. Essas regiões, embora em geral de pequena extensão comparada à extensão global dos diagramas, apresentam uma complexidade formidável. Como no caso do modelo na ausência do campo (Yokoi *et al.*, 1985), é também nessa região que encontramos os atratores estranhos, que correspondem a fases moduladas caóticas. Nesta seção, descreveremos alguns aspectos do comportamento de fases comensuráveis nessas regiões, deixando a descrição dos atratores estranhos para a seção 6.8.

Para valores de $p > 1$, a coexistência de fases moduladas de diferentes números de onda ocorre, nos diagramas $T - H$, nas regiões em que as fases moduladas se dobram como camadas de cebola, perto do ponto de multifases. Um exemplo típico dessa região de coexistência de fases ocorre no interior da fase $1/6$ mostrada na figura 6.20. A região de estabilidade da fase $1/6$ está mostrada na figura 6.31. Ressaltamos que existem muitas outras, possivelmente infinitas, fases moduladas que coexistem nessa região, mas que escolhemos estudar a fase $1/6$ por ser a mais simples. O aspecto mais notável é a existência de uma lacuna no ramo inferior da região de estabilidade da fase $1/6$. O estudo do maior expoente de Lyapunov nesta região mostra que o ciclo-6 torna-se um repulsor nesta lacuna, pois esse expoente assume valor positivo, como mostrado na seqüência de gráficos da figura 6.32. Mais ainda, nessa região torna-se estável um ciclo-12 (figura 6.32b). Este processo de duplicação de período prossegue com a diminuição da temperatura, quando na região central de estabilidade do ciclo-12 este passa a ser instável, tornando-se

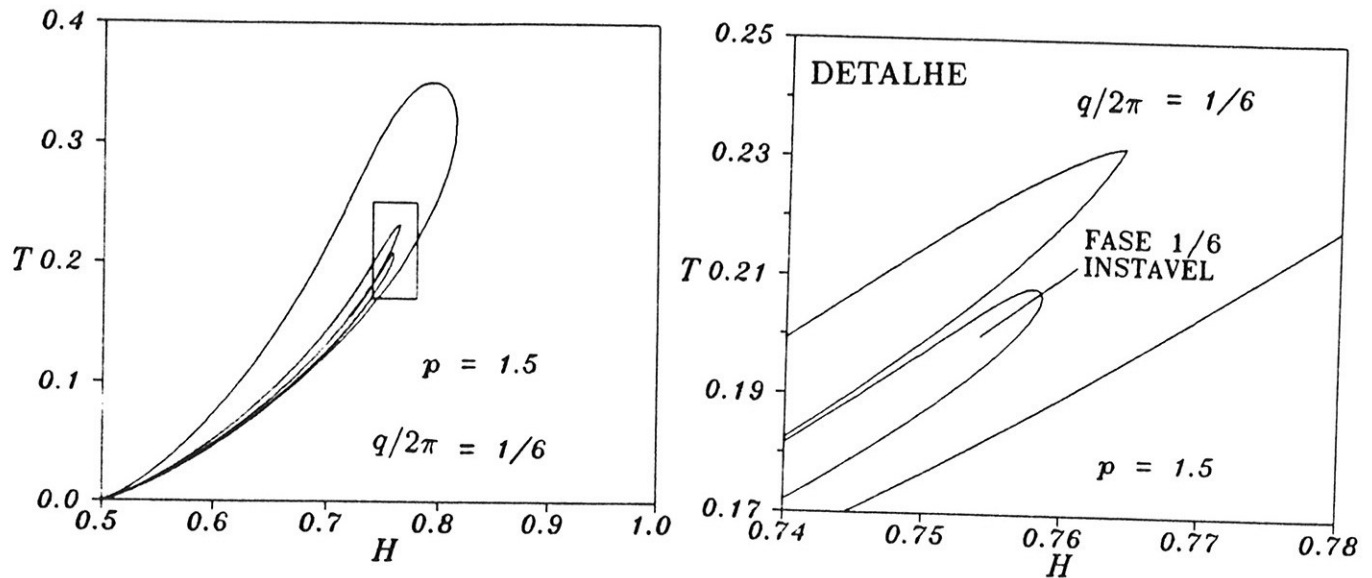


Figura 6.31: Região de instabilidade da fase 1/6 para $p = 1.5$.

estável o ciclo-24 (figura 6.32c), e assim sucessivamente. Claramente esse tipo de duplicação de período deve estar relacionado ao aparecimento de atratores estranhos nessa região segundo uma das rotas para o caos (Feigenbaum, 1980).

Para valores de $p < 1$ existem regiões onde coexistem as fases paramagnética e modulada, conforme pode se observar, por exemplo, nas figuras 6.5—6.8. Não é fácil estudar o que ocorre com as fases moduladas comensuráveis que adentram essa região.

A figura 6.33 mostra o que ocorre com a fase 1/11 para $p = 0,7$. A complexidade decorre da existência de um grande número de diferentes ciclos-11 que podem se tornar estáveis ou instáveis nessa região. Para compreender a situação, foi importante construir gráficos dos dois expoentes de Lyapunov associados a cada um dos ciclos-11, como função do campo magnético. Em certos intervalos de parâmetros os autovalores Λ_1 e Λ_2 da matriz linearizada L tornam-se complexos, e nesses casos os dois expoentes de Lyapunov coincidem.

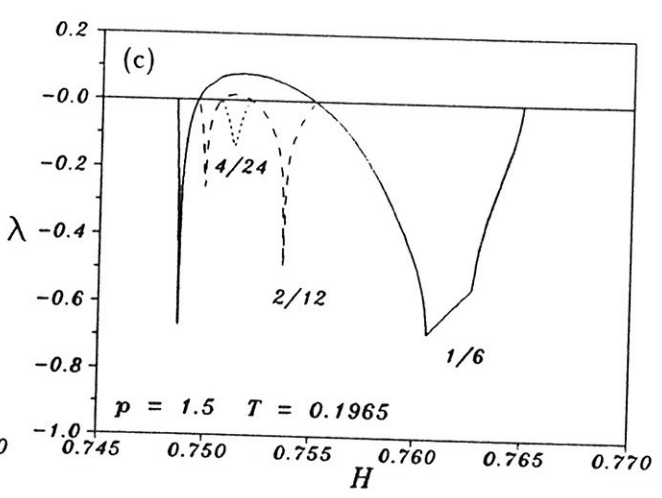
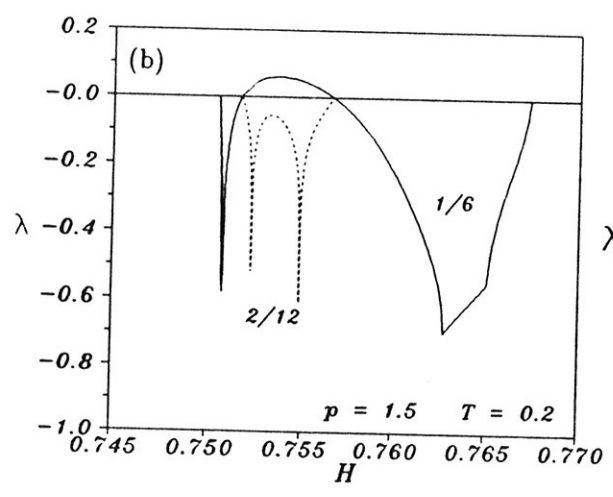
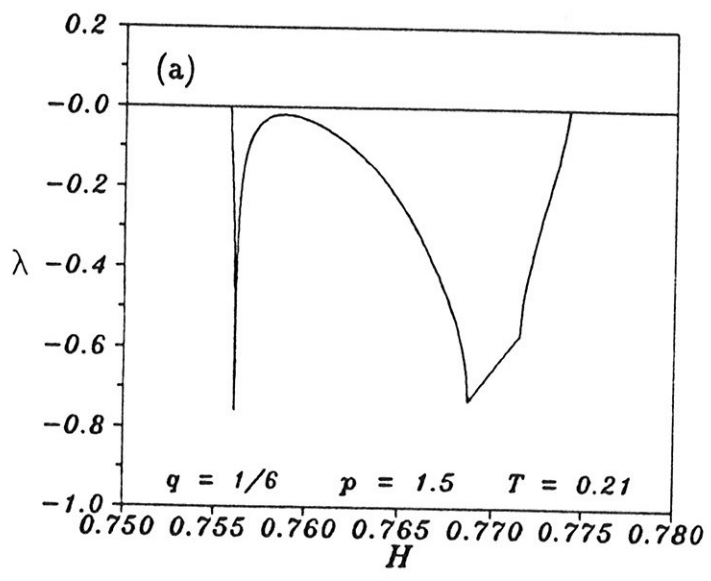


Figura 6.32: Processo de duplicação de período da fase $1/6$ e $p = 1,5$. (a) $T = 0,21$. (b) $T = 0,20$. (c) $T = 0,1965$.

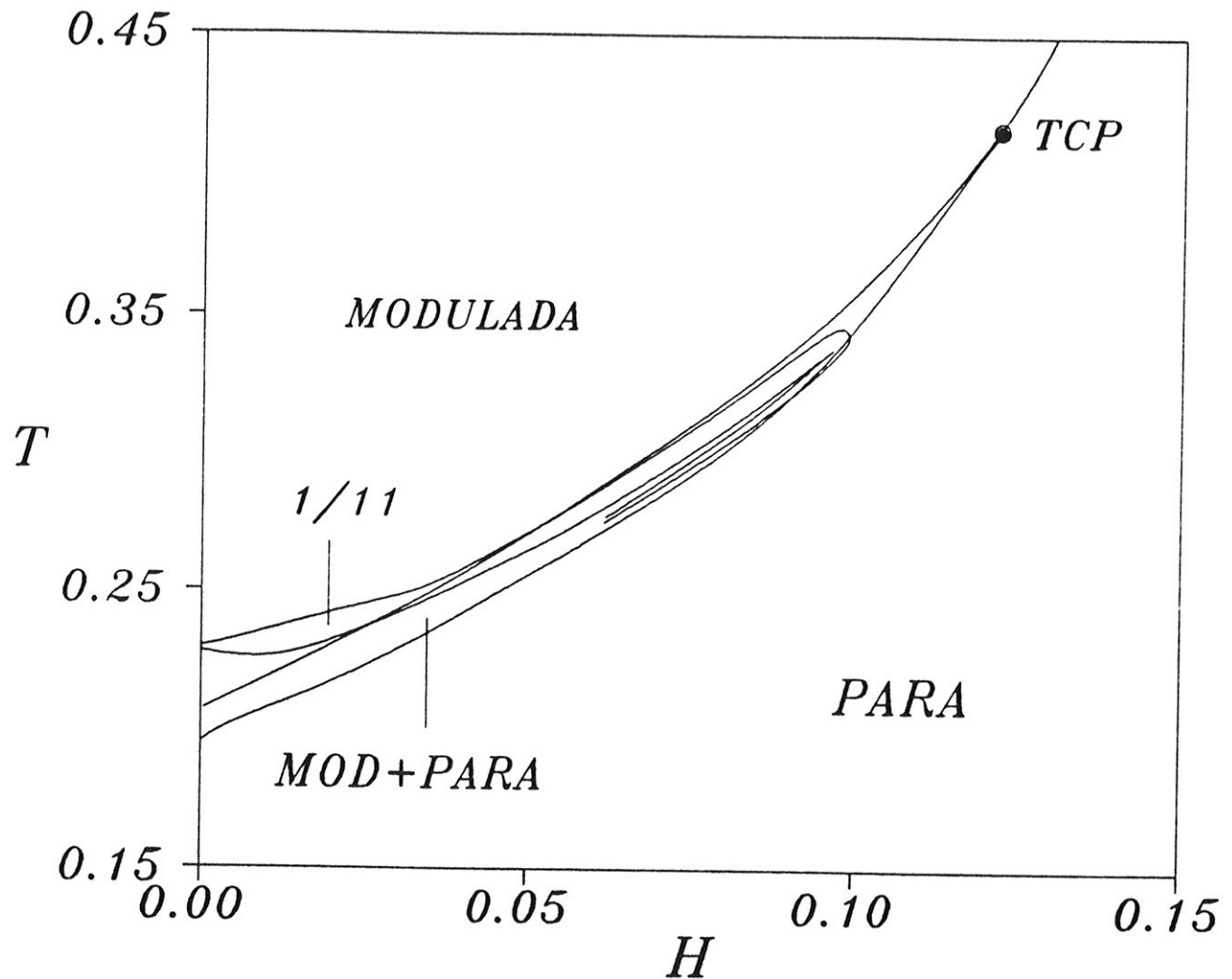


Figura 6.33: Localização da fase 1/11 no diagrama de fases para $p = 0,7$.

A figura 6.34a mostra o que ocorre para campos pequenos e baixas temperaturas. Neste caso, existem dois ciclos-11, cujos expoentes de Lyapunov associados estão indicados pelos índices (1) e (2). O ciclo-11 (1) tem ambos os expoentes negativos, enquanto o ciclo-11 (2) tem um expoente positivo e o outro negativo. Portanto nessa região apenas o ciclo-11 (1) é estável.

Este cenário se modifica ligeiramente nas figuras 6.34b e c. Nessas, para temperaturas ligeiramente maiores, o ciclo-11 (1) apresenta re-

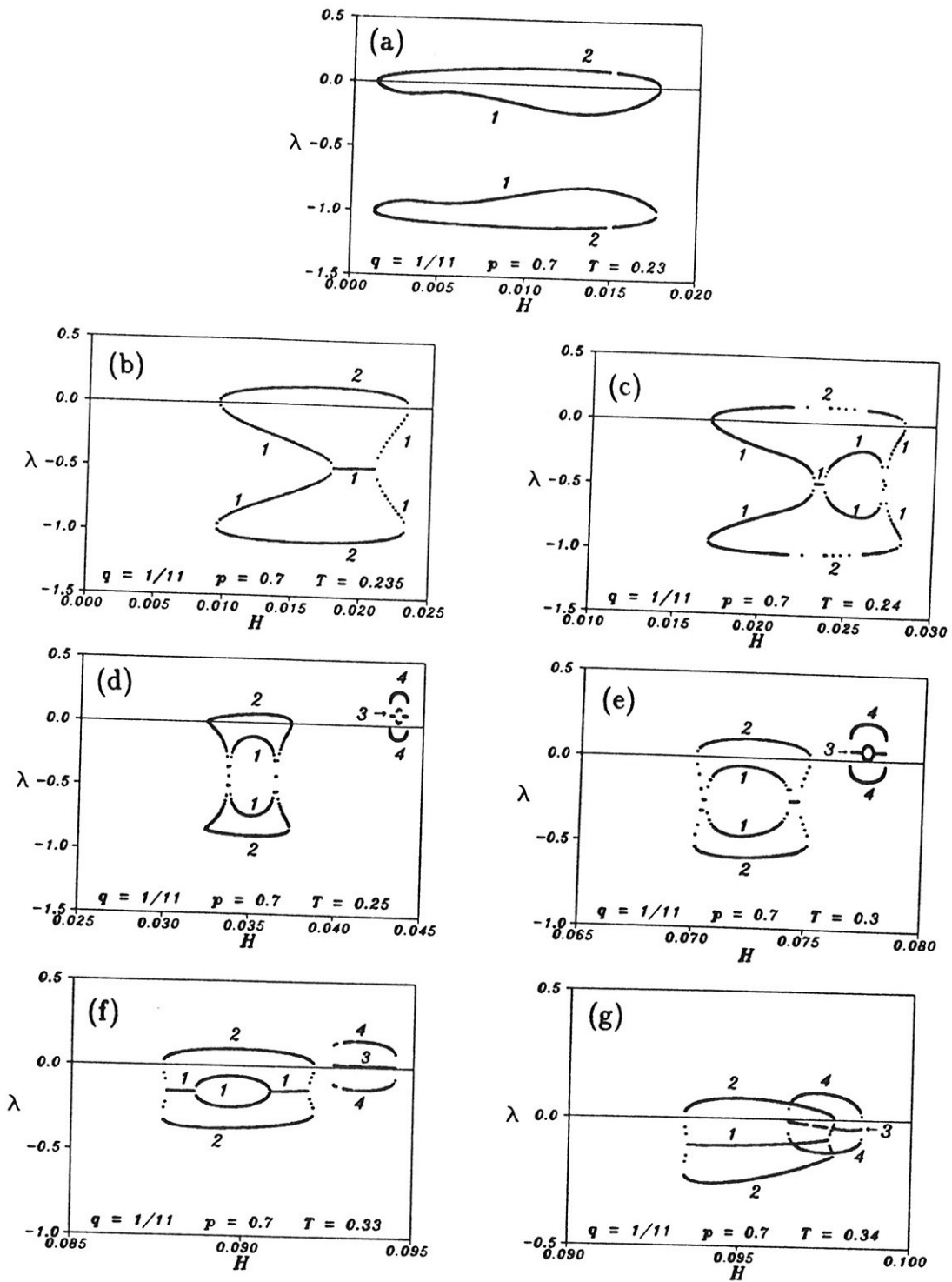


Figura 6.34: Expoentes de Lyapunov da fase 1/11 em função do campo magnético, para $p = 0,7$ e T igual a : (a) 0,23 , (b) 0,235 , (c) 0,24 , (d) 0,25 , (e) 0,3 , (f) 0,33 e (g) 0,34 .

giões onde Λ é complexo, caracterizadas pelo colapso das curvas dos expoentes numa única curva. Na figura 6.34d observamos o surgimento de mais dois ciclos-11, indicados por (3) e (4), que entretanto são instáveis. Estes ciclos-11 correspondem, na figura 6.33, ao ramo de baixo da fase 1/11, que não representa uma região de estabilidade da fase 1/11, mas uma região onde existe ciclo-11 instável. A dificuldade em encontrar esses ciclos é responsável pela forma das fronteiras da fase 1/11, após a dobra.

Gradualmente, conforme aumentamos a temperatura, esses ciclos-11 tornam-se cada vez menos instáveis, e se aproximam dos ciclos-11 (1) e (2), conforme indicado nas figuras 6.34e e 6.34f. Finalmente, na figura 6.34g observamos que o ciclo-11 (3) torna-se estável, com expoente de Lyapunov negativo, indicando que existe uma região de coexistência entre os ciclos-11 (1) e (3). Portanto nem todo o ramo de baixo da fase 1/11 na figura 6.33 é instável, mas ele se torna instável abaixo de uma certa temperatura.

6.7 Fases incomensuráveis na presença de campo

Diferentes tipos de atratores aperiódicos, correspondendo a fases incomensuráveis, foram observados na presença do campo magnético, e estão mostrados nas figuras 6.35 e 6.36. A figura 6.35a mostra um exemplo típico de atrator aperiódico observado para campo pequenos e temperaturas altas. Ele corresponde a uma fase incomensurável deslizante. Para obtê-lo, descartamos as 100.000 iterações iniciais, partindo de condições iniciais $(x_1, y_1) = (1, 1)$ e os pontos plotados correspondem aos 25.000 pontos posteriores. A figura 6.35b mostra um atrator aperiódico observado a campos e temperaturas baixos. Observamos que, nesta situação, o atrator torna-se aparentemente desconexo, havendo regiões que jamais

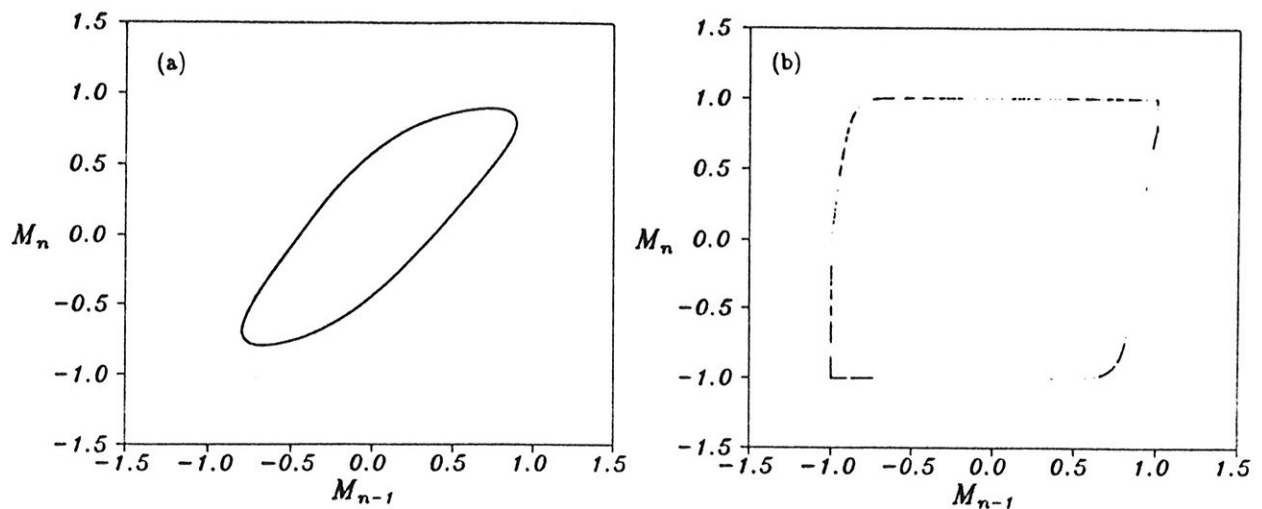


Figura 6.35: Fases incomensuráveis para $p < 1$. (a) deslizante, para $p = 0,6$, $T = 0,43855$ e $H = 0,02$. (b) travada, para $p = 0,95$, $T = 0,950051$ e $H = 0,05$.

são visitadas. Esse tipo de atrator corresponderia a uma fase incomensurável travada. Neste caso, foram descartadas 60.000 iterações iniciais, partindo de $(x_1, y_1) = (1, 1)$ e os pontos plotados correspondem aos 30.000 pontos posteriores.

A figura 6.36 mostra atratores aperiódicos observados na região de campos altos. Observamos a concentração dos atratores no canto superior direito, decorrente do fato de que existe uma componente grande de magnetização paralela ao campo aplicado. A figura 6.36a mostra uma órbita aperiódica unidimensional, correspondendo a uma fase incomensurável do tipo deslizante. Ela foi obtida descartando-se as 70.000 iterações iniciais, partindo de $(x_1, y_1) = (1, 1)$ e os 10.000 pontos posteriores estão representados. Já a figura 6.36b mostra um atrator aperiódico a temperaturas mais baixas, onde se observa regiões nunca visitadas pelos pontos do mapeamento. Esse tipo de órbita corresponde a uma fase incomensurável travada. Descartou-se as 60.000 iterações iniciais, partindo de $(x_1, y_1) = (1, 1)$ e os pontos representados correspondem aos 30.000

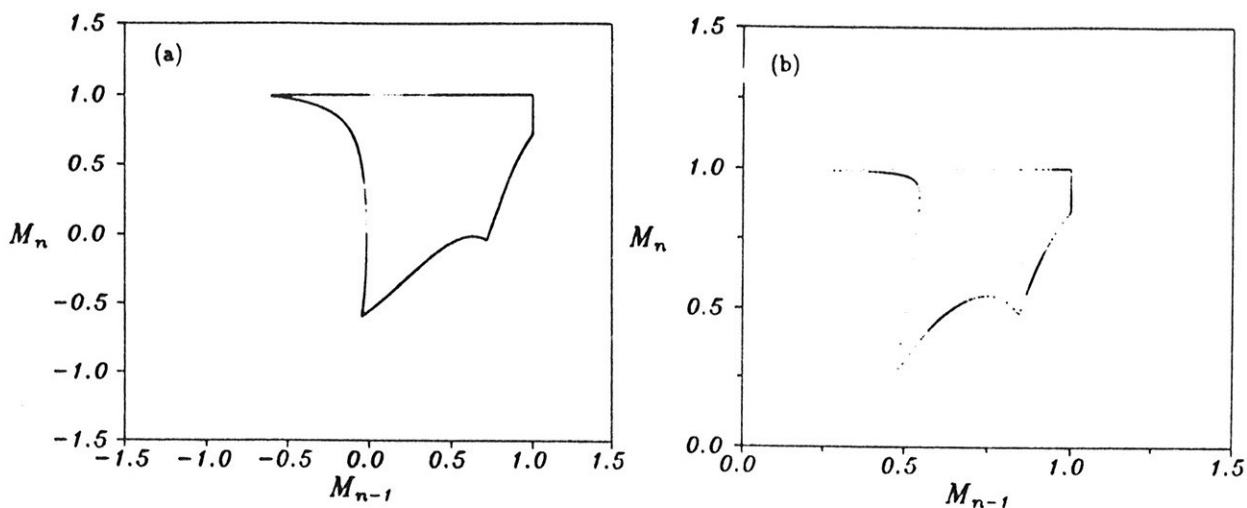


Figura 6.36: Fases incomensuráveis para $p > 1$. (a) deslizando, para $p = 2$, $T = 0,3$ e $H = 1,27$. (b) travada, para $p = 2$, $T = 0,219019$ e $H = 1,27$.

pontos posteriores.

6.8 Atratores estranhos na presença de campo

A figura 6.37 mostra o maior expoente de Lyapunov calculado pela iteração do mapeamento, conforme o método de Eckmann e Ruelle (1985) descrito no apêndice, para $p = 0,6$ e $T = 0,35$, num intervalo de valores de H , na região de coexistência das fases modulada e paramagnética. O mapeamento foi iterado a partir do ponto inicial $(x_1, y_1) = (1, 1)$, descartaram-se 10.000 pontos iniciais e foram utilizados 10.000 pontos subsequentes no cômputo do expoente.

A figura 6.38 mostra o atrator estranho encontrado no ponto $p = 0,6$, $H = 0,0247$ e $T = 0,35$. O maior expoente de Lyapunov é $\lambda_1 = 0,049$. Nestas figuras sempre se partiu do ponto inicial $(x_1, y_1) = (1, 1)$ e descartou-se 10.000 pontos iniciais. A seqüência dessas figuras mostra os detalhes do atrator em graus crescentes de magnificação, onde se percebe claramente a sua natureza fractal. As figuras 6.40a, b, c e d

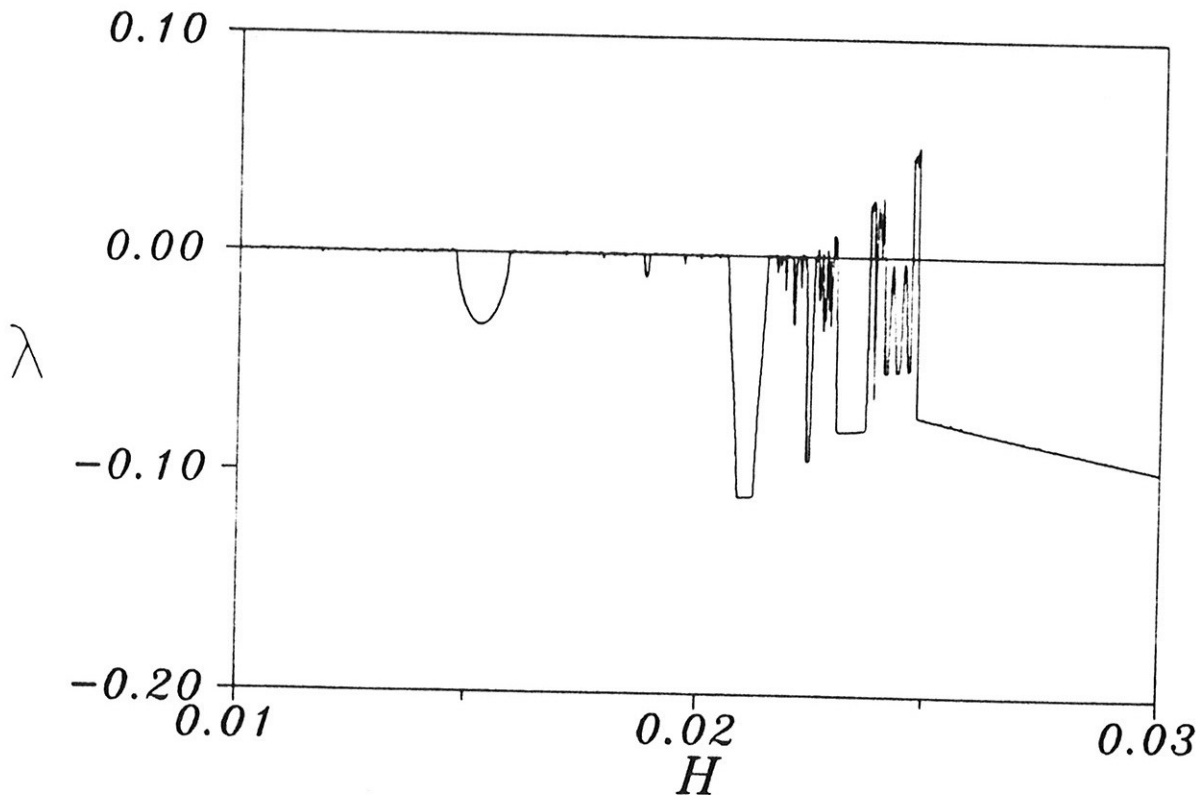


Figura 6.37: Maior expoente de Lyapunov em função do campo magnético, obtido pelo método de Eckmann e Ruelle (1985) para $p = 0,6$ e $T = 0,35$. Observe-se duas regiões povoadas de atratores estranhos perto de $H = 0,025$.

contém, respectivamente, 15.000, 12.000, 2.500 e 730 pontos do mapeamento, correspondendo a um total de 15.000, 50.000, 200.000 e 1.000.000 de iterações.

A figura 6.39 mostra o maior expoente de Lyapunov, calculado também pelo método de Eckmann e Ruelle (1985), para $p = 1$, $T = 0,15$ e num intervalo de valores de H que inclui a região de coexistência de fases moduladas. Também nesse caso partiu-se do ponto inicial $(x_1, y_1) = (1, 1)$, descartou-se 10.000 iterações iniciais e foram utilizados as 10.000 iterações seguintes para o cálculo do expoente.

A figura 6.40 mostra o atrator estranho encontrado para $p = 1$, $H = 0,235$ e $T = 0,15$. O maior expoente de Lyapunov é $\lambda_1 = 0,12$. Na

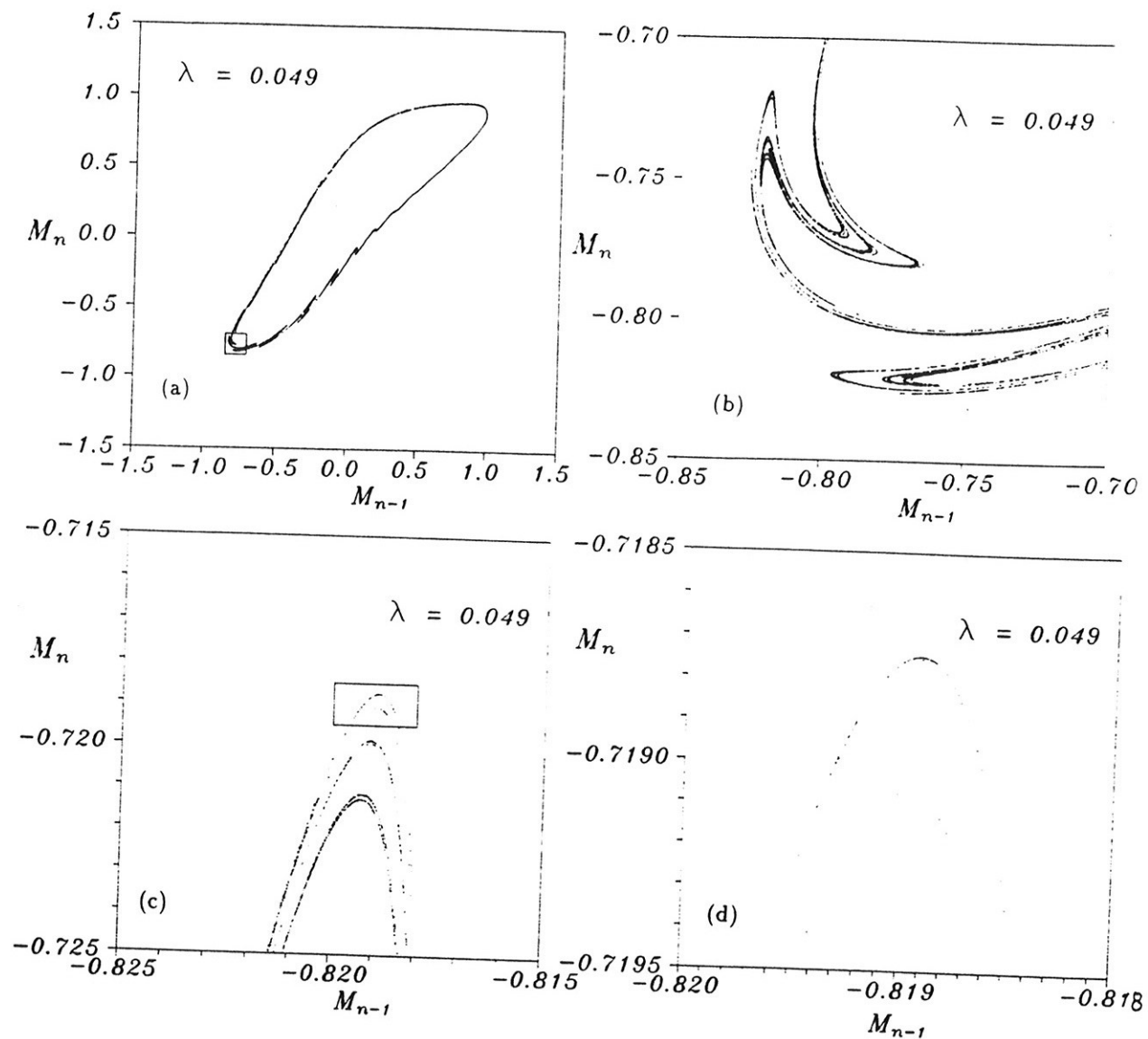


Figura 6.38: Atrator estranho obtido para valores de $p = 0,6$, $H = 0,35$, $T = 0,0247$, e várias ampliações, que evidenciam sua auto-similaridade.

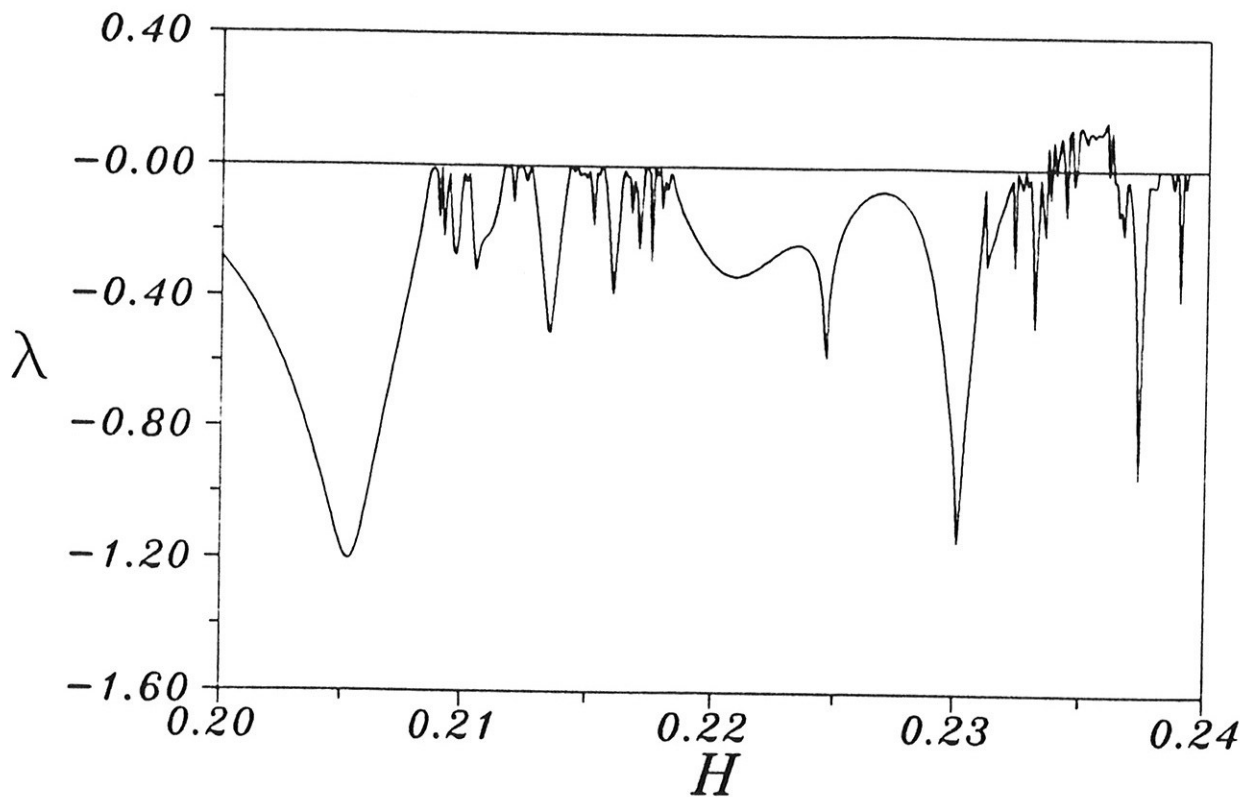


Figura 6.39: Maior expoente de Lyapunov em função do campo magnético, obtido pelo método de Eckmann e Ruelle (1985) para $p = 1$ e $T = 0,15$. Observe-se uma região povoada de atratores estranhos perto de $H = 0,235$.

seqüência de figuras em magnificação crescente podemos observar a sua estrutura fractal. Na obtenção dos pontos dessas figuras sempre se partiu do ponto inicial $(x_1, y_1) = (1, 1)$ e descartou-se 10.000 pontos iniciais. As figuras 6.40a, b, c e d, contém, respectivamente, 45.000, 14.000, 8.000 e 2.500 pontos do mapeamento, e correspondem, respectivamente, a 45.000, 500.000, 1.000.000 e 10.000.0000 de iterações do mapeamento.

As figuras 6.41 e 6.42 mostram mais dois exemplos de atratores estranhos encontrados na presença do campo magnético. Neste caso, eles foram detectados para $p = 1,5$, o que nos leva a concluir que esses atratores estranhos devem existir para todos os valores do parâmetro de competição maiores do que $1/2$. Estes atratores, particularmente,

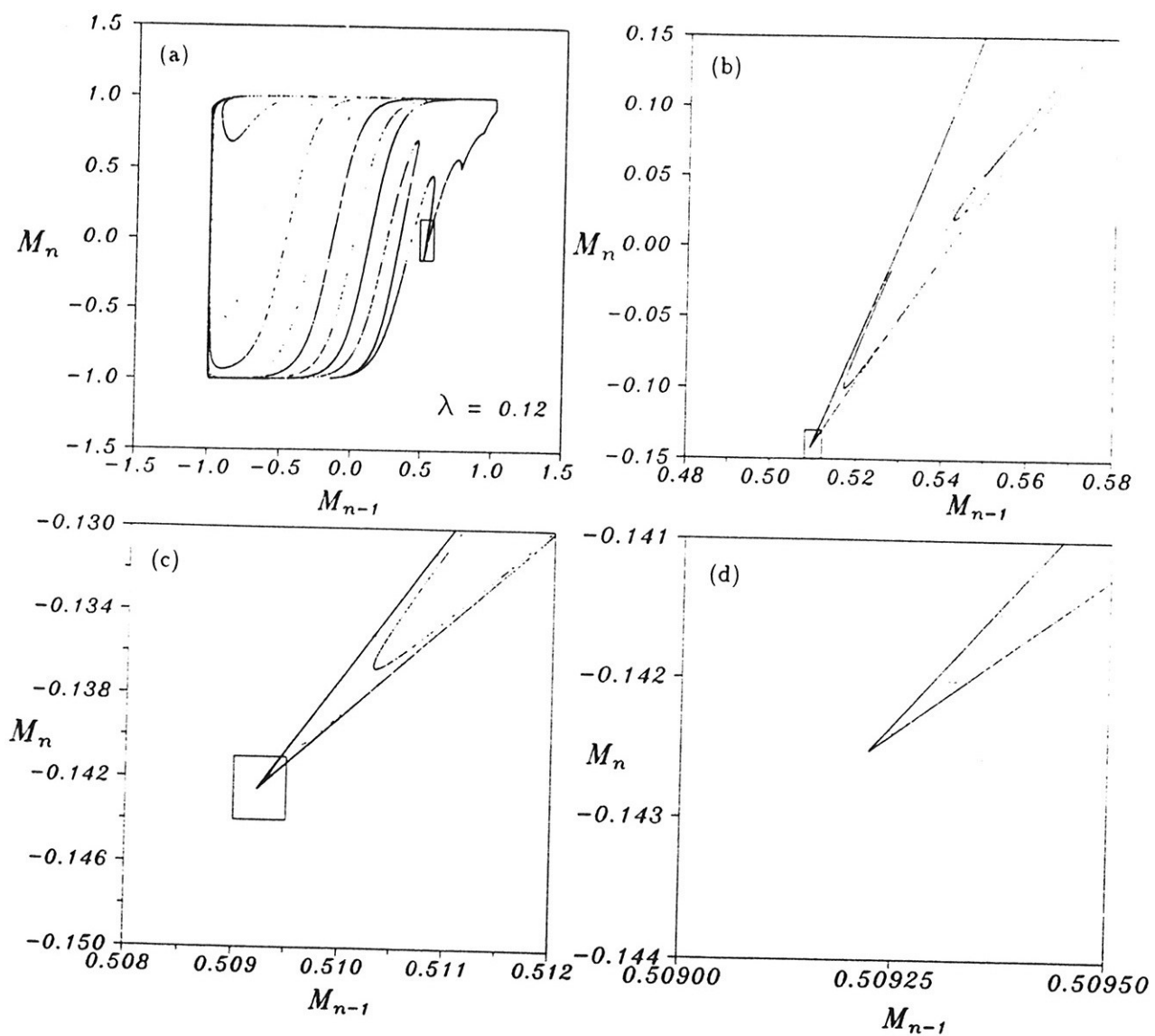


Figura 6.40: Atrator estranho obtido para valores de $p = 1$, $T = 0,15$, $H = 0,235$, e várias ampliações, que evidenciam sua auto-similaridade.

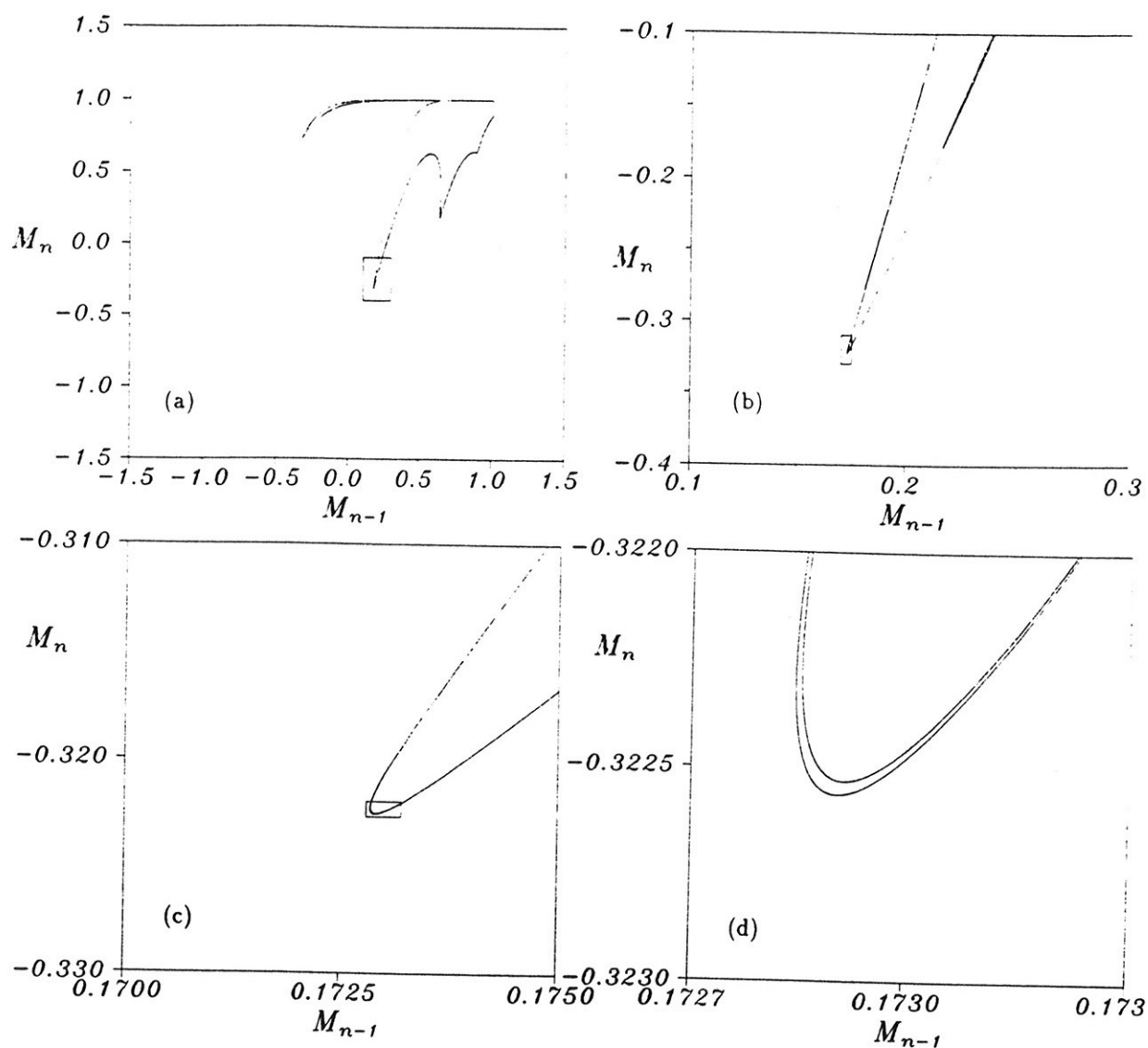


Figura 6.41: Atrator estranho "conexo" obtido para valores de $p = 1,5$, $T = 0,16$, $H = 0,7287$ e várias ampliações, que evidenciam sua auto-similaridade.

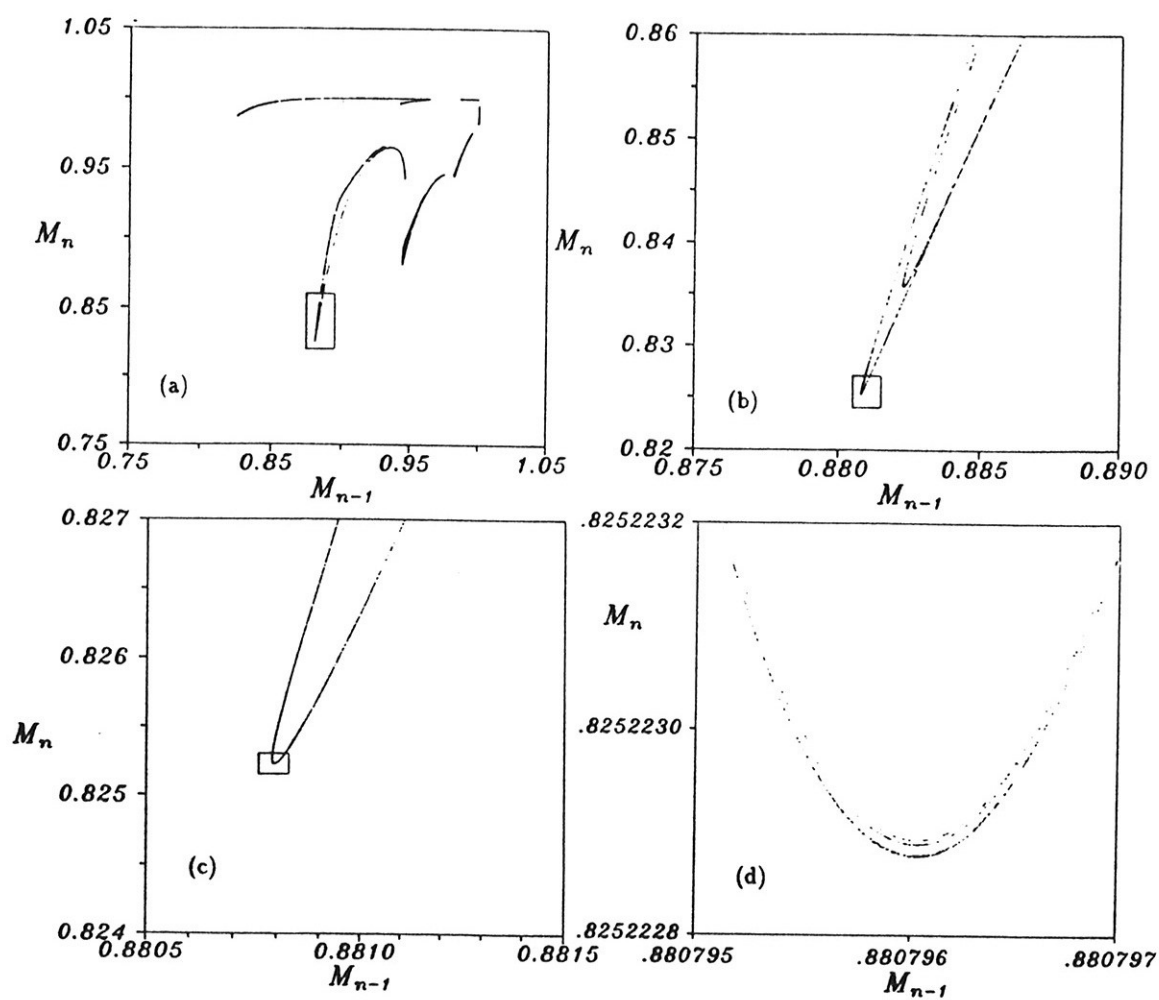


Figura 6.42: Atrator estranho "desconexo" obtido para valores de $p = 1,5$, $T = 0,03$, $H = 0,5708$, e várias ampliações, que evidenciam sua auto-similaridade.

foram encontrados a campos relativamente mais elevados e encontram-se mais concentrados no canto direito superior, indicando a presença de uma magnetização considerável no sentido do campo magnético. Podemos também observar que o atrator encontrado a temperaturas mais altas, figura 6.41, é mais conexo que o atrator encontrado a temperaturas mais baixas, figura 6.42, um fenômeno que já ocorre a campo nulo.

Não foi nosso propósito empreender estudo detalhado desses atratores estranhos no molde dos trabalhos de Prado e Fiedler-Ferrari (1989) e Carneiro e Wreszinski (1991), mas apenas verificar a existência deles na presença de campo magnético. Como no caso do campo nulo, pudemos confirmar a ocorrência deles nas regiões de coexistência de fases moduladas.

6.9 Comparação com o diagrama de fases do modelo ANNNI na presença de um campo magnético

Como mencionamos anteriormente, o modelo investigado nesta parte da tese é uma contrapartida na árvore de Cayley do modelo ANNNI numa rede cristalina. De fato, foi essa a principal motivação para emprendermos esse estudo, já que o modelo numa árvore é mais simples de ser estudado e permite uma exploração muito mais detalhada do diagrama de fases, que poderia ser útil na elaboração do diagrama de fases detalhado do modelo ANNNI na presença de um campo. Neste sentido, é interessante compararmos os resultados desse capítulo com os diagramas de fases do modelo ANNNI na presença de campo obtidos, na aproximação de campo médio, por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981).

Os diagramas de fases desses autores foram obtidos considerando-se apenas fases de períodos menores que 20, e portanto devem ser

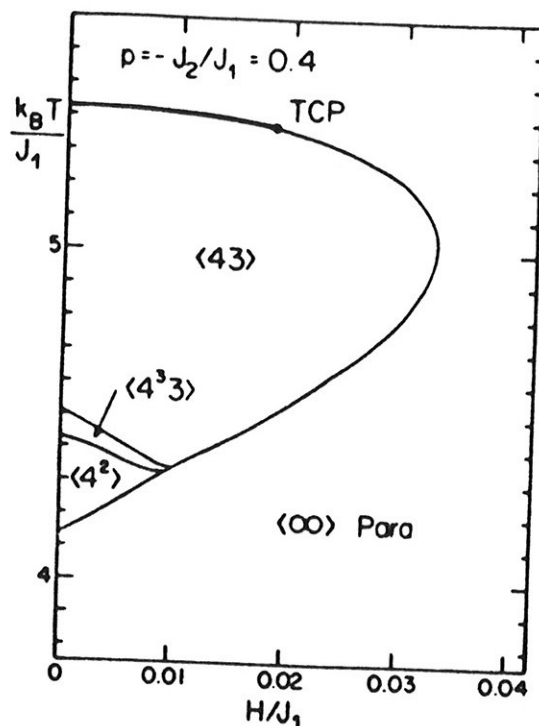


Figura 6.43: Diagrama de fases do modelo ANNNI na presença de campo, obtido por Yokoi *et al.* (1981), para $p = 0,4$. A linha mais espessa representa uma transição de segunda ordem e a mais fina uma transição de primeira ordem, e se encontram num ponto tricrítico (TCP).

considerados bastante aproximados e incompletos. Na comparação dos dois modelos é importante ter em mente que o ponto de multifases, a campo nulo, no modelo ANNNI, ocorre para $p = -J_2/J_1 = 1/2$, enquanto no modelo na árvore de Cayley ocorre para $p = 1$.

A figura 6.43 de Yokoi *et al.* (1981) mostra o diagrama de fases $T - H$ típico para $p < 1/2$, que deve ser comparado, por exemplo, com o diagrama 6.8 deste capítulo. Existe uma grande semelhança na forma geral desses diagramas, principalmente o fato das fases moduladas existirem numa região em forma de uma semi-bolha. As fases $1/8$ e $2/15$ podem ser vistas nos dois diagramas de fases, mas é difícil uma comparação mais detalhada pelo fato do diagrama de Yokoi *et al.* incluir apenas fases

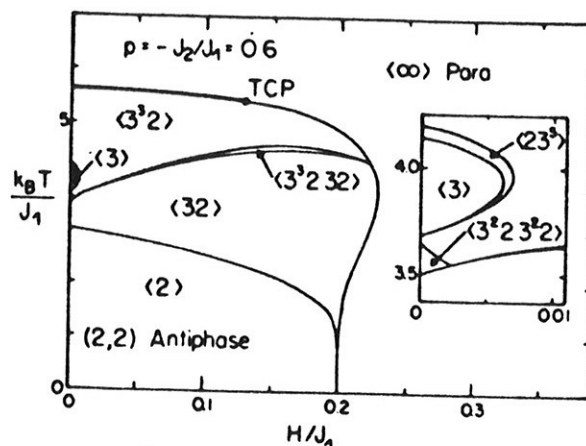


Figura 6.44: Diagrama de fases do modelo ANNNI na presença de campo, obtido por Yokoi *et al.* (1981), para $p = 0,6$. A linha mais espessa representa uma transição de segunda ordem e a mais fina uma transição de primeira ordem, que se encontram num ponto tricrítico (TCP).

comensuráveis de períodos curtos. Por exemplo, é bastante improvável que a fase $\langle 43 \rangle$ domine quase a totalidade da região modulada como na figura 6.43, sendo mais provável que existam muitas fases comensuráveis de períodos maiores, além de fases incomensuráveis, como na figura 6.8. Uma diferença entre os dois modelos refere-se à localização do ponto tricrítico, que ocorre no lado superior da semi-bolha no caso do modelo ANNNI, enquanto no modelo na árvore ocorre no lado inferior.

A figura 6.44 mostra um diagrama de fases $T - H$ típico do modelo ANNNI para $p > 1/2$, que deve ser comparado, por exemplo, com o diagrama de fases 6.20 deste capítulo. A forma geral dos dois diagramas é bastante parecida, exceto que as fases parecem sair verticalmente do ponto de multifases no modelo ANNNI e obliquamente no caso do modelo na árvore de Cayley. Podemos observar nos dois diagramas que as fases $1/4$ e $1/5$ ocupam porções consideráveis do diagrama de fases. Por outro lado, fases do tipo $1/6$, $2/11$ e $3/16$ na figura 6.20 que formam camadas sobrepostas não são observadas no modelo ANNNI, e é possível

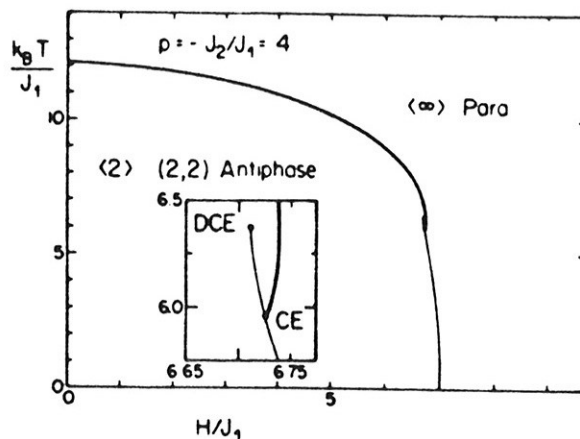


Figura 6.45: Diagrama de fases do modelo ANNNI na presença de campo magnético para $p = 4$, obtido por Yokoi *et al.* (1981). O retângulo é uma ampliação do diagrama global onde se observa a ocorrência de um ponto crítico terminal (CE) e de um ponto crítico terminal duplo (DCE).

que sejam uma peculiaridade do diagrama do modelo na árvore de Cayley. Observamos também que no modelo ANNNI ainda existe o ponto tricrítico, que desaparece no modelo na árvore de Cayley.

Para valores grandes de p , o modelo ANNNI apresenta um diagrama $T - H$ que tipicamente tem a forma mostrada na figura 6.45. Este diagrama de fases deve ser comparado ao o diagrama da figura 6.23 desse capítulo. Nos dois casos, observamos a predominância da fase $1/4$. Isto ocorre porque para valores de p muito grandes o modelo ANNNI decompõe-se em duas subredes metamagnéticas, enquanto o modelo na árvore de Cayley decompõe-se em duas sub-árvores antiferromagnéticas.

Em resumo, podemos dizer que os diagramas de fases do modelo na árvore de Cayley, embora apresentando certas diferenças em relação ao diagrama de fases do modelo ANNNI, são suficientemente semelhantes para constituir um guia útil numa investigação mais detalhada do diagrama de fases do modelo ANNNI na presença de um campo magnético.

Parte II

**TRANSIÇÕES
SIMÉTRICA-ASSIMÉTRICA NO
MODELO DE
FRENKEL-KONTOROVA DUPLO**

Capítulo 7

Introdução à parte II

Na primeira parte da tese estudamos um modelo que apresenta fases moduladas magnéticas. Nesta parte estudaremos um modelo que apresenta fases moduladas estruturais, e que constitui uma extensão do modelo FK (Frenkel e Kontorova, 1938).

O modelo FK é um sistema unidimensional clássico de partículas, também chamadas de átomos, que interagem com seus vizinhos através de um potencial parabólico (como se estivessem ligadas por molas), e que estão sujeitas a um potencial que varia senoidalmente no espaço (figura 7.1). Tratando-se de um modelo unidimensional com interações de curto alcance, ele não apresenta fases ordenadas a temperatura finita (Landau e Lifshitz, 1969). A maior parte dos estudos se concentra, portanto, nas propriedades do modelo no zero absoluto da temperatura, onde ele apresenta fases ordenadas moduladas.

Em 1949, Frank e van der Merwe resolveram o modelo FK na “aproximação contínua”, válida para potencial externo fraco. Eles mostraram que esse modelo pode apresentar uma transição da fase comensurável, onde todos os átomos estão no fundo do potencial, para uma fase incomensurável caracterizada pela existência de defeitos regularmente espaçados.

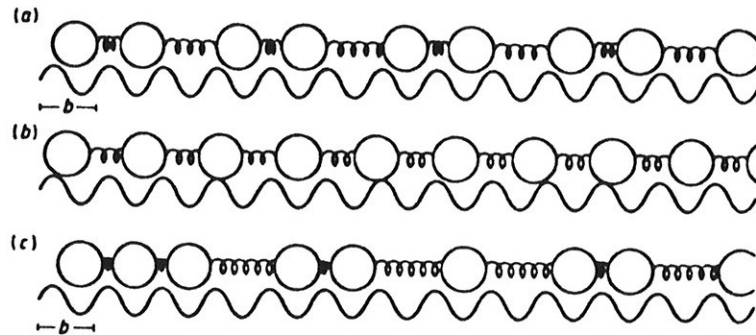


Figura 7.1: Representação do modelo FK. As molas representam as interações entre os átomos e a linha ondulada o potencial periódico. (a) fase comensurável. (b) fase incomensurável. (c) estrutura caótica.

O primeiro diagrama de fases para o modelo FK foi proposto por Ying (1971) e está mostrado na figura 7.2. Nesse diagrama nota-se a predominância da fase em que todos os átomos estão nos mínimos do potencial externo, rotulada por (I). As fases (II), (III), (IV) e (V) são fases moduladas com periodicidades 2,3,4 e 5, respectivamente. Nas zonas sombreadas deve se encontrar fases comensuráveis com periodicidade maior e fases incomensuráveis. A transição entre as fases (I)-(II) e (II)-(III) foi proposta como de primeira ordem.

Em 1978, Aubry mostrou que o problema de encontrar o estado fundamental do modelo FK tem relação com problemas de sistemas dinâmicos. Isto se dá porque a condição de extremo da energia para o modelo FK gera o mapa padrão (Chirikov, 1979 e Greene, 1979). Neste mesmo artigo, Aubry mostra a existência de uma transição experimentada pelas fases incomensuráveis, a chamada transição por “quebra de analiticidade”, conforme já mencionamos na Introdução Geral. Ainda no

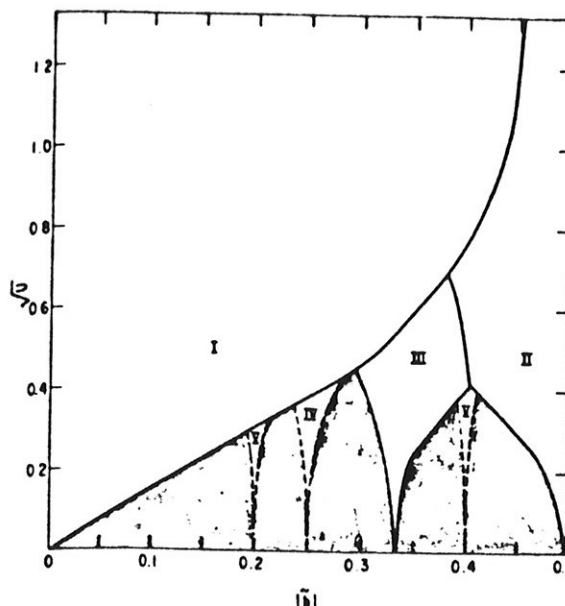


Figura 7.2: Diagrama de fases do modelo FK proposto por Ying (1971). A abscissa representa a discrepância entre as periodicidades do potencial externo e o comprimento de repouso das molas e a ordenada representa a amplitude do potencial externo.

artigo de 1978, Aubry propôs um modelo semelhante ao FK que, em vez do potencial ter forma senoidal ele é uma série de parábolas repetidas, tendo encontrado sua solução exata. O diagrama de fases desse modelo está mostrado na figura 7.3. Os rótulos das fases são chamados de número de rotação, onde o denominador representa o período de repetição da configuração. A definição de número de rotação será dada no próximo capítulo. Aubry (1983b) demonstrou que o modelo antiferromagnético de longo alcance de Bak e Bruinsma (1982, 1983), que apresenta “escada do diabo completa”, na verdade pode ser reduzido a esse modelo.

Aubry e Le Daeron (1983) e Aubry (1983a, b, c), obtiveram uma série de resultados rigorosos para o modelo FK e para um classe de modelos FK generalizados, onde a interação entre os átomos é sempre uma função convexa. Entre os resultados, está a demonstração de que não pode haver transições de fase de primeira ordem no modelo FK, quando a discrepância entre o período do potencial e o comprimento de

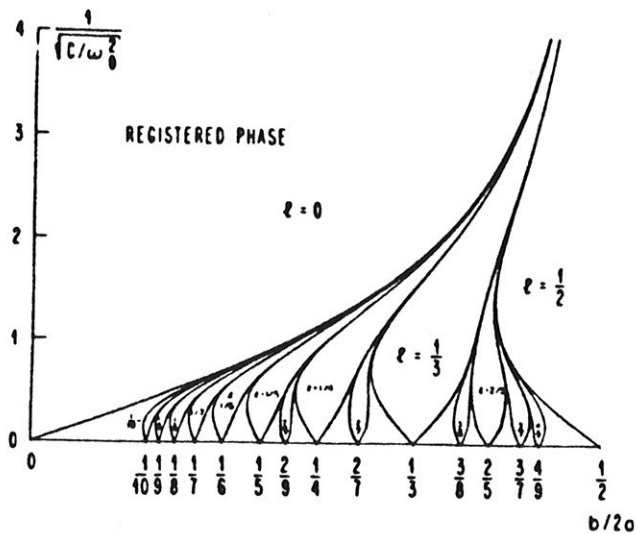


Figura 7.3: Diagrama de fases do modelo de Aubry (1978).

repouso das molas é aumentada. Isso significa que, nas figuras 7.2 e 7.3, para abscissas crescentes, as fases mudam continuamente. Neste sentido, foi apontada a existência de incorreções no diagrama de fases de Ying. Demonstraram também que não pode haver estado fundamental caótico, uma possibilidade sugerida por Bak (1982). Os resultados de Aubry não excluem, entretanto, a possibilidade de fases caóticas em redes de Bethe.

Li e Bak (1986), estudando a transição por “quebra de analiticidade”, verificaram que as posições dos átomos do modelo FK numa fase travada do modelo FK constitui um conjunto de Cantor (Mandelbrot, 1983) de dimensão fractal zero.

Em 1986, Griffiths e Chou propuseram um novo método para o estudo de diagramas de fases de modelos unidimensionais. O chamado “método dos potenciais efetivos” permitiu a determinação do diagrama de fases do modelo FK, além de uma larga classe de modelos, inclusive aqueles cujas interações interatômicas não são convexas. Exemplos disso são um modelo magneto-elástico (Marchand, Hood e Caillé 1987) e o

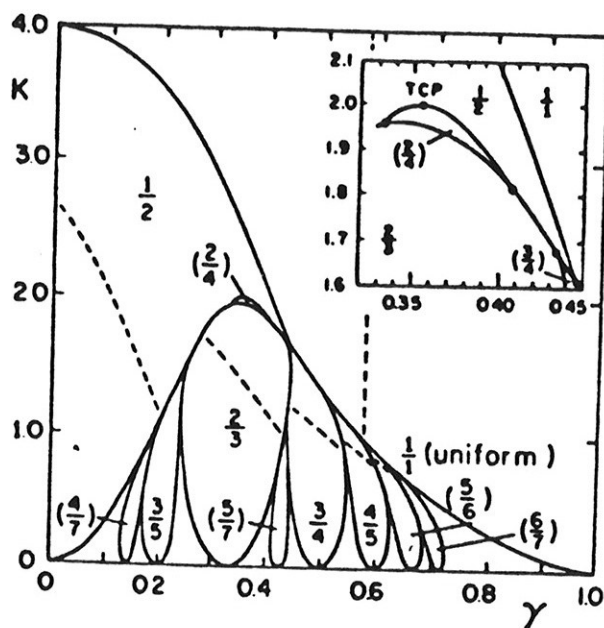


Figura 7.4: Diagrama de fases global do modelo magneto-elástico, obtido através do método dos potenciais efetivos por Marchand, Hood e Caillé (1987).

modelo XY quiral na presença de campo (Yokoi, Tang e Chou, 1988). Os diagramas de fases desses modelos estão mostrados nas figuras 7.4 e 7.5. Esses modelos exibem transições de primeira ordem, as mesmas que Aubry provava não existirem para interações interatômicas convexas.

Nesta parte da tese, iremos estudar os diagramas de fases do modelo FK em que o potencial externo contém primeiro e segundo harmônicos. Entre outras características desse modelo, interessa-nos relatar a descoberta de fases sem simetria de reflexão por nós encontradas (Tragtenberg e Yokoi, 1989), independentemente de Sasaki e Floría (1989). No capítulo 9 ficará evidente a diferença entre os mecanismos produtores deste tipo de fases em cada um dos modelos estudados. Em 1990, Braiman, Baumgarten, Jortner e Klafer mostraram a existência de fases assimétricas em cadeias finitas do tipo FK.

A Parte II deste trabalho está assim estruturada: no capítulo 8, descrevemos o modelo FK, mostramos sua solução na aproximação

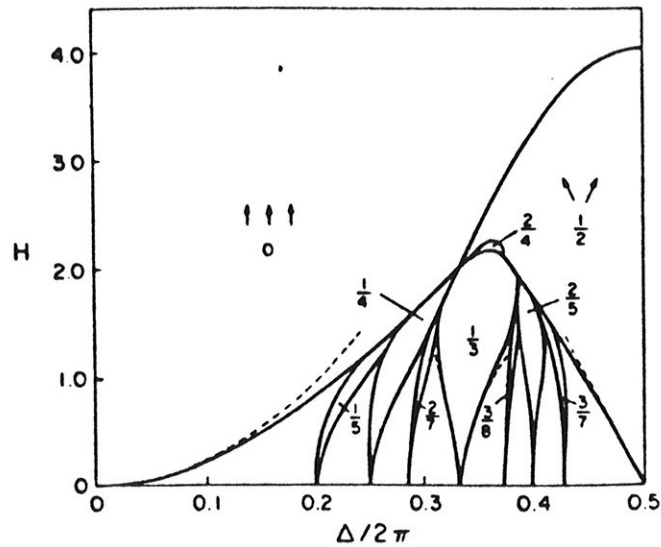


Figura 7.5: Diagrama de fases global do estado fundamental do modelo XY quiral na presença de campo, obtido através do método dos potenciais efetivos por Yokoi, Tang e Chou (1988).

contínua e discutimos a ocorrência de “escadas do diabo”. Além disto, descrevemos sucintamente o método dos potenciais efetivos e os modelos FK estendidos em que ele foi aplicado. No capítulo 9 mostramos novos resultados para um modelo FK estendido, como a ocorrência de transições de segunda ordem entre configurações simétricas e assimétricas dentro de uma mesma fase.

Capítulo 8

O modelo FK e suas extensões

8.1 Descrição do modelo FK

Como já dissemos, o modelo FK (Frenkel e Kontorova, 1938) é uma cadeia unidimensional infinita de partículas, também chamadas átomos, ligadas entre si por molas perfeitas, e sujeitas a um potencial externo senoidal, como ilustrado na figura 7.1. A energia do modelo é dada pela expressão

$$E = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{k_0}{2} (x_{n+1} - x_n - a)^2 + V(x_n) \right], \quad (8.1)$$

onde

$$V(x) = \frac{K}{(2\pi)^2} \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{b}\right) \right]. \quad (8.2)$$

Nestas expressões, k é a constante da mola, x_n é a coordenada do n -ésimo átomo, a é o comprimento natural das molas, b é o período do potencial e K é a amplitude do potencial. É conveniente adotar o sistema de unidades tal que

$$k_0 = 1 \text{ e } b = 1. \quad (8.3)$$

Ao invés das coordenadas x_n é mais interessante trabalhar com as variáveis

$$u_n = x_n - n, \quad (8.4)$$

que medem a distância entre o n -ésimo átomo e o n -ésimo mínimo do potencial externo. A expressão para a energia fica então

$$E = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2} (u_{n+1} - u_n - \gamma)^2 + V(u_n) \right], \quad (8.5)$$

onde

$$\gamma = a - 1 \quad (8.6)$$

mede a discrepância entre o comprimento de onda do potencial e o comprimento natural das molas.

O problema básico consiste em encontrar as configurações $\{u_n\}$ do sistema que minimizam a energia para dados parâmetros K e γ .

8.2 Solução na “aproximação contínua”

A solução exata para este modelo ainda não foi encontrada, mas vários métodos podem ser empregados no sentido de compreender seu comportamento, ainda que parcialmente. Discutiremos nesta seção a “aproximação contínua” do modelo.

A configuração de átomos que minimiza a energia deve satisfazer a condição

$$\frac{\partial E}{\partial u_n} = 0. \quad (8.7)$$

Substituindo-se a expressão da energia (8.5) nesta condição obtemos

$$2u_n - u_{n+1} - u_{n-1} + \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u_n) = 0. \quad (8.8)$$

Em 1949, Frank e van der Merwe estudaram essa equação sob a hipótese de que os valores de u_n variavam pouco para valores de n sucessivos. Como veremos, esta hipótese é válida quando a amplitude do potencial K é pequena. Pode-se, neste caso, tomar n como sendo uma variável contínua, e a equação de diferença (8.8) torna-se uma equação diferencial, chamada de equação de "seno-Gordon" independente do tempo:

$$\frac{d^2 u}{dn^2} = \frac{K}{2\pi} \sin(2\pi u). \quad (8.9)$$

Esta é matematicamente idêntica à equação de um pêndulo simples e pode ser integrada exatamente. A solução geral é

$$u(n) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \text{am} \left[\frac{\sqrt{K}}{k} (n - n_0) \right], \quad (8.10)$$

onde am é a amplitude da função elíptica e k e n_0 são as constantes de

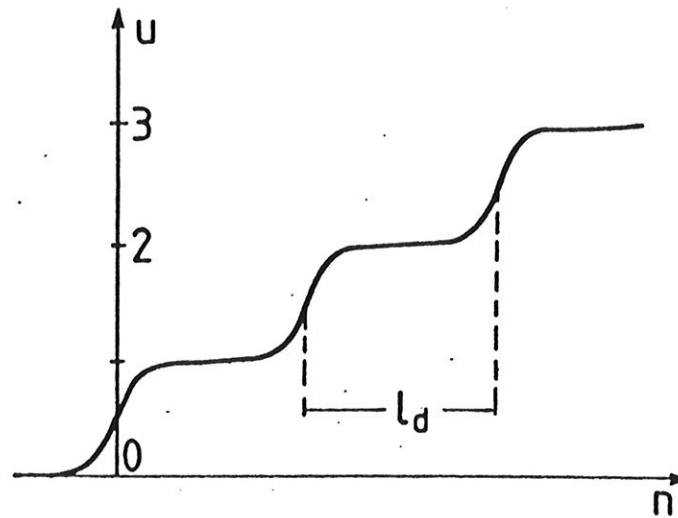


Figura 8.1: “Rede” de defeitos igualmente espaçados de l_d . (Selke, 1992).

integração ¹. A forma geral da função está mostrada na figura 8.1. Ela se caracteriza por apresentar regiões onde a função varia rapidamente separados por platôs onde a função praticamente se mantém constante. Na região dos platôs, os átomos estão praticamente nos fundos do potencial, enquanto na região de rápida variação os átomos avançam no sentido de sobrepor o máximo de potencial. Estas regiões constituem *defeitos* (também chamados de paredes, descomensurações, “kinks” ou sólitons) onde falta um átomo em relação ao número de mínimos de potencial. A separação l_d entre esses defeitos é dada pela fórmula

$$l_d = \frac{2kK(k)}{\sqrt{K}}, \quad (8.11)$$

onde $K(k)$ é a função elíptica completa de primeira espécie. Portanto o deslocamento médio dos átomos sucessivos é dado por

¹A mesma expressão, como o argumento de am com sinal oposto é também solução, que entretanto não iremos considerar por não ser relevante para $\gamma > 0$.

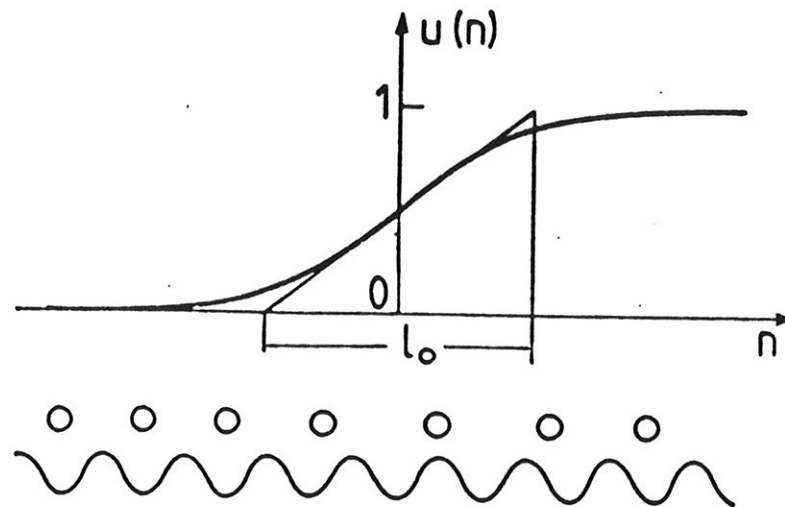


Figura 8.2: Configuração de um defeito isolado. Na parte superior da figura, está representada a variação das posições dos átomos em relação aos mínimos do potencial. Na parte inferior, estão representados os átomos em relação ao potencial de substrato. (Selke, 1992).

$$\omega = \langle u_n - u_{n-1} \rangle = \frac{1}{l_d}, \quad (8.12)$$

denominado de *número de rotação*. Uma estrutura será chamada comensurável ou incommensurável conforme ω seja um número racional ou irracional, respectivamente.

No caso $k = 1$ a expressão (8.10) reduz-se a

$$u(n) = \frac{2}{\pi} \arctan \exp[\sqrt{K}(n - n_0)], \quad (8.13)$$

e representa um único defeito na fase comensurável $u_n = 0$ em que todos os átomos estão nos fundos do potencial, como mostrado na figura 8.2. A largura desse defeito, definida a partir da inclinação da função para

$n = n_0$, como indicado na figura 8.2, é dada por

$$l_0 = \frac{\pi}{\sqrt{K}}. \quad (8.14)$$

Isso mostra a validade da aproximação contínua para potenciais baixos, pois quanto menor a amplitude do potencial, mais suavemente variará u_n .

Conforme aumentamos o parâmetro γ , para uma amplitude do potencial K fixa, a configuração de átomos que minimiza a energia passa da estrutura comensurável travada, com todos os átomos nos mínimos do potencial, para estruturas incomensuráveis, com defeitos igualmente espaçados. O gráfico do número de rotação $\omega = 1/l_d$ como função de γ tem a forma da figura 8.3. A transição entre as fases comensurável e incomensurável, ou transição CI, é contínua e ocorre para

$$\gamma_c = \frac{2}{\pi l_0}. \quad (8.15)$$

Para $\gamma = \gamma_c$ surge um único defeito, como ilustrado na figura 8.2, e para γ maiores surgem defeitos igualmente espaçados como na figura 8.1.

Uma interpretação fenomenológica do que ocorre pode ser obtida a partir da expressão aproximada para a energia do defeito, na proximidade da transição CI. O excesso de energia por defeito em relação à fase comensurável é dado por

$$U \approx (\gamma_c - \gamma) + \frac{8\sqrt{K}}{\pi^2} \exp(-\sqrt{K}l_d). \quad (8.16)$$

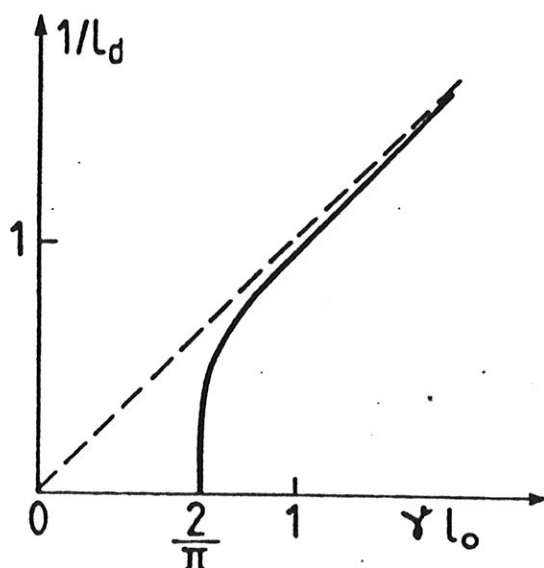


Figura 8.3: Transição comensurável-incomensurável, representada pelo gráfico ω versus γl_0 . À esquerda do ponto da transição $(2/\pi, 0)$, a fase é travada. À sua direita ela é incomensurável.

O primeiro termo pode ser interpretado como sendo a energia de criação do defeito, que se torna favorável para $\gamma > \gamma_c$. A densidade de defeitos é controlada pelo segundo termo, positivo, que representa a repulsão entre os defeitos.

8.3 Método dos potenciais efetivos

Os estudos do estado fundamental do modelo FK e suas extensões partem, muitas vezes, das equações de extremização de energia (8.8). A desvantagem desse procedimento é que essas equações admitem em geral um grande número de soluções, das quais devemos escolher apenas uma, aquela de menor energia. Portanto sempre acompanha uma certa insegurança nesse método, a de ter omitido certas estruturas importantes na análise e, portanto, não ter determinado o verdadeiro estado fundamental. O “método dos potenciais efetivos”, introduzido por

Griffiths e Chou (1986), aborda o problema da determinação do estado fundamental de uma forma totalmente distinta, e permite, ao menos em princípio, determinar com absoluta certeza o verdadeiro estado fundamental do sistema.

O método do potencial efetivo se aplica a uma classe de sistemas mais geral que o modelo FK, inclusive para os casos em que o potencial de interação entre partículas é não-convexo. A forma geral da energia potencial para uma cadeia unidimensional infinita de partículas, também chamadas átomos, interagindo entre si por um potencial W e sujeitas a um potencial externo periódico V é dada por

$$E = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [W(u_{n+1} - u_n) + V(u_n)], \quad (8.17)$$

onde u_n denota o deslocamento de n -ésimo átomo em relação ao n -ésimo mínimo do potencial. Suporemos que $V(u)$ é uma função periódica de período 1,

$$V(u + 1) = V(u). \quad (8.18)$$

No caso particular do modelo FK, W e V são dados por

$$W(\Delta u) = \frac{1}{2}(\Delta u - \gamma)^2, \quad (8.19)$$

$$V(u) = \frac{K}{(2\pi)^2} [1 - \cos 2\pi u]. \quad (8.20)$$

A equação básica do método do potencial efetivo é

$$R(u) + \lambda = V(u) + \min_{u'} [W(u - u') + R(u')], \quad (8.21)$$

chamada de “equação de autovalor aditivo” ou “equação de autovalor por minimização” (Griffiths, 1990), pela sua semelhança com a equação de autovalores da álgebra linear. Pode ser demonstrado que, para V e W satisfazendo condições apropriadas, a equação (8.21) tem solução com um único autovalor λ e uma autofunção contínua R (Griffiths, 1990). A função R deve ser periódica com o mesmo período do potencial V ,

$$R(1 + u) = R(u). \quad (8.22)$$

Pode-se mostrar que λ é a energia por partícula do estado fundamental. Para se determinar o estado fundamental considera-se o mapeamento

$$\tau(u) = u', \quad (8.23)$$

onde para cada u associa-se o valor de u' onde é atingido o mínimo na equação de autovalor aditivo (8.21). Então qualquer configuração de partículas $\{u_n\}$ com a propriedade

$$\tau(u_n) = u_{n-1} \quad (8.24)$$

é um estado fundamental. Na prática, partindo-se de um valor inicial u , a iteração do mapeamento (8.23) converge sempre para um atrator que corresponde ao estado fundamental do sistema.

Há várias formas de se justificar heurísticamente a equação de autovalor aditivo (8.21) (Griffiths, 1990). Uma das formas é obtê-la como o limite de temperatura zero do método do operador de transferência. Um outro método, mais direto, é considerar uma cadeia finita de átomos. Seja $R_N(u)$ a energia mínima de uma cadeia de N átomos, u_1, u_2, \dots, u_N , com o vínculo de que $u_N = u$; ou seja, o N -ésimo átomo é mantido numa posição fixa, mas os outros átomos são livres para se rearranjarem de modo a minimizar a energia. Então

$$R_1(u) = V(u), \quad (8.25)$$

$$R_2(u) = V(u) + \min_{u'} [W(u - u') + R_1(u')], \quad (8.26)$$

$$R_3(u) = V(u) + \min_{u'} [W(u - u') + R_2(u')], \quad (8.27)$$

e, em geral,

$$R_{N+1}(u) = V(u) + \min_{u'} [W(u - u') + R_N(u')]. \quad (8.28)$$

Se agora supomos que para N grande, $R_N(u)$ tende a uma função $R(u)$ mais uma constante proporcional a N ,

$$R_N(u) \approx R(u) + N\lambda, \quad (8.29)$$

então, no limite $N \rightarrow \infty$, a equação (8.28) torna-se idêntica à equação de autovalor aditivo (8.21). Além disso, esta dedução mostra o significado intuitivo de $R(u)$: é o potencial efetivo relacionado à força sobre o átomos

mais à direita numa cadeia semi-infinita. Mais ainda, esta dedução sugere porque a iteração do mapeamento τ , equação (8.23), fornece uma série de pontos que convergem para o estado fundamental. Se o átomo mais à direita, numa cadeia semi-infinita, está na posição u , o átomo imediatamente à sua esquerda está na posição $\tau(u)$, e o átomo à esquerda deste em $\tau(\tau(u))$, e assim sucessivamente. Assim, iterando-se um número suficiente de vezes determinamos as posições dos átomos que estão bem afastados da fronteira direita da cadeia, e portanto menos perturbados pela presença desta borda.

Analogamente, podemos definir um potencial efetivo à esquerda $L(u)$ para a semi-cadeia à direita do átomo na posição u' , que deve obedecer à equação

$$L(u') + \lambda = V(u') + \min_u [W(u - u') + L(u)]. \quad (8.30)$$

O autovalor λ é o mesmo para as equações (8.21) e (8.30), mas as funções $R(u)$ e $L(u)$ são em geral diferentes. Existe uma não-unicidade trivial das funções R e L que decorre do fato de que adicionando-se uma constante obtém-se uma outra autofunção. Por isso é conveniente “normalizá-las” de tal forma que

$$\min_u [R(u)] = \min_u [L(u)] = 0, \quad (8.31)$$

para fixar essa constante aditiva. Algumas vezes observa-se uma multiplicidade não-trivial das autofunções. Isso ocorre quando há coexistência de estados fundamentais distintos (Sasaki e Floría, 1989 e Schellnhuber, Urbschat e Willbrink, 1990).

Podemos também definir o potencial efetivo total $F(u)$ segundo

$$F(u) = R(u) + L(u) - V(u), \quad (8.32)$$

onde $V(u)$ foi subtraído para não ser contado duplamente. $F(u)$ representa o potencial efetivo sentido por um átomo no centro de uma cadeia infinita (nos dois sentidos), que ocupa a posição u , enquanto todos os outros átomos são livres para ocupar a configuração de menor energia. Portanto a função $F(u)$ apresenta a propriedade de que ela toma valores mínimos nos pontos correspondendo ao estado fundamental.

Discutiremos agora um dos procedimentos numéricos (Griffiths e Chou, 1986; Chou e Griffiths, 1986) para resolver a equação de autovalor aditivo (8.21), e que foi o método por nós utilizado nesta tese. Inicialmente discretiza-se o intervalo $[0,1)$ em N pontos uniformemente espaçados. O valor de N é tipicamente da ordem de $10^2 \sim 10^4$. O potencial efetivo $R(u)$ é calculado iterativamente segundo a fórmula

$$R^{(n)} = \frac{1}{2} [R^{(n-1)} + \mathcal{K}R^{(n-1)}] - \lambda_n, \quad (8.33)$$

onde \mathcal{K} denota o operador

$$\mathcal{K}R(u) = V(u) + \min_{u'} [W(u - u') + R(u')], \quad (8.34)$$

e λ_n é uma constante determinada de tal forma que a função $R^{(n)}$ satisfaça a condição (8.31). A função inicial $R^{(0)}$ pode ser qualquer. Tipicamente escolhemos $R^{(0)} = V$. Continua-se a iteração na forma acima descrita, até que

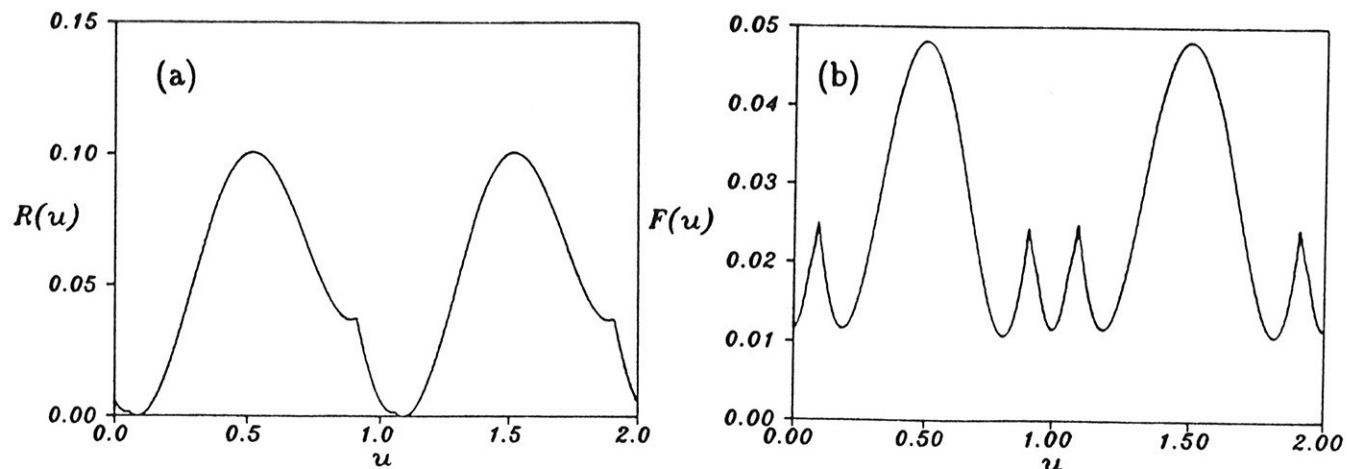


Figura 8.4: Potenciais efetivos calculados para o modelo FK com $\gamma = 0,36$ e $K = 3$. (a) $R(u)$. (b) $F(u)$.

$$\max_u |R^{(n)}(u) - R^{(n-1)}(u)| < \delta, \quad (8.35)$$

onde δ é a tolerância admitida no cálculo, que tipicamente é da ordem de $10^{-4} \sim 10^{-8}$. $R^{(n)}$ e λ_n são então considerados como sendo aproximações adequadas para a autofunção e autovalor, respectivamente. O estado fundamental é obtido pela iteração do mapeamento τ .

Os potenciais efetivos R e F para o modelo de Frenkel-Kontorova, calculados através do método exposto, estão representados na figura 8.4. A figura 8.5 mostra a função τ do mapeamento (8.23).

A figura 8.6 mostra o diagrama de fases global do modelo FK obtido por Griffiths e Chou (1986), pela aplicação do método dos potenciais efetivos. Apenas poucas fases comensuráveis estão representadas. A figura 8.7 mostra as configurações dos átomos nas fases comensuráveis com números de rotação $1/3$ e $2/5$.

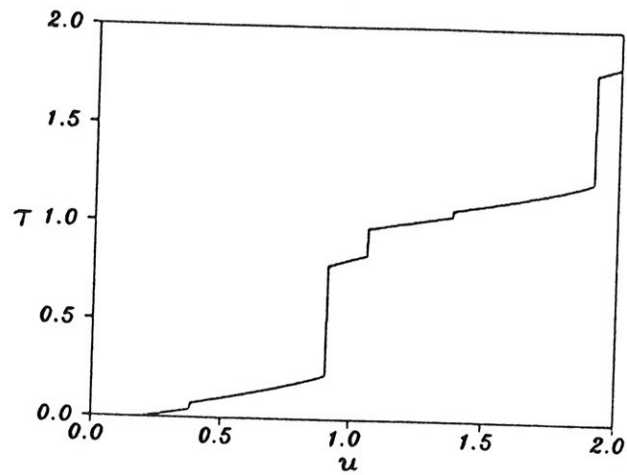


Figura 8.5: Mapeamento $\tau(u)$, obtido para o modelo FK com $\gamma = 0,36$ e $K = 3$.

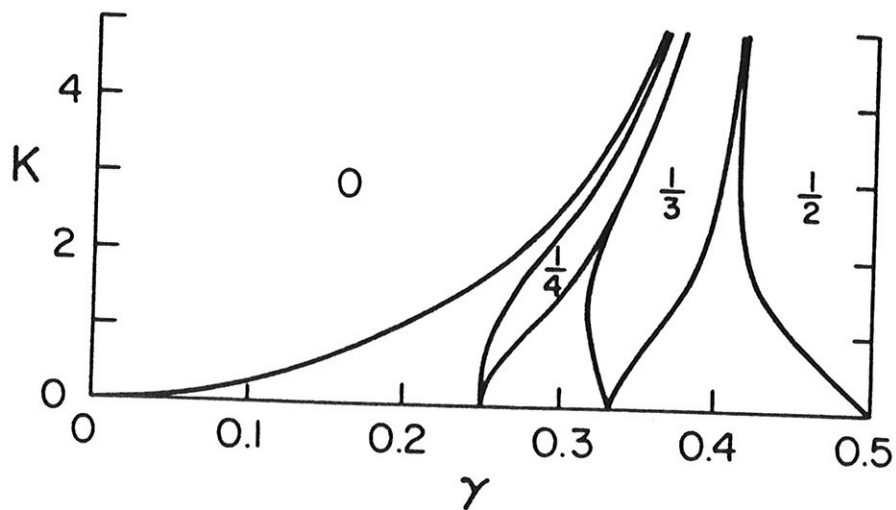


Figura 8.6: Diagrama de fases do modelo FK, obtido por Griffiths e Chou (1986), usando o método dos potenciais efetivos.

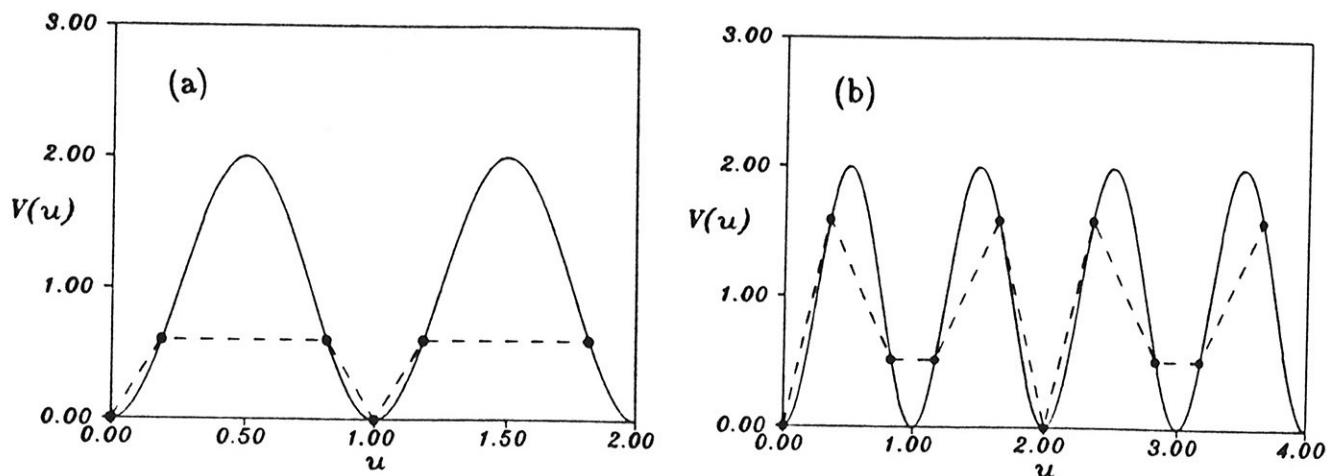


Figura 8.7: Configurações típicas dos átomos do modelo FK, nas fases: (a) $\omega = 1/3$ e (b) $\omega = 2/5$.

8.4 “Escadas do diabo” no modelo FK

O número de rotação ω depende de γ e K . Se fixarmos K , podemos estudar como ω varia com γ . Na aproximação contínua vimos que a variação é suave, como mostra a figura 8.3. Observamos que nessa aproximação as fases comensuráveis não são travadas, situação que corresponde ao caso da figura 1.5a na classificação vista na introdução geral. Entretanto a aproximação contínua, ao substituir a equação de diferenças (8.8) pela equação diferencial (8.9), simplesmente despreza a natureza discreta das posições atômicas. Segundo Aubry (1978), entretanto, cada fase comensurável deve-se travar devido ao potencial subjacente e se apresentar no gráfico de ω versus γ como um platô, formando assim uma “escada do diabo”. As figuras 8.8 e 8.9 mostram o as “escadas do diabo” para amplitudes de potencial iguais a $K = 0,5$ e $K = 1,5$, respectivamente, juntamente com as curvas da aproximação contínua.

Comparando os gráficos das figuras 8.8 e 8.9, vemos que os platôs são muito menores para valores de K menores que para K maiores. Se-

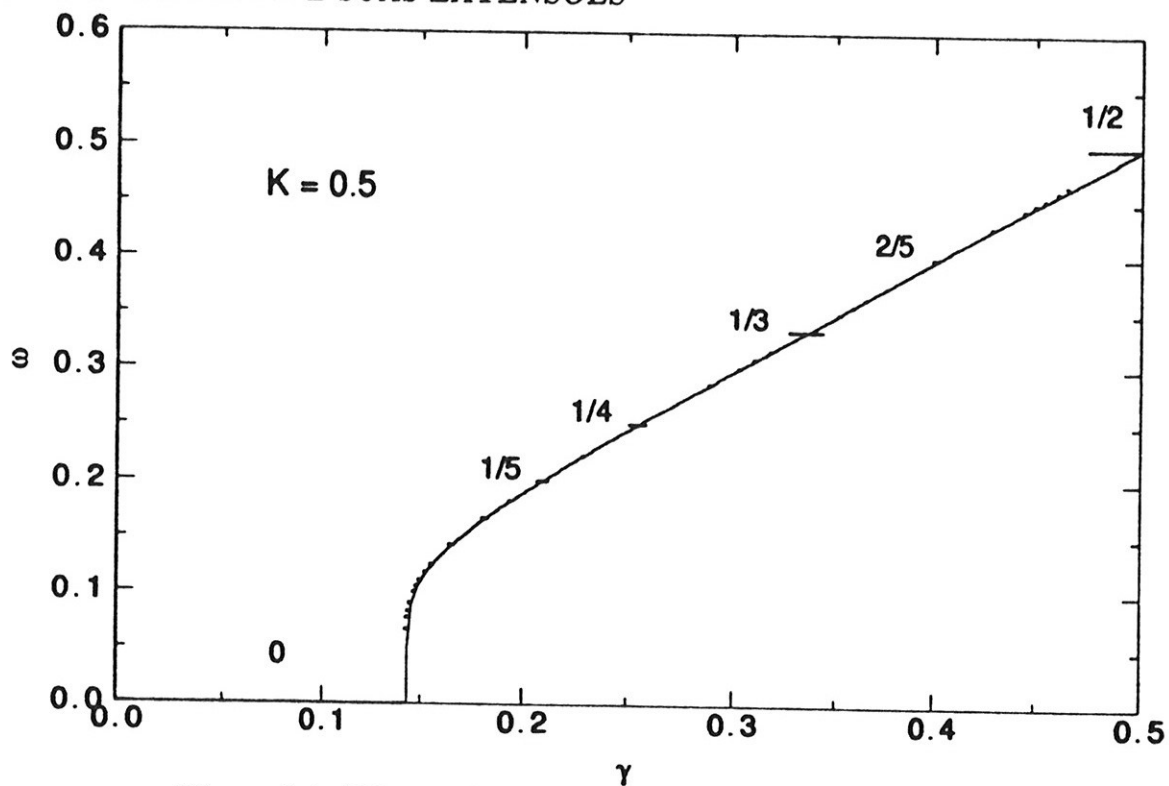


Figura 8.8: Número de rotação em função de γ , para $K = 0,5$.

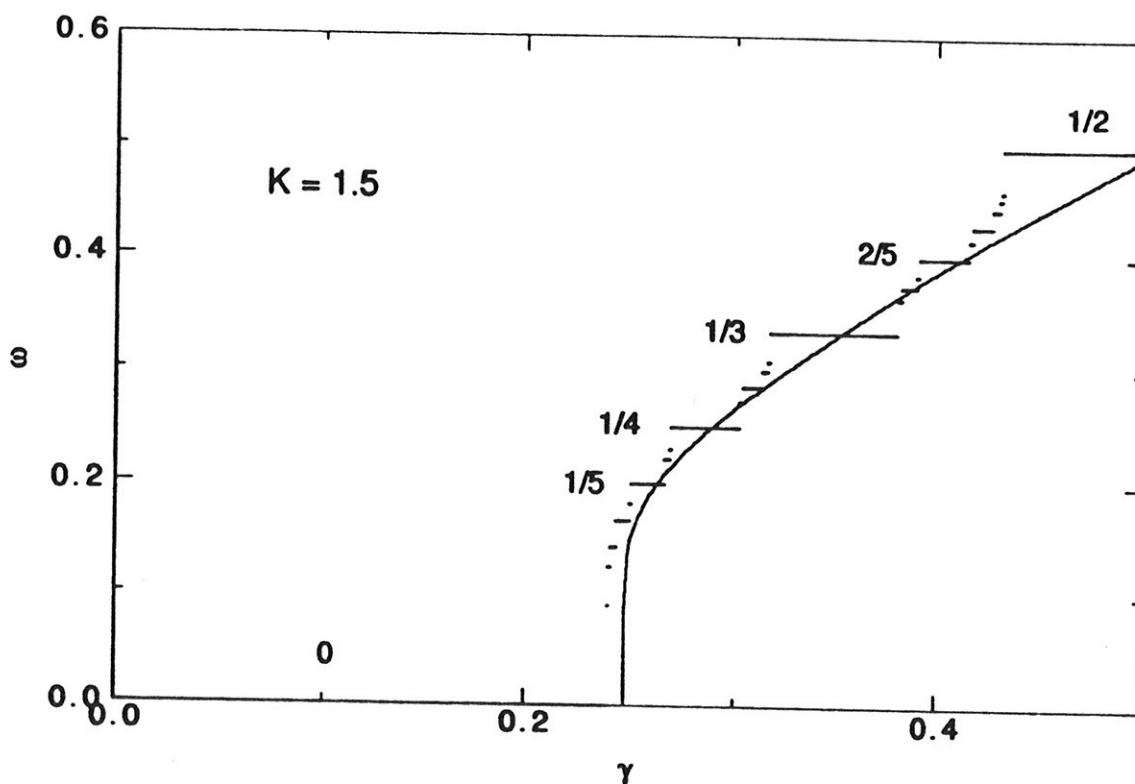


Figura 8.9: Número de rotação em função de γ , para $K = 1,5$.

gundo Aubry (1978), a medida das fases incomensuráveis no eixo γ deve passar de não-zero para zero, ou seja, a “escada do diabo” deve passar de incompleta para completa com o aumento de K . Estes casos correspondem, respectivamente, às figuras 1.5b e c da introdução geral.

Esses resultados de Aubry (1978) baseiam-se na relação entre o modelo FK e a teoria dos sistemas dinâmicos. Introduzindo-se o “momento” p_n com “tempo” discreto n segundo $p_n = u_n - u_{n-1}$, a relação de recorrência (8.8) pode ser escrita sob a forma de um mapeamento bidimensional

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n + \frac{K}{2\pi} \operatorname{sen} 2\pi u_n, \\ u_{n+1} &= u_n + p_{n+1}, \end{aligned} \tag{8.36}$$

que é chamada de mapeamento padrão na teoria dos sistemas dinâmicos (Lichtenberg e Lieberman, 1983). As trajetórias (u_n, p_n) no espaço de fases desse mapeamento foi estudado extensivamente no contexto de sistemas dinâmicos. Em particular, para valores de K pequenos a existência de órbitas unidimensionais é garantida pelo teorema de Kolmogorov-Arnold-Moser ou KAM, mas para potenciais suficientemente fortes as trajetórias no espaço de fases passam a ocupar um conjunto de Cantor, o chamado “cantorus” (Greene, 1979). Esses dois tipos de trajetórias correspondem, segundo Aubry (1978), a fases incomensuráveis deslizante e travada, respectivamente. Em ambos os casos as posições dos átomos podem ser escritas sob a forma

$$u_n = f(n\omega + \alpha) = n + \alpha + g(n\omega + \alpha), \tag{8.37}$$

onde g é uma função periódica com o período do potencial e α é um fator de fase arbitrário. Para potenciais fracos a função f e a função periódica g são analíticas, enquanto para potenciais suficientemente fortes elas se tornam descontínuas, como mostrado na figura 8.10. No primeiro caso a fase incomensurável é dita deslizante, e no segundo travada. No caso de uma fase incomensurável deslizante, para valores pequenos de K , o conjunto $\{u_n \bmod 1\}$ das posições dos átomos preenche totalmente o intervalo $[0,1)$. Assim, ao puxarmos a cadeia unidimensional para qualquer lado, nenhuma energia é gasta. No entanto, quando K se torna maior que um certo valor $K_c(\omega)$, que depende do número de rotação ω da fase incomensurável, as partículas não mais poderão se localizar perto dos máximos do potencial externo, pois isto passaria a custar muita energia. Nestas condições, $\{u_n \bmod 1\}$ passa a ser um conjunto de Cantor (Mandelbrot, 1983). Li e Bak (1986) mostraram que a dimensão fractal deste conjunto é zero. Esta fase é dita travada. A figura 1.6 procura ilustrar a diferença entre as fases deslizante e travada. A transição entre estes dois tipos de ordenamento foi chamada por Aubry (1978) de transição por “quebra de analiticidade”, pois a função f que descreve a estrutura incomensurável passa de analítica a não-analítica nessa transição.

8.5 Extensões do modelo de Frenkel-Kontorova

A expressão para a energia do modelo FK, equação (8.5), pode ser generalizada para um potencial interatômico W e externo V arbitrários sob a forma

$$E = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [W(u_{n+1} - u_n) + V(u_n)]. \quad (8.38)$$

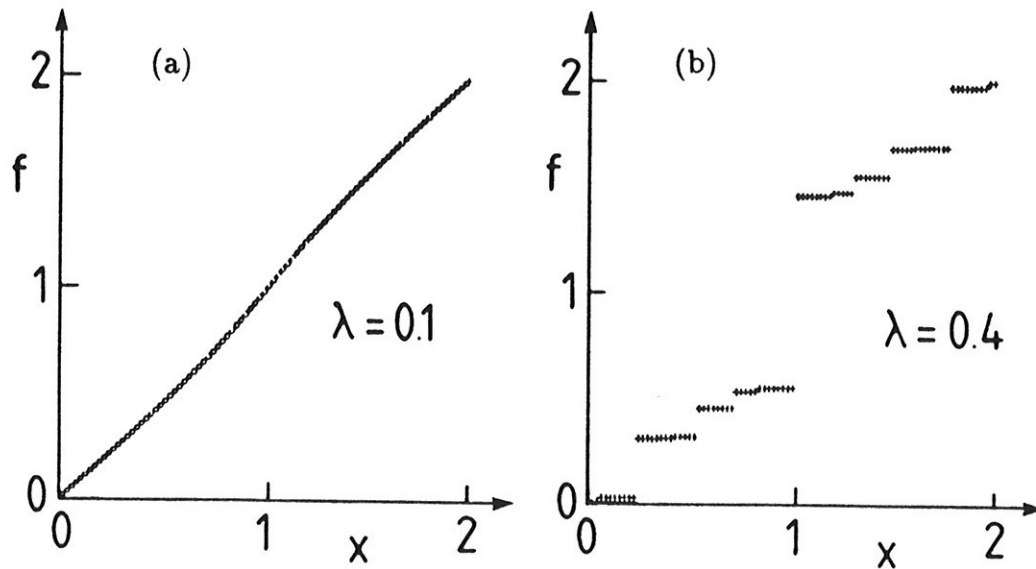


Figura 8.10: Fases incomensuráveis no modelo FK, representadas a partir da função f para valores típicos da amplitude do potencial. (a) deslizante. (b) travada. λ representa $K/(2\pi)^2$.

No caso do modelo FK,

$$W(u - u') = \frac{1}{2}(u - u' - \gamma)^2, \quad (8.39)$$

$$V(u) = \frac{K}{(2\pi)^2} (1 - \cos 2\pi u). \quad (8.40)$$

Podemos, portanto, modificar o modelo FK alterando-se a interação interatômica W ou o potencial externo V , ou ambos simultaneamente.

Uma possibilidade consiste em estudar o efeito da modificação do potencial interatômico W . Em particular, é interessante estudar o efeito de potenciais W não-convexos, não cobertos pelos teoremas de Aubry (1978, 1983a, b e c), e que são mais realistas por permitirem a relaxação da mola após uma certa distância. Nesta linha está o trabalho de Marchand, Hood e Caillé (1987, 1988), que estudaram um modelo

com potencial de interação que apresenta dois mínimos. O diagrama de fases por eles obtido está reproduzido na figura 7.4. Nesta linha está também o trabalho de Yokoi, Tang e Chou (1988), que estudaram o modelo XY quiral na presença de campo. Neste caso o potencial W é dado por uma função cosseno. O diagrama de fases obtido por eles está mostrado na figura 7.5. Em ambos os modelos o potencial de interação W é não-convexo, e o efeito disso se manifesta no diagrama de fases, por exemplo, através de transições de fases de primeira ordem como função do parâmetro γ ou Δ , o que seria proibido pelo teorema de Aubry se o potencial de interação fosse convexo.

Uma outra vertente procura estudar o efeito da modificação do potencial externo V sobre o diagrama de fases. Esse estudo foi iniciado por Chou e Griffiths (1986), que acrescentaram ao potencial externo um termo de segundo harmônico:

$$V(u) = \frac{K}{(2\pi)^2} \{1 - \cos(2\pi u) + \epsilon[1 - \cos(4\pi u)]\}. \quad (8.41)$$

Chamaremos o modelo FK com este novo termo no potencial de modelo de Frenkel-Kontorova duplo, ou FKD². A forma do potencial $V(x)$ depende criticamente do parâmetro ϵ , que mede a intensidade relativa entre o primeiro e o segundo harmônico. Para valores de ϵ positivos, o potencial tem a forma da figura 8.11.

Griffiths e Chou (1986) estudaram o caso $\epsilon = 0, 1$ e obtiveram o diagrama de fases da figura 8.12. Observamos que o diagrama de fases muda qualitativamente em relação ao diagrama de fases do modelo FK mesmo pela presença de um segundo harmônico com apenas um décimo

²Esse nome foi sugerido pelo fato de que, na aproximação contínua, o modelo é descrito por uma "double sine-Gordon equation" (Campbell, Peyrard e Sodano, 1986).

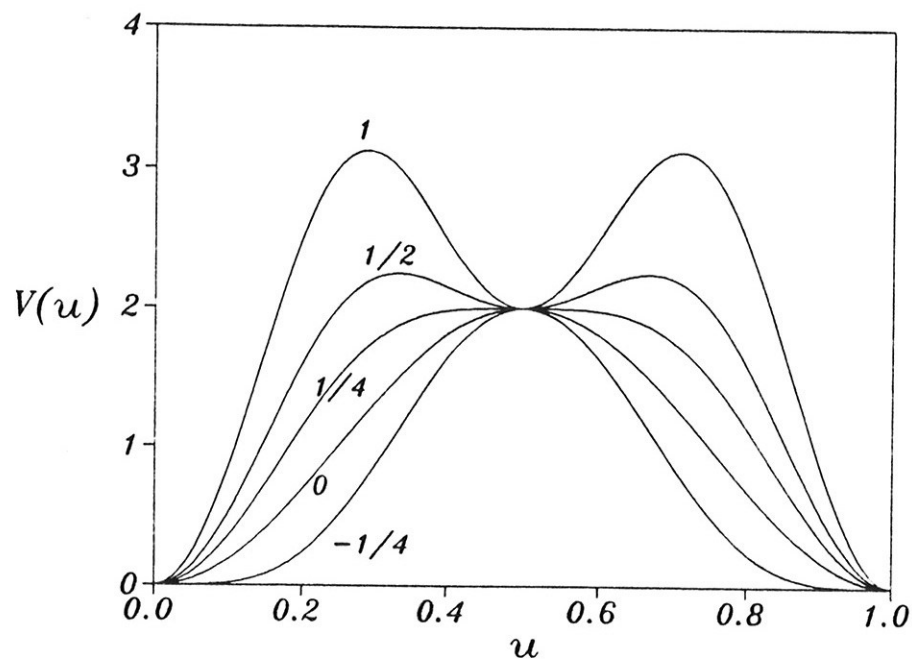


Figura 8.11: Potencial externo do modelo FKD para ϵ igual a $-1/4$, 0 , $1/4$, $1/2$ e 1 .

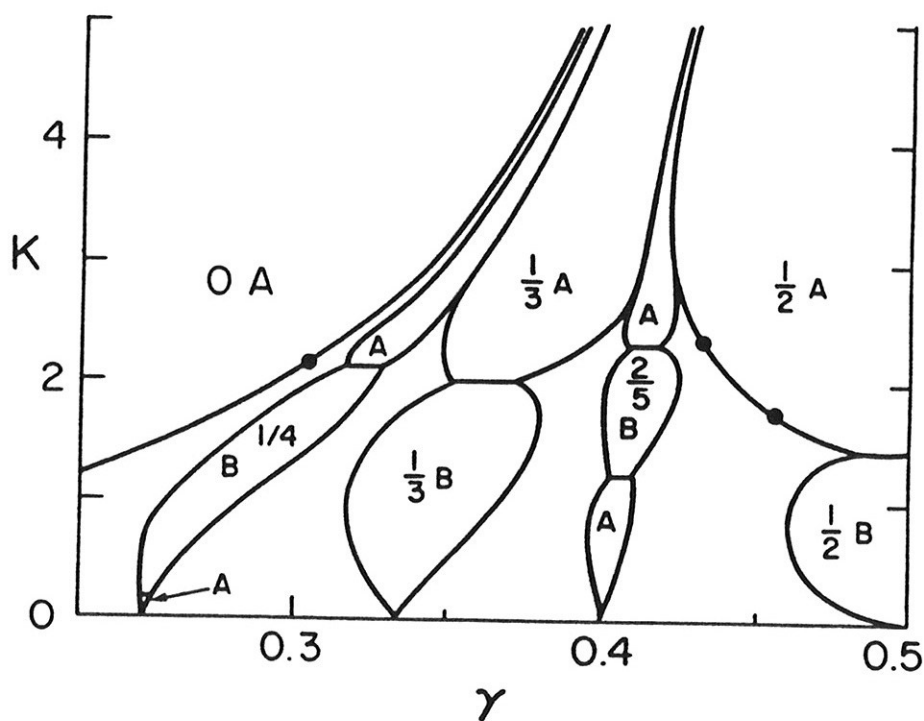


Figura 8.12: Diagrama de fases do modelo FKD para $\epsilon = 0, 1$, determinado por Griffiths e Chou (1986).

da amplitude do harmônico principal. Neste caso, as fases moduladas podem se apresentar em dois tipos de configurações : com átomos no topo do potencial (tipo B) ou sem nenhum átomo no topo (tipo A), como ilustradas na figura 8.16. A transição entre estes dois tipos de configurações é de primeira ordem, e está representada na figura 8.12 sob a forma de platôs no interior das fases comensuráveis. Observamos que isso não viola o teorema de Aubry, pois a transição de primeira ordem se dá como função da amplitude K e não como função de γ . No caso do modelo FK ocorrem somente as configurações do tipo A. As linhas de primeira ordem tendem a um ponto de *acumulação* na fronteira das fases comensuráveis, que estão representados por círculos cheios na figura 8.12. Por exemplo, o primeiro ponto de acumulação na fase 0A se localiza próximo ao ponto $\gamma = 0,31$ e $K = 2,2$. Estes pontos de acumulação revelam aspectos novos da transição comensurável-incomensurável. Esta transição se dá como vimos na seção 8.2, quando a energia para criação de defeitos torna-se zero. Esses defeitos estão travados pelo potencial subjacente. Sobre os pontos de acumulação ocorre uma mudança na simetria dos defeitos que governam a transição comensurável-incomensurável. Na figura 8.13 estão representados defeitos relativos à fase 0A com simetrias diferentes.

Prosseguindo no caminho de Griffiths e Chou, Sasaki e Floría (1989) estudaram o modelo em que o potencial contém três harmônicos:

$$V(x) = \frac{K}{(2\pi)^2} \sum_{k=1}^3 \epsilon_k [1 - \cos(2\pi kx)]. \quad (8.42)$$

A forma desse potencial para $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 1/4$ e $\epsilon_3 = 1/6$ está mostrada na figura 8.14. O diagrama de fases correspondente por eles obtido, pelo

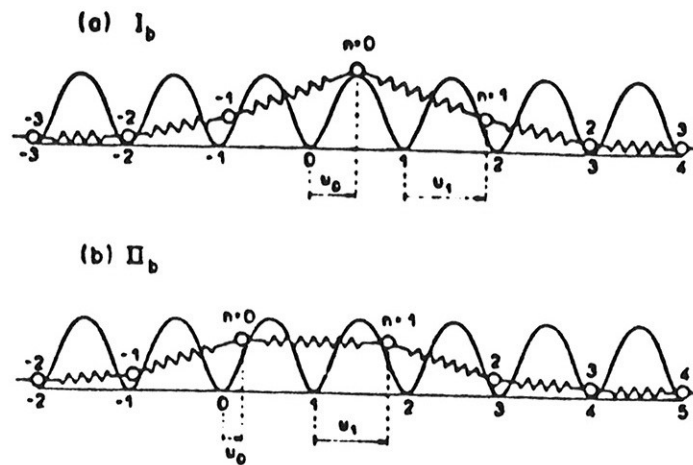


Figura 8.13: Defeitos da fase 0A com simetrias diferentes, no modelo DFK. (a) I_b possui um átomo no topo do potencial e (b) II_b não o possui. (Yokoi, 1988).

método do potencial efetivo, está mostrado na figura 8.15.

O fato novo por eles descoberto foi a existência de estados fundamentais sem simetria de reflexão especular (tipo C), como ilustrado na figura 8.16. Isso apesar do potencial $V(u)$ ser simétrico. A forma do potencial é determinante neste comportamento, como evidenciado pela depressão de $V(u)$ na figura 8.14, que é um estágio intermediário entre a posição do topo e do vale. O diagrama de fases 8.15 mostra a ocorrência de transições de primeira e segunda ordem entre as fases dos tipos A, B e C. A forma que Sasaki e Floría propuseram para determinar a ordem da transição foi através da definição de um parâmetro de ordem que distingue as configurações A, B e C, definido por

$$x = \frac{1}{Q} \sum_{i=-\frac{Q-1}{2}}^{\frac{Q-1}{2}} u_{n+i} - \omega n, \quad (8.43)$$

para Q ímpar, e

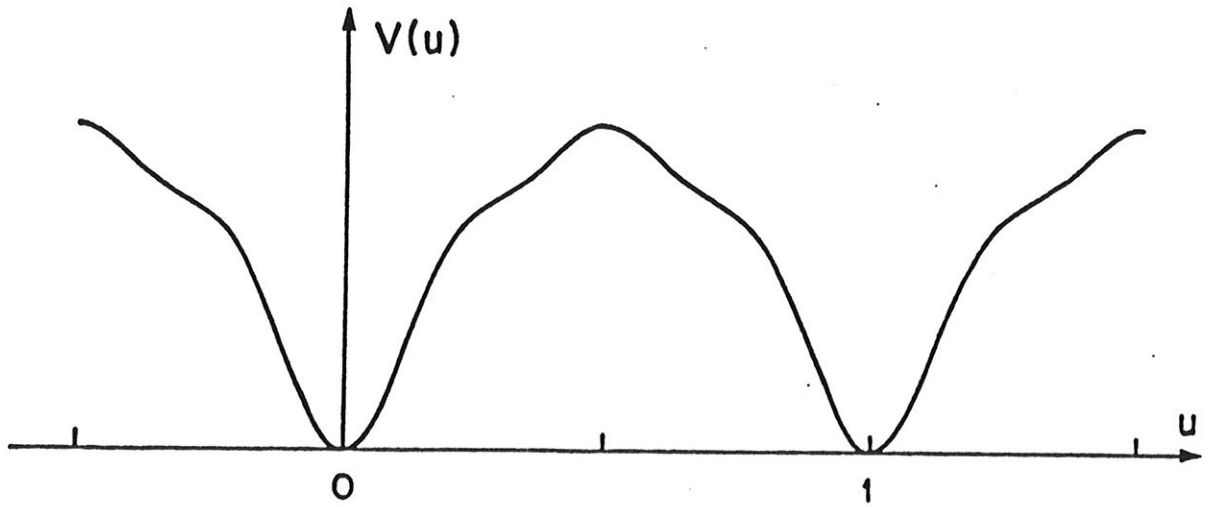


Figura 8.14: Potencial externo para o modelo FK estendido estudado por Sasaki e Floría (1989).

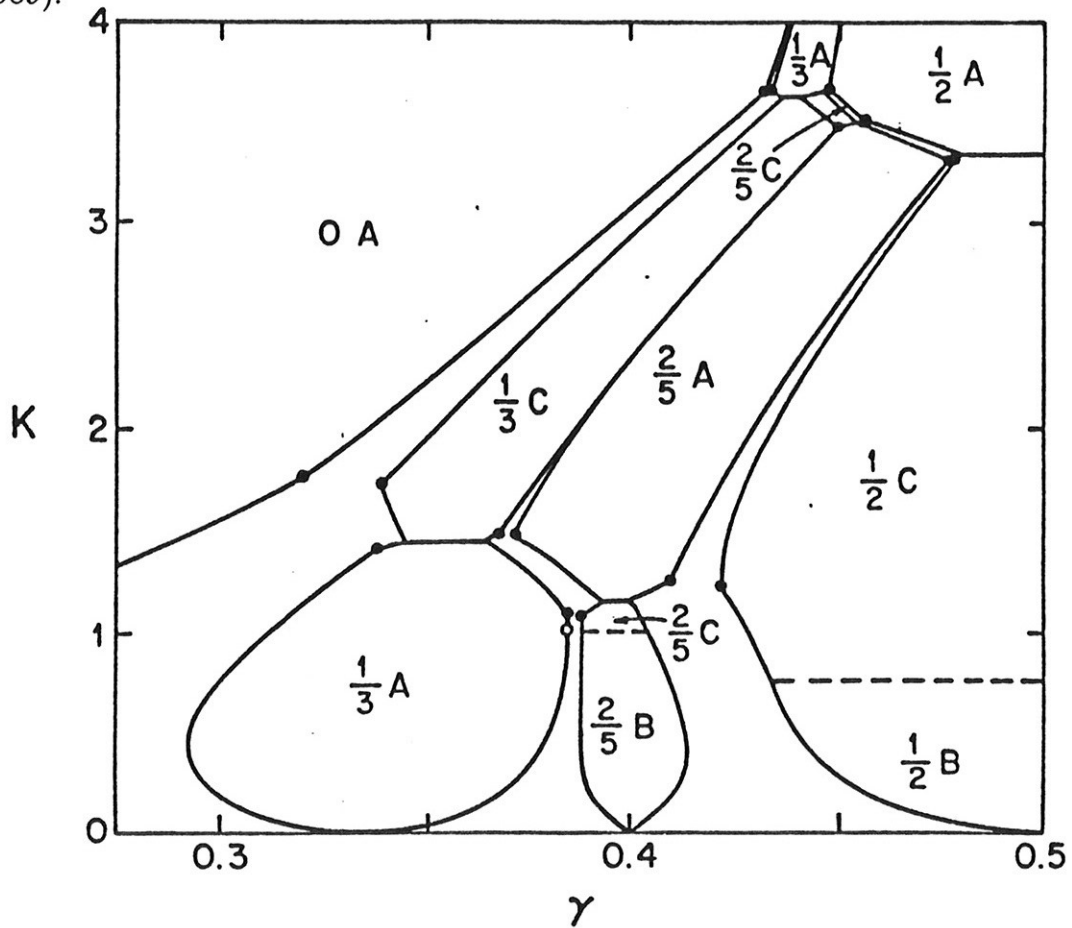


Figura 8.15: Diagrama de fases do modelo de Sasaki e Floría (1989).

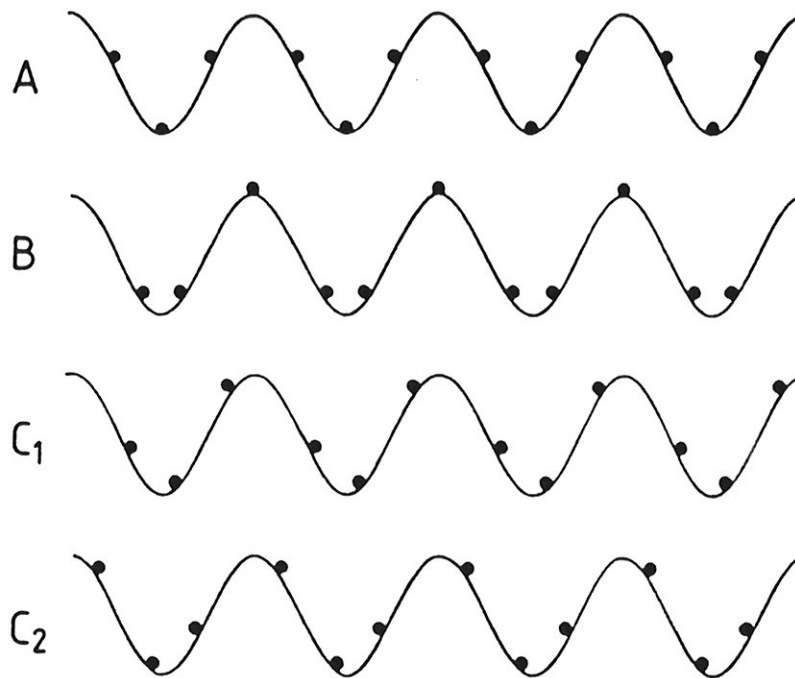


Figura 8.16: Fases dos tipos A, B e C, com $\omega = 1/3$. (Sasaki e Floría, 1989).

$$x = \frac{1}{Q} \sum_{i=-\frac{Q}{2}+1}^{\frac{Q}{2}} u_{n+i} - \omega n, \quad (8.44)$$

para Q par, onde Q é o período da fase comensurável e ω é o número de rotação. Assim, $x = 0 \pmod{1/Q}$ na fase tipo A e $x = 1/2Q \pmod{1/Q}$ na fase tipo B, e tem valor diferente destes na fase C. A ordem das transições A-C e B-C varia dependendo dos parâmetros ϵ_2 e ϵ_3 conforme indicado na figura 8.17.

Eles encontram, nesse mesmo trabalho, uma série de pontos de acumulação (ver figura 8.15), mas agora de dois tipos. Um tem as mesmas características do modelo FKD já mencionadas, revelando uma mudança brusca na simetria do defeito que governa a transição comensurável-incomensurável. Este é representado por círculos cheios. O outro, representado por um círculo oco, também é um ponto de mudança, mas

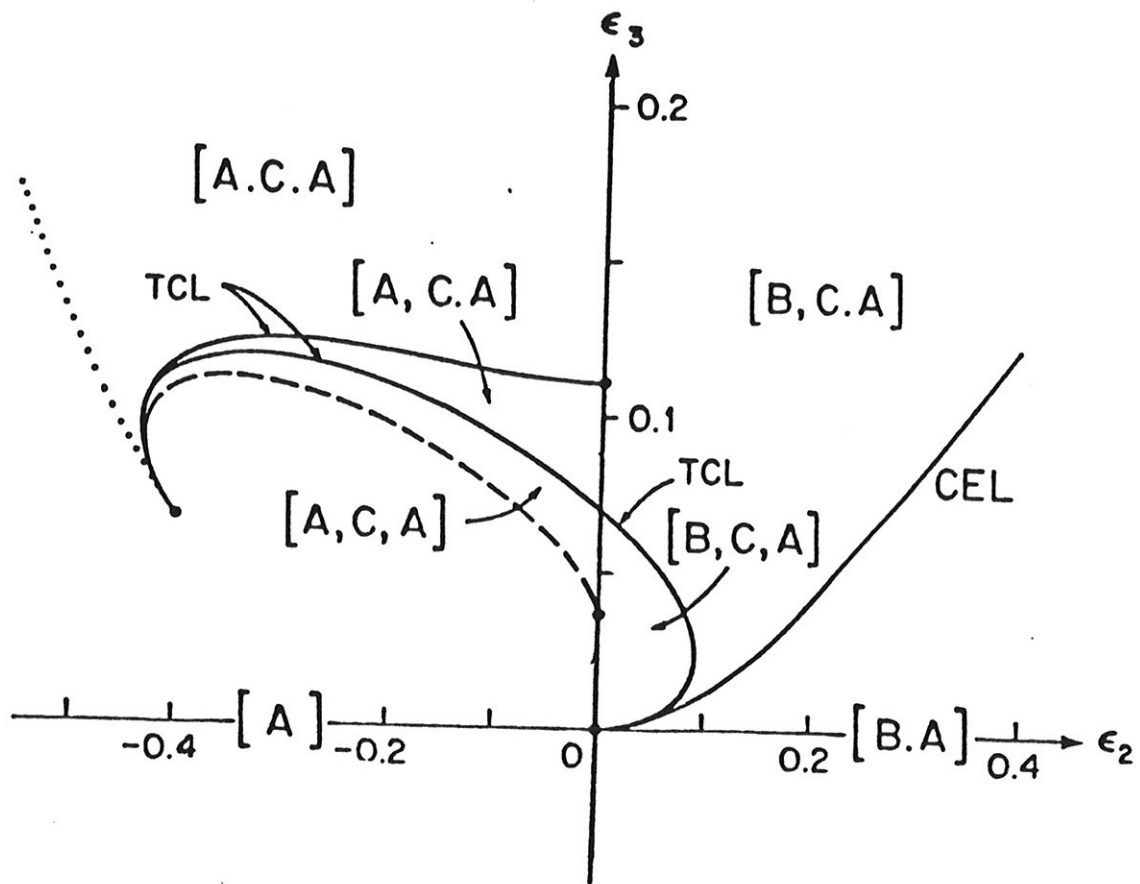


Figura 8.17: Ordem das transições na fase 1/2 para vários valores de ϵ_2 e ϵ_3 . TCL são linhas de pontos tricríticos. O símbolo $[A, C, B]$ representa uma transição de segunda ordem entre uma fase A e C, e outra de primeira ordem entre fases C e B, à medida em que K aumenta.

neste caso ela é contínua.

Capítulo 9

Novos resultados para o modelo FKD

9.1 Diagrama de fases do modelo FKD

Griffiths e Chou (1986) e Chou e Griffiths (1986) estudaram o modelo FKD apenas para valores positivos do parâmetro ϵ . Nesses casos os diagramas de fases têm sempre a forma geral da figura 8.12. Neste capítulo apresentaremos resultados obtidos quando se considera valores negativos de ϵ . Esse caso é de particular interesse pois, para $\epsilon < -1/4$, descreve um sistema que apresenta dois mínimos do potencial num período, como fica claro pelo gráfico da função potencial mostrado na figura 9.1.

Para valores de ϵ no intervalo $(0, -1/4]$ o diagrama de fases do modelo FKD não muda qualitativamente em relação ao caso $\epsilon = 0$, mostrado na figura 8.6. A figura 9.2 mostra o diagrama de fases do modelo FKD para $\epsilon = -0,1$ obtido pelo método dos potenciais efetivos. Observa-se simplesmente um maior alargamento das fases comensuráveis em relação ao caso $\epsilon = 0$.

A situação muda de forma qualitativa para $\epsilon < -1/4$ devido ao fato do mínimo global de $V(u)$ em $u = 0 \pmod{1}$ se transformar em

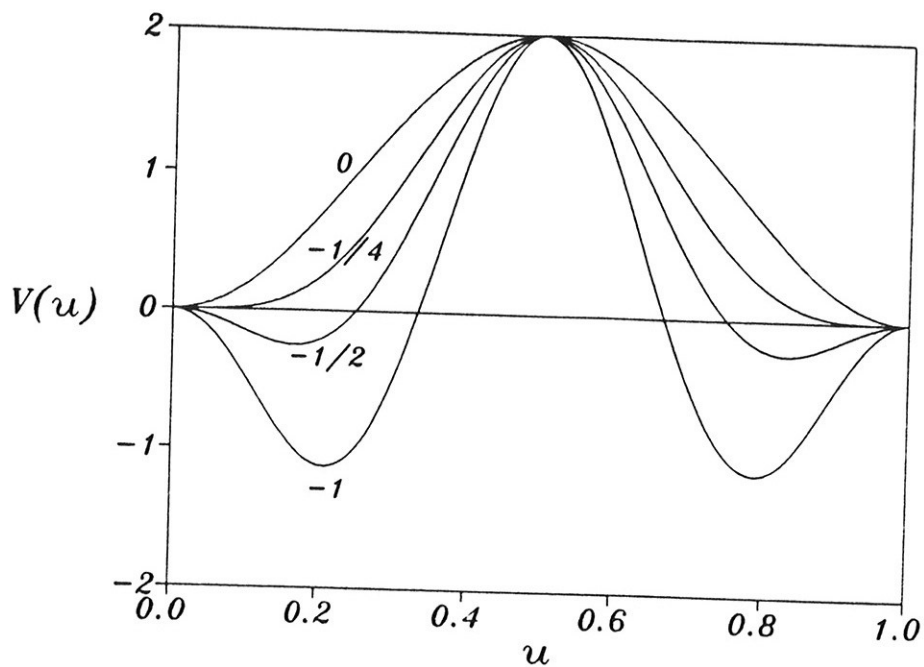


Figura 9.1: $V(u)$ do modelo FKD para ϵ igual a 0, $-1/4$, $-1/2$ e -1 .

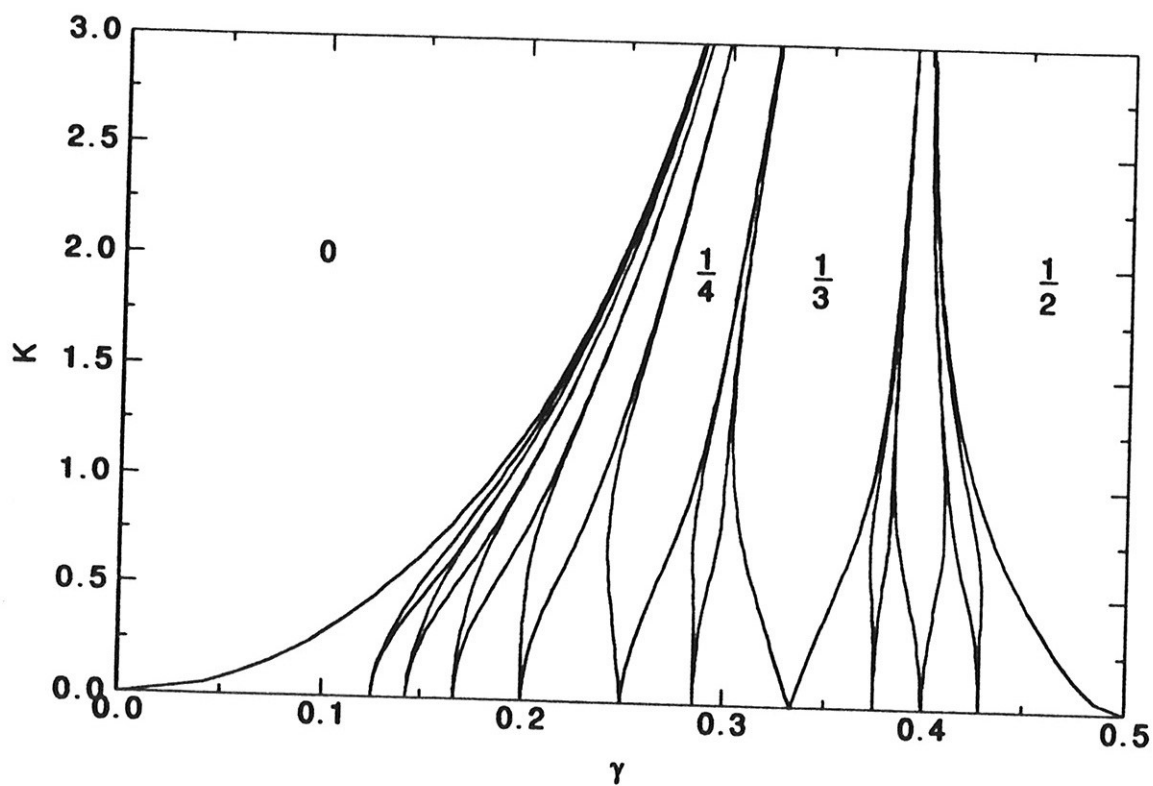


Figura 9.2: Diagrama de fases do modelo FKD para $\epsilon = -0, 1$.

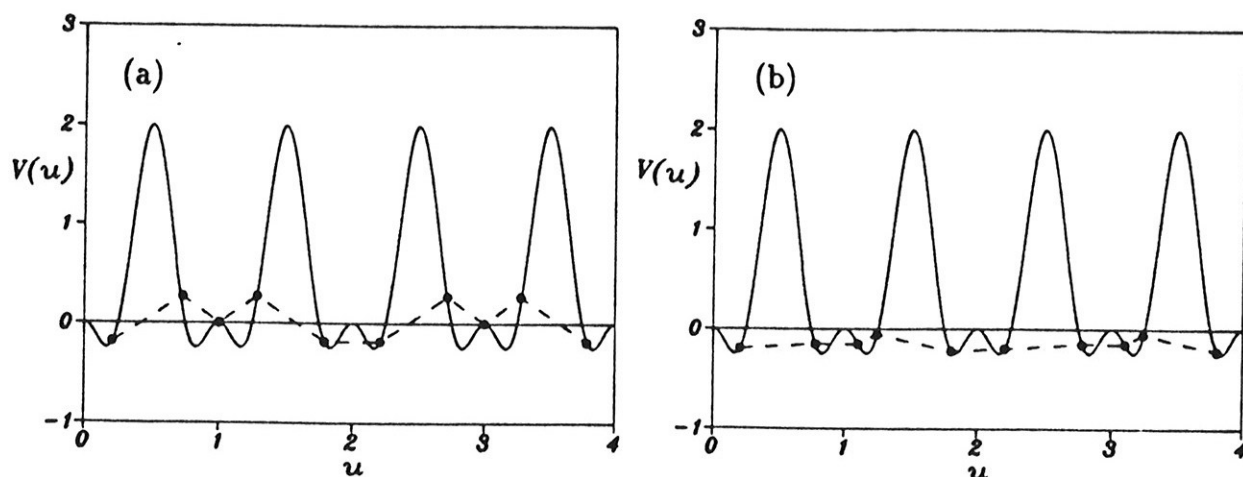


Figura 9.3: Configurações da fase $2/5$ no modelo FKD, para $\epsilon = -0,5$. (a) simétrica, para $\gamma = 0,363$, $K = 1$ e (b) assimétrica para $\gamma = 0,325$, $K = 3$.

um máximo local, com o conseqüente surgimento de dois mínimos globais por período, como se pode observar na figura 9.1. Observamos que, para $\epsilon < -1/4$, podem surgir transições de fases nos interiores das fases comensuráveis, entre configurações simétricas (tipo A) e assimétricas (tipo C) dos átomos, conforme a classificação da figura 8.16. A figura 9.3 mostra as configurações simétrica e assimétrica da fase $\omega = 2/5$ observadas para $\epsilon = -0,5$.

Descobrimos as fases assimétricas neste modelo através do estudo do mapa τ . Verificamos a existência de dois atratores assimétricos, sendo que um era a reflexão especular do outro. A função $F(u)$ obtida segundo o algoritmo da seção 8.3, mostrava a existência de 6 mínimos para a fase $1/3$, localizados nos pontos pertencentes às configurações assimétricas. Isto se explica da seguinte forma: o algoritmo utilizado calcula a minimização dum potencial efetivo. Na realidade, como existem duas fases assimétricas, a cada uma delas pode ser associado um potencial efetivo $R_i(u)$, ($i = 1, 2$). O que estava sendo calculado, efetivamente, era

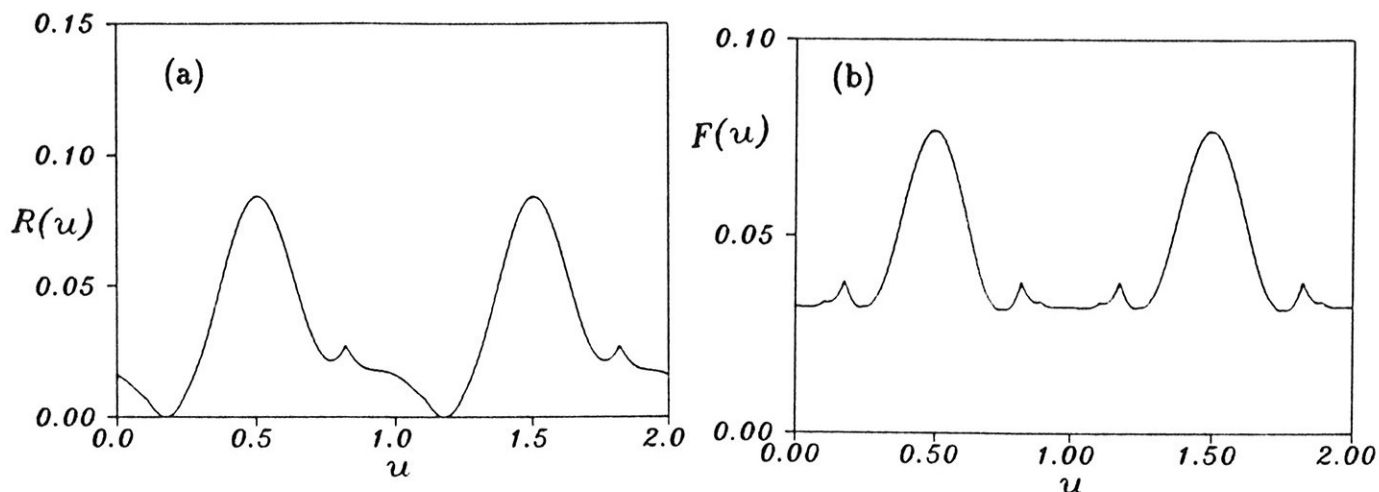


Figura 9.4: Potenciais efetivos no modelo FKD, com $\epsilon = -0.5$ e $\gamma = 0,3$ e $K = 1,8$. (a) $R(u)$. (b) $F(u)$.

um potencial $R(u)$ tal que

$$R(u) = \min_i \{R_i(u)\}. \quad (9.1)$$

Portanto, a função $F(u)$ era também dada por

$$F(u) = \min_i \{F_i(u)\}, \quad (9.2)$$

sendo $F_i(u)$, ($i = 1, 2$) os potenciais efetivos associados às configurações assimétricas. Os potenciais efetivos R e F e o mapa τ estão nas figuras 9.4 e 9.5.

As fases assimétricas são observadas apenas para fases comensuráveis $\omega = P/Q$ de período Q ímpar. Intuitivamente isto pode ser compreendido da seguinte forma: para períodos ímpares e potencial fraco

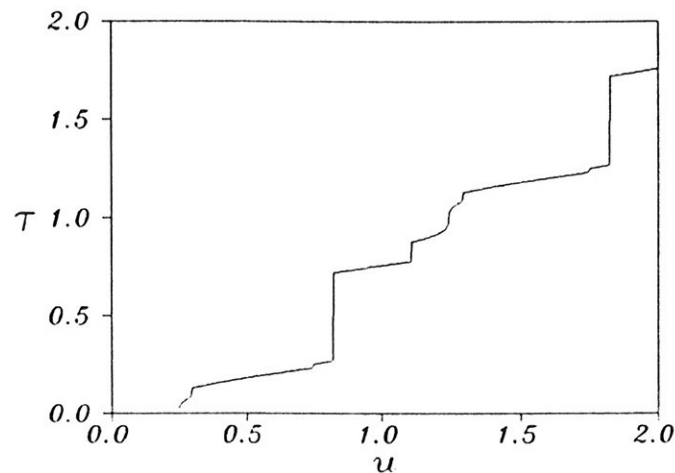


Figura 9.5: $\tau(u)$ para o modelo FKD, com $\epsilon = -0.5$ e $\gamma = 0,3$ e $K = 1,8$.

há sempre um átomo por período que se localiza no topo dos máximos locais do potencial. Conforme aumentamos o potencial os átomos que estão no topo dos máximos locais tendem a se deslocar para um dos lados. Visto que existe apenas um átomo deste tipo por período, a configuração resultante é necessariamente assimétrica. Como os átomos podem se deslocar para a direita ou para a esquerda, a fase assimétrica apresenta uma dupla degenerescência, que podemos designar por C_1 e C_2 conforme a classificação da figura 8.16. De acordo com esse argumento as fases assimétricas podem ocorrer apenas para potenciais relativamente intensos.

A figura 9.6 mostra o diagrama de fases do modelo para $\epsilon = -0,5$ obtido pelo método dos potenciais efetivos, usando uma discretização de 512 pontos. Neste diagrama estão também indicadas as fronteiras entre as fases simétrica (tipo A) e assimétrica (tipo C) para algumas das fases comensuráveis, através de barras horizontais tracejadas. Os círculos ocios têm o mesmo significado *daquele* no diagrama de Sasaki e

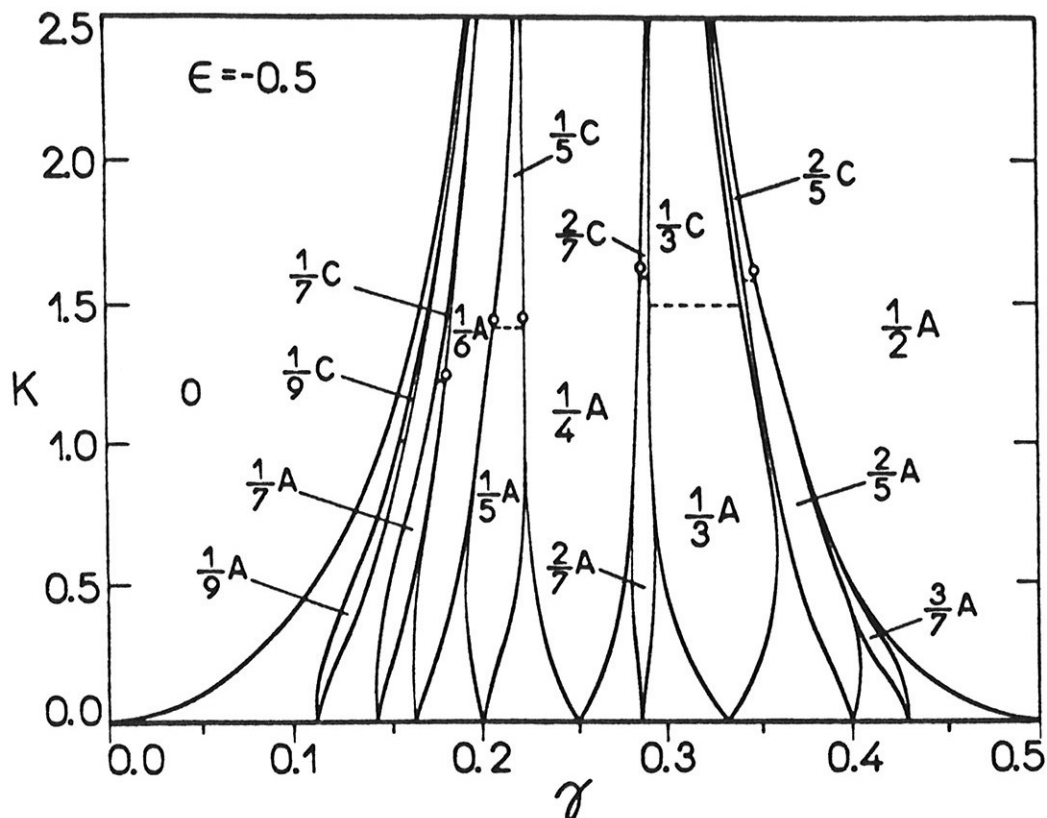


Figura 9.6: Diagrama de fases para o modelo FKD, com $\epsilon = -0,5$.

Flória, qual seja, representam a variação contínua no defeito que governa a transição comensurável-incomensurável. No entanto, pudemos obter uma série deles pois são também pontos de acumulação das transições simétrica-assimétrica nas fases de período ímpar.

9.2 Estudo das transições simétrica-assimétrica

O método dos potenciais efetivos pode ser empregado para investigar a natureza da transição simétrica-assimétrica. Os resultados numéricos indicam que a transição é de segunda ordem, com uma mudança contínua da configuração dos átomos do tipo A para o tipo C conforme a amplitude do potencial K é aumentado. A determinação precisa da transição pode ser feita pelo estudo do comprimento de correlação

(Johannesson, Schaub e Suhl, 1988), que mede a influência que a variação da posição de um átomo tem na mudança da posição de outro átomo, a uma certa distância dele.

Consideremos um estado fundamental do modelo e dois átomos rotulados por k e m . Seja δu_k um deslocamento infinitesimal da posição de equilíbrio u_k . O átomo em u_m se deslocará de δu_m . Portanto, podemos definir o comprimento de correlação ξ através da relação

$$\delta u_m \sim \delta u_k \exp\left(-\frac{|m - k|}{\xi}\right). \quad (9.3)$$

ξ pode ser determinado utilizando a condição de extremização da energia. No estado fundamental as coordenadas dos átomos $\{u_n\}$ devem obedecer a esta condição, de forma que

$$\frac{\partial E}{\partial u_n} = 2u_n - u_{n-1} - u_{n+1} + V'(u_n) = 0, \quad (9.4)$$

onde E é dada pela equação (8.5). Introduzindo-se a variável $p_n = u_n - u_{n-1}$ podemos reescrever a relação de recorrência acima sob a forma de um mapeamento bidimensional

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n + V'(u_n), \\ u_{n+1} &= u_n + p_{n+1}. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Linearizando-se o mapeamento resulta

$$\begin{pmatrix} \delta p_{n+1} \\ \delta u_{n+1} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & V''(u_n) \\ 1 & 1 + V''(u_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta p_n \\ \delta u_n \end{pmatrix} = \mathbf{J}_n(p_n, u_n) \begin{pmatrix} \delta p_n \\ \delta u_n \end{pmatrix}. \quad (9.6)$$

Consideremos uma fase comensurável de período Q . Para átomos a uma distância Q um do outro,

$$\begin{pmatrix} \delta p_{n+Q} \\ \delta u_{n+Q} \end{pmatrix} \approx \mathbf{J}_{n+Q-1} \mathbf{J}_{n+Q-2} \cdots \mathbf{J}_n \begin{pmatrix} \delta p_n \\ \delta u_n \end{pmatrix}. \quad (9.7)$$

Como as matrizes \mathbf{J}_n têm determinante 1, a matriz produto

$$\mathbf{L} = \prod_{i=0}^{Q-1} \mathbf{J}_{n+Q-1-i}(p_i, u_i) \quad (9.8)$$

também terá determinante 1. Portanto, os autovalores de \mathbf{L} serão dados simplesmente por

$$\Lambda_{\pm} = \frac{\text{tr} \mathbf{L}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\text{tr} \mathbf{L}}{2}\right)^2 - 1} \quad (9.9)$$

onde tr denota o traço. Esses autovalores satisfazem $\Lambda_+ \Lambda_- = 1$. O comportamento dominante de uma órbita, em princípio, é governado pelo maior autovalor Λ_+ . No entanto, no caso de uma perturbação do estado fundamental, Aubry (1981) mostrou que o vetor $(\delta p_k, \delta u_k)$ é proporcional ao autovetor da matriz \mathbf{L} com menor autovalor. Neste caso, o autovalor que nos interessa é Λ_- . Portanto,

$$\begin{pmatrix} \delta p_{n+Q} \\ \delta u_{n+Q} \end{pmatrix} \approx \Lambda_- \begin{pmatrix} \delta p_n \\ \delta u_n \end{pmatrix}. \quad (9.10)$$

Comparando a equação (9.3) com a equação (9.10), concluímos que

$$\xi = -\frac{Q}{\ln \Lambda_-}. \quad (9.11)$$

Para uma fase comensurável de período Q é possível determinar com grande precisão a configuração dos átomos em equilíbrio resolvendo-se numericamente o sistema de equações (9.4) utilizando, por exemplo, o método de Newton. Partimos de configurações tentativa, para $K \approx 0$, dadas por

$$u_n = n\omega, \quad (n = 0, \dots, Q - 1), \quad (9.12)$$

que são as posições de átomos igualmente espaçados de ω . Para K pequeno, espera-se a ocorrência de fases simétricas (tipo A). Aumentando K com passos convenientemente pequenos, continuamos obtendo soluções do tipo A. Os autovalores Λ_{\pm} das soluções simétricas são reais com $\Lambda_- < 1$ e $\Lambda_+ > 1$ para amplitudes do potencial K pequenas. Entretanto os autovalores se aproximam gradualmente de 1 quando K se aproxima de K_c . Portanto o comprimento de correlação ξ diverge para $K = K_c$. A divergência do comprimento de correlação indica que a solução simétrica torna-se instável em $K = K_c$, assinalando a transição para a fase assimétrica. Para valores de K maiores que K_c os autovalores Λ_{\pm} da solução

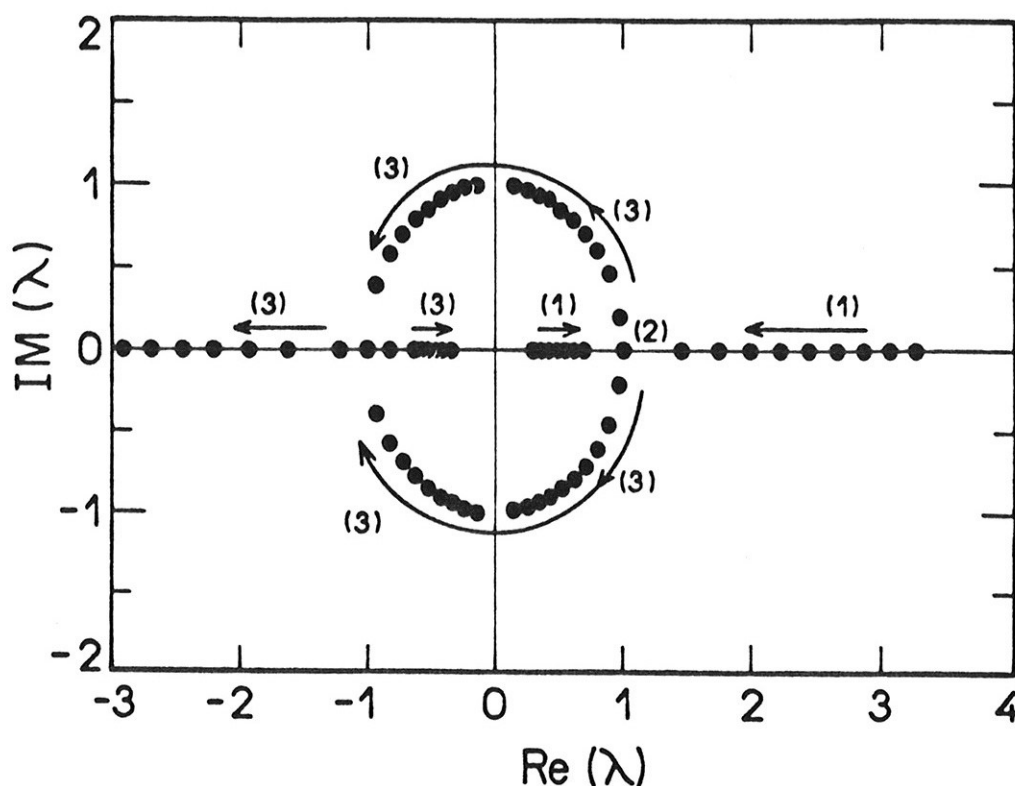


Figura 9.7: Autovalores correspondentes à configuração simétrica da fase $\omega = 1/3$, no modelo FKD com $\epsilon = -0,5$.

simétrica tornam-se complexos. Para valores de K maiores ainda, os autovalores se tornam novamente reais, embora negativos, mostrando que a solução simétrica torna-se um mínimo local de energia. Este cenário está representado na figura 9.7. Ela representa a parte real e a parte imaginária dos autovalores Λ_{\pm} da fase $\omega = 1/3$, para o modelo FKD com $\epsilon = -0,5$. Os autovalores na situação (1) correspondem a $K < K_c$. O ponto (2) no eixo real positivo representa $K = K_c$, o *locus* da transição simétrica-assimétrica. Os pontos caracterizados por (3) representam configurações simétricas para $K > K_c$. Nota-se que, para K pouco maior do que K_c , os autovalores são complexos, mas se tornam reais negativos para K suficientemente grande. O sentido das setas representa o aumento

de K . Comparamos configurações e valores de K_c calculados por este método e pelo método dos potenciais efetivos, e verificamos concordância entre eles, dentro da precisão numérica. O estudo do comprimento de correlação ξ permite, portanto, localizar precisamente o valor crítico da amplitude K_c .

A divergência do comprimento de correlação se dá na forma

$$\xi \sim A(K_c - K)^{-\nu}, \quad (9.13)$$

sendo A uma constante. O expoente $\nu = 1/2$, para $\omega = 1/3$, com $\epsilon = -0,5$, conforme podemos ver na figura 9.8. Este valor foi obtido para outras fases, como $2/5$ e $1/5$. Um argumento na direção de generalizar este resultado para todas as fases com esta transição é o seguinte: considere-se o produto das matrizes jacobianas da equação (9.8). O traço desta matriz produto, perto da transição, é dado assintoticamente por

$$\text{tr}(\mathbf{L}) \approx 2 + B\delta K, \quad (9.14)$$

onde $\delta K = K_c - K$ e B é uma constante. Isto deve ocorrer porque a matriz \mathbf{L} é o produto de matrizes cujos elementos são polinômios de ordem Q em K . Logo, os autovalores de \mathbf{L} são, em primeira ordem, proporcionais a δK , para $K \rightarrow K_c^-$. Então, pela equação (9.11), o expoente ν deve ser $1/2$.

Outro expoente está associado à transição simétrica-assimétrica. Para $\epsilon = -0,25$, este tipo de transição não ocorre. Isto significa que há um “crossover” neste valor de ϵ . Estudando o que ocorre nas vizinhanças deste ponto, determinamos o expoente de “crossover”, definido por

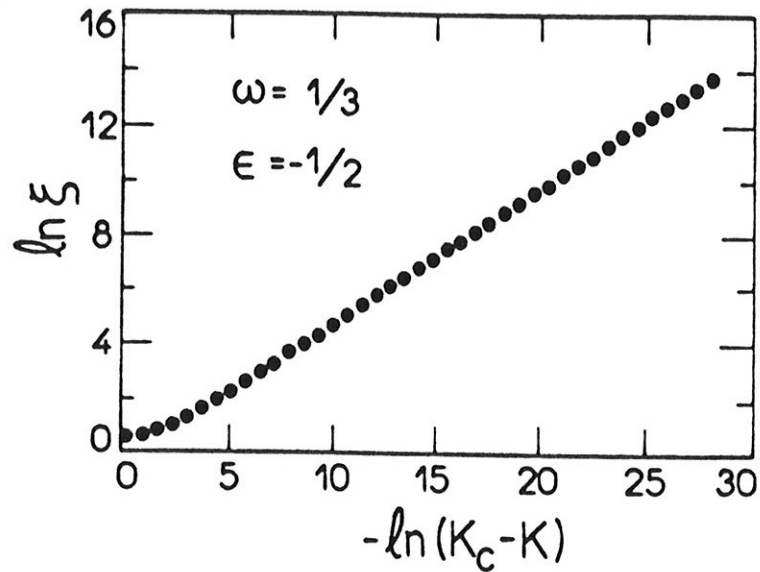


Figura 9.8: Comprimento de correlação em função da amplitude do potencial externo na fase $\omega = 1/3$ do modelo FKD, para $\epsilon = -0,5$.

$$K_c = C |\epsilon + 1/4|^{-\phi}, \quad (9.15)$$

onde C é uma constante. Para o caso $\omega = 1/3$, obtivemos o valor do expoente de crossover $\phi = 1$, como está representado na figura 9.9.

As amplitudes críticas K_c nas transições simétrica-assimétrica, para diferentes valores de $\omega = P/Q$ estão representadas na figura 9.10. As figuras 9.10–9.13 mostram a estrutura aproximadamente auto-similar desse gráfico.

A auto-similaridade aproximada reflete o fato de que os platôs têm a mesma estrutura: tem uma cúspide virada para baixo, sendo que o menor valor de K_c no interior de cada platô é dado pela fase com número de rotação da forma

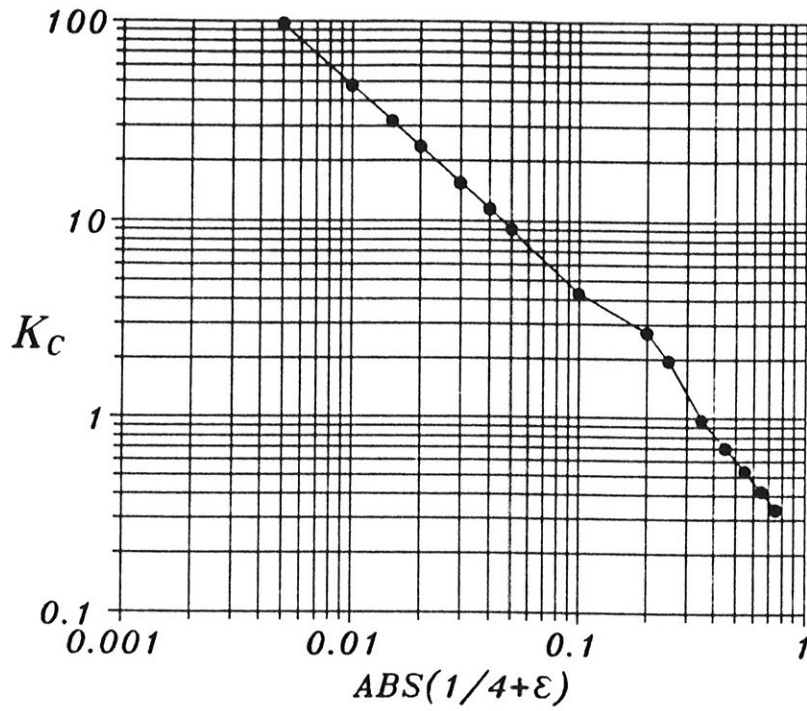


Figura 9.9: K_c versus ϵ na fase 1/3.

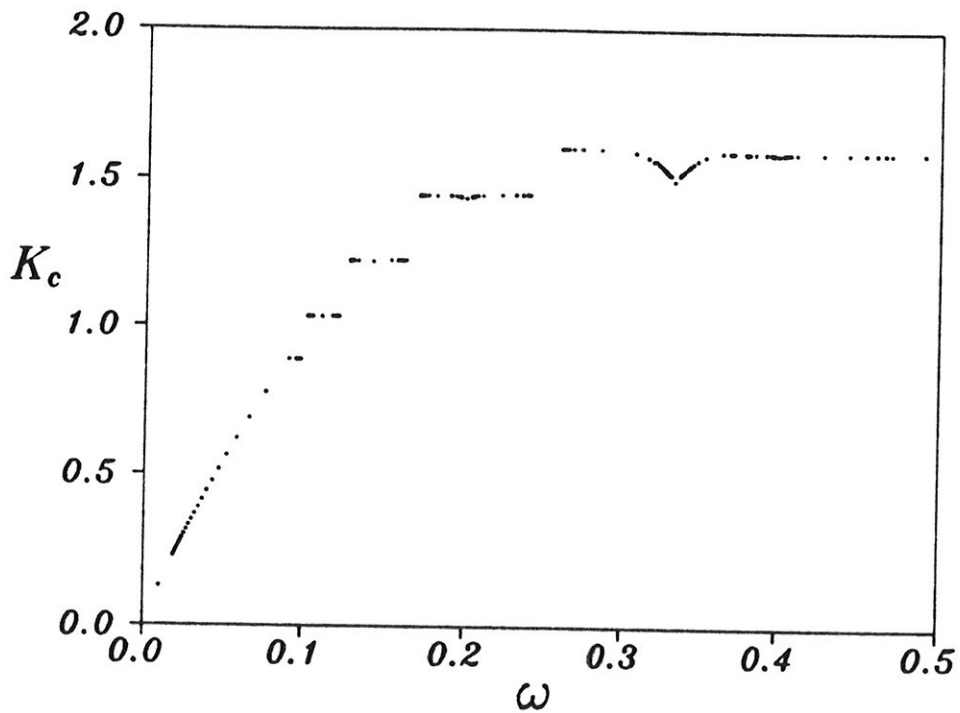


Figura 9.10: Diagrama K_c versus ω para o modelo FKD, com $\epsilon = -0,5$.

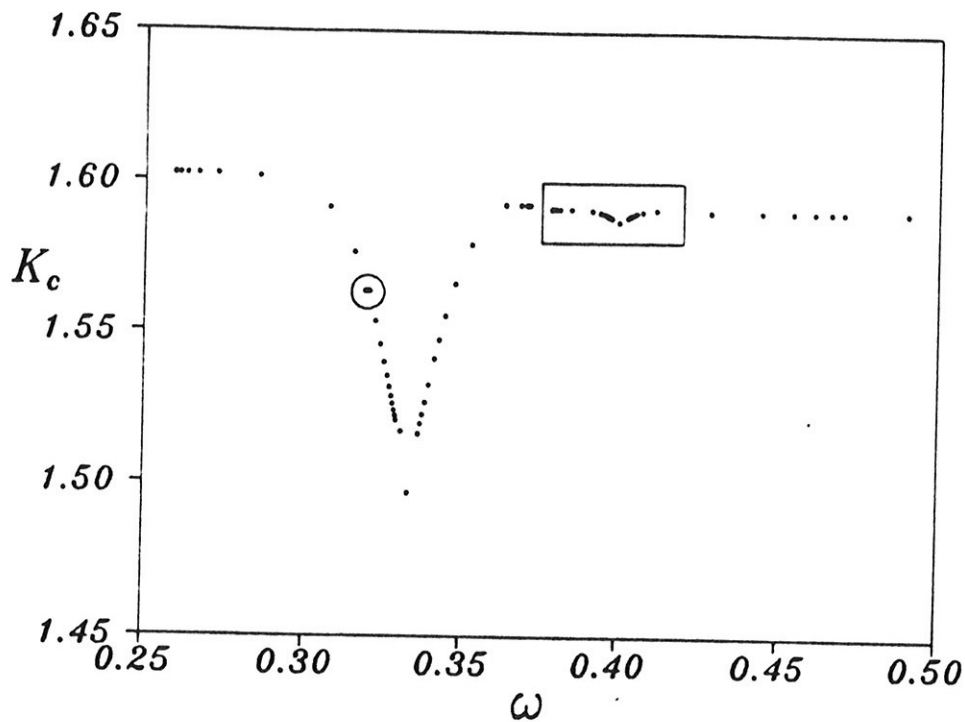


Figura 9.11: Detalhe do diagrama K_c versus ω nas proximidades das fase 1/3.

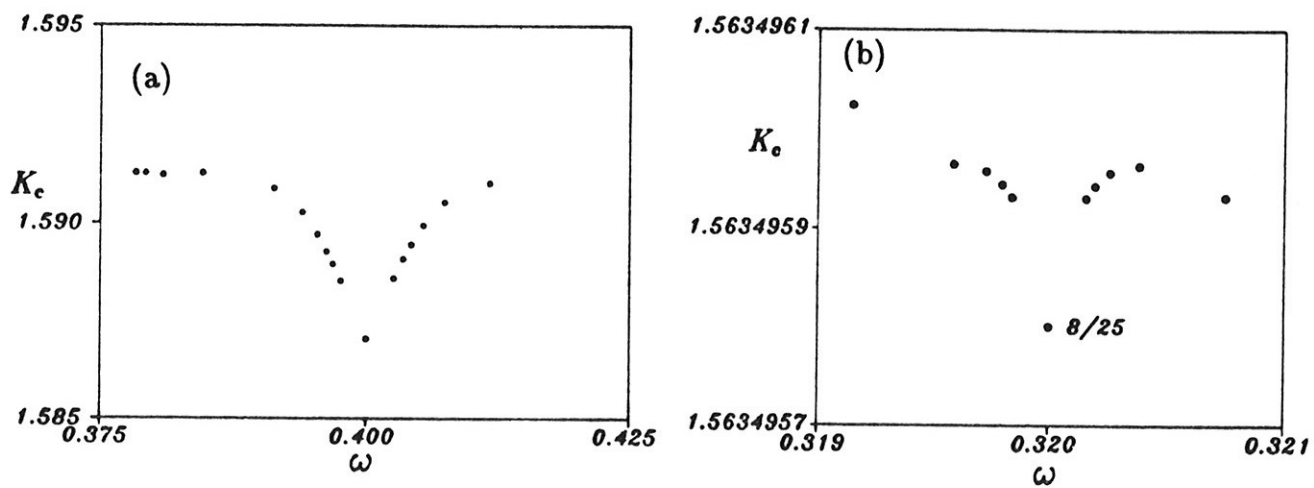


Figura 9.12: Detalhes do diagrama K_c versus ω nas proximidades das fases (a) 2/5 e (b) 8/25.

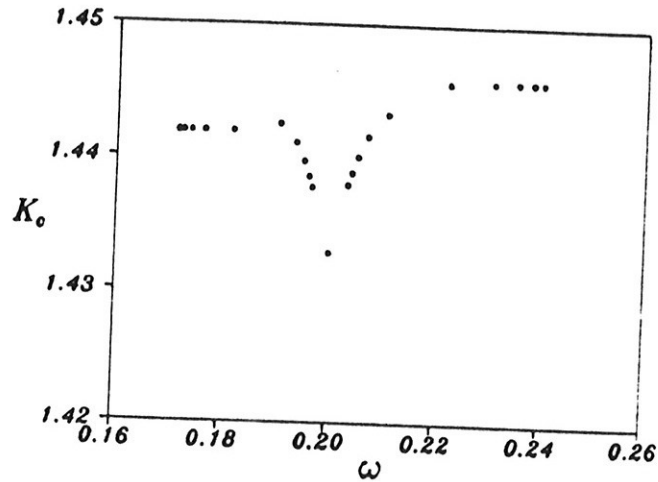


Figura 9.13: Detalhe do diagrama K_c versus ω nas proximidades da fase $1/5$.

$$\omega = \frac{1}{Q} \quad (9.16)$$

sendo Q um número ímpar. Cada um dos platôs se estende ao longo do intervalo

$$\frac{1}{Q+1} < \omega < \frac{1}{Q-1}. \quad (9.17)$$

A forma geral dos platôs das figuras 9.10 e 9.13 pode ser compreendida intuitivamente da seguinte maneira: tome-se, por exemplo, o platô com $1/4 < \omega < 1/2$. A fase $1/3$ simétrica é a fase menos estável entre todas as fases simétricas deste intervalo, pois nela a transição simétrica-assimétrica se dá para menor valor de K_c . Todas as fases de denominador ímpar neste platô são fases “compostas” através de uma combinação da fase $1/3$ com a fase $1/2$ ou com a fase $1/4$. Por exemplo: a fase $8/25$ é “composta” de 7 fases $1/3$ com uma fase $1/4$, pois os valores dos $\{ u_n \}$ dos átomos

se repetem após 8 períodos do potencial, sendo que em 7 deles há três átomos e no restante há 4 átomos. Olhando-se para a matriz J , nota-se que a instabilidade da configuração simétrica é dada pelo termo $V''(u)$, que é devido à existência de átomos nos máximos locais de potencial de substrato. Nota-se que a fase $1/3$ é a menos estável, neste sentido, do que as fases $1/2$ e $1/4$. Portanto, como todas as fases comensuráveis são “compostas”, no sentido definido acima, pelas fases $1/3$ e $1/2$ ou $1/4$, elas serão mais estáveis do que a fase $1/3$ e, portanto, a fase $1/3$ tem que ser o ponto mais agudo da cúspide do platô.

Considerações finais

A descrição e análise de modelos para sistemas modulados magnéticos e estruturais, ao longo desta tese, envolveu uma revisão do assunto, para que ficassem claros os novos resultados por nós obtidos. Neste capítulo, faremos uma síntese destes resultados a título de considerações finais.

Na primeira parte do trabalho, estudamos um modelo com interações competitivas na rede de Bethe, na presença de campo, análogo ao modelo ANNNI. Nosso objetivo foi o de determinar diagramas de fase globais, onde se observasse o comportamento das fases moduladas na presença de campo.

Nestes diagramas de fases $T - H$ foi possível obter uma miríade de comportamentos diferentes das fases moduladas, dependendo do parâmetro de competição p . O comportamento dependia, entre outras coisas, da forma da fase modulada a campo nulo no diagrama $T - p$. Conforme o número de intersecções das retas $p = \text{constante}$ com a fronteira da fase em questão, esta fase poderia ter formas diferentes, ou até apresentar regiões desconexas, no diagrama $T - H$.

A obtenção dos diagramas de fases globais tornou-se tarefa muito mais simples devido aos novos métodos de determinação de fronteiras

de fases, descritos no capítulo 4. Para fases com largura relativamente grande, o procedimento baseado no método de Newton, aplicado ao mapeamento (3.35) é o mais adequado. Para fases estreitas, é mais útil o método baseado na minimização da função ϕ .

Através destes métodos também pudemos investigar aspectos detalhados dos diagramas $T - H$. Nestes aspectos inscrevem-se as regiões de coexistência de fases com números de onda diferentes, e as regiões de coexistência de fases comensuráveis distintas com o mesmo número de onda.

O primeiro tipo de região se caracteriza pela coexistência de atratores do mapeamento (3.35) com números de onda diferentes, obtidos a partir de diferentes condições iniciais. Para $1/2 < p < 1$, esta região se inicia a campo nulo e termina num ponto tricrítico, na presença de campo. Para $p \geq 1$, esta região se transfere para o interior das fases moduladas, e tem aspecto mais complexo, pois se relaciona com o envolvimento sucessivo de fases moduladas dobradas uma sobre as outras como camadas de uma cebola. Nestas regiões foram encontrados atratores estranhos com aspecto diferente dos encontrados anteriormente neste tipo de modelo. Particularmente, encontramos atratores “desconexos” que podem estar relacionados a outro tipo de rota para o caos, talvez a de Curry e Yorke (1978).

O segundo tipo de região é definido pela coexistência de configurações com um mesmo número de onda, que observamos para campos pequenos nas fases com período ímpar, e para campos maiores nas de período par. Esta região de coexistência tanto pode ser um artifício do modelo numa árvore, como pode ser um guia para a busca de transições de primeira ordem no interior de fases moduladas na presença de campo em modelos para redes reais.

De forma geral, os resultados obtidos para o comportamento de fases moduladas na presença de campo, no modelo magnético numa árvore por nós estudado, pode fornecer algumas pistas sobre o comportamento destas fases em modelos reais.

Na segunda parte do trabalho, relatamos nosso estudo de uma transição simétrica-assimétrica dentro de fases moduladas estruturais através de um mecanismo ainda não explorado na literatura. O mecanismo é a existência de um máximo local no potencial externo de um modelo FK estendido. As fases assimétricas desta forma produzidas não são fases intermediárias entre fases simétricas, como no modelo de Sasaki-Flória. Elas são fases que persistem para altos valores da amplitude do potencial externo. Encontramos também uma série de pontos de acumulação destas transições, que origina um diagrama K_c versus ω com aspecto fractal.

Os expoentes críticos relacionados a esta transição, que é de segunda ordem e só ocorre nas fases de período ímpar, são $1/2$, para o expoente ν (que mede a divergência do comprimento de correlação) e 1 para o expoente ϕ (que mede o "crossover" entre a situação com esta transição para a situação sem esta transição).

Apêndice : Método de Eckmann-Ruelle para o cálculo dos expoentes de Lyapunov

Como vimos na seção 3.3, os expoentes de Lyapunov do mapeamento

$$\mathbf{X}_{n+1} = F(\mathbf{X}_n), \quad (11.1)$$

onde

$$\mathbf{X}_n = \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} \quad (11.2)$$

e

$$F(\mathbf{X}_n) = \begin{pmatrix} y_n \\ \tanh \frac{1}{T}(y_n - px_n + H) \end{pmatrix}. \quad (11.3)$$

são definidos por

$$\lambda_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |\Lambda_i| \quad (i = 1, 2), \quad (11.4)$$

onde Λ_i ($i = 1, 2$) são os autovalores da matriz L , produto das matrizes jacobianas do mapeamento

$$L = J(X_N)J(X_{N-1}) \cdots J(X_2)J(X_1). \quad (11.5)$$

As matrizes jacobianas são dadas por

$$J(X_n) = \frac{\partial(x_{n+1}, y_{n+1})}{\partial(x_n, y_n)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{p}{T}(1 - y_{n+1}^2) & \frac{1}{T}(1 - y_{n+1}^2) \end{pmatrix}. \quad (11.6)$$

No caso do cálculo dos expoentes de Lyapunov de ciclos- Q é suficiente considerar os Q pontos do ciclo no produto (11.5), e os expoentes de Lyapunov são dados por $\lambda_i = \frac{1}{Q} \ln |\Lambda_i|$ ($i = 1, 2$). Foi dessa forma que calculamos os expoentes de Lyapunov de fases comensuráveis.

Entretanto, no caso das órbitas aperiódicas ou atratores estranhos é necessário considerar um valor de N muito grande, da ordem de 10^3 a 10^7 , de modo que o produto (11.5) pode acarretar problemas de "overflow" nos computadores. Esse problema ocorre particularmente quando se trata de atratores estranhos em que um dos expoentes é positivo. Nesses casos calculamos os expoentes de Lyapunov através de um método proposto por Eckmann e Ruelle (1985). A estratégia consiste em triangularizar sucessivamente a matriz jacobiana no produto (11.5). Começamos pela matriz $J(X_1)$. Procuramos, inicialmente, uma matriz O_1 de forma a obter uma matriz triangular T_1 ,

$$\mathbf{T}_1 = \mathbf{O}_1 \mathbf{J}(\mathbf{X}_1). \quad (11.7)$$

Então, escrevendo $\mathbf{J}(\mathbf{X}_1) = \mathbf{O}_1^{-1} \mathbf{T}_1$, a matriz \mathbf{L} fica

$$\mathbf{L} = \mathbf{J}(\mathbf{X}_N) \mathbf{J}(\mathbf{X}_{N-1}) \cdots \mathbf{J}(\mathbf{X}_2) \mathbf{O}_1^{-1} \mathbf{T}_1. \quad (11.8)$$

Podemos agora triangularizar a matriz $\mathbf{J}(\mathbf{X}_2) \mathbf{O}_1^{-1}$ através de outra transformação \mathbf{O}_2 , de forma a obter uma matriz triangular \mathbf{T}_2 ,

$$\mathbf{T}_2 = \mathbf{O}_2 \mathbf{J}(\mathbf{X}_2) \mathbf{O}_1^{-1}. \quad (11.9)$$

Então podemos escrever a matriz \mathbf{L} sob a forma

$$\mathbf{L} = \mathbf{J}(\mathbf{X}_N) \mathbf{J}(\mathbf{X}_{N-1}) \cdots \mathbf{O}_2^{-1} \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1. \quad (11.10)$$

Continuando este processo até a matriz $\mathbf{J}(\mathbf{X}_N)$, no final ficaremos com

$$\mathbf{L} = \mathbf{O}_N^{-1} \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 \approx \mathbf{T}_N \mathbf{T}_{N-1} \cdots \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1. \quad (11.11)$$

Na última passagem utilizamos o fato de que, para valores de N grandes, a matriz \mathbf{O}_N^{-1} pode ser desprezada quando comparada ao produto das matrizes triangulares \mathbf{T}_i . O fato das matrizes \mathbf{T}_i serem triangulares faz com que os elementos da diagonal principal da matriz produto sejam o produto dos elementos da diagonal principal das matrizes \mathbf{T}_i . Mais ainda,

os autovalores de L serão os próprios elementos da diagonal principal. Assim,

$$\Lambda_i = \prod_{k=1}^N (T_k)_{ii} \quad (i = 1, 2). \quad (11.12)$$

Portanto, os expoentes de Lyapunov podem ser calculados através da fórmula

$$\lambda_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \ln |(T_k)_{ii}| \quad (i = 1, 2). \quad (11.13)$$

A vantagem desta fórmula é óbvia, pois substituindo o produto de matrizes por uma soma de logaritmos de elementos das matrizes elimina-se por completo o problema de “overflow”, exceto, é claro, nas circunstâncias em que os próprios elementos da matriz T apresentam tais problemas, o que pode ocorrer a temperaturas muito baixas.

Referências

Ashcroft, N. W. e N. D. Mermin (1976) *Solid State Physics* (Saunders College).

Aubry, S. (1978) em *Solitons and Condensed Matter Physics*, eds. A. R. Bishop e T. Schneider, *Solid State Sciences*, **8**, p. 264 (Springer-Verlag).

Aubry, S. (1981) em *Proceedings of the Les Houches Lectures, 1980*, eds. T. Balian e R. Stora (North-Holland).

Aubry, S. (1983a) *Physica* **7D**, 240.

Aubry, S. (1983b) *J. Physique* **44**, 147.

Aubry, S. (1983c) *J. Phys.* **C16**, 2497.

Aubry, S. e P. Y. Le Daeron (1983) *Physica* **8D**, 381.

Bak, P. (1982) *Rep. Prog. Phys.* **42**, 587.

Bak, P. e J. von Boehm (1980) *Phys. Rev. B* **21**, 5297.

- Bak, P. e R. Bruinsma (1982) *Phys. Rev. Lett.* **49**, 249.
- Baxter, R. (1982) *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press).
- Bethe, H. (1935) *Proc. Roy. Soc.* **A150**, 552.
- Blinc, R. e A. P. Levanyuk (1986) eds., *Incommensurate Phases in Dielectrics*, vols. 1 e 2 (North-Holland).
- Bragg, W. L. e E. J. Williams (1934) *Proc. Roy. Soc.* **A145**, 699.
- Braiman, Y., J. Baumgarten, J. Jortner e J. Klafer (1990) *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2398.
- Bray, A. J. e M. A. Moore (1987) *Phys. Rev. Lett.* **58**, 57.
- Callen, H. (1985) *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, Inc.).
- Campbell D. K., M. Peyrard e P. Sodano (1986) *Physica* **19D**, 165.
- Carneiro, C. E. I. e W. F. Wreszinski (1991) *Phys. Rev.* **A43**, 5691.
- Chen, M. S., L. Onsager, J. Bonner e J. Nagle (1974) *J. Chem. Phys.* **60**, 405.
- Chirikov, B. V. (1979) *Phys. Rep.* **52**, 263.
- Chou, W. e R. B. Griffiths (1986) *Phys. Rev.* **B34**, 6219.
- Comes, R., S. M. Shapiro, G. Shirane, A. F. Garito e A. J. Hegger (1975)

Phys. Rev. Lett. **35**, 1518.

Cooper, B. R. (1968) em *Solid State Physics*, vol. 21, 393.

Curry, J. H. e J. A. Yorke (1978) em *Lecture Notes in Mathematics*, **668**, p. 48.

Denoyer, F., A. H. Moudden, R. Currat, C. Vettier, A. Bellamy e M. Lambert (1982) Phys. Rev. B **25**, 1697.

Eckmann, J. P. e D. Ruelle (1985) Rev. Mod. Phys. **57**, 617.

Eggarter, T. P. (1974) Phys. Rev. B **9**, 2989.

Elliott, R. J. (1961) Phys. Rev. **124**, 346.

Feigenbaum, M. (1980) Los Alamos Sc. **1**, 4.

Fisher, M. E. e W. Selke (1980) Phys. Rev. Lett. **44**, 1502.

Fisher, M. E. e W. Selke (1981) Phyl. Trans. R. Soc. London **302**, 1.

Fisher, M. E. (1982) em *Melting, Localization and Chaos*, eds. R. K. Kalia e P. Vashishta, p. 259 (North-Holland).

Frank, F. C. e J. H. van der Merwe (1949) Proc. Roy. Soc **198**, 1340.

Frenkel, Y. I. e T. Kontorova (1938) Zh. Eksp. Teor. Fiz. **8**, 1340.

Greene, J. M. (1979) J. Math. Phys. **20**, 1183.

Griffiths, R. B. (1990) em *Fundamental Problems in Statistical Physics*,

vol. VII, (Elsevier).

Griffiths, R. B. e W. Chou (1986) *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1929.

Hornreich, R. M., M. Luban e S. Shtrikman (1975) *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1678.

Horiguchi, T. e T. Morita (1983) *J. Stat. Phys.* **35**, 355.

Iizumi, M., J. D. Axe e G. Shirane (1977) *Phys. Rev.* **B15**, 4392.

IMSL-Problem Solving Software Systems (1987), versão 1.0, para IBM-PC com Microsoft FORTRAN, E.U.A.

Inawashiro, S., C. J. Thompson e G. Honda, G. (1983) *J. Stat. Phys.* **33**, 419.

Ishimura, N. e T. Yamamoto (1989) *J. Phys. Soc. Jap.* **58**, 2439.

Izyumov, Y. A. (1984) *Sov. Phys.-Usp.* **27**, 845.

Jensen, M. J. e P. Bak (1983) *Phys. Rev.* **B27**, 6853.

Landau, L. D. e E. M. Lifshitz (1969) *Statistical Physics* (Pergamon Press).

Li, W. e P. Bak (1986) *Phys. Rev. Lett.* **57**, 655.

Lichtenberg, A. J. e M. A. Lieberman (1983) *Regular and Stochastic Motion* (Springer-Verlag).

Mandelbrot, B. B. (1983) *The Fractal Geometry of Nature* (Freeman).

- Marchand, M., K. Hood e A. Caillé (1987) *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1660.
- Mariz, A. M., C. Tsallis e E. L. Albuquerque (1985) *J. Stat. Phys.* **40**, 577.
- Matsuda, H. (1974) *Prog. Theor. Phys.* **51**, 1053.
- McKay, S. R., A. N. Berker e S. Kirkpatrick (1982) *Phys. Rev. Lett.* **48**, 767.
- Moreira, J. G. (1987) tese de doutoramento, departamento de Física da UFMG.
- Moreira, J. G. e S. R. Salinas (1993) *Phys. Rev.* **B47**, 778.
- Müller-Hartmann, E. e J. Zittartz (1974) *Phys. Rev. Lett.* **33**, 893.
- Öttinger, H. C. (1983) *J. Phys.* **A16**, 1483.
- Pokrovsky, V. L. e G. Uimin (1982a) *J. Phys.* **C15**, L353.
- Pokrovsky, V. L. e G. Uimin (1982b) *Sov. Phys.-JETP (Engl. Transl.)* **82**, 1640.
- Prado, C. P. C. e N. Fiedler-Ferrari (1989) *Phys. Lett.* **A135**, 175.
- Press, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling (1986) *Numerical Recipes* (Cambridge University Press).
- Pynn, R. (1979) *Nature* **281**, 433.
- Redner, S. e H. E. Stanley (1977) *J. Phys.* **C 10**, 4765.

- Rossat-Mignod, J., P. Burlet, H. Bartholin, O. Vogt e R. Lagnier (1980) *J. Phys.* **C13**, 6381.
- Runnels, L. K. (1967) *J. Math. Phys.* **8**, 2081.
- Sasaki, K. e L. M. Floría (1989) *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 2179.
- Schellnhuber, H. J., H. Urbschat e J. Willbrink (1990) *Z. Phys.* **B80**, 305.
- Selke, W. (1980) *J. Phys.* **C13**, L265.
- Selke, W. e P. M. Duxbury (1984) *Z. Phys.* **B57**, 49.
- Selke, W. (1988) *Phys. Rep.* **170**, 213.
- Selke, W. (1992) em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, eds. C. Domb e J. L. Lebowitz, vol. 15, p. 1 (Academic Press).
- Smith, J. e J. M. Yeomans (1982) *J. Phys.* **C15**, L1053.
- Smith, J. e J. M. Yeomans (1983) *J. Phys.* **C16**, 5305.
- Stanley, H. E. (1971) *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, (Oxford University Press).
- Stephenson, J. (1970) *Can. J. Phys.* **48**, 1724.
- Szpilka, A. (1985) *J. Phys.* **C18**, 569.
- Thompson, C. J. (1982) *J. Stat. Phys.* **27**, 441.

- Toulouse, G. (1977) *Communication on Physics* **2**, 115-119.
- Tragtenberg, M. H. R. e C. S. O. Yokoi (1989) "Fases Assimétricas no modelo DFK", apresentado no XII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambú, MG.
- Uimin, G. (1984) *J. Stat. Phys.* **34**, 1.
- Upton, P. e J. M. Yeomans (1989) *Phys. Rev.* **B40**, 479.
- Vannimenus, J. (1981) *Z. Phys.* **B43**, 141.
- Wilson, J. A., F. J. DiSalvo e S. Mahajan (1975) *Adv. Phys.* **24**, 117.
- Yamada, Y., I. Shibuya e S. Hosino (1963) *J. Phys. Soc. Japan* **18**, 1594.
- Yeomans, J. M. (1988) em *Solid State Physics*, eds. H. Ehrenreich, F. Seitz e D. Turnbull, vol. 41, p. 151 (Academic Press).
- Ying, S. C. (1971) *Phys. Rev.* **B3**, 4160.
- Yokoi, C. S. O., M. D. Coutinho-Filho e S. R. Salinas (1981) *Phys. Rev.* **B24**, 4047.
- Yokoi, C. S. O., M. J. de Oliveira e S. R. Salinas (1985) *Phys. Rev. Lett.* **54**, 163.
- Yokoi, C. S. O. (1988) *Phys. Rev.* **B38**, 634.
- Yokoi, C. S. O., L. H. Tang e W. Chou (1988) *Phys. Rev.* **B37**, 2173.