UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

SBI-IFUSP

305M810T0571

ESTUDO DE ALGUNS MODELOS PARA SISTEMAS
MAGNÉTICOS MODULADOS NA PRESENÇA DE UM
CAMPO MAGNÉTICO

Levanter
30/05/82
la
Município de Curitiba
19/07/82
alino

Tese de Doutorado
CARLOS SEIHITI ORII

SÃO PAULO
1982

AGRADECIMENTOS

Desejo expressar os meus sinceros agradecimentos aos professores Sílvio R. Salinas, Maurício D. Coutinho Filho e Carlos C. Becerra, cujas sugestões, críticas e palavras encorajadoras possibilitaram a conclusão deste pequeno trabalho.

Em especial agradeço ao professor Sílvio R. Salinas pela agra tarefa de orientação, assim como pela paciência e compreensão demonstrada aos meus lentos progressos que resultaram nesta tese serodiamente terminada.

RESUMO

Dois modelos descrevendo sistemas magnéticos modulados são estudados na presença de um campo magnético. Na primeira parte consideramos um modelo de Ising com interações competitivas numa única direção espacial (modelo ANNNI). A superfície crítica, a linha tricrítica, a estrutura das fases moduladas, e os diagramas de fases são determinados na aproximação de campo médio. O comportamento crítico e tricrítico é analisado através do método de Grupo de Renormalização. Na segunda parte estudamos um modelo adequado à descrição do composto MnP. Cálculos realizados na aproximação de campo médio e através do método de Grupo de Renormalização contribuem para esclarecer os resultados experimentais acerca do ponto de Lifshitz observado neste composto.

ABSTRACT

Two models describing modulated magnetic systems are studied in the presence of a magnetic field. The first part is dedicated to the study of an Ising model with competing interactions along one of the spatial directions (ANNNI model). The critical surface, the tricritical line, the structure of the modulated phases, and the phase diagrams are determined in the mean field approximation. The critical and the tricritical behaviour is analysed by the Renormalization Group method. The second part is concerned with a model suitable for the description of the compound MnP. Calculations carried out in the mean field approximation and through the Renormalization Group method provide a better understanding of the experimental results on the Lifshitz point observed in this compound.

ÍNDICE

pág.

Notas Preliminares	1
--------------------------	---

PRIMEIRA PARTE- Modelo de Ising com interações competi- tivas numa direção axial (modelo ANNNI)

1. Definição do modelo e um sumário dos estudos reali- zados até o presente	3
2. Aproximação de campo médio	8
2A. Equações de campo médio	9
2B. Estado fundamental	12
2C. Cálculos na ausência do campo magnético	14
2D. Cálculos na presença de um campo magnético	21
3. Método de Grupo de Renormalização	29
3A. Modelo s^4 de Wilson	30
3B. Aproximação gaussiana	35
3C. Comportamento crítico ordinário	43
3D. Comportamento crítico no ponto de Lifshitz	64
3E. Comportamento crítico na presença de um campo magnético	76

SEGUNDA PARTE - Ponto de Lifshitz no composto MnP: Estudo baseado num modelo microscópico

4. Observações gerais sobre o composto MnP	94
5. Estudo na aproximação de campo médio	99
5A. Equações de campo médio	99
5B. Solução paramagnética e as linhas de transição de segunda ordem	101
5C. Expansão de Landau e a linha de transição de primeira ordem	105
5D. Suscetibilidades longitudinal e transversal uniformes	110
6. Análise segundo o método de Grupo de Renormaliza- ção	115
Considerações Finais	122
Apêndice 1	123
Apêndice 2	131
Apêndice 3	132
Referências	133

NOTAS PRELIMINARES

Procuramos enfeixar nesta dissertação os trabalhos realizados no decorrer dos últimos anos. Dividimo-la em duas partes. A primeira é dedicada a um modelo de Ising com interações competitivas numa direção axial (modelo ANNNI), e a segunda a um modelo mais complexo apropriado à descrição do ponto multicrítico de Lifshitz observado experimentalmente no composto MnP. Esses trabalhos, aparentemente díspares, são, entretanto, resultados de uma preocupação única de melhor compreender os sistemas magnéticos modulados.

As fases moduladas caracterizam-se por apresentar estruturas magnéticas de períodos nem sempre comensuráveis com a rede subjacente. Estas fases recebem as denominações de helicoidal, sinusoidal etc. conforme as figuras descritas pelo vetor de magnetização. Materiais magnéticos apresentando fases moduladas são conhecidos há mais de duas décadas, e datam daquela época as primeiras tentativas de cálculos mecânico-estatísticos baseados, o mais das vezes, na aproximação de campo médio. Porquanto houvesse um interesse contínuo por estes sistemas, somente nos últimos anos fizeram-se progressos mais significativos. Acreditamos que isso se deve à introdução de novas técnicas de cálculo, como o método de Grupo de Renormalização e a teoria de sóliton na transição comensurável-incomensurável. Por outro lado, o reexame das clássicas equações de campo médio, permitido pela facilidade de computação numérica hoje disponível, revelou aspectos desconhecidos concernentes às fases moduladas.

Na primeira parte da dissertação, onde discutimos o modelo ANNNI, procuraremos fornecer uma visão mais concreta do desenvolvimento histórico no caso particular deste modelo. O nosso trabalho consistiu em estudá-lo na presença

de um campo magnético. Entre outros fatos que nos sugeriram este estudo podemos destacar: a possibilidade de comportamentos críticos diferentes induzidos pelo campo magnético, a inexistência de estudo do diagrama de fases desse modelo na presença de um campo, e o fato do campo magnético ser um campo de relevância experimental. O estudo foi realizado na aproximação de campo médio e através do método de Grupo de Renormalização.

A segunda parte é dedicada ao estudo de um modelo microscópico para a descrição do ponto de Lifshitz observado no composto MnP. A descoberta do ponto de Lifshitz no MnP foi algo inopinada, ao menos à luz das teorias então disponíveis, pois especulava-se a sua existência em sistemas muito diferentes, como aqueles de composição variável ou submetidos à pressão. Esta omissão teórica é compreensível se considerarmos as particularidades deste composto, como procuraremos demonstrar. Os cálculos serão efetuados na aproximação de campo médio e também através do método de Grupo de Renormalização.

Tanto quanto possível procuramos fazer uma exposição linear, e isto implicou a inclusão de alguns tópicos sobejamente pesquisados. Assim, o capítulo 1 e as seções 2A, 2B, 2C, 3A, 3B, 3C e 3D são pouco mais que compilações de resultados dispersos em diversos periódicos. As seções 2D e 3E, e os capítulos 5 e 6 reúnem, no entanto, resultados de cálculos por nós realizados.

PRIMEIRA PARTE

Modelo de Ising com interações competitivas
numa direção axial (modelo ANNNI)

1. DEFINIÇÃO DO MODELO E UM SUMÁRIO DOS ESTUDOS REALIZADOS ATÉ O PRESENTE

O modelo de Ising que discutiremos nesta primeira parte difere do modelo de Ising ferromagnético usual, cuja crônica pode ser encontrada no artigo de Brush (1967), por apresentar interações competitivas entre os segundos vizinhos numa das direções espaciais. A hamiltoniana desse modelo na presença de um campo magnético H tem a forma

$$\mathcal{H} = - \frac{1}{2} \sum_{\vec{r} \vec{r}'} J(\vec{r} - \vec{r}') \sigma_{\vec{r}} \sigma_{\vec{r}'} - H \sum_{\vec{r}} \sigma_{\vec{r}} \quad (1.1)$$

onde $\sigma_{\vec{r}} = \pm 1$ e as constantes de intercâmbio são

$$J(\vec{r}) = \begin{cases} J_1 & \text{se } \vec{r} = \pm \vec{e}_1 \\ J_2 & \text{se } \vec{r} = \pm 2 \vec{e}_1 \\ J_0 & \text{se } \vec{r} = \pm \vec{e}_i \ (i = 2, \dots, d) \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (1.2)$$

Suporemos que existem N "spins" em cada uma das direções espaciais da rede cúbica simples de espaçamento unitário num

total de N^d "spins". Em geral teremos em mente um sistema tridimensional ($d=3$), e limitaremos o estudo ao caso $J_1, J_0 > 0$ e J_2 arbitrário. Desde já introduziremos o parâmetro p segundo

$$p = - \frac{J_2}{J_1} \quad (1.3)$$

o qual mede a magnitude da competição entre primeiros e segundos vizinhos. Para valores suficientemente elevados de p esperamos a ocorrência de fases moduladas, conforme se pode observar no diagrama de fases T - p ilustrado de forma esquemática na figura abaixo.

FIGURA 1 - Diagrama de fases esquemático do modelo ANNNI.

P: fase paramagnética, F: fase ferromagnética,
M: fase modulada e PL: ponto de Lifshitz.

A fase modulada no modelo considerado caracteriza-se pela variação periódica da magnetização ao longo da direção em que as interações são competitivas, como procuramos ilustrar na figura abaixo.

FIGURA 2 - Representação esquemática de um possível ordenamento modulado no modelo. A interação competitiva ocorre segundo o eixo z e os pontos representam os planos xy . Os vetores representam o valor médio dos "spins" nestes planos.

Fisher e Selke (1980) sugeriram denominar o modelo de ANNNI, acrônimo de "Axial Next-Nearest-Neighbour Ising", nome que tem sido utilizado amplamente e que adotaremos neste trabalho.

Historicamente esse modelo foi introduzido por Elliott (1961) para descrever a variação sinusoidal dos momentos magnéticos observada em terras raras pesadas como o érbio. A interação competitiva procurava simular a interação de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY), oscilante e de longo alcance, existente nestes materiais. A natureza escalar do modelo de Ising reproduzia, por seu turno, a anisotropia

uniaxial no érbio que mantém os momentos magnéticos orientados segundo uma única direção espacial. Realizando cálculos na aproximação de campo médio Elliott pôde concluir que esse modelo permitia uma descrição satisfatória da fase modulada do érbio.

O estudo desse modelo foi retomado por Droz e Coutinho Filho (1976). Empregando a técnica de Grupo de Renormalização estes pesquisadores mostraram que os expoentes críticos caracterizando a transição para a fase modulada pertencem à mesma classe de universalidade do modelo XY. Garel e Pfeuty (1976) chegaram de modo independente à mesma conclusão.

A noção do ponto de Lifshitz (PL), que é um ponto multicrítico onde as fases paramagnética, comensurável e incomensurável tornam-se idênticas, foi introduzida por Hornreich, Luban e Shtrikman (1976). Redner e Stanley (1977a, b), empregando a técnica de análise de séries de altas temperaturas, estudaram as fronteiras de fases para-ferro e para-modu e o PL. Selke (1978) fez o mesmo através da técnica de Monte Carlo.

A natureza complexa da fase modulada a baixas temperaturas foi revelada pelos estudos realizados por Selke e Fisher (1977) utilizando a técnica de Monte Carlo. von Boehm e Bak (1979) consideraram um modelo similar ao modelo ANNNI para tentar compreender as várias fases moduladas observadas no composto CeSb. Realizando cálculos numéricos minuciosos na aproximação de campo médio, estes autores sugeriram que a variação do vetor de onda com a temperatura neste modelo poderia ser um exemplo de "escada do diabo", uma noção introduzida por Mandelbrot (1977). Mais tarde Bak e von Boehm (1980) fizeram uma análise detalhada do modelo ANNNI na aproximação de campo médio, e mostraram como as transições entre as várias fases moduladas podem ser compreendidas como sendo devido a um mecanismo tipo sóliton. A fase modulada foi ainda estudada por Fisher e Selke (1980a, b) utilizando técnicas de séries de baixas temperaturas,

por Villain e Gordon (1980) utilizando uma análise diferente das equações de campo médio, e por Bak (1981) utilizando um análogo discreto da teoria de sóliton. Estes estudos revelam a existência de infinitas fases comensuráveis, nas quais os períodos das estruturas magnéticas são múltiplos racionais do parâmetro da rede cristalina, e também de fases incomensuráveis onde esse não é o caso.

Embora normalmente o sistema considerado seja tridimensional, existe também um grande número de trabalhos dedicados a este modelo em duas dimensões. As características mais interessantes nesse caso são a possível existência de uma fase flutuante tipo Kosterlitz-Thouless, e a provável inexistência do PL em temperaturas diferentes de zero. Como exemplos de trabalhos dedicados a este problema mencionamos Hornreich et al. (1979), Selke e Fisher (1980), Villain e Bak (1981), Rujan (1981), Barber (1981) e Barber e Duxbury (1981, 1982).

O estudo do modelo ANNNI na presença de um campo magnético foi iniciado por Coutinho Filho e Moura (1980), que analisaram o diagrama de fases na vizinhança do PL utilizando a teoria de Landau. Um estudo detalhado do diagrama de fases na aproximação de campo médio foi realizado por Yokoi, Coutinho Filho e Salinas (1981a).

2. APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

Como mencionamos anteriormente, o modelo ANNNI foi estudado por muitos autores na aproximação de campo médio e na ausência do campo magnético, a começar pelo próprio Elliott (1961). Mais recentemente Michelson (1977) estudou em detalhe a vizinhança do PL e Bak e von Boehm (1980) investigaram a fase modulada. O estudo na aproximação de campo médio quando um campo magnético está presente foi iniciado por Coutinho Filho e Moura (1980) e continuado por Yokoi, Coutinho Filho e Salinas (1981a).

Neste capítulo faremos uma revisão dos aspectos essenciais do modelo quando tratado na aproximação de campo médio. Procuraremos enfatizar as técnicas empregadas, as dificuldades envolvidas, e os resultados obtidos, sem no entanto reproduzir detalhadamente os cálculos e as expressões, muitas vezes extensas, que podem ser encontradas no nosso trabalho já mencionado.

Acreditamos que os resultados obtidos na aproximação de campo médio descrevem os aspectos básicos do modelo, ao menos para sistemas tridimensionais, e que constituem o ponto de partida para cálculos mais aprimorados como os de Grupo de Renormalização que descreveremos no capítulo seguinte.

2A. Equações de campo médio

Há diversas maneiras de se obter a chamada aproximação de campo médio. Por exemplo, podemos utilizar a desigualdade atribuída a Bogoliubov, que se encontra discutida no artigo de Falk (1970), segundo a qual a energia livre do sistema é limitada superiormente por

$$\Phi \equiv G_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (2.1)$$

onde $\mathcal{H}$ é a hamiltoniana do sistema, e G_0 e $\langle \dots \rangle_0$ são a energia livre e o valor esperado calculados com a hamiltoniana arbitrária $\mathcal{H}_0$.

Para se obter a aproximação de campo médio adota-se uma hamiltoniana $\mathcal{H}_0$ da forma

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\vec{x}} \eta_{\vec{x}} \sigma_{\vec{x}}. \quad (2.2)$$

Então, com $\beta = 1/kT$,

$$\langle \sigma_{\vec{x}} \rangle_0 = \tanh \beta \eta_{\vec{x}} \equiv m_{\vec{x}}. \quad (2.3)$$

Como $\mathcal{H}_0$ não envolve interação entre "spins", podemos calcular sem dificuldades a função Φ , que em termo das

variáveis $m_{\vec{r}}$ será dada por

$$\Phi [m_{\vec{r}}] = -kTN^3 \ln 2 + kT \sum_{\vec{r}} \int_0^{m_{\vec{r}}} \tanh^{-1} \mu \, d\mu - \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}\vec{r}'} J(\vec{r}-\vec{r}') m_{\vec{r}} m_{\vec{r}'} - H \sum_{\vec{r}} m_{\vec{r}} . \quad (2.4)$$

No que segue a função Φ será denominada funcional de energia livre. A energia livre na aproximação de campo médio corresponderá ao valor mínimo dessa funcional:

$$G(T, H, N^3) = \min_{m_{\vec{r}}} \Phi [m_{\vec{r}}] . \quad (2.5)$$

As equações de minimização determinando as variáveis $m_{\vec{r}}$ são

$$m_{\vec{r}} = \tanh \beta \left[\sum_{\vec{r}'} J(\vec{r}-\vec{r}') m_{\vec{r}'} + H \right] . \quad (2.6)$$

Portanto as variáveis $m_{\vec{r}}$ correspondem às magnetizações locais na linguagem da teoria de campo médio.

No caso particular do modelo ANNNI a magnetização deve ser uniforme exceto talvez numa única direção espacial, que faremos coincidir com o eixo z. Neste caso a magnetização só irá depender da coordenada z, e escreveremos m_z . A funcional de energia livre Φ será agora:

$$\begin{aligned}
N^{-2} \Phi [m_z] = & -kTN \ln 2 + kT \sum_z \int_0^{m_z} \tanh^{-1} \mu d\mu \\
& - \frac{1}{2} \sum_z [4J_0 m_z^2 + J_1 m_z (m_{z-1} + m_{z+1}) \\
& + J_2 m_z (m_{z-2} + m_{z+2})] - H \sum_z m_z, \quad (2.7)
\end{aligned}$$

e a equação de minimização,

$$\begin{aligned}
m_z = & \tanh \beta [4J_0 m_z + J_1 (m_{z-1} + m_{z+1}) + \\
& + J_2 (m_{z-2} + m_{z+2}) + H] . \quad (2.8)
\end{aligned}$$

A dificuldade básica deste modelo em comparação com o modelo de Ising ferromagnético é que agora temos, em vez de uma única equação, um sistema de N equações acopladas, sendo que estamos interessados no limite $N \rightarrow \infty$.

2B. Estado Fundamental

No zero absoluto da temperatura a energia livre na aproximação de campo médio, que é o mínimo da funcional (2.7), fica

$$N^{-2} G(T=0, H, N^3) = \min_{m_z} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_z [4J_0 + J_1 m_z (m_{z-1} + m_{z+1}) + J_2 m_z (m_{z-2} + m_{z+2}) - H \sum_z m_z] \right\}, \quad (2.9)$$

onde $m_z = \pm 1$. Como as interações são ferromagnéticas no interior dos planos, essa é também a energia correta para o estado fundamental. O problema da determinação do estado fundamental reduz-se, portanto, ao problema da determinação do estado fundamental de um modelo de Ising unidimensional descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{z=1}^N (J_1 \sigma_z \sigma_{z+1} + J_2 \sigma_z \sigma_{z+2} + H \sigma_z) \quad (2.10)$$

Uma solução simples para este problema encontra-se no trabalho de Morita e Horiguchi (1972). Estamos estudando apenas a situação em que J_1 é positivo, e neste caso os estados fundamentais possíveis são aqueles com todos os "spins" paralelos (fase ferromagnética) e aqueles com seqüências de dois "spins" positivos seguidos de dois "spins" negativos

(antifase (2,2)), como estão mostrados na figura abaixo.

FIGURA 3 - Estados fundamentais do modelo ANNNI na presença de um campo magnético no caso em que J_1 é positivo.

Observamos que sobre as linhas de transição $H = \pm J_1(2p-1)$ separando a antifase (2,2) das fases ferromagnéticas os estados fundamentais são altamente degenerados, conduzindo a entropias residuais para $d = 1$, mas não para dimensões superiores.

2C. Cálculos na ausência do campo magnético

Os cálculos analíticos a campo nulo baseiam-se no fato das equações de minimização (2.8), ou a funcional de energia livre (2.7), poderem ser desenvolvidas em potências de m_z . Essa circunstância permite uma aproximação sistemática na região próxima à fase paramagnética.

Consideremos inicialmente a equação de minimização (2.8). Expandindo-se a tangente hiperbólica inversa obtemos, para $H = 0$,

$$\begin{aligned} & \beta [4J_0 m_z + J_1 (m_{z-1} + m_{z+1}) + J_2 (m_{z-2} + m_{z+2})] \\ & = \tanh^{-1} m_z = m_z + \frac{1}{3} m_z^3 + \frac{1}{5} m_z^5 + \dots \end{aligned} \quad (2.11)$$

Como uma primeira aproximação iremos reter apenas o termo de primeira ordem e faremos a hipótese

$$m_z = M_1 \cos(qz + \phi) \quad (2.12)$$

Para $q \neq 0$ esta função representa uma magnetização harmônica de amplitude M_1 e comprimento de onda $2\pi/q$. Substituindo-se essa expressão na equação truncada em primeira ordem resulta

$$\beta J(q) M_1 \cos(qz + \phi) = M_1 \cos(qz + \phi), \quad (2.13)$$

onde

$$J(q) = 4J_0 + 2J_1 \cos q + 2J_2 \cos 2q \quad (2.14)$$

é a transformada de Fourier das constantes de intercâmbio. É claro que $M_1 = 0$ é sempre uma solução, a solução paramagnética. Essa é a única solução possível acima da temperatura T_c definida pela expressão

$$kT_c = \max_q J(q) = J(q_c), \quad (2.15)$$

onde q_c é o vetor de onda que torna máxima a função $J(q)$. Abaixo da temperatura T_c soluções não nulas são possíveis. Assim, identificamos T_c com a temperatura crítica. Examinando a função $J(q)$ concluímos que para $p \leq 1/4$ q_c é nulo, de modo que o sistema deve se ordenar ferromagneticamente, enquanto para $p > 1/4$ temos

$$q_c = \cos^{-1} \left(\frac{1}{4p} \right), \quad (2.16)$$

e o sistema deve apresentar um ordenamento sinusoidal. q_c varia de 0 em $p = 1/4$ a $\pi/2$ quando $p \rightarrow \infty$. A equação (2.15) determina as linhas de transição para-ferro $T_0(p)$ e para-modu $T_\lambda(p)$, conforme podem ser observadas na figura 4. A linha de transição para-ferro é, na aproximação de campo médio, uma

reta. O ponto que separa $T_0(p)$ e $T_\lambda(p)$ é o ponto de Lifshitz, que na aproximação de campo médio ocorre para $p = 1/4$ e temperatura T_L tal que $kT_L = 4J_0 + 3J_1/4$.

FIGURA 4 - Diagrama de fases T - p do modelo ANNNI obtido na aproximação de campo médio para o caso particular $J_0 = J_1$. As diversas fases moduladas foram determinadas através de cálculos numéricos por Bak e von Boehm (1980). As frações indicam os vetores de onda do harmônico principal divididos por 2π .

O truncamento em primeira ordem não nos permite determinar a amplitude M_1 . Por outro lado a hipótese (2.12) não é consistente com a equação (2.11) quando termos de ordem superiores à primeira são considerados. Portanto faremos uma hipótese de trabalho mais geral da forma

$$m_z = M_1 \cos(q_c z + \phi) + M_3 \cos 3(q_c z + \phi) + M_5 \cos 5(q_c z + \phi) + \dots \quad (2.17)$$

Substituindo-se a expressão acima na equação (2.11) e igualando os coeficientes dos mesmos harmônicos podemos determinar as amplitudes M_1 , M_3 etc. Por exemplo, temos em ordem dominante

$$M_1 \simeq \pm 2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad M_3 \simeq -\frac{1}{12} \left[1 - \frac{J(3q_c)}{J(q_c)}\right]^{-1} M_1^3 \quad (2.18)$$

Em geral M_n será proporcional à n -ésima potência da amplitude do harmônico principal M_1 . Observamos que quando o campo magnético está ausente não precisamos considerar os harmônicos pares.

A figura 4 mostra que as fases modulada e ferromagnética estão separadas pela linha de transição $T_1(p)$. Esta é uma linha de transição de primeira ordem, que pode ser determinada próximo ao PL igualando-se as energias livres nas duas fases. As expressões assintóticas válidas na proximidade do PL mostram que as linhas de transição $T_0(p)$, $T_\lambda(p)$ e $T_1(p)$

encontram-se tangencialmente.

Os cálculos analíticos mostram que não muito distante da temperatura crítica a magnetização é quase harmônica, sendo distorcida ligeiramente pela presença de harmônicos superiores. A periodicidade da modulação é, no entanto, igual à que se verifica muito próximo de T_c , isto é, $2\pi/q_c$. É claro então que a hipótese (2.17) deve conduzir a resultado sem sentido na região em que a periodicidade da modulação é diferente de $2\pi/q_c$. A análise numérica do sistema de equações (2.8), feita pela primeira vez em detalhe por Bak e von Boehm (1980), mostra que a situação pode ser bastante complexa.

Para resolver numericamente o sistema de equações (2.8) procedemos da seguinte maneira. Supomos que a periodicidade da magnetização é L , de modo que ficamos efetivamente com L equações acopladas, e resolvemos este conjunto de equações iterativamente até que a auto-consistência seja alcançada. Em princípio deveríamos tomar L de 1 a infinito, mas na prática somos forçados a limitar L , por exemplo, a $L \leq 20$. A convergência do processo iterativo é boa a baixas temperaturas, mas há alguns problemas que devem ser mencionados. Muitas vezes há mais de uma solução para um mesmo L , e existe o perigo do processo iterativo convergir para uma solução que não fornece o mínimo absoluto. Para contornar este problema começamos o processo iterativo com três ou mais condições iniciais diferentes, em geral ondas harmônicas de períodos ligeiramente diferentes. Dentre as várias soluções para um mesmo valor de L escolhemos aquela que fornece o menor valor para a funcional de energia livre, e dentre todas estas soluções para os vários L s diferentes, escolhemos aquela que corresponde ao menor mínimo. A figura 5 mostra as várias fases determinadas numericamente e caracterizadas pelos vetores de onda dos harmônicos principais. Um modo alternativo, mais informativo,

de caracterizar uma fase modulada foi sugerido por Fisher e Selke (1980a). Assim, a fase $q = 2\pi/5$ ilustrada na figura 6 pode ser indicada por $\langle 32 \rangle$, o que significa que 3 planos com "spins" predominantemente positivos são seguidos por 2 planos com "spins" predominantemente negativos.

FIGURA 5 - Gráfico do vetor de onda do harmônico principal em função da temperatura que mostra as diversas fases moduladas determinadas numericamente para $p = 0,6$, conforme os cálculos realizados por Bak e von Boehm (1980).

FIGURA 6 - Representação da estrutura de magnetização da fase $q = 2\pi/5$ ou $\langle 32 \rangle$ determinada numericamente. A linha contínua indica o harmônico principal.

O aspecto mais marcante de um gráfico q vs. T seja talvez a existência de algumas fases bastante estáveis separadas por várias fases muito pouco estáveis. Os cálculos numéricos não permitem tirar conclusões a respeito das fases incomensuráveis, mas podemos supor que esta tendência continue e que existam de fato infinitas fases comensuráveis com intervalos de estabilidade cada vez menores, o que, segundo von Boehm e Bak (1978), poderia caracterizar uma "escada do diabo". Mesmo desconsiderando-se especulações desse tipo, o modelo apresenta uma complexidade na fase modulada que não era percebida até há poucos anos.

2D. Cálculos na presença de um campo magnético

A aplicação de um campo magnético na direção axial faz com que surja uma magnetização uniforme não nula mesmo na fase paramagnética. Esta magnetização $m_z = m_0$ é determinada pelas equações de minimização (2.8), que neste caso reduzem-se a

$$m_0 = \tanh \beta [H + J(0) m_0] \quad (2.19)$$

Em analogia com o procedimento da seção anterior, podemos efetuar cálculos analíticos desenvolvendo as equações de minimização (2.8), ou a funcional de energia livre (2.7), em potências de $\delta m_z = m_z - m_0$. As equações de minimização (2.8) tornam-se

$$\begin{aligned} & \beta [4J_0 \delta m_z + J_1 (\delta m_{z-1} + \delta m_{z+1}) + J_2 (\delta m_{z-2} + \delta m_{z+2})] \\ &= \frac{1}{1-m_0^2} \delta m_z + \frac{m_0}{(1-m_0^2)^2} \delta m_z^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.20)$$

Repetindo-se os argumentos já utilizados no caso onde o campo é nulo, podemos concluir que a temperatura crítica é determinada pela equação

$$\frac{kT}{1-m_0^2} = \max_q J(q) = J(q_c) \quad , \quad (2.21)$$

a qual mostra que a periodicidade da fase modulada perto da transição é função unicamente de p , e independe de T ou H . No espaço T - p - H , a equação (2.21) determina uma superfície, a superfície crítica, conforme se pode observar na figura 7.

FIGURA 7 - Diagrama de fases T - p - H do modelo ANNNI na aproximação de campo médio no caso $J_0 = J_1$. A linha de pontos tricríticos (— · — · — · —) separa a superfície crítica, indicada pelas linhas contínuas, da superfície de transição de primeira ordem, representada pelas linhas pontilhadas. Para valores de p superiores a 2,946... a linha tricrítica dá lugar a linhas de pontos terminais críticos e duplamente críticos, as quais não foram desenhadas.

Ainda em analogia com o caso onde o campo magnético é nulo, fazendo-se a hipótese

$$\delta m_z = M_0 + M_1 \cos(q_c Z + \varphi) + M_2 \cos 2(q_c Z + \varphi) + \dots, \quad (2.22)$$

e inserindo-a na equação (2.20), podemos determinar as amplitudes dos harmônicos que caracterizam a magnetização. Os cálculos indicam que, em ordem dominante, M_1 é proporcional a $(T_\lambda(H) - T)^{1/2}$, enquanto M_0 é proporcional a M_1^2 e em geral M_n é proporcional a M_1^n para n maiores ou iguais a 2. Observamos que neste caso tanto os harmônicos ímpares quanto os pares estão presentes.

Até o momento supomos que a transição é contínua, mas o exemplo do metamagnetismo sugere que ela pode se tornar descontínua a campos suficientemente elevados. Para examinar esta possibilidade iremos estudar o comportamento da magnetização total, que na fase paramagnética é

$$M_T^{(P)} = N^3 m_0, \quad (2.23)$$

enquanto na fase modulada

$$M_T^{(M)} = N^3 (m_0 + M_0). \quad (2.24)$$

Estes dois ramos da magnetização encontram-se com inclinações diferentes no plano M_T -H. O laço de van der Waals surge quando a

derivada $\partial M_T^{(M)}/\partial H$ no ponto de transição torna-se negativa. Portanto, o ponto tricrítico é determinada pela condição

$$\left(\frac{\partial M_T^{(M)}}{\partial H} \right)_{\text{SUP. CRÍTICA}} = \infty \quad (2.25)$$

Efetuando-se os cálculos obtemos as seguintes expressões para as temperaturas e os campos tricríticos:

$$\frac{k T_{tr}}{J(q_c)} = 1 - \left\{ 3 + 2 \left[\frac{2J(0)}{J(q_c) - J(0)} + \frac{J(2q_c)}{J(q_c) - J(2q_c)} \right] \right\}^{-1} \quad (2.26)$$

$$\pm H_{tr} = -J(0) \left[1 - \frac{k T_{tr}}{J(q_c)} \right]^{\frac{1}{2}} + k T_{tr} \tanh^{-1} \left[1 - \frac{k T_{tr}}{J(q_c)} \right] \quad (2.27)$$

As linhas de pontos tricríticos estão ilustradas na figura 7. Observamos que as linhas de pontos tricríticos encontram-se tangencialmente com as linhas críticas $T_0(p)$ e $T_\lambda(p)$ e a linha de transição de primeira ordem $T_1(p)$.

A expressão para a temperatura tricrítica não é válida para todos os valores de p , pois ela se torna negativa para grandes valores de p . A estabilidade dos pontos tricríticos pode ser examinada através da expansão de Landau da funcional de energia livre, de modo análogo ao que foi feito por Kincaid e Cohen (1975) para o modelo de Ising metamagnético. No caso particular em que $J_0 = J_1$, a linha tricrítica é estável até $p = 2,946...$. Além desse valor surgem os pontos terminais

críticos e os pontos terminais duplamente críticos, conforme as definições introduzidas por Kincaid e Cohen (1975).

Os cálculos numéricos na presença de um campo podem ser realizados utilizando-se o mesmo processo empregado quando na ausência do campo. Os resultados representativos obtidos para $p = 0,4$, $0,6$ e 4 estão mostrados nas figuras 8, 9 e 10. Para $p = 0,4$ observamos que a fase modulada está limitada a uma região em forma de corcova. Esse diagrama de fases é típico do intervalo $0,25 < p < 0,5$, no qual o estado fundamental é ferromagnético. Para $p = 0,6$ observamos que uma região

FIGURA 8 - Diagrama de fases T-H determinado numericamente no caso $J_0 = J_1$ e $p = 0,4$. A linha grossa é a linha crítica que termina no ponto tricrítico (PT).

FIGURA 9 - Diagrama de fases T-H determinado numericamente no caso $J_0 = J_1$ e $p = 0,6$. A linha grossa é a linha crítica que termina no ponto tricrítico (PT). A figura menor mostra detalhes em torno da fase $\langle 3 \rangle$.

considerável é ocupada pela antifase (2,2) e pelas fases comensuráveis simples com vetores de onda dos harmônicos principais iguais a $2\pi/5$ e $4\pi/11$. Finalmente, para $p = 4$ a maior parte do diagrama de fases é ocupada pela antifase (2,2), o que não é surpreendente, pois, para $-J_2 \gg J_1$, podemos imaginar o modelo como sendo constituído por dois sistemas metamagnéticos fracamente acoplados. Observamos que a linha crítica termina no ponto terminal crítico, enquanto a linha de primeira ordem termina no ponto terminal duplamente crítico.

FIGURA 10 - Diagrama de fases T-H determinado numericamente no caso $J_0 = J_1$ e $p = 4$. A linha grossa é a linha crítica que termina no ponto terminal crítico (PTC). A figura menor mostra detalhes em torno do ponto terminal duplamente crítico (PTDC), que foi determinado numericamente.

A figura 11 mostra a magnetização total como função do campo magnético para $p = 0,6$ e $kT/J_1 = 2,75$. A transição entre as fases comensuráveis $\langle 2 \rangle$ e $\langle 32 \rangle$ é, virtualmente, uma transição de primeira ordem. Mas, refinando-se os cálculos numéricos, verifica-se a existência de outras fases comensuráveis em intervalos cada vez menores.

FIGURA 11 - Gráfico da magnetização total por "spin" em função do campo magnético no caso $J_0 = J_1$, $p = 0,6$ e $kT/J_1 = 2,75$. A figura menor mostra detalhes da transição entre as fases $\langle 2 \rangle$ e $\langle 32 \rangle$.

3. MÉTODO DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

É um fato bem conhecido que a teoria de campo médio, quando aplicado ao modelo de Ising ferromagnético usual, fornece resultados que quantitativamente estão em desacordo com os valores experimentais. Os estudos realizados nas décadas anteriores mostram que isto se deve menos à deficiência do modelo que às limitações da teoria, especialmente quando se está interessado no fenômeno crítico. O método de Grupo de Renormalização (GR), desenvolvido em grande parte por Wilson (1971), foi idealizado para superar as limitações da teoria de campo médio. Este método distingue-se dos outros métodos computacionais, como aqueles envolvendo as séries de altas temperaturas, por fornecer uma estrutura conceitual onde as noções de universalidade, escala etc. emergem naturalmente.

O comportamento crítico do modelo ANNNI a campo nulo, ou de modelos essencialmente equivalentes, foi estudado por muitos autores através do método de GR. A transição para a fase ferromagnética foi estudada por Wilson (1971) nos seus primeiros trabalhos a respeito da aplicação do método aos fenômenos críticos. A transição de fase no ponto de Lifshitz foi estudada por Hornreich et al. (1975). Droz e Coutinho Filho (1976) e Garel e Pfeuty (1976) estudaram a transição para a fase modulada. Nas partes iniciais deste capítulo tornaremos a obter os resultados principais desses trabalhos no caso específico do modelo ANNNI. A apresentação será sucinta, mas procuraremos discutir os aspectos essenciais do problema. Na última seção consideraremos o problema do comportamento crítico do modelo ANNNI na presença de um campo magnético.

3A. Modelo s^4 de Wilson

A idéia básica subjacente ao método de GR, ou seja, redução dos graus de liberdade e dilatação das escalas de comprimento, pode ser implementada de pelo menos dois modos diferentes. A técnica utilizada inicialmente por Wilson (1971) é conhecida como GR no espaço dos momentos, ou espaço recíproco, enquanto a técnica desenvolvida inicialmente por Niemeijer e van Leeuwen (1973) é conhecida como GR no espaço real, ou espaço direto. Estas técnicas apresentam vantagens e desvantagens, e são, num certo sentido, complementares. Para as nossas finalidades será mais conveniente a aplicação da técnica de GR no espaço recíproco.

O modelo ANNNI definido pela hamiltoniana (1.1) é um modelo de "spins" discretos. Para a aplicação da técnica de GR no espaço recíproco devemos transformar o modelo discreto em um modelo contínuo. Uma das maneiras de se conseguir isso foi sugerida por Hubbard (1972), e consiste no uso de uma identidade matemática que já havia sido empregada por Baker (1962) e por Siegart (1963) para representar o modelo de Ising como uma integral funcional sobre campos contínuos. Uma outra maneira de se fazer a passagem do discreto ao contínuo foi utilizada por Wilson (1971), e será empregada neste trabalho por ser mais simples, intuitiva, e ser suficiente para o que objetivamos.

A função de partição do modelo s^4 de Wilson é definida através da expressão

$$Z = \prod_{\vec{r}} \int_{-\infty}^{\infty} dS_{\vec{r}} P[S_{\vec{r}}] e^{-\beta \mathcal{H}[S_{\vec{r}}]}, \quad (3.1)$$

onde $\mathcal{H}[S_{\vec{r}}]$ é a hamiltoniana do modelo ANNNI com os "spins"

discretos $\sigma_{\vec{r}}$ substituídos por variáveis contínuas $S_{\vec{r}}$, e $P[S_{\vec{r}}]$ representa a probabilidade de distribuição "a priori" dos "spins". Wilson (1971) considerou $P[S_{\vec{r}}]$ da forma

$$P[S_{\vec{r}}] = \exp\left(-\sum_{\vec{r}} \omega(S_{\vec{r}})\right), \quad (3.2)$$

onde a função peso $\omega(S)$ é dada por

$$\omega(S) = \frac{1}{2} a S^2 + \frac{1}{4} b S^4, \quad b > 0. \quad (3.3)$$

Para $a < 0$ a função $\exp(-\omega(S))$ apresenta máximos em $S = \pm \sqrt{-a/b}$ e tende a zero quando $S \rightarrow \infty$.

Claramente, o modelo s^4 definido acima não é o mesmo que o modelo ANNNI, e não podemos esperar que haja concordância perfeita entre as funções termodinâmicas dos dois modelos. No entanto, um dos resultados básicos do método de GR é que quantidades tais como expoentes críticos independem em grande medida dos parâmetros do modelo. É isso que justifica o estudo do modelo s^4 em vez do modelo ANNNI original, pois, como ficará mais claro no decorrer deste capítulo, os aspectos essenciais para o comportamento crítico foram preservados nesta transformação.

Será conveniente reescrever a função de partição sob a forma compacta

$$Z = \int [dS_{\vec{r}}] e^{-\mathcal{H}[S_{\vec{r}}]}, \quad (3.4)$$

onde introduzimos a notação

$$\int [dS_{\vec{k}}] = \prod_{\vec{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dS_{\vec{k}} , \quad (3.5)$$

e definimos a hamiltoniana efetiva

$$\overline{\mathcal{H}}[S_{\vec{k}}] = \beta \mathcal{H}[S_{\vec{k}}] + \sum_{\vec{k}} \omega(S_{\vec{k}}) . \quad (3.6)$$

A passagem ao espaço recíproco será feita através da introdução da transformada de Fourier dos "spins":

$$S_{\vec{k}} = \frac{1}{N^d} \sum_{\vec{q}} S_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{k}} . \quad (3.7)$$

É fácil verificar a validade da relação

$$\sum_{\vec{k}} S_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{N^d} \sum_{\vec{q}} S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} , \quad (3.8)$$

que mostra a ortogonalidade da transformação

$$\{ S_{\vec{k}} \} \rightarrow \left\{ \frac{S_0}{\sqrt{N^d}} ; \sqrt{\frac{2}{N^d}} \operatorname{Re} S_{\vec{q}} , \sqrt{\frac{2}{N^d}} \operatorname{Im} S_{\vec{q}} , \vec{q} > \vec{0} \right\} . \quad (3.9)$$

Disso seguem-se as igualdades

$$\int [dS_{\vec{x}}] = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{\vec{x}} dS_{\vec{x}} = \int \prod_{\vec{q}} \frac{dS_{\vec{q}}}{\sqrt{N^d}} = \int [dS_{\vec{q}}] , \quad (3.10)$$

onde convencionamos que

$$dS_{\vec{q}} dS_{-\vec{q}} = 2 d(\text{Re } S_{\vec{q}}) d(\text{Im } S_{\vec{q}}) . \quad (3.11)$$

Portanto, podemos escrever a função de partição na forma alternativa

$$Z = \int [dS_{\vec{q}}] e^{-\mathcal{K}[S_{\vec{q}}]} , \quad (3.12)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{K}[S_{\vec{q}}] = & -\beta H S_0 + \frac{1}{2N^d} \sum_{\vec{q}_1, \vec{q}_2} [a - \beta J(\vec{q})] S_{\vec{q}_1} S_{\vec{q}_2} \Delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2) \\ & + \frac{b}{4N^{3d}} \sum_{\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4} S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} \Delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4) . \end{aligned} \quad (3.13)$$

$J(q)$ é a transformada de Fourier das constantes de intercâmbio,

$$J(\vec{q}) = 2J_0 \sum_{i=2}^d \cos q_i + 2J_1 \cos q_1 + 2J_2 \cos 2q_2 , \quad (3.14)$$

e $\Delta(\vec{Q})$ representa a conservação do vetor de onda a menos de um vetor da rede recíproca, ou seja,

$$\Delta(\vec{Q}) = \sum_{\vec{G}} \delta_{\vec{Q}, \vec{G}} \quad , \quad (3.15)$$

sendo δ o delta de Kronecker. Adiantamos que para o problema sob consideração os termos de "Umklapp" não serão importantes, de modo que podemos tomar $\Delta(\vec{Q}) = \delta_{\vec{Q}, 0}$.

Estamos ultimamente interessados em considerar o problema no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Nesse limite são válidas as seguintes igualdades:

$$\frac{1}{N^d} \sum_{\vec{q}} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q \equiv \int_{\vec{q}} \quad , \quad (3.16)$$

$$N^d \delta_{\vec{Q}, 0} = (2\pi)^d \delta^d(\vec{Q}) \equiv S(\vec{Q}) \quad , \quad (3.17)$$

onde $\delta^d(\vec{Q})$ é função delta de Dirac. Com as notações acima introduzidas a hamiltoniana efetiva adquirirá a seguinte feição:

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}[S_{\vec{q}}] = & -\beta H S_{\vec{0}} + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} [a - \beta J(\vec{q})] S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \\ & + \frac{b}{4} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_4} S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} S(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4) \quad . \end{aligned} \quad (3.18)$$

3B. Aproximação gaussiana

Antes de considerar o problema geral será conveniente examinar o que ocorre quando o parâmetro b na função peso é nulo. O parâmetro a será um número positivo arbitrário, que por simplicidade escolheremos igual à unidade. O modelo assim definido é o modelo gaussiano de Berlin e Kac (1952), com uma única e significativa diferença na possibilidade das interações poderem ser competitivas. Esse modelo apresenta limitações graves, como a de não estar definido abaixo da temperatura crítica, mas também revela vários aspectos característicos do modelo ANNNI.

O cálculo da função de partição reduz-se ao cálculo de integrais gaussianas:

$$\begin{aligned} Z &= \int [dS_{\vec{q}}] \exp \left\{ \beta H S_{\vec{0}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} [1 - \beta J(\vec{q})] S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \right\} = \\ &= (2\pi)^{\frac{N^d}{2}} \exp \left\{ \frac{\beta^2 H^2 N^d}{2[1 - \beta J(0)]} \right\} \prod_{\vec{q}} [1 - \beta J(\vec{q})]^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Portanto, a energia livre será

$$\begin{aligned} G &= -kT \ln Z = -\frac{1}{2} N^d kT \ln(2\pi) - \\ &- \frac{\beta H^2 N^d}{2[1 - \beta J(0)]} + \frac{1}{2} kT N^d \sum_{\vec{q}} \ln [1 - \beta J(\vec{q})]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

As expressões acima não são válidas abaixo da temperatura crítica T_c tal que

$$k T_c = \max_{\vec{q}} J(\vec{q}) = J(\vec{q}_c) \quad (3.22)$$

porque abaixo desta temperatura as integrais da função de partição tornam-se divergentes. O vetor de onda $\vec{q}_c$, que denominaremos vetor de onda crítico, é aquele que torna máxima a função $J(\vec{q})$. Facilmente verificamos que $\vec{q}_c = \vec{0}$ para $p \leq 0,25$, enquanto $\vec{q}_c = (q_c, 0, 0, \dots, 0)$, com $q_c = \cos^{-1}(1/4p)$, para $p > 0,25$.

Todas as funções termodinâmicas podem ser obtidas da expressão da energia livre. Por exemplo, a suscetibilidade e o calor específico a campo nulo são:

$$\chi = - \left(\frac{\partial^2 G}{\partial H^2} \right)_T = \frac{N^d}{k T - J(0)} \quad , \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} C_H = - T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_{H=0} = & \frac{1}{2} k N^d - k^2 T N^d \int_{\vec{q}} \frac{1}{k T - J(\vec{q})} \\ & + \frac{1}{2} k^3 T^2 N^d \int_{\vec{q}} \frac{1}{[k T - J(\vec{q})]^2} \quad . \end{aligned} \quad (3.24)$$

Consideremos inicialmente a expressão para a suscetibilidade. Para $p \leq 0,25$ a suscetibilidade diverge ao aproximarmos de T_c segundo a lei de Curie-Weiss, o que mostra que o expoente crítico γ é 1. Para $p > 0,25$ a suscetibilidade não diverge mesmo quando nos aproximamos de T_c , o que sugere que neste caso o ordenamento seria não uniforme.

Consideremos agora a expressão do calor específico.

Os argumentos das integrais são singulares em $T = T_c$ para $\vec{q} = \vec{q}_c$. O comportamento das integrais nas proximidades do ponto crítico é determinado, portanto, pelas contribuições de $\vec{q}$ próximos a $\vec{q}_c$. Para $p \leq 0,25$ temos a seguinte expansão da função $J(\vec{q})$ em torno de $\vec{q}_c = 0$:

$$J(\vec{q}) = J(\vec{0}) - j_{||} \sum_{i=2}^d q_i^2 - j_{\perp 2} q_1^2 - j_{\perp 4} q_1^4 + \dots, \quad (3.25)$$

onde

$$j_{||} = J_0, \quad j_{\perp 2} = J_1(1-4p) \quad \text{e} \quad j_{\perp 4} = J_1(32p-1)/24. \quad (3.26)$$

O coeficiente $j_{\perp 2}$ é positivo para $p < 0,25$. Nesse caso podemos fazer uma transformação de variáveis conveniente de modo que a última integral na expressão do calor específico, que é o termo mais singular, seja, em ordem dominante, proporcional a

$$\int_0^1 \frac{q^{d-1} dq}{(T-T_c + q^2)^2} = (T-T_c)^{-2+\frac{d}{2}} \int_0^{\frac{1}{\sqrt{T-T_c}}} \frac{x^{d-1} dx}{(1+x^2)^2} \sim (T-T_c)^{-2+\frac{d}{2}}, \quad (3.27)$$

o que mostra que o expoente do calor específico α é $2-d/2$. Para $p = 0,25$ o coeficiente do termo q_1^2 é nulo, e torna-se necessário considerar o termo quártico. Repetindo-se os cálculos na mesma linha do que foi feito acima obtemos $\alpha = 9/4-d/2$. Esse é um indício claro de que o comportamento crítico no PL deve diferir do comportamento crítico ferromagnético usual. Resta

considerar a situação em que $p > 0,25$. A expansão da função $J(\vec{q})$ em torno de $\pm \vec{q}_c = (q_c, 0, \dots, 0)$ toma a forma

$$J(\vec{q}) = J(\vec{q}_c) - j_{||} \sum_{i=2}^d q_i^2 - j_{\perp} (q_1 \pm q_c)^2 + \dots, \quad (3.28)$$

onde

$$j_{\perp} = J_1 \left(4p - \frac{1}{4p} \right). \quad (3.29)$$

Os argumentos das integrais que surgem na expressão do calor específico são agora divergentes em $T = T_c$ tanto para $\vec{q} = \vec{q}_c$ quanto para $\vec{q} = -\vec{q}_c$. Essas integrais irão divergir do mesmo modo que a integral (3.27), de sorte que o expoente crítico é também neste caso $\alpha = 2-d/2$.

Para finalizar faremos algumas observações sobre as funções de correlação. Define-se a função de correlação "spin-spin" segundo a expressão

$$\Gamma(\vec{\ell}, \vec{\ell}') = \Gamma(\vec{\ell} - \vec{\ell}') = \langle S_{\vec{\ell}} S_{\vec{\ell}'} \rangle - \langle S_{\vec{\ell}} \rangle \langle S_{\vec{\ell}'} \rangle, \quad (3.30)$$

onde foi admitida a invariância translacional do sistema. Acima da temperatura crítica e a campo nulo, situação em que estamos interessados, os valores médios dos "spins" são nulos, de modo que temos simplesmente

$$\Gamma(\vec{\ell}) = \langle S_{\vec{\ell}} S_{\vec{\ell}} \rangle. \quad (3.31)$$

De relevância mais direta às experiências de espalhamento, pois fornece a variação da intensidade de espalhamento em função do vetor de onda $\vec{q}$, é a transformada de Fourier das funções de correlação

$$\Gamma(\vec{q}) = \sum_{\vec{x}} \Gamma(\vec{x}) e^{i \vec{q} \cdot \vec{x}}, \quad (3.32)$$

muitas vezes conhecida como fator de estrutura, amplitude de espalhamento, ou simplesmente como função de correlação. Pode-se verificar facilmente que

$$\langle S_{\vec{q}} S_{\vec{q}'} \rangle = \Gamma(\vec{q}) N^d \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} = \Gamma(\vec{q}) \delta(\vec{q} + \vec{q}'). \quad (3.33)$$

Para o cálculo de $\langle S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \rangle$ convém introduzir um campo magnético harmônico $H_{-\vec{q}}$ acoplado ao componente de Fourier $S_{\vec{q}}$. A função geratriz

$$Z[H_{\vec{q}}] = \int [d S_{\vec{q}}] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} [1 - \beta J(\vec{q})] S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} H_{-\vec{q}} S_{\vec{q}} \right\} \quad (3.34)$$

pode ser calculada através de uma translação das variáveis de "spin"

$$S_{\vec{q}} \rightarrow S_{\vec{q}} + \frac{H_{\vec{q}}}{1 - \beta J(\vec{q})} \quad (3.35)$$

que fornece

$$Z[H_{\vec{q}}] = Z[0] \exp \left\{ \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} \frac{H_{\vec{q}} H_{-\vec{q}}}{1 - \beta J(\vec{q})} \right\}, \quad (3.36)$$

onde $Z[0]$ é evidentemente a função de partição do modelo gaussiano a campo nulo. O valor esperado $\langle S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \rangle$ pode então ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \langle S_{\vec{q}} S_{\vec{q}'} \rangle &= Z^{-1} \int [dS_{\vec{q}}] S_{\vec{q}} S_{\vec{q}'} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} [1 - \beta J(\vec{q})] S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \right\} \\ &= \left\{ \frac{\delta}{\delta H_{-\vec{q}'}} \frac{\delta}{\delta H_{\vec{q}}} \frac{Z[H_{\vec{q}}]}{Z[0]} \right\}_{H=0}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde introduzimos a notação da derivada funcional

$$\frac{\delta}{\delta H_{-\vec{q}'}} \equiv N^d \frac{\partial}{\partial H_{-\vec{q}'}} \quad (3.38)$$

Efetuando-se as derivações obtemos

$$\langle S_{\vec{q}} S_{\vec{q}'} \rangle = \frac{1}{1 - \beta J(\vec{q})} \delta(\vec{q} + \vec{q}'), \quad (3.39)$$

de modo que o fator de estrutura é

$$\Gamma(\vec{q}) = \frac{1}{1 - \beta J(\vec{q})} \quad (3.40)$$

Analiseemos a amplitude de espalhamento crítico, ou seja, a transformada de Fourier das funções de correlação no ponto crítico. A expressão (3.40) mostra que para $T = T_c$ $\Gamma(\vec{q})$ diverge conforme $\vec{q}$ tende a $\vec{q}_c$. Tomemos inicialmente o caso $p \leq 0,25$. Para $T = T_c$ e $\vec{q} \simeq \vec{0}$ temos

$$\Gamma(\vec{q}) \simeq \frac{k T_c}{j_{||} \sum_{i=2}^d q_i^2 + j_{\perp 2} q_1^2 + j_{\perp 4} q_1^4} \quad (3.41)$$

Para $p < 0,25$ o coeficiente $j_{\perp 2}$ é positivo. Portanto, qualquer que seja a direção do vetor de onda $\vec{q} = q \vec{e}_i$ ($i = 1, \dots, d$), a amplitude do espalhamento crítico comportar-se-á da forma

$$\Gamma(\vec{q} = q \vec{e}_i) \sim \frac{1}{q^2} \quad (T = T_c, q \rightarrow 0, i = 1, \dots, d) \quad (3.42)$$

No entanto, para $p = 0,25$ o valor do coeficiente $j_{\perp 2}$ é nulo, de modo que o comportamento será diferente na direção da anisotropia axial:

$$\Gamma(\vec{q} = q \vec{e}_1) \sim \frac{1}{q^4} \quad (T = T_c, q \rightarrow 0, p = 0,25) \quad (3.43)$$

Consideremos agora o caso $p > 0,25$. Para $T = T_c$ e $\vec{q} \simeq \pm \vec{q}_c$

temos

$$I(\vec{q}) \simeq \frac{K T_c}{j_{\parallel} \sum_{i=2}^a q_i^2 + j_{\perp} (q_{\parallel} \mp q_c)} \quad (3.44)$$

Segue-se que a amplitude de espalhamento crítico será outra vez diferente na direção axial, porquanto a divergência ocorrerá para vetor de onda diferente de zero:

$$I(\vec{q} = q \vec{e}_1) \sim \frac{1}{(q \mp q_c)^2} \quad (T = T_c, q \rightarrow \pm q_c) \quad (3.45)$$

Esses resultados merecem alguns comentários. O comportamento peculiar da amplitude de espalhamento crítico em $p = 0,25$ e $\vec{q}$ na direção axial reflete a natureza excepcional do PL, que veremos possuir um conjunto não usual de expoentes críticos. Por outro lado, a divergência da amplitude de espalhamento crítico para vetores de onda não nulos na direção axial quando $p > 0,25$ é um reflexo natural da tendência ao ordenamento modulado existente nessa região.

3C. Comportamento crítico ordinário

Após termos examinado o modelo gaussiano, retornaremos ao modelo s^4 onde o coeficiente do termo quártico é diferente de zero. Este modelo, contrariamente ao modelo gaussiano, não é solúvel exatamente. Um tratamento perturbativo "ingênuo" do termo quártico apresenta dificuldades perto da criticalidade onde o coeficiente do termo quadrático tende a zero. O método de Grupo de Renormalização supera, em princípio, essas dificuldades.

A transformação de GR é uma transformação no espaço das hamiltonianas efetivas. Ela se traduz, por exemplo, numa equação diferencial da forma

$$\frac{d}{d\ell} \overline{\mathcal{H}} = \mathbb{G}(\overline{\mathcal{H}}) \quad . \quad (3.46)$$

A transformação é construída de modo a reduzir os graus de liberdade do sistema, deixando invariante a função de partição, e dilatar as escalas de comprimento. Estas condições implicam as formas de escala da energia livre

$$\mathbb{G}(\overline{\mathcal{H}}_0) = e^{-d\ell} \mathbb{G}(\overline{\mathcal{H}}_\ell) , \quad (3.47)$$

e do comprimento de correlação

$$\xi(\overline{\mathcal{H}}_\ell) = e^{-\ell} \xi(\overline{\mathcal{H}}_0) . \quad (3.48)$$

onde $\overline{\mathcal{H}}_0$ é a hamiltoniana efetiva do sistema original. A transformação de GR construída de uma maneira conveniente apresenta pontos fixos para os quais a hamiltoniana original $\overline{\mathcal{H}}_0$ poderá convergir quando $\ell \rightarrow \infty$. Seja $\overline{\mathcal{H}}^*$ um destes pontos fixos tal que $\xi(\overline{\mathcal{H}}^*) = \infty$. Da equação (3.48) resulta que somente uma hamiltoniana $\overline{\mathcal{H}}_{0,c}$ tal que $\xi(\overline{\mathcal{H}}_{0,c}) = \infty$ poderá convergir para este ponto fixo. Variando-se os parâmetros da hamiltoniana $\overline{\mathcal{H}}_0$ poderemos eventualmente atingir a hamiltoniana crítica $\overline{\mathcal{H}}_{0,c}$. Para $\overline{\mathcal{H}}_0$ próxima a $\overline{\mathcal{H}}_{0,c}$ esperamos que inicialmente $\overline{\mathcal{H}}_\ell$ se aproxime de $\overline{\mathcal{H}}^*$ para depois afastar-se e convergir para um outro ponto fixo. A linearização da transformação perto do ponto fixo $\overline{\mathcal{H}}^*$ fornece as relações de escala e os expoentes críticos. Os diferentes pontos fixos correspondem aos diferentes comportamentos críticos, e, portanto, o método de GR fornece ainda um alicerce matemático para o fenômeno de "crossover" e a noção de universalidade.

Nesta seção descreveremos uma técnica (aproximada) de se implementar a transformação de GR que tem sido empregada frutiferamente em diversos problemas de fenômenos críticos. Trata-se da transformação de GR construída a partir da remoção precisa dos momentos ("sharp momentum cut-off"). Nossa apresentação será breve e se aterá mais aos aspectos técnicos. Maiores detalhes desta técnica ou do método de GR de uma forma geral podem ser encontrados nos livros de Toulouse e Pfeuty (1975), Ma (1976) e Amit (1978), ou em artigos de revisão de Wilson e Kogut (1974), Fisher (1974) e de vários autores no sexto volume da coleção editada por Domb e Green (1976).

Limitar-nos-emos, nesta seção, à situação em que $p < 0,25$ e $H = 0$, quando esperamos um comportamento crítico usual. O exemplo do modelo gaussiano torna evidente que o comportamento crítico é determinado pela contribuição dos

vetores de onda próximos de $\vec{q}_c = \vec{0}$. Inserindo-se a expansão (3.25) para $J(\vec{q})$ na expressão da hamiltoniana efetiva (3.18) obtemos

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}[S_{\vec{q}}] = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} \beta [akT - J(\vec{0}) + j_{\parallel} \sum_{i=2}^d q_i^2 + j_{\perp 2} q_1^2 + O(q_i^4)] S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \\ & + \frac{b}{4} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_4} S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4) , \end{aligned} \quad (3.49)$$

onde $j_{\parallel}$ e $j_{\perp 2}$ são positivos. Executaremos agora três transformações que se destinam somente a simplificar as expressões algébricas envolvidas nos cálculos. Em primeiro lugar faremos uma mudança de escala de comprimento na direção axial

$$q_1 \rightarrow \sqrt{\frac{j_{\parallel}}{j_{\perp 2}}} q_1 , \quad (3.50)$$

de modo a tornar isotrópico o termo quadrático

$$j_{\parallel} \sum_{i=2}^d q_i^2 + j_{\perp 2} q_1^2 \rightarrow j_{\parallel} \sum_{i=1}^d q_i^2 = j_{\parallel} q^2 . \quad (3.51)$$

Faremos também uma mudança na escala das variáveis de "spin"

$$S_{\vec{q}} \rightarrow \sqrt{kT} \left(\frac{j_{\perp 2}}{j_{\parallel}^3} \right)^{\frac{1}{4}} S_{\vec{q}} , \quad (3.52)$$

o que torna o coeficiente do termo quadrático unitário. Finalmente, restringiremos a integração a uma zona de Brillouin de raio unitário. Isso não deverá influir no comportamento crítico que depende dos valores de $\vec{q}$ próximos à origem. Com essas modificações podemos escrever a hamiltoniana efetiva na forma

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}[S_{\vec{q}}] = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} [r + q^2 + O(q^4)] S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} \\ & + \frac{u}{4!} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_4} S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4), \end{aligned} \quad (3.53)$$

onde

$$r = \frac{a k T - J(\vec{0})}{j_{\parallel}} \quad \text{e} \quad u = \frac{b}{4} \frac{(k T)^2}{\sqrt{j_{\parallel}^3 j_{\perp 2}}}. \quad (3.54)$$

A função de partição será, a menos de um fator regular,

$$Z = \int [dS_{\vec{q}}] e^{-\bar{\mathcal{H}}[S_{\vec{q}}]}, \quad (3.55)$$

onde as variáveis $S_{\vec{q}}$ estão definidas numa esfera d-dimensional de raio unitário.

A transformação de GR será construída integrando-se as variáveis de "spin" $S_{\vec{q}}$ com os vetores de onda na camada externa da zona de Brillouin $b^{-1} < q < 1$ ($b > 1$). Esta remoção dos momentos externos corresponde à diminuição dos graus de liberdade de um fator b^{-d} . Podemos escrever

$$Z = \int^< [dS_{\vec{q}}] e^{-\overline{\mathcal{H}}_0^<} \int^> [dS_{\vec{q}}] e^{-\overline{\mathcal{H}}_0^> - \overline{\mathcal{H}}_P} , \quad (3.56)$$

onde

$$\overline{\mathcal{H}}_0^> = \frac{1}{2} \int_{\vec{q}}^> (r + q^2) S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} , \quad (3.57)$$

$$\overline{\mathcal{H}}_P = \frac{u}{4!} \int_{\vec{q}_1, \vec{q}_4} S_{\vec{q}_1} \cdots S_{\vec{q}_4} \delta(\vec{q}_1 + \cdots + \vec{q}_4) , \quad (3.58)$$

e onde os sinais $>$ e $<$ indicam, respectivamente, os vetores de onda nas regiões externa e interna da zona de Brillouin. Obviamente o cálculo da segunda das integrais na expressão (3.56) apresenta grau de dificuldade comparável ao cálculo da própria função de partição. Além disso, um cálculo perturbativo, considerando-se $\overline{\mathcal{H}}_P$ como uma perturbação, não seria confiável desde que a magnitude de u pode ser grande nos estágios iniciais da transformação de GR. Não obstante, se a hamiltoniana original for crítica ou quase crítica, a transformação de GR deve conduzir a hamiltoniana na proximidade da hamiltoniana do ponto fixo. Wilson e Fisher (1972) observaram que para dimensionalidades próximas de 4, $d = 4 - \epsilon$, a ordem de grandeza da constante de acoplamento u no ponto fixo era comparável a ϵ , o que permitiria um cálculo perturbativo sensato. Convindo em que assim seja, estudaremos o fenômeno crítico na dimensão $d = 4 - \epsilon$, ou, como no sugestivo título do artigo há pouco mencionado, em dimensão $d = 3,99$. Não precisamos acrescentar que estamos ultimamente interessados com a realidade tridimensional, mas

muitas das características qualitativas relevantes estão presentes já na dimensão $d = 4 - \epsilon$. De mais a mais, as grandezas de interesse como os expoentes críticos podem ser obtidas como séries de potências em ϵ , e, se desconsiderarmos possíveis problemas de convergência das séries, podemos estimar estas grandezas para sistemas tridimensionais tomando-se $\epsilon = 1$.

Posto que a hamiltoniana original tenha a forma simples (3.53), a iteração da transformação de GR deverá gerar constantes de acoplamento mais complexas. Para o caso em estudo será suficiente considerar hamiltonianas da forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & N^d u_0 + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2(\vec{q}) S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} + \\ & + \frac{1}{4!} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_4} u_4(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4) S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4) + \\ & + \frac{1}{6!} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_6} u_6(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_6) S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_6} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_6) + \dots, \quad (3.59) \end{aligned}$$

onde sempre podemos supor as constantes de acoplamento u_n como sendo simétricas nos seus argumentos. Admitindo-se que estamos próximos do ponto fixo, e que, portanto, u_4, u_6 etc. são pequenos, faremos a segunda das integrais na expressão (3.56) perturbativamente, onde agora

$$\mathcal{H}_0^{\mathcal{Z}} = \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2(\vec{q}) S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}}, \quad (3.60)$$

$$\mathcal{H}_P = \frac{1}{4!} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_4} u_4(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4) S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4) +$$

$$+ \frac{1}{6!} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_6} u_6(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_6) S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_6} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_6) + \dots \quad (3.61)$$

Notemos que podemos escrever

$$\begin{aligned} \int^> [dS_{\vec{q}}] e^{-\vec{\mathcal{H}}_0 - \vec{\mathcal{H}}_p} &= \left(\int^> [dS_{\vec{q}}] e^{-\vec{\mathcal{H}}_0} \right) \langle e^{-\vec{\mathcal{H}}_p} \rangle_0 = \\ &= \left(\int^> [dS_{\vec{q}}] e^{-\vec{\mathcal{H}}_0} \right) \langle 1 - \vec{\mathcal{H}}_p + \frac{1}{2} \vec{\mathcal{H}}_p^2 - \dots \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.62)$$

onde $\langle \dots \rangle_0$ representa o valor esperado gaussiano. Portanto, o problema básico consiste no cálculo de valores esperados gaussianos da forma $\langle S_{\vec{q}_1} S_{\vec{q}_2} \dots S_{\vec{q}_k} \rangle_0$, onde $|\vec{q}_i| > b^{-1}$. Esse problema pode ser resolvido pela introdução da função geratriz

$$Z^>[H_{\vec{q}}] = \int^> [dS_{\vec{q}}] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2(\vec{q}) S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} + \int_{\vec{q}} H_{-\vec{q}} S_{\vec{q}} \right\} \quad (3.63)$$

Fazendo-se a substituição $S_{\vec{q}} \rightarrow S_{\vec{q}} + H_{\vec{q}}/u_2(\vec{q})$ encontramos

$$Z^>[H_{\vec{q}}] = Z^>[0] \exp \left[\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} \frac{H_{\vec{q}} H_{-\vec{q}}}{u_2(\vec{q})} \right] \quad (3.64)$$

Da definição do valor esperado gaussiano e do resultado acima concluímos que

$$\begin{aligned}
\langle S_{\vec{q}_1} \cdots S_{\vec{q}_k} \rangle_0 &= \left\{ \frac{\delta}{\delta H_{-\vec{q}_1}} \cdots \frac{\delta}{\delta H_{-\vec{q}_k}} \frac{Z^>[H_{\vec{q}}]}{Z^>[0]} \right\}_{H=0} = \\
&= \left\{ \frac{\delta}{\delta H_{-\vec{q}_1}} \cdots \frac{\delta}{\delta H_{-\vec{q}_k}} \exp \left[\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} \frac{H_{\vec{q}} H_{-\vec{q}}}{u_2(\vec{q})} \right] \right\}_{H=0}. \quad (3.65)
\end{aligned}$$

Então,

$$\langle S_{\vec{q}} \rangle_0 = 0, \quad (3.66)$$

$$\langle S_{\vec{q}_1} S_{\vec{q}_2} \rangle_0 = \frac{1}{u_2(\vec{q}_1)} \delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2), \quad (3.67)$$

Em geral, $\langle S_{\vec{q}_1} S_{\vec{q}_2} \cdots S_{\vec{q}_k} \rangle_0$ será nulo para k ímpar, e, para k par, será a soma de todas as combinações possíveis do produto dos valores esperados de pares de "spins" (contrações).

Para a contabilidade dos múltiplos termos que surgem na expansão indicada na eq.(3.62) costuma-se representar os termos graficamente. Assim os termos de $\mathcal{H}_p$ correspondentes a u_4, u_6 etc. serão representados por figuras do tipo

As arestas representam os "spins", e a contração de dois "spins" pertencentes à zona externa será indicada por uma linha ligando estas arestas. Aos "spins" pertencentes à zona interna corresponderão arestas livres. É importante observar que não é preciso calcular os gráficos desconexos devido à existência da igualdade

$$\langle e^{-\bar{\mathcal{H}}_p} \rangle_0 = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} G_n \right\} , \quad (3.68)$$

onde G_n , o n -ésimo cumulante, é a soma dos gráficos conexos de n vértices (Teorema de "linked cluster"). É simples verificar explicitamente a igualdade acima em ordens baixas expandindo-se a função exponencial nos dois lados da equação. Por conseguinte, a função de partição pode ser escrita na forma

$$Z = \int [dS_{\vec{q}}] \exp \left\{ -\bar{\mathcal{H}}_0 + \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \ln \frac{2\pi}{u_2(\vec{q})} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} G_n \right\} . \quad (3.69)$$

O segundo termo no argumento da exponencial, assim como os gráficos sem arestas livres, contribuem para o termo independente de "spin" da hamiltoniana transformada. Para os nossos intuitos esse termo não será relevante e não será considerado.

Faremos agora a hipótese de trabalho, a ser verificada "a posteriori", de que $u_2, u_4 = O(\epsilon)$ e $u_6, u_8, \dots = O(\epsilon^2)$. Na figura 12 estão mostrados os gráficos relevantes para o estabelecimento das relações de recorrência em primeira ordem em ϵ .

FIGURA 12 - Gráficos relevantes para estabelecimento das relações de recorrência em ordem ϵ .

Fazendo-se ainda a dilatação da escala de comprimento para que a zona de Brillouin tenha novamente raio unitário,

$$\vec{q}' = b \vec{q} , \quad (3.70)$$

e mudando-se também a escala das variáveis de "spin"

$$S_{\vec{q}} = \gamma S'_{\vec{q}'} , \quad (3.71)$$

a função de partição será dada por

$$Z = \int [d S'_{\vec{q}'}] e^{-\mathcal{H}'[S'_{\vec{q}'}]} , \quad (3.72)$$

onde $\mathcal{H}'$ é a hamiltoniana transformada

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'[S'_{\vec{q}'}] = & N'^d u'_0 + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}'} u'_2(\vec{q}') S'_{\vec{q}'} S'_{-\vec{q}'} + \\ & + \frac{1}{4!} \int_{\vec{q}'_1 \dots \vec{q}'_4} u'_4(\vec{q}'_1, \dots, \vec{q}'_4) S'_{\vec{q}'_1} \dots S'_{\vec{q}'_4} \delta(\vec{q}'_1 + \dots + \vec{q}'_4) + \dots \end{aligned} \quad (3.73)$$

As novas constantes de acoplamento relacionam-se com as da hamiltoniana inicial através das equações

$$u'_2(\vec{q}') = \gamma^2 b^{-d} \left\{ u_2(\vec{q}) + \frac{1}{2} \int_{\vec{p}} \frac{u_4(\vec{q}, -\vec{q}, \vec{p}, -\vec{p})}{u_2(\vec{p})} + O(\epsilon^2) \right\} , \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned}
 u_4'(\vec{q}_1', \dots, \vec{q}_4') = 5^4 b^{-3d} \left\{ u_4(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4) + \frac{1}{2} \int_{\vec{p}}^> \frac{u_6(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4, \vec{p}, -\vec{p})}{u_2(\vec{p})} \right. \\
 - \frac{1}{4} \int_{\vec{p}\vec{p}'}^> \frac{u_4(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{p}, \vec{p}') u_4(\vec{q}_3, \vec{q}_4, -\vec{p}, -\vec{p}')}{u_2(\vec{p}) u_2(\vec{p}')} \delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{p} + \vec{p}') \\
 \left. - (5 \text{ perm.}) + O(\epsilon^3) \right\}, \quad (3.75)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 u_6'(\vec{q}_1', \dots, \vec{q}_6') = 5^6 b^{-5d} \left\{ u_6(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_6) - \right. \\
 - \frac{1}{2} \int_{\vec{p}}^> \frac{u_4(\vec{p}, \vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{q}_3) u_4(-\vec{p}, \vec{q}_4, \vec{q}_5, \vec{q}_6)}{u_2(\vec{p})} \delta(\vec{p} + \vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3) - \\
 \left. - (19 \text{ perm.}) + O(\epsilon^3) \right\}, \quad \text{etc.} \quad (3.76)
 \end{aligned}$$

Escrevendo-se

$$u_2(\vec{q}) = r + q^2 + w_1 q^4 + w_2 q^6 + \dots, \quad (3.77)$$

$$u_4(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4) = u + v(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4), \quad (3.78)$$

onde $v(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4)$ é a parte dependente dos vetores de onda do acoplamento $u_4(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4)$, e fazendo-se a hipótese de que

$$r, u = O(\epsilon) \quad \text{e} \quad w_1, w_2, \dots, v(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4) = O(\epsilon^2), \quad (3.79)$$

a equação (3.74) toma a forma

$$r' + q^2 + w_1' q^4 + w_2' q^6 + \dots = \xi^2 b^{-d} [r + b^{-2} q^2 + w_1 b^{-4} q^4 + w_2 b^{-6} q^6 + \dots + \frac{1}{2} \int_{\vec{p}}^> \frac{u}{r + p^2} + O(\epsilon^2)] . \quad (3.80)$$

O fator ξ será escolhido de tal modo a manter o coeficiente do termo q^2 igual à unidade. Logo,

$$\xi^2 b^{-d-2} = 1 + O(\epsilon^2) \quad \text{ou} \quad \xi = b^{1 + \frac{d}{2} + O(\epsilon^2)} . \quad (3.81)$$

Resultam assim as relações

$$r' = b^2 [r + \frac{1}{2} u \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{r + p^2} + O(\epsilon^2)] , \quad (3.82)$$

$$w_1' = b^{-2} w_1 + O(\epsilon^2) , \quad (3.83)$$

$$w_2' = b^{-4} w_2 + O(\epsilon^2) , \quad \text{etc.} \quad (3.84)$$

Contrariamente a r que pode divergir por iteração da transformação, vemos que $w_1, w_2, \text{etc.}$ convergem rapidamente aos pontos fixos $w_1^*, w_2^*, \dots = O(\epsilon^2)$ conforme iteramos.

Dizemos então que w_1, w_2 , etc. são irrelevantes. Da mesma forma podemos mostrar que o termo dependente do vetor de onda em $u_4, v(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4)$, é irrelevante, e que os acoplamentos u_6, u_8 , etc. são também irrelevantes. Da equação (3.75) obtemos para o termo u a relação de recorrência

$$u' = b^\epsilon \left[u - \frac{3}{2} u^2 \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{(r+p^2)^2} + \frac{1}{2} \int_{\vec{p}}^> \frac{u_6(0, \dots, 0, \vec{p}, -\vec{p})}{r+p^2} + O(\epsilon^3) \right]. \quad (3.85)$$

Observamos que o acoplamento irrelevante u_6 poderá contribuir para a relação de recorrência de u em ordem ϵ^2 se $u_6^*(0, 0, 0, 0, \vec{q}, -\vec{q})$, onde $b^{-1} < |\vec{q}| < 1$, for da ordem de ϵ^2 . Agora, esse ponto fixo é determinado pela equação (3.76) considerado no ponto fixo, ou seja,

$$u_6^*(0, \dots, \vec{q}, -\vec{q}) = b^{-2} \left\{ u_6^*(0, \dots, 0, \frac{\vec{q}}{b}, -\frac{\vec{q}}{b}) - 6 u^{*2} \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{r^*+p^2} \delta(\vec{p} + \frac{\vec{q}}{b}) + O(\epsilon^3) \right\}. \quad (3.86)$$

Ora, desde que $\vec{q}$ deve estar contido na zona de Brillouin esférica de raio unitário, a integral acima será diferente de zero somente se $|\vec{q}| = 1$. Segue-se que $u_6^*(0, 0, 0, 0, \vec{q}, -\vec{q})$ será da ordem de ϵ^2 somente se $|\vec{q}| = 1$. Isso corresponde a uma superfície na integral de volume da equação (3.85), que é, portanto, nula em ordem ϵ^2 . Consequentemente, as relações de recorrência corretas em ordem ϵ são

$$r' = b^2 \left[r + \frac{1}{2} u \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{r+p^2} + O(\epsilon^2) \right], \quad (3.89)$$

$$u' = b^\epsilon \left[u - \frac{3}{2} u^2 \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{(r+p^2)^2} + O(\epsilon^3) \right] . \quad (3.90)$$

Estas são relações de recorrência finitas. É vantajoso considerar a transformação infinitesimal $b \rightarrow 1$, que corresponde à eliminação de uma camada infinitesimal da zona de Brillouin. Escreveremos

$$b = e^\delta , \quad (3.91)$$

com $\delta \rightarrow 0$. As integrais que comparecem nas equações (3.89) e (3.90) ficam, neste limite,

$$\int_{\vec{p}}^> = \frac{1}{(2\pi)^d} \int^> d^d p = \frac{d\delta}{(2\pi)^d} \int d\Omega , \quad (3.92)$$

onde $\int d\Omega$ é uma integral de superfície sobre uma esfera d -dimensional de raio unitário. Portanto, as equações diferenciais da transformação de GR em ordem ϵ são:

$$\frac{r'-r}{\delta} = \frac{dr}{d\ell} = 2r + \frac{A u}{1+r} + O(\epsilon^2) , \quad (3.93)$$

$$\frac{u'-u}{\delta} = \frac{du}{d\ell} = \epsilon u - \frac{B u^2}{(1+r)^2} + O(\epsilon^3) , \quad (3.94)$$

onde

$$A = \frac{2\Omega_4}{(2\pi)^4} \quad , \quad B = 3A \quad , \quad (3.95)$$

sendo Ω_4 a superfície de uma esfera quadridimensional de raio unitário.

São dois os pontos fixos da transformação. Temos o ponto fixo trivial

$$r^* = u^* = 0 \quad , \quad (3.96)$$

e o não trivial

$$r^* = -\frac{1}{3}\epsilon + O(\epsilon^2) \quad ,$$

$$u^* = \frac{1}{B}\epsilon + O(\epsilon^2) \quad . \quad (3.97)$$

As linhas de fluxo da transformação para os casos $d < 4$ e $d > 4$ estão esquematizadas na figura abaixo.

FIGURA 13 - Representação esquemática das linhas de fluxo da transformação de GR, eqs. (3.93) e (3.94). *: ponto fixo trivial e ★: ponto fixo não trivial.

Observamos que para $d < 4$, que é o caso de maior relevância física, o ponto fixo trivial é inatingível, ao passo que existe uma linha de fluxo que conduz ao ponto fixo não trivial. Para $d > 4$ é o inverso que ocorre. O ponto fixo trivial é também chamado gaussiano por fornecer os expoentes críticos do modelo gaussiano, enquanto o ponto fixo não trivial é também chamado Ising por se acreditar que os expoentes críticos correspondem àqueles do modelo de Ising. A estabilidade relativa destes pontos fixos como função da dimensionalidade sugere que para $d > 4$ os expoentes críticos do modelo de Ising coincidem com aqueles do modelo gaussiano, isto é, são clássicos.

Os expoentes críticos são determinados pela linearização das equações diferenciais de transformação (3.93) e (3.94) nas proximidades do ponto fixo. Assim, fazendo-se uma aproximação linear na vizinhança do ponto fixo não trivial obtemos

$$\frac{d}{d\ell} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \frac{1}{3}\epsilon & A(1 - \frac{1}{3}\epsilon) \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta u \end{pmatrix} . \quad (3.98)$$

Os autovalores da transformação são

$$\lambda_1 = 2 - \frac{1}{3}\epsilon + O(\epsilon^2) , \quad \lambda_2 = -\epsilon + O(\epsilon^2) . \quad (3.99)$$

Associados a estes autovalores existem os eixos próprios que definem as variáveis lineares de escala, μ_1 e μ_2 , satisfazendo as equações diferenciais

$$\frac{d\mu_1}{d\ell} = \lambda_1 \mu_1, \quad \frac{d\mu_2}{d\ell} = \lambda_2 \mu_2, \quad (3.100)$$

que apresentam as soluções

$$\mu_1(\ell) = e^{\lambda_1 \ell} \mu_1(0), \quad \mu_2(\ell) = e^{\lambda_2 \ell} \mu_2(0). \quad (3.101)$$

Para relacionar os autovalores determinados acima com o expoente crítico do calor específico, α , devemos lembrar que a função de partição é preservada na transformação mas que o número de graus de liberdade é diminuída de um fator b^{-d} .

Portanto, a energia livre por "spin" deve satisfazer a relação

$$G(\bar{\kappa}) = b^{-d} G(\bar{\kappa}'), \quad (3.102)$$

ou, escrevendo-se $b = e^\ell$,

$$G(\bar{\kappa}) = e^{-d\ell} G(\bar{\kappa}_\ell). \quad (3.103)$$

$G(\bar{\kappa})$ é a energia livre por "spin" do sistema original. Se $\bar{\kappa}_\ell$ se encontra na proximidade do ponto fixo é possível parametrizá-la através das variáveis lineares de escala $\mu_1(\ell)$ e $\mu_2(\ell)$.

Assim,

$$G = e^{-d\ell} f(e^{\lambda_1 \ell} \mu_1(0), e^{\lambda_2 \ell} \mu_2(0)). \quad (3.104)$$

Notemos que $\mu_1(\ell)$ diverge conforme $\ell \rightarrow \infty$, enquanto $\mu_2(\ell)$ converge a zero. Dizemos, então, que μ_1 é relevante enquanto

μ_2 é irrelevante. Devido a essa característica de μ_1 , $\mu_1(0)$ deve-se anular quando a hamiltoniana inicial torna-se crítica, pois caso contrário não seria possível atingir-se o ponto fixo. Portanto, em primeira aproximação $\mu_1(0)$ deve ser proporcional a $t = (T - T_c)/T_c$, ou, em unidades convenientes, $\mu_1(0) = t$. Escolhendo-se ℓ tal que $e^{\lambda_1 \ell} t = 1$, resulta

$$G = t^{-\frac{d}{\lambda_1}} f(1, \mu_2(0) t^{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}}) \quad (3.105)$$

Como $\lambda_2/\lambda_1 = -\epsilon/2 + O(\epsilon^2)$, o segundo argumento na função acima tende a zero conforme a variável t tende a zero. Obviamente isso é uma consequência da irrelevância de μ_2 . Assim $G \sim t^{-\frac{d}{\lambda_1}}$, e decorre a relação

$$2 - \alpha = \frac{d}{\lambda_1} \quad \text{ou} \quad \alpha = 2 - \frac{d}{\lambda_1} = \frac{1}{6}\epsilon + O(\epsilon^2). \quad (3.106)$$

Outro expoente que podemos determinar sem dificuldades é o expoente ν , associado à divergência do comprimento de correlação. Desde que se faz uma mudança na escala de comprimento de um fator b , o comprimento de correlação se transforma de acordo com a relação

$$\xi(\bar{\kappa}) = e^{\ell} \xi(\bar{\kappa}_\ell). \quad (3.107)$$

Repetindo-se os raciocínios anteriores obtemos

$$\xi = t^{-\frac{1}{\lambda_1}} g(1, \mu_2(0) t^{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}}), \quad (3.108)$$

de sorte que $\xi \sim t^{-\frac{1}{\lambda_1}}$ e, portanto,

$$\nu = \frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{12} \epsilon + O(\epsilon^2). \quad (3.109)$$

As equações (3.106) e (3.109) mostram que existe a relação $2-\alpha = d\nu$, conhecida como relação de hiper-escala, e que envolve a dimensionalidade do sistema.

Por último faremos algumas considerações sobre o expoente η . É simples verificar que o valor esperado do produto de um par de "spins" se transforma de acordo com a equação

$$\langle S_{\vec{q}_1} S_{\vec{q}_2} \rangle_{\vec{\kappa}} = \xi^2 \langle S_{b\vec{q}_1} S_{b\vec{q}_2} \rangle_{\vec{\kappa}'}. \quad (3.110)$$

Portanto, a amplitude de espalhamento satisfaz a relação

$$\Gamma(\vec{q}; \vec{\kappa}) = \xi^2 b^{-d} \Gamma(b\vec{q}; \vec{\kappa}'). \quad (3.112)$$

Observamos que o fator $\xi = \xi(\vec{\kappa})$ é dependente dos parâmetros da hamiltoniana em cada estágio da transformação. A equação (3.112) implica a seguinte forma de escala perto do ponto crítico

$$\Gamma(\vec{q}) \simeq e^{(2-\eta)\ell} h(e^\ell \vec{q}, e^{\lambda_1 \ell} \mu_1(0), e^{\lambda_2 \ell} \mu_2(0)), \quad (3.113)$$

a qual é válida para $|\vec{q}| \ll 1$. O valor de η , que logo veremos ser o familiar expoente crítico, está relacionado com o valor de ζ no ponto fixo através da equação

$$\eta = 2 + d - 2 \frac{d}{d\ell} \ln \zeta^* \quad (3.114)$$

Para $T = T_c$ obtemos, tomando-se um valor de ℓ tal que $e^\ell q = 1$,

$$\Gamma(\vec{q}) \sim \frac{1}{q^{2-\eta}} \quad (3.115)$$

A equação (3.81) mostra que

$$\frac{d}{d\ell} \ln \zeta^* = 1 + \frac{d}{2} + O(\epsilon^2). \quad (3.116)$$

Inserindo-se esse resultado na equação (3.114) obtemos

$$\eta = O(\epsilon^2). \quad (3.117)$$

Não é possível determinar o coeficiente do termo ϵ^2 num cálculo aproximado em ordem ϵ . Demonstra-se, porém, através de cálculos mais elaborados, que este coeficiente é $1/54$, de sorte que η é pequeno mesmo para $\epsilon = 1$.

Pode-se determinar os demais expoentes críticos β , γ e δ em ordem ϵ , a partir dos expoentes críticos determinados acima, através das relações entre os expoentes

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

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

Fisher: $\gamma = \nu(2 - \eta)$

hiper-escala: $2 - \alpha = d \nu$

Estas relações, diga-se de passagem já clássicas, com a possível exceção da última ainda sujeita a controvérsias, são conseqüências das leis de escala para as funções termodinâmicas e as funções de correlação, as quais são fundamentadas pelo método de GR.

3D. Comportamento crítico no ponto de Lifshitz

O estudo do modelo gaussiano mostrou que o comportamento crítico do sistema no ponto de Lifshitz, ponto divisório das transições para as fases uniforme e não uniforme, deve ser distinto do comportamento crítico usual, apresentando um conjunto diferente de expoentes críticos. O tratamento de GR para este ponto multicrítico foi realizado pela primeira vez por Hornreich, Luban e Shtrikman (1975), e uma revisão dos desenvolvimentos subsequentes até 1980 encontra-se no artigo de Hornreich (1980). Faremos nesta seção uma discussão do PL no modelo ANNNI baseado no método de GR, discussão esta que será útil para a segunda parte desta dissertação.

O coeficiente j_{12} definido na equação (3.26) e que comparece na expressão (3.49), é uma função do parâmetro p e se anula quando $p = 0,25$. É evidente que o comportamento crítico nessas condições não pode ser descrito por uma hamiltoniana do ponto fixo em que o coeficiente do termo q_1^2 é unitário. Assim, buscamos uma outra transformação de GR na qual o coeficiente do termo q_1^4 será mantido unitário. A hamiltoniana efetiva terá a mesma forma geral (3.59), com a diferença de que agora o acoplamento $u_2(q)$ terá a forma

$$u_2(\vec{q}) = r + \sum_{i=2}^d q_i^2 + j q_1^2 + q_1^4 + \dots \quad (3.118)$$

Mencionamos de passagem que, na classificação de Hornreich et al. (1975), este PL pertence à categoria $m = 1$, e é chamado PL uniaxial, pois existe apenas uma direção espacial em que surge a modulação.

Neste problema será conveniente considerar uma zona de Brillouin limitada pela superfície

$$\sum_{i=2}^d q_i^2 + q_1^4 = q_{||}^2 + q_{\perp}^4 = 1, \quad (3.119)$$

onde introduzimos as notações

$$\vec{q}_{||} = (q_2, \dots, q_d), \quad q_{\perp} = q_1. \quad (3.120)$$

A transformação de GR será construída integrando-se as variáveis de "spin" localizadas na região externa à superfície

$$(b q_{||})^2 + (a q_{\perp})^4 = 1, \quad (3.121)$$

onde $a, b > 1$. Podemos então repetir, palavra por palavra, os argumentos da seção anterior. Supondo-se, como uma hipótese de trabalho a ser verificada "a posteriori", que u_4, u_6 , etc. são pequenos, chegamos às equações

$$u_2'(\vec{q}') = \gamma^2 a^{-1} b^{-(d-1)} \left\{ u_2(\vec{q}) + \frac{1}{2} \int_{\vec{p}}^> \frac{u_4(\vec{q}, -\vec{q}, \vec{p}, -\vec{p})}{u_2(\vec{p})} + O(\epsilon^2) \right\}, \quad (3.122)$$

$$\begin{aligned} u_4'(\vec{q}_1', \dots, \vec{q}_4') = & \gamma^4 a^{-3} b^{-3(d-1)} \left\{ u_4(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4) + \frac{1}{2} \int_{\vec{p}}^> \frac{u_6(\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_4, \vec{p}, -\vec{p})}{u_2(\vec{p})} - \right. \\ & - \frac{1}{4} \int_{\vec{p}, \vec{p}'}^> \frac{u_4(\vec{q}_1, \vec{q}_2, \vec{p}, \vec{p}') u_4(\vec{q}_3, \vec{q}_4, -\vec{p}, -\vec{p}')}{u_2(\vec{p}) u_2(\vec{p}')} \delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{p} + \vec{p}') \\ & \left. - (5 \text{ perm.}) + O(\epsilon^3) \right\}, \quad (3.123) \end{aligned}$$

onde $\vec{q}' = (a q_{\perp}, b \vec{q}_{\parallel})$ e $\epsilon = d_m - d$, onde d_m é a dimensão marginal acima da qual esperamos um comportamento gaussiano. Será suficiente considerar as variáveis r , j e u , pois as restantes são fortemente irrelevantes e não contribuem para as relações de recorrência em primeira ordem em ϵ . Substituindo-se a expressão de u_2 , eq. (3.118), na equação (3.122) obtemos

$$r' + q_{\parallel}^2 + j' q_{\perp}^2 + q_{\perp}^4 + \dots = \xi^2 \bar{a}^{-1} b^{-(d-1)} [r + b^{-2} q_{\parallel}^2 + j' \bar{a}^{-2} q_{\perp}^2 + \bar{a}^{-4} q_{\perp}^4 + \dots + \frac{1}{2} u \int_{\vec{p}} \frac{1}{u_2(\vec{p})} + O(\epsilon^2)] . \quad (3.124)$$

Para restaurar os coeficientes de $q_{\parallel}^2$ e $q_{\perp}^4$ e novamente torná-los iguais à unidade, devemos escolher os parâmetros ξ , $\underline{a}$ e $\underline{b}$ de tal forma que

$$\xi^2 \bar{a}^{-1} b^{-(d-1)-2} = 1 + O(\epsilon^2) , \quad (3.125)$$

$$\xi^2 \bar{a}^{-5} b^{-(d-1)} = 1 + O(\epsilon^2) , \quad (3.126)$$

ou seja,

$$a = b^{\frac{1}{2} + O(\epsilon^2)} , \quad (3.127)$$

$$\xi = b^{\frac{d}{2} + \frac{3}{4} + O(\epsilon^2)} . \quad (3.128)$$

A primeira das igualdades acima mostra que, para se atingir o ponto fixo adequado à descrição do ponto de Lifshitz, os fatores de escala espaciais $\underline{a}$ e $\underline{b}$ devem estar relacionados de modo conveniente. As relações de recorrência corretas em

ordem ϵ são, portanto,

$$r' = b^2 \left[r + \frac{1}{2} u \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{u_2(\vec{p})} + O(\epsilon^2) \right], \quad (3.129)$$

$$j' = b \left[j + O(\epsilon^2) \right], \quad (3.130)$$

$$u' = b^\epsilon \left[u - \frac{3}{2} u^2 \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{[u_2(\vec{p})]^2} + O(\epsilon^3) \right]. \quad (3.131)$$

onde $\epsilon = 4,5 - d$. A dimensionalidade marginal é, pois, $d_m = 4,5$. Parafraseando Wilson e Fisher (1972) podemos dizer que estamos estudando o fenômeno crítico em 4,49 dimensões. No limite $b = e^\delta \rightarrow 1$, teremos

$$\int_{\vec{p}}^> = \frac{1}{(2\pi)^d} \int^> d^d p = \frac{\delta}{(2\pi)^{4,5}} \int d\sigma \frac{1}{\sqrt{4 q_\perp^2 + q_\parallel^2}} + O(\epsilon), \quad (3.132)$$

onde a integral de superfície deve ser calculada sobre a superfície $q_\parallel^2 + q_\perp^2 = 1$ em dimensão 4,5. Consequentemente, as equações diferenciais da transformação de GR são, em ordem ϵ ,

$$\frac{dr}{d\ell} = 2r + Au - Aur - Cuj + O(\epsilon^2), \quad (3.133)$$

$$\frac{dj}{d\ell} = j + O(\epsilon^2), \quad (3.134)$$

$$\frac{du}{d\ell} = \epsilon u - Bu^2 + O(\epsilon^3), \quad (3.135)$$

onde

$$A = \frac{1}{2(2\pi)^{4,5}} \int \frac{d\sigma}{\sqrt{4q_{\perp}^6 + q_{\parallel}^2}} , \quad B = 3A , \quad (3.136)$$

$$C = \frac{1}{2(2\pi)^{4,5}} \int \frac{q_{\perp}^2}{\sqrt{4q_{\perp}^6 + q_{\parallel}^2}} d\sigma . \quad (3.137)$$

Os pontos fixos das equações diferenciais são facilmente calculáveis. Temos o ponto fixo trivial (Lifshitz-gaussiano)

$$r^* = j^* = u^* = 0 , \quad (3.138)$$

e o ponto fixo não trivial (Lifshitz-Ising)

$$r^* = -\frac{\epsilon}{3} + O(\epsilon^2) ,$$

$$j^* = O(\epsilon^2) , \quad (3.139)$$

$$u^* = \frac{\epsilon}{B} + O(\epsilon^2) .$$

Linearizando-se as equações de transformação nas proximidades do ponto fixo não trivial obtemos

$$\frac{d}{d\ell} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta j \\ \delta u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \frac{1}{3}\epsilon & -\frac{C}{B}\epsilon & A(1 - \frac{1}{3}\epsilon) \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta j \\ \delta u \end{pmatrix} . \quad (3.140)$$

Os autovalores da transformação são

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 2 - \frac{1}{3}\epsilon + O(\epsilon^2), \\ \lambda_2 &= 1 + O(\epsilon^2), \\ \lambda_3 &= -\epsilon + O(\epsilon^2).\end{aligned}\tag{3.141}$$

Para dimensionalidades menores que 4,5 somente as variáveis lineares de escala associadas aos autovalores λ_1 e λ_2 são relevantes.

A energia livre por "spin" se transforma de acordo com a igualdade

$$G(\overline{\mathcal{K}}) = \bar{a}^{-1} b^{-(d-1)} G(\overline{\mathcal{K}'}), \tag{3.142}$$

onde $\underline{b}$ é arbitrário, mas $\underline{a}$ depende tanto de $\underline{b}$ quanto dos parâmetros da hamiltoniana conforme a equação (3.127). A lei de transformação acima implica a seguinte forma de escala próximo ao ponto crítico:

$$G = e^{-(d-1+\frac{d}{de}\ln a^*)\ell} f(e^{\lambda_1\ell}\mu_1, e^{\lambda_2\ell}\mu_2). \tag{3.143}$$

Note-se que da relação (3.127) obtemos

$$\frac{d}{d\ell} \ln a^* = \frac{1}{2} + O(\epsilon^2). \tag{3.144}$$

A hamiltoniana original é parametrizada por T e por p ,

sendo que deve existir apenas um par (T_c, p_c) tal que $\bar{\mathcal{H}}_c = \bar{\mathcal{H}}(T_c, p_c)$ seja conduzida ao ponto fixo não trivial Lifshitz-Ising $\bar{\mathcal{H}}^*$. Se $T \simeq T_c$ e $p \simeq p_c$, a hamiltoniana deve-se aproximar bastante de $\bar{\mathcal{H}}^*$ antes de divergir. Os campos lineares de escala são funções dos campos físicos $t = (T - T_c)/T_c$ e $\Delta p = p - p_c$, e devemos ter em primeira aproximação as relações lineares

$$\begin{aligned}\mu_1 &= a_1 t + b_1 \Delta p, \\ \mu_2 &= a_2 t + b_2 \Delta p.\end{aligned}\tag{3.145}$$

Os coeficientes a_1, a_2, b_1 e b_2 determinam as inclinações dos eixos de escala lineares relativamente aos campos físicos. O comportamento da energia livre depende de como nos aproximamos do ponto de Lifshitz. Fixando-se μ_2 e escolhendo-se ℓ tal que $e^\ell |\mu_1| = 1$ resulta

$$G = |\mu_1|^{2-\alpha} f(\pm 1, \frac{\mu_2}{|\mu_1|^\phi}) ,\tag{3.146}$$

onde α é o expoente crítico do calor específico ao longo do eixo μ_1 ($\mu_2 = 0$),

$$\alpha = 2 - \frac{d-1 + \frac{d}{de} \ln a^*}{\lambda_1} ,\tag{3.147}$$

e ϕ é o expoente de "crossover" associado ao campo μ_2 ,

$$\phi = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} .\tag{3.148}$$

Em ordem $\epsilon = 4,5$ - d os valores de α e ϕ são

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{1}{6} \epsilon + O(\epsilon^2), \\ \phi &= \frac{1}{2} + \frac{1}{12} \epsilon + O(\epsilon^2).\end{aligned}\tag{3.149}$$

É importante observar que o expoente crítico α definido na equação (3.147) determina a divergência do calor específico ao longo do eixo $\mu_2 = 0$. Para $\mu_2 \neq 0$ o calor específico deve divergir diferentemente, o que só é possível se a função $f(\pm 1, x)$ for singular, digamos, para $x = C_{\pm}$. Portanto, as linhas de transição de segunda ordem para-ferro e para-modu devem ter a forma assintótica

$$\mu_2 = C_{\pm} |\mu_1|^{\phi}\tag{3.150}$$

na proximidade do ponto de Lifshitz, o que mostra que o expoente de "crossover" está relacionado com as formas das linhas críticas.

Como a mudança na escala de comprimento é feita de forma diferente na direção axial, o comprimento de correlação também se transforma diferentemente. Assim, devemos considerar os comprimentos de correlação $\xi_{\perp}$ e $\xi_{\parallel}$, que se transformam de acordo com as equações

$$\begin{aligned}\xi_{\parallel}(\bar{\kappa}) &= b \xi_{\parallel}(\bar{\kappa}'), \\ \xi_{\perp}(\bar{\kappa}) &= a \xi_{\perp}(\bar{\kappa}').\end{aligned}\tag{3.151}$$

Essas relações implicam as seguintes formas de escala perto da criticalidade

$$\begin{aligned}\xi_{||} &\simeq e^{\ell} g_{||}(e^{\lambda_1 \ell} \mu_1, e^{\lambda_2 \ell} \mu_2), \\ \xi_{\perp} &\simeq e^{\ell \frac{d}{d\ell} \ln a^*} g_{\perp}(e^{\lambda_1 \ell} \mu_1, e^{\lambda_2 \ell} \mu_2).\end{aligned}\tag{3.152}$$

Considerando-se a aproximação segundo o eixo μ_1 ($\mu_2 = 0$), e escolhendo-se ℓ tal que $e^{\lambda_1 \ell} |\mu_1| = 1$, resulta

$$\xi_{||} \sim |\mu_1|^{-\nu_{||}}, \quad \xi_{\perp} \sim |\mu_1|^{-\nu_{\perp}},\tag{3.153}$$

onde introduzimos os expoentes críticos

$$\nu_{||} = \frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{12} \epsilon + O(\epsilon^2),\tag{3.154}$$

$$\nu_{\perp} = \frac{\frac{d}{d\ell} \ln a^*}{\lambda_1} = \frac{1}{4} + \frac{1}{24} \epsilon + O(\epsilon^2).\tag{3.155}$$

Observamos que, em vez das notações acima, Hornreich et al. (1975) empregaram as notações $\nu_{\lambda 2}$ e $\nu_{\lambda 4}$. No entanto, parece-nos que, para um PL uniaxial, as notações acima introduzidas denotam melhor a assimetria uniaxial do sistema. Note-se que entre os expoentes α , $\nu_{||}$ e $\nu_{\perp}$ subsiste a relação de hiper-escala

$$2 - \alpha = (d-1) \nu_{||} + \nu_{\perp}.\tag{3.156}$$

Faremos agora algumas considerações sobre as funções de correlação. É simples verificar que a amplitude de espalhamento se transforma de acordo com a relação

$$\Gamma(q_{\perp}, \vec{q}_{\parallel}; \mathcal{K}) = \zeta^2 \bar{a}^{-1} b^{-(d-1)} \Gamma(a q_{\perp}, b \vec{q}_{\parallel}; \mathcal{K}') , \quad (3.157)$$

a qual implica a forma de escala

$$\Gamma(q_{\perp}, \vec{q}_{\parallel}; \mathcal{K}) \simeq e^{(2-\eta_{\parallel})\ell} h(e^{\ell \frac{d}{d\ell} \ln a^*} q_{\perp}, e^{\ell} \vec{q}_{\parallel}, e^{\lambda_1 \ell} \mu_1, e^{\lambda_2 \ell} \mu_2), \quad (3.158)$$

onde escrevemos

$$\eta_{\parallel} = 1 + d + \frac{d}{d\ell} \ln a^* - 2 \frac{d}{d\ell} \ln \zeta^* . \quad (3.159)$$

A equação (3.128) mostra que

$$\frac{d}{d\ell} \ln \zeta^* = \frac{d}{2} + \frac{3}{4} + O(\epsilon^2) . \quad (3.160)$$

Inserindo-se as equações (3.144) e (3.160) na expressão (3.159) verifica-se que

$$\eta_{\parallel} = O(\epsilon^2) . \quad (3.161)$$

Consideremos a relação (3.158) no PL, onde $\mu_1 = \mu_2 = 0$. Escolhendo-se ℓ tal que $e^{\ell} q_{\parallel} = 1$, obtemos

$$\Gamma(0, \vec{q}_{\parallel}) \sim \frac{1}{q_{\parallel}^{2-\eta_{\parallel}}} , \quad (3.162)$$

ao passo que, tomando-se ℓ tal que $e^{\ell}|q_{\perp}| = 1$, resulta

$$\Gamma(q_{\perp}, 0) \sim \frac{1}{|q_{\perp}|^{4-\eta_{\perp}}}, \quad (3.163)$$

onde introduzimos a notação

$$\eta_{\perp} = 4 - \frac{2-\eta_{\parallel}}{\frac{d}{d\ell} \ln a^*} = O(\epsilon^2). \quad (3.164)$$

Devemos observar novamente que, em vez das notações $\eta_{\parallel}$ e $\eta_{\perp}$, Hornreich et al. (1975) empregam as notações η_{12} e η_{14} . Comparando as equações (3.154), (3.155) e (3.164) observamos a existência das relações

$$\frac{2-\eta_{\parallel}}{4-\eta_{\perp}} = \frac{\nu_{\perp}}{\nu_{\parallel}} = \frac{d}{d\ell} \ln a^*. \quad (3.165)$$

Os expoentes críticos restantes podem ser determinados a partir das relações entre os expoentes

$$\begin{aligned} \text{Rushbrooke:} \quad & \alpha + 2\beta + \gamma = 2 \\ \text{Widom:} \quad & \gamma = \beta(\delta-1) \\ \text{Fisher:} \quad & \gamma = \nu_{\perp}(2-\eta_{\perp}) = \nu_{\parallel}(2-\eta_{\parallel}) \\ \text{Hiper-escala:} \quad & 2-\alpha = (d-1)\nu_{\parallel} + \nu_{\perp} \end{aligned}$$

As duas primeiras relações resultam da consideração do problema na presença do campo magnético, e a terceira do teorema de flutuação-dissipação. Observamos que, em contraste com o ponto crítico usual, quando o conhecimento dos expoentes η e ν permite determinar os expoentes restantes, no PL precisamos conhecer um número duplo de expoentes. Na realidade, devido à

existência da relação (3.165), é necessário conhecer apenas três dentre os expoentes $\eta_{\parallel}$, $\eta_{\perp}$, $\nu_{\parallel}$ e $\nu_{\perp}$.

Além desses expoentes críticos, define-se no PL um novo expoente crítico β_k , que indica como varia o vetor de onda sobre a linha crítica no lado modulado:

$$q_{\perp} \sim |\mu_2|^{\beta_k}. \quad (3.166)$$

Esse expoente não é independente dos demais expoentes críticos, como pode ser demonstrado da seguinte maneira. Escolhendo-se ℓ tal que $e^{\lambda_1 \ell} |\mu_1| = 1$, a forma de escala (3.158) fornece

$$\Gamma(q_{\perp}, \vec{q}_{\parallel}, \mu_1, \mu_2) \simeq |\mu_1|^{-\gamma} \chi^{\pm} \left(\frac{q_{\perp}}{|\mu_1|^{\nu_{\perp}}}, \frac{\vec{q}_{\parallel}}{|\mu_1|^{\nu_{\parallel}}}, \frac{\mu_2}{|\mu_1|^{\varnothing}} \right). \quad (3.167)$$

Agora, $\Gamma(q_{\perp}, \vec{q}_{\parallel}, \mu_1, \mu_2)$ deve divergir no lado modulado para $q_{\perp} \neq 0$. Como neste caso $|\mu_1|^{-\gamma}$ é finito, a divergência deve provir de $\chi^{\pm}(x, y, z)$. Suponhamos que $\mu_1 > 0$ e que $\chi^+(x, y, z)$ seja singular para $x = x_0$, $y = 0$, $z = z_0$. Então, sobre a linha crítica no lado modulado teremos,

$$\mu_2 = z_0 |\mu_1|^{\varnothing}, \quad q_{\perp} = x_0 |\mu_1|^{\nu_{\perp}}, \quad (3.168)$$

de sorte que,

$$q_{\perp} = x_0 \left(\frac{\mu_2}{z_0} \right)^{\frac{\nu_{\perp}}{\varnothing}} \sim \mu_2^{\frac{\nu_{\perp}}{\varnothing}} \quad (3.169)$$

Portanto,

$$\beta_k = \frac{\nu_{\perp}}{\varnothing} = \frac{1}{2} + O(\epsilon^2). \quad (3.170)$$

3E. Comportamento crítico na presença de um campo magnético

Nesta seção estudaremos a influência do campo magnético quando o sistema efetua a transição para a fase modulada. Os estudos realizados na aproximação de campo médio, e discutidos no segundo capítulo, mostram que para campos suficientemente elevados existe a possibilidade de um comportamento tricrítico. Por outro lado, estudos realizados a campo nulo por Droz e Coutinho Filho (1976) e por Garel e Pfeuty (1976), mostram que os expoentes críticos associados à transição são os mesmos de um modelo XY. O nosso objetivo será, portanto, o de investigar estes aspectos do problema na presença de um campo magnético através do método de GR. O processo de cálculo será semelhante àquele utilizado por Nelson e Fisher (1975) para investigar o metamagneto de Ising na presença de um campo magnético, e pode ser considerado, num certo sentido, como um prolongamento daquele trabalho.

Em contraste com as situações estudadas nas seções 3C e 3D, para os valores do parâmetro p maiores que 0,25 a transformada de Fourier $J(\vec{q})$, eq. (3.14), apresenta máximos em $\vec{q} = \vec{q}_c$ e $\vec{q} = -\vec{q}_c$, onde $\vec{q}_c = (q_c, 0, \dots, 0)$ com $q_c = \cos^{-1}(1/4p)$. Em consonância com os princípios básicos do método de GR precisamos considerar devidamente os vetores de onda na proximidade destes dois máximos. A razão pela qual, nestes casos, o número de componentes de "spin" fica virtualmente duplicado prende-se a essa duplicação do número de máximos da função $J(\vec{q})$.

Antes de mais nada será conveniente eliminar o termo linear na hamiltoniana do modelo s^4 , eq. (3.18). Fazendo-se a mudança de variáveis de "spin"

$$S_{\vec{q}} \rightarrow S_{\vec{q}} + M \delta(\vec{q}), \quad (3.171)$$

obtemos, a menos de um termo independente de "spin",

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}[S_{\vec{q}}] = & \{-\beta H + [a - \beta J(0)]M + bM^3\} S_{\vec{0}} + \\ & + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} [a + 3bM^2 - \beta J(\vec{q})] S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} + \\ & + bM \int_{\vec{q}_1 \vec{q}_2 \vec{q}_3} S_{\vec{q}_1} S_{\vec{q}_2} S_{\vec{q}_3} \delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3) + \\ & + \frac{b}{4} \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_4} S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4). \end{aligned} \quad (3.172)$$

Podemos eliminar o termo linear escolhendo-se um valor de $\underline{M}$ tal que satisfaz a equação

$$-\beta H + [a - \beta J(0)]M + bM^3 = 0. \quad (3.173)$$

Obviamente estamos simplesmente transladando a origem das variáveis de "spin" de um valor igual à magnitude da magnetização paramagnética na aproximação de campo médio. Reescreveremos a expressão (3.172) na forma

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}[S_{\vec{q}}] = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2(\vec{q}) S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} + w \int_{\vec{q}_1 \vec{q}_2 \vec{q}_3} S_{\vec{q}_1} S_{\vec{q}_2} S_{\vec{q}_3} \delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3) + \\ & + u \int_{\vec{q}_1 \dots \vec{q}_4} S_{\vec{q}_1} \dots S_{\vec{q}_4} \delta(\vec{q}_1 + \dots + \vec{q}_4), \end{aligned} \quad (3.174)$$

onde introduzimos as notações

$$u_2(\vec{q}) = a + 3bM^2 - \beta J(\vec{q}), \quad w = bM, \quad u = b/4. \quad (3.175)$$

Como mencionamos anteriormente, devemos considerar todas as variáveis de "spin" $S_{\vec{q}}$ com vetores de onda $\vec{q}$ nas proximidades dos vetores de onda críticos $\pm \vec{q}_c$. A conservação dos vetores de onda, latente nas funções delta existentes na expressão (3.174), faz com que surjam acoplamentos entre estas variáveis de "spin" com aquelas em torno dos vetores de onda $0, \pm 2\vec{q}_c, \pm 3\vec{q}_c$, etc. Em analogia com a linguagem empregada nas transições de fase estruturais, podemos dizer que as primeiras são aquelas associadas ao modo "soft", e as demais aos vários modos "non-soft". Estas últimas são importantes porque se acoplam com as variáveis de "spin" do modo "soft", e serão elas que em última análise conduzirão o sistema ao comportamento tricrítico e transição de primeira ordem. Para o problema em estudo será suficiente considerar os modos "non-soft" 0 e $\pm 2\vec{q}_c$. Denotando por $\vec{q}$ um vetor de onda representando desvios em relação aos valores $0, \pm \vec{q}_c$ e $\pm 2\vec{q}_c$, teremos

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2(\vec{q}) S_{\vec{q}} S_{-\vec{q}} + \int_{\vec{q}} u_2(\vec{q}_c + \vec{q}) S_{\vec{q}_c + \vec{q}} S_{-\vec{q}_c - \vec{q}} + \int_{\vec{q}} u_2(2\vec{q}_c + \vec{q}) \\ & S_{2\vec{q}_c + \vec{q}} S_{-2\vec{q}_c - \vec{q}} + w \int_{\vec{q}, \vec{q}'} (6 S_{\vec{q}} S_{\vec{q}_c + \vec{q}'} S_{-\vec{q}_c - \vec{q} - \vec{q}'} + 3 S_{2\vec{q}_c + \vec{q}} \\ & S_{-\vec{q}_c + \vec{q}'} S_{-\vec{q}_c - \vec{q} - \vec{q}'} + 3 S_{-2\vec{q}_c + \vec{q}} S_{\vec{q}_c + \vec{q}'} S_{\vec{q}_c - \vec{q} - \vec{q}'} + 6 u \int_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} \\ & S_{\vec{q}_c + \vec{q}} S_{\vec{q}_c + \vec{q}'} S_{\vec{q}_c + \vec{q}''} S_{-\vec{q}_c - \vec{q} - \vec{q}' - \vec{q}''} . \end{aligned} \quad (3.176)$$

Não é preciso considerar a dependência explícita de $u_2(\vec{q})$ e $u_2(2\vec{q}_c + \vec{q})$ em $\vec{q}$, pois pode-se mostrar que estas funções correspondem a variáveis irrelevantes. Por outro lado, $u_2(\vec{q}_c + \vec{q})$ tem a forma

$$u_2(\vec{q}_c + \vec{q}) = a + 3bM^2 - \beta J(\vec{q}_c) + \beta j_{||} q_{||}^2 + \beta j_{\perp} q_{\perp}^2 + O(q^4), \quad (3.177)$$

onde $j_{||}$ e $j_{\perp}$ estão definidas nas equações (3.26) e (3.29). Uma mudança de escala apropriada na variável $\vec{q}$ nos permite escrever

$$u_2(\vec{q}_c + \vec{q}) = r_1 + q^2 + O(q^4), \quad (3.178)$$

onde o parâmetro r_1 ,

$$r_1 \propto a + 3bM^2 - \beta J(\vec{q}_c), \quad (3.179)$$

mede essencialmente o afastamento da superfície crítica. Será ainda conveniente definir um novo conjunto de variáveis de "spin" segundo as transformações

$$S_{\vec{q}} = \sigma_{0\vec{q}}, \quad (3.180)$$

$$S_{\pm n\vec{q}_c + \vec{q}} = \sigma_{n\vec{q}}^1 \pm i \sigma_{n\vec{q}}^2 \quad (n = 1, 2).$$

Após estas modificações a hamiltoniana efetiva tomará a forma

$$\begin{aligned}
 \overline{\mathcal{H}} = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} r_0 \sigma_{0\vec{q}} \sigma_{0-\vec{q}} + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} (r_1 + q^2) \left(\sum_{\alpha=1}^2 \sigma_{1\vec{q}}^{\alpha} \sigma_{1-\vec{q}}^{\alpha} \right) + \\
 & + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} r_2 \left(\sum_{\alpha=1}^2 \sigma_{2\vec{q}}^{\alpha} \sigma_{2-\vec{q}}^{\alpha} \right) + \int_{\vec{q} \vec{q}'} [W_0 (\sigma_{0\vec{q}} \sigma_{1\vec{q}'}^1, \sigma_{1-\vec{q}-\vec{q}'}^1 + \\
 & + \sigma_{0\vec{q}} \sigma_{1\vec{q}'}^2, \sigma_{1-\vec{q}-\vec{q}'}^2) + W_2 (\sigma_{2\vec{q}}^1 \sigma_{1\vec{q}'}^1, \sigma_{1-\vec{q}-\vec{q}'}^1 - \sigma_{2\vec{q}}^1 \sigma_{1\vec{q}'}^2, \sigma_{1-\vec{q}-\vec{q}'}^2 + \\
 & + 2 \sigma_{2\vec{q}}^2 \sigma_{1\vec{q}'}^2, \sigma_{1-\vec{q}-\vec{q}'}^1)] + \int_{\vec{q} \vec{q}' \vec{q}''} u \left(\sum_{\alpha, \beta=1}^2 \sigma_{1\vec{q}}^{\alpha} \sigma_{1\vec{q}'}^{\alpha} \sigma_{1\vec{q}''}^{\beta} \sigma_{1-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''}^{\beta} \right).
 \end{aligned}
 \tag{3.181}$$

onde

$$\begin{aligned}
 W_0, W_2 & \propto W, \\
 r_0 & \propto a + 3bM^2 - \beta J(0), \\
 r_2 & \propto a + 3bM^2 - \beta J(2\vec{q}_c),
 \end{aligned}
 \tag{3.182}$$

e as integrais se estendem a uma zona de Brillouin esférica de raio unitário.

Analisaremos agora como se transformam as variáveis r_0, r_1, r_2, w_0, w_2 e u sob a ação do GR. Podemos escrever, em notação óbvia,

$$Z = \int [d\sigma] e^{-\overline{\mathcal{H}}} = \int [d\sigma] e^{-\overline{\mathcal{H}}^<} \int^> [d\sigma] e^{-\overline{\mathcal{H}}^> - \overline{\mathcal{H}}_T},
 \tag{3.183}$$

onde,

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{H}}_0 = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}}^> r_0 \sigma_{0\vec{q}} \sigma_{0-\vec{q}} + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}}^> (r_1 + q^2) \left(\sum_{\alpha=1}^2 \sigma_{1\vec{q}}^{\alpha} \sigma_{1-\vec{q}}^{\alpha} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \int_{\vec{q}}^> r_2 \left(\sum_{\alpha=1}^2 \sigma_{2\vec{q}}^{\alpha} \sigma_{2-\vec{q}}^{\alpha} \right). \end{aligned} \quad (3.184)$$

Calcularemos a segunda das integrais na expressão (3.183) perturbativamente, supondo que w_0 , w_2 e u são pequenos. Mais concretamente, faremos a hipótese de que w_0 , $w_2 = 0(\sqrt{\epsilon})$ e $u = 0(\epsilon)$, onde $\epsilon = 4 - d$. O cálculo se torna mais envolvido do que aquele considerado na seção 3C porque agora devemos distinguir os três tipos diferentes de "spins" e as respectivas componentes. Na figura 14 estão representados os vértices perturbativos.

FIGURA 14 - Vértices perturbativos. As arestas representam os tipos de "spins". σ_0 :-----, σ_1 :——— e σ_2 :----- . Os números indicam as componentes.

A função de partição pode então ser escrita na forma

$$Z = \int^> [d\sigma] \exp \left\{ -\overline{\mathcal{H}}^< + \ln \int^> [d\sigma] e^{-\overline{\mathcal{H}}_0^>} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} G_n \right\}, \quad (3.185)$$

onde G_n é a soma dos gráficos conexos de n vértices. Gráficos sem arestas livres correspondem a termos independentes de "spin" e não são necessários ao nosso estudo. Na figura 15 estão representadas as topologias dos gráficos importantes para a obtenção das relações de recorrência. A lista completa dos gráficos encontra-se no apêndice 1.

FIGURA 15 - Topologia dos gráficos que contribuem para as relações de recorrência em ordem ϵ .

É interessante observar a existência de gráficos de uma única aresta livre, que correspondem a um campo magnético $\bar{h}$ gerado espontaneamente no processo de transformação. Representaremos as novas constantes de acoplamento através de uma barra encimando a letra. Efetuando-se a transformação de variáveis

$$\vec{q}' = b \vec{q}, \quad (3.186)$$

$$\sigma_{n\vec{q}}^\alpha = \mathcal{S}_n \sigma_{n\vec{q}'}^{\alpha'} \quad (n = 0, 1, 2), \quad (3.187)$$

obtemos as seguintes relações:

$$\bar{h} = \mathcal{S}_0 [-2 w_0 A_{010} + O(\epsilon^{3/2})],$$

$$\bar{r}_0 = \mathcal{S}_0^2 b^{-d} [r_0 - 4 w_0^2 A_{020} + O(\epsilon^2)],$$

$$\begin{aligned} \bar{r}_1 + q^2 = \mathcal{S}_1^2 b^{-d} [r_1 + b^{-2} q^2 + 16 u A_{010} - 4 w_0^2 A_{110} \\ - 4 w_2^2 A_{011} - 4 w_2^2 A_{011} + O(\epsilon^2)], \end{aligned}$$

$$\bar{r}_2 = \mathcal{S}_2^2 b^{-d} [r_2 - 4 w_2^2 A_{020} + O(\epsilon^2)],$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_0 = \mathcal{S}_0 \mathcal{S}_1^2 b^{-2d} [w_0 - 16 u w_0 A_{020} + 4 w_0^3 A_{120} + \\ + 8 w_0 w_2^2 A_{021} + O(\epsilon^{5/2})], \end{aligned}$$

$$\bar{w}_2 = \mathcal{S}_2 \mathcal{S}_1^2 b^{-2d} [w_2 - 8 u w_2 A_{020} + 4 w_2 w_0^2 A_{120} + O(\epsilon^{5/2})],$$

$$\begin{aligned} \bar{u} = & \mathfrak{S}_1^4 b^{-3d} [u - 40 u^2 A_{020} + 24 u w_0^2 A_{120} + 32 u w_2^2 A_{021} \\ & - 4 w_0^4 A_{220} - 8 w_2^4 A_{022} - 8 w_0^2 w_2^2 A_{121} + O(\epsilon^3)] , \end{aligned} \quad (3.188)$$

onde definimos

$$A_{lmn} = \int_{\vec{p}}^> \frac{1}{r_0^l (r_1 + q^2)^m r_2^n} . \quad (3.189)$$

Para que a hamiltoniana transformada tenha novamente a forma original (3.181) devemos fazer uma translação das variáveis de "spin" $\sigma_{0\vec{q}}$ e eliminar o termo linear $-\bar{h} \sigma_{0\vec{0}}$. Fazendo-se

$$\sigma_{0\vec{q}} \rightarrow \sigma_{0\vec{q}} + m \delta(\vec{q}) , \quad (3.190)$$

o termo linear se anula para $\underline{m}$ satisfazendo a equação

$$\bar{h} - \bar{r}_0 m = 0 , \quad (3.191)$$

e a hamiltoniana transformada $\bar{\mathcal{H}}'$ terá a mesma forma da hamiltoniana original (3.181) com

$$\begin{aligned} r_0' = \bar{r}_0 , \quad r_1' = \bar{r}_1 + 2 \bar{w}_0 m , \quad r_2' = \bar{r}_2 , \\ w_0' = \bar{w}_0 , \quad w_2' = \bar{w}_2 , \quad u' = \bar{u} . \end{aligned} \quad (3.192)$$

Seguindo o exemplo de Nelson e Fisher (1975), escolhemos os fatores ζ_0 e ζ_2 de tal modo a deixar invariante os acoplamentos r_0 e r_2 . Então,

$$\begin{aligned}\zeta_0 &= b^{\frac{d}{2}} [1 + 2W_0^2 A_{020}/r_0 + O(\epsilon^2)], \\ \zeta_2 &= b^{\frac{d}{2}} [1 + 2W_2^2 A_{020}/r_2 + O(\epsilon^2)].\end{aligned}\quad (3.193)$$

Por outro lado o fator ζ_1 é escolhido de tal modo a deixar inalterado e unitário o coeficiente de q^2 . Portanto,

$$\zeta_1 = b^{1+\frac{d}{2}} [1 + O(\epsilon^2)]. \quad (3.194)$$

Resolvendo-se a equação (3.191) obtemos para $\underline{m}$ o valor

$$m = \frac{\bar{h}}{r_0} = -b^{\frac{d}{2}} \left[\frac{2W_0 A_{010}}{r_0} + O(\epsilon^{\frac{3}{2}}) \right]. \quad (3.195)$$

Assim, escrevendo-se A_{lmn} sob a forma

$$A_{lmn} = \frac{1}{r_0^l r_2^n} \int_{\vec{p}} \frac{1}{(r_1 + p^2)^m} = \frac{A_m}{r_0^l r_2^n} + O(\epsilon), \quad (3.196)$$

onde A_m é a integral acima calculada em $d = 4$, as relações de recorrência ficam

$$\begin{aligned}
 r_1' &= b^2 [r_1 + 16 u A_1 - 8 w_0^2 A_1 / r_0 - 8 w_2^2 A_1 / r_2 + O(\epsilon^2)] , \\
 w_0' &= b^{\frac{\epsilon}{2}} [w_0 - 16 u w_0 A_2 + 6 w_0^3 A_2 / r_0 + 8 w_0 w_2^2 A_2 / r_2 + O(\epsilon^{\frac{5}{2}})] , \\
 w_2' &= b^{\frac{\epsilon}{2}} [w_2 - 8 u w_2 A_2 + 4 w_2 w_0^2 A_2 / r_0 + 2 w_2^3 A_2 / r_2 + O(\epsilon^{\frac{5}{2}})] , \\
 u' &= b^{\epsilon} [u - 40 u^2 A_2 + 24 u w_0^2 A_2 / r_0 + 32 u w_2^2 A_2 / r_2 - \\
 &\quad - 4 w_0^4 A_2 / r_0^2 - 8 w_2^4 A_2 / r_2^2 - 8 w_0^2 w_2^2 A_2 / r_0 r_2 + O(\epsilon^3)] .
 \end{aligned}
 \tag{3.197}$$

Será mais conveniente analisar as relações de recorrência como função das variáveis

$$x_0 = \frac{w_0^2}{r_0} \quad \text{e} \quad x_2 = \frac{w_2^2}{r_2} .
 \tag{3.198}$$

Além disso é cômodo tomar o limite $b = e^{\delta} \rightarrow 1$. Nesse limite

$$A_m = \int_{\vec{p}} \frac{1}{(r_1 + p^2)^m} = \frac{4 \delta}{(2\pi)^4} \int d\Omega \frac{1}{(1 + r_1)^m} = a_m \delta ,
 \tag{3.199}$$

onde

$$a_m = \frac{4 \Omega_4}{(2\pi)^4} \frac{1}{(1 + r_1)^m} ,
 \tag{3.200}$$

sendo Ω_4 a área de uma esfera quadridimensional de raio

unitário. As equações diferenciais da transformação de GR são, portanto,

$$\frac{dr_1}{d\ell} = 2r_1 + 16u a_1 - 8x_0 a_1 - 8x_2 a_1 + O(\epsilon^2),$$

$$\frac{dx_0}{d\ell} = \epsilon x_0 - 32u x_0 a_2 + 12x_0^2 a_2 + 16x_0 x_2 a_2 + O(\epsilon^3),$$

$$\frac{dx_2}{d\ell} = \epsilon x_2 - 16u x_2 a_2 + 4x_2^2 a_2 + 8x_0 x_2 a_2 + O(\epsilon^3),$$

$$\frac{du}{d\ell} = \epsilon u - 40u^2 a_2 + 24x_0 u a_2 + 32x_2 u a_2$$

$$-4x_0^2 a_2 - 8x_2^2 a_2 - 8x_0 x_2 a_2 + O(\epsilon^3). \quad (3.201)$$

As linhas de fluxo desta transformação no subespaço (x_0, x_2, u) estão representadas esquematicamente na figura 16. Os pontos fixos são ao todo em número de oito, e estão reunidos na tabela 1.

Seguindo-se a prática usual, podemos agora linearizar as equações de transformação (3.201) na vizinhança de cada um dos pontos fixos e assim obter os autovalores e os autovetores associados aos mesmos. Os primeiros determinam os expoentes críticos, e os últimos, os eixos de escala. Na tabela 2 estão reunidos os autovalores em ordem ϵ correspondentes a cada um dos pontos fixos.

FIGURA 16 - Pontos fixos e linhas de fluxo no subespaço (x_0, x_2, u) . ●: ponto fixo gaussiano, ★: ponto fixo tipo XY. b: ponto fixo que determina o comportamento crítico na ausência do campo, h: idem, na presença do campo, g: ponto fixo que determina o comportamento tricrítico na presença do campo. Os pontos fixos (c)-(f) não são acessíveis no caso do modelo ANNNI.

	r_1^*/ϵ	$x_0^* a_0/\epsilon$	$x_2^* a_0/\epsilon$	$u^* a_0/\epsilon$
a	0	0	0	0
b	$-1/5$	0	0	$1/40$
c	0	0	$1/4$	$1/8$
d	$-1/5$	0	$3/20$	$1/10$
e	0	$1/4$	0	$1/8$
f	$-1/5$	$1/20$	0	$1/20$
g	0	$1/4$	$1/4$	$1/4$
h	$-1/5$	$1/20$	$3/20$	$1/8$

TABELA 1 - Pontos fixos da transformação (3.201).

	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
a	2	ϵ	ϵ	ϵ
b	$2 - \frac{2}{5}\epsilon$	$\epsilon/5$	$3\epsilon/5$	$-\epsilon$
c	2	ϵ	ϵ	$-\epsilon$
d	$2 - \frac{2}{5}\epsilon$	$\epsilon/5$	$-3\epsilon/5$	$-\epsilon$
e	2	ϵ	ϵ	$-\epsilon$
f	$2 - \frac{2}{5}\epsilon$	$3\epsilon/5$	$-\epsilon/5$	$-\epsilon$
g	2	ϵ	$-\epsilon$	$-\epsilon$
h	$2 - \frac{2}{5}\epsilon$	$-\epsilon/5$	$-3\epsilon/5$	$-\epsilon$

TABELA 2 - Autovalores em ordem ϵ .

Observando-se a tabela 2 verificamos que o maior autovalor em todos os pontos fixos é λ_1 . Segue-se que para os pontos fixos (a), (c), (e) e (g) o expoente ν é, em ordem ϵ ,

$$\nu = \frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{2}, \quad (3.202)$$

enquanto para os pontos fixos (b), (d), (f) e (h),

$$\nu = \frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{2} + \frac{1}{10} \epsilon + O(\epsilon^2). \quad (3.203)$$

Assim, os pontos fixos (a), (c), (e) e (g) apresentam um expoente crítico característico do modelo gaussiano (em ordem ϵ), ao passo que os pontos fixos (b), (d), (f) e (h) apresentam um expoente crítico característico do modelo XY (em ordem ϵ). O ponto fixo (a) é totalmente instável para $d < 4$ e não pode em geral ser atingido. Na ausência do campo magnético, $x_0 = x_2 = 0$, o ponto fixo (b) é estável. Isto significa que a transição para a fase modulada na ausência do campo se faz com os mesmos expoentes críticos do modelo XY. Reobtivemos, portanto, os resultados de Droz e Coutinho Filho (1976) e Garel e Pfeuty (1976). Os pontos fixos (d) e (f) podem ser atingidos quando $u > x_2/2$, $x_0 = 0$ e $u > x_0/2$, $x_2 = 0$, respectivamente. Por outro lado, os pontos fixos (c) e (e) podem ser atingidos quando $u = x_2/2$, $x_0 = 0$ e $u = x_0/2$, $x_2 = 0$, respectivamente. Quando $u < x_2/2$, $x_0 = 0$ ou $u < x_0/2$, $x_2 = 0$, o acoplamento u diverge a valores negativos e devemos esperar uma transição de primeira ordem. Os pontos fixos (c) - (f) não são fisicamente acessíveis quando os termos

cúbicos w_0 e w_2 estão relacionados com os parâmetros do modelo ANNNI, pois neste caso eles são simultaneamente nulos ou não nulos conforme a equação (3.182). O ponto fixo (h) é estável quando $u > (x_0 + x_2)/2$ com $x_0, x_2 \neq 0$, ao passo que quando $u < (x_0 + x_2)/2$ o acoplamento u diverge a valores negativos, traduzindo-se numa transição de primeira ordem. Portanto, o ponto fixo (h) determina o comportamento crítico na presença de um campo magnético. É interessante observar o "crossover" entre os pontos fixos (b) e (h) quando se aplica o campo magnético, mas como ambos os pontos fixos têm características de um modelo XY, o comportamento crítico permanece inalterado. O ponto fixo (g), que é atingido quando $u = (x_0 + x_2)/2$ com $x_0, x_2 \neq 0$, corresponde ao ponto fixo gaussiano associado ao comportamento tricrítico do modelo ANNNI na presença de um campo magnético.

Os cálculos foram até este momento efetuados em ordem ϵ . Demonstraremos agora que os resultados acima são corretos em todas as ordens em ϵ . A idéia consiste em integrar os campos "non-soft", ou seja, aqueles campos σ_0 e σ_2^α em que os acoplamentos dos termos quadráticos r_0 e r_2 permanecem finitos mesmo na criticalidade. Esta circunstância, aliada ao fato de que os acoplamentos cúbicos são pequenos perto dos pontos fixos, permite efetuar a integração dos campos σ_0 e σ_2^α perturbativamente em relação ao termo quadrático

$$\overline{\mathcal{H}}_0 = \frac{r_0}{2} \int_{\vec{q}} \sigma_{0\vec{q}} \sigma_{0-\vec{q}} + \frac{r_2}{2} \int_{\vec{q}} \sum_{\alpha=1}^2 \sigma_{2\vec{q}}^\alpha \sigma_{2-\vec{q}}^\alpha. \quad (3.204)$$

Somente os vértices perturbativos cúbicos da figura 14 precisam ser considerados. Um pouco de reflexão nos convence de que os

únicos gráficos que contribuem são aqueles em segunda ordem listados na figura abaixo.

FIGURA 17 - Gráficos relevantes na integração dos campos "non-soft". O número entre parênteses indica a multiplicidade dos gráficos.

A hamiltoniana efetiva que resta, após integrados os campos σ_0 e σ_2^α , é

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} (r_1 + q^2) \left(\sum_{\alpha=1}^2 \sigma_{1\vec{q}}^\alpha \sigma_{1-\vec{q}}^\alpha \right) + \\ & + \left(u - \frac{1}{2} \frac{W_0^2}{r_0} - \frac{1}{2} \frac{W_2^2}{r_2} \right) \int_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} \left(\sum_{\alpha, \beta=1}^2 \sigma_{1\vec{q}}^\alpha \sigma_{1\vec{q}'}^\alpha \sigma_{1\vec{q}''}^\beta \sigma_{1-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''}^\beta \right) \quad (3.205) \end{aligned}$$

A hamiltoniana acima é a mesma de um modelo n-vetorial ($n = 2$), e apresentará um comportamento crítico usualmente associado a este desde que

$$u - \frac{1}{2} \frac{W_0^2}{r_0} - \frac{1}{2} \frac{W_2^2}{r_2} > 0. \quad (3.206)$$

O comportamento tricrítico manifestar-se-á quando a desigualdade acima tender à igualdade. Estas conclusões, válidas em todas as ordens em ϵ , estão em pleno acordo com os resultados obtidos através da análise das relações de recorrência em ordem ϵ .

SEGUNDA PARTE

Ponto de Lifshitz no composto MnP: Estudo
baseado num modelo microscópico

4. OBSERVAÇÕES GERAIS SOBRE O COMPOSTO MnP

Estudos experimentais recentes realizados por Becerra et al. (1980) e Shapira et al. (1981) demonstram de modo convincente a existência de um ponto de Lifshitz no diagrama de fases campo magnético vs. temperatura do fosfeto de manganês (MnP). As evidências experimentais apresentadas por estes pesquisadores, como a configuração das fronteiras das fases na proximidade do PL, e o valor do coeficiente de "crossover", sugerem um PL caracterizado pela dimensionalidade espacial $d = 3$, parâmetro de ordem escalar ($n = 1$) e uma única direção de instabilidade do vetor de onda ($m = 1$). Os estudos destes autores foram suplementados recentemente com dados sobre a variação do vetor de onda perto de PL obtidos pela técnica de difração de nêutrons por Moon, Cable e Shapira (1981). Esses dados mostram que o vetor de onda tende continuamente a zero sobre a linha crítica na fase modulada, o que constitui uma evidência palmar do PL.

Ainda que o PL no composto MnP pertença à mesma classe de universalidade do PL existente no modelo ANNNI, este não serve para a descrição desse material. Com efeito, basta observar que a fase modulada no composto MnP é uma fase "fan", e não uma fase sinusoidal como no modelo ANNNI. Além do mais, o PL no composto MnP ocorre no diagrama de fases campo magnético vs. temperatura e não temperatura vs. pressão ou temperatura vs. composição, como se tinha suposto nas investigações iniciais em busca de materiais que pudessem exibir o PL. O nosso objetivo será, portanto, o de procurar compreender, a partir de um modelo microscópico e um mínimo de hipóteses subsidiárias, as várias características experimentais observadas no PL deste composto. Depois de estabelecer um

modelo microscópico faremos a análise inicialmente na aproximação de campo médio e depois através do método de Grupo de Renormalização. Um resumo destes cálculos pode ser encontrado na comunicação de Yokoi, Coutinho Filho e Salinas (1981b).

As propriedades magnéticas do composto MnP têm atraído a atenção de muitos pesquisadores experimentais desde os inícios da década de 60, principalmente devido ao interesse que as complexas fases moduladas despertam. Há um acúmulo considerável de informações espalhadas em vários periódicos. Mencionaremos, como ilustração, os estudos através da técnica de difração de nêutrons por Felcher (1966), Ishikawa et al. (1969), Obara et al. (1980), Tajima et al. (1980); as medidas de magnetização por Komatsubara et al. (1969,1970) e a análise teórica subsequente de Hiyamizu e Nagamiya (1971).

Neste parágrafo descreveremos a traços largos algumas propriedades que serão relevantes na discussão. A estrutura cristalina do MnP é ortorrômbica ($a > b > c$), onde o eixo c ($\equiv x$) é fácil, b ($\equiv y$) intermediário e a ($\equiv z$) é extremamente duro. Na ausência do campo magnético MnP é ferromagnético entre 47 e 291K com os momentos paralelos à direção fácil. Abaixo de 47K a fase ordenada é "screw", onde os momentos giram no plano bc com vetor de onda $\vec{q}$ ao longo do eixo a . Aplicando-se um campo magnético ao longo do eixo b observamos uma outra fase, chamada "fan", onde os momentos não realizam rotações completas como na fase "screw". O diagrama de fases com o campo magnético na direção do eixo b está mostrado na figura 18. O nosso interesse principal concentra-se no "ponto triplo", onde se encontram as fases ferromagnética, "fan" e paramagnética. A figura 19 é uma representação esquemática do diagrama de fases na proximidade do PL. As experiências indicam que as linhas de transição para-"fan" e para-ferro são de segunda ordem, enquanto a linha "fan"-ferro é de primeira

FIGURA 18 - Diagrama de fases do composto MnP com o campo magnético H paralelo ao eixo cristalino b [apud Shapira et al. (1981)] . SCR: fase "screw".

FIGURA 19 - Representação esquemática do diagrama de fases próximo ao PL, (H_L, T_L) .

FIGURA 20 - Representação esquemática dos vetores de magnetização em planos sucessivos ao longo do eixo a nas fases paramagnética, ferromagnética e "fan".

As análises teóricas como as de Hiyamizu e Nagamiya (1971) baseiam-se na imagem de "spins" localizados com interações tipo RKKY entre os elétrons d e uma anisotropia de campo cristalino ortorrômbica. Seguiremos esta linha tradicional, embora a experiência recente de Takase, Yashima e Kasuya (1979) lance dúvidas quanto ao caráter estritamente localizado dos elétrons d.

O nosso objetivo principal será a compreensão do fenômeno, e não uma análise quantitativa dos dados experimentais. Assim sendo, simplificaremos ao máximo o modelo eliminando todos os detalhes que complicariam desnecessariamente os cálculos. Escreveremos, portanto, a seguinte hamiltoniana XY,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{r}\vec{r}'} J(\vec{r}-\vec{r}') \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}'} - D \sum_{\vec{r}} [(S_{\vec{r}}^x)^2 - (S_{\vec{r}}^y)^2] - H \sum_{\vec{r}} S_{\vec{r}}^y, \quad (4.1)$$

onde $\vec{l} = (l, m, n)$ é o vetor da rede de uma rede cúbica simples com N vértices em cada uma das direções espaciais, $\vec{S}_l = (S_l^x, S_l^y)$ são os operadores de Pauli, e o fator de anisotropia $D > 0$ favorece a direção x (eixo c). As constantes de intercâmbio $J(\vec{l} - \vec{l}')$ são ferromagnéticas no plano $XY(ab)$ e devem incluir os efeitos da interação competitiva ao longo da direção z (eixo a). A escolha de uma rede cúbica simples, de "spin" $1/2$ etc. são simplificações em relação ao que é conhecido a respeito do MnP, mas estamos seguindo os nossos propósitos iniciais de simplificar os aspectos do problema que não influem no comportamento qualitativo e crítico do sistema. Devemos mencionar que a hamiltoniana (4.1) já foi em parte analisada por Kitano e Nagamiya (1964) há quase duas décadas, mas obviamente eles são se preocuparam em estudar o problema do PL.

5. ESTUDO NA APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO

5A. Equações de campo médio

Novamente, como fizemos no caso do modelo ANNNI, deduziremos as equações de campo médio a partir da desigualdade de Bogoliubov. Neste caso a hamiltoniana tentativa adequada é

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{(\ell, m, n)} \vec{\eta}_n \cdot \vec{S}_{(\ell, m, n)} , \quad (5.1)$$

onde $\vec{\eta}_n$ é o parâmetro variacional associado ao plano $\underline{n}$. Efetuando-se os cálculos obtemos para a energia livre na aproximação de campo médio o resultado

$$G(T, H, N^3) = \min_{\{\vec{M}_n\}} \Phi(T, H, N^3; \{\vec{M}_n\}) , \quad (5.2)$$

onde

$$\begin{aligned} N^{-3} \Phi(T, H, N^3; \{\vec{M}_n\}) = & -kT \ln 2 + \frac{kT}{N} \sum_n \int_0^{M_n} \tanh^{-1} \mu \, d\mu \\ & - \frac{1}{2N} \sum_{nn'} J(n-n') \vec{M}_n \cdot \vec{M}_{n'} - \frac{D}{N} \sum_n [(M_n^x)^2 - (M_n^y)^2] - H \sum_n M_n^z , \quad (5.3) \end{aligned}$$

sendo que definimos as constantes de intercâmbio efetivo entre os planos n e n' através da equação

$$J(n-n') = N^{-2} \sum_{\ell m} \sum_{\ell' m'} J(\ell-\ell', m-m', n-n') . \quad (5.4)$$

Igualando-se a zero as derivadas da funcional de energia livre (5.3) relativamente a M_n^x e M_n^y obtemos as seguintes equações de minimização:

$$\frac{M_n^\alpha}{M_n} = \frac{\eta_n^\alpha}{\eta_n} ,$$

$$\eta_n^\alpha = \sum_{n'} J(n-n') M_{n'}^\alpha \pm 2D M_n^\alpha + H_n^\alpha ,$$

(5.5)

$$M_n = \tanh \beta \eta_n ,$$

$$M_n = \sqrt{(M_n^x)^2 + (M_n^y)^2} , \quad \eta_n = \sqrt{(\eta_n^x)^2 + (\eta_n^y)^2} ,$$

onde os sinais $+$ e $-$ correspondem, respectivamente, a $\alpha = x$ e $\alpha = y$, com $H_n^x = 0$ e $H_n^y = H$.

5B. Solução paramagnética e as linhas de transição de segunda ordem

A fase paramagnética é caracterizada por uma magnetização paralela ao eixo $\underline{b}$, ou seja, $\vec{M}_n = (0, M)$. Das equações (5.5) concluimos que M deve satisfazer a equação

$$M = \tanh \beta \{ [J(0) - 2D] M + H \} , \quad (5.6)$$

onde definimos

$$J(q) = \sum_n J(n) e^{iqn} . \quad (5.7)$$

Para estudar a passagem do sistema da fase paramagnética para a fase ordenada, caracterizada por um valor não nulo da magnetização transversal M_n^x , convém considerar a suscetibilidade transversal dependente do vetor de onda $\chi^x(q)$. Aplicando-se, na fase paramagnética, um campo perturbativo δH_n^x na direção x , surgirá como resposta uma componente transversal δM_n^x . Das equações de minimização (5.5) obteremos, em primeira ordem, a relação

$$\frac{[J(0) - 2D] M + H}{M} \delta M_n^x = \sum_{n'} J(n-n') \delta M_{n'}^x + 2D \delta M_n^x + \delta H_n^x . \quad (5.8)$$

Introduzindo-se as transformadas de Fourier

$$\delta M_n^x = \sum_q \delta M_q^x e^{iqn}, \quad \delta H_n^x = \sum_q \delta H_q^x e^{iqn}, \quad (5.9)$$

resulta

$$\chi^x(q) = \frac{1}{J(0) - J(q) - 4D + M^{-1}H}. \quad (5.10)$$

A expressão acima fornece a suscetibilidade transversal dependente do vetor de onda em toda a fase paramagnética.

A transição de fase deve ser caracterizada pela divergência de $\chi^x(q)$, ou seja, pela condição

$$J(0) - 4D + M^{-1}H = \max_q J(q) = J(q_c). \quad (5.11)$$

Desta última equação, e no pressuposto de que $J(q)$ independe tanto da temperatura quanto do campo magnético, segue-se que somente uma fase ordenada, ferromagnética ($q_c = 0$) ou "fan" ($q_c \neq 0$), deve estar presente no diagrama de fases T-H próximo à linha de transição de segunda ordem. Isso contradiz os fatos experimentais. Podemos atribuir esta discrepância à limitação da aproximação de campo médio empregada, ou, o que talvez seja mais provável, à dependência de $J(q)$ com T e H. Embora as evidências experimentais de Tajima et al. (1980) e Obara et al. (1980) concordem com esta hipótese, o mecanismo que lhe é responsável ainda parece não estar completamente esclarecido. Como quer que seja, uma vez aceita esta hipótese, devemos considerar a hamiltoniana original (4.1) como sendo uma hamiltoniana efetiva que já incorpora esses efeitos. Iremos

então escrever $J(q)$ próximo ao PL e para pequenos valores de q na forma

$$J(q) = J(0) - \alpha q^2 - \frac{1}{2} \beta q^4, \quad (5.12)$$

onde, em aproximação linear,

$$\alpha = \alpha_T (T - T_L) + \alpha_H (H - H_L), \quad (5.13)$$

$$J(0) = J_0 + J_{0T} (T - T_L) + J_{0H} (H - H_L),$$

sendo T_L e H_L a temperatura e campo do PL. Admitiremos ainda que β é um parâmetro constante e positivo. Essas hipóteses serão suficientes para examinar a vizinhança do PL.

Pode-se argumentar que a dependência de $J(q)$ com T e H é conjectural, mas é inegável que outros autores fazem hipóteses similares quando supõem que o PL deve emergir como função da concentração ou da pressão. Sem dúvida podemos considerar a ocorrência do PL no composto MnP como sendo devida a uma conjunção de duas circunstâncias felizes, ou seja, a dependência de α com T e H , e a proximidade deste do zero.

Se o parâmetro α for positivo, o máximo de $J(q)$ ocorre para $q = 0$, e o sistema sofre uma transição de segunda ordem para a fase ferromagnética. Da equação (5.11) concluímos que a linha de transição para-ferro $H_0(T)$ tem a forma assintótica

$$H_0(T) \simeq H_L - A \Delta T - B \Delta T^2, \quad (5.14)$$

onde $\Delta T = T - T_L$. Por outro lado, se α for negativo o máximo de $J(q)$ ocorre para

$$q_c = \left(-\frac{\alpha}{\beta} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.15)$$

de sorte que o estado de equilíbrio na fase ordenada é não uniforme. Da equação (5.11) concluímos que a linha de transição para-"fan" $H_\lambda(T)$ tem a forma assintótica

$$H_\lambda(T) \simeq H_0(T) + C \Delta T^2. \quad (5.16)$$

Os pré-fatores A , B e C são funções dos parâmetros da hamiltoniana efetiva (v. apêndice 2). A equação (5.16) mostra que as duas linhas críticas, $H_0(T)$ e $H_\lambda(T)$, se encontram tangencialmente e que o coeficiente de "crossover" em campo médio é $\phi = 1/2$. Podemos ainda concluir, a partir da equação (5.15), que o vetor de onda crítico q_c se comporta assintoticamente como

$$q_c^2 \sim (T - T_L) \sim (H - H_L). \quad (5.17)$$

Conseqüentemente, o valor do expoente crítico β_k na aproximação de campo médio é $1/2$.

5C. Expansão de Landau e a linha de transição de primeira ordem

A linha de transição ferro-"fan" é presumivelmente de primeira ordem. Portanto, para determinar a linha de transição ferro-"fan" $H_1(T)$ precisamos comparar as energias livres nas fases ferromagnética e "fan". A este propósito será conveniente considerar a expansão de Landau da funcional de energia livre (5.3).

Escrevendo-se a magnetização na fase ordenada sob a forma $\vec{M}_n = (M_n^x, M_n^y)$, com M dada pela equação (5.6), e expandindo-se a funcional de energia livre obtemos

$$\begin{aligned} N^{-3} \Phi = N^{-3} G_0 - \frac{1}{2N} \sum_{nn'} J(n-n') (M_n^x M_{n'}^x + \delta M_n^y \delta M_{n'}^y) + \\ + \frac{1}{N} \sum_n [(A_{20} - D) M_n^{x2} + (A_{02} + D) \delta M_n^{y2} + A_{21} M_n^{x2} \delta M_n^y \\ + A_{03} \delta M_n^{y3} + A_{40} M_n^{x4} + A_{22} M_n^{x2} \delta M_n^{y2} + A_{04} \delta M_n^{y4} + \dots], \end{aligned} \quad (5.18)$$

onde G_0 é a energia livre paramagnética e A_{ij} são funções dos parâmetros da hamiltoniana efetiva (v. apêndice 3). A expansão da funcional de energia livre (5.18) está efetuada como função dos incrementos M_n^x e δM_n^y . Para obter a expansão apenas em M_n^x devemos estabelecer a relação entre M_n^x e δM_n^y , o que pode ser conseguido utilizando-se a condição de que Φ deve ser mínima relativamente a δM_n^y .

Começaremos analisando o caso quando a transição se efetua para a fase ferromagnética. Neste caso M_n^x e δM_n^y são uniformes, e podemos escrever

$$M_h^x = M^x, \quad \delta M_h^y = \delta M^y. \quad (5.19)$$

Minimizando-se a funiconal de energia livre relativamente a δM^y obtemos em ordem dominante

$$\delta M^y = - \frac{A_{21}}{2 B(0)} M^{x^2}, \quad (5.20)$$

e a expansão correta até quarta ordem é

$$N^{-3} \Phi = N^{-3} G_0 + A(0) M^{x^2} + \left[A_{40} - \frac{A_{21}^2}{4 B(0)} \right] M^{x^4}, \quad (5.21)$$

onde definimos

$$A(q) = A_{20} - D - \frac{1}{2} J(q) = \frac{1}{2} \chi^x(q), \quad (5.22)$$

$$B(q) = A_{02} + D - \frac{1}{2} J(q). \quad (5.23)$$

A minimização da expressão (5.21) relativamente a M^x fornece em ordem dominante

$$M^x = \pm \left\{ - \frac{A(0)}{2 \left[A_{40} - \frac{A_{21}^2}{4 B(0)} \right]} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (5.24)$$

Portanto, a energia livre em ordem dominante será

$$N^{-3}(G - G_0) = - \frac{A(0)^2}{4 A_{40} - \frac{A_{21}^2}{B(0)}} \quad (5.25)$$

Na fase "fan" a magnetização $\vec{M}_n$ é espacialmente não uniforme na direção do eixo $\underline{a}$, e é natural introduzir as transformadas de Fourier

$$M_n^x = \sum_q M_q^x e^{iqn}, \quad \delta M_n^y = \sum_q \delta M_q^y e^{iqn}. \quad (5.26)$$

Neste caso, eliminando-se δM_n^y em favor de M_n^x , obtemos corretamente até quarta ordem,

$$N^{-3}\Phi = N^{-3}G_0 + 2A(q_c)|M_{q_c}^x|^2 + \left[6A_{40} - \frac{A_{21}^2}{B(0)} - \frac{A_{21}^2}{2B(2q_c)}\right]|M_{q_c}^x|^4. \quad (5.27)$$

Escrevamos a componente $\underline{x}$ da magnetização na fase "fan" sob a forma

$$M_n^x = \sum_q M_q^x e^{iqn} = M_0^x + M_1^x \cos(q_c + \vartheta) + M_2^x \cos 2(q_c + \vartheta) + \dots \quad (5.28)$$

Então, minimizando-se a funcional de energia livre (5.27) relativamente a M_1^x obtemos a seguinte expressão para a amplitude do harmônico principal em ordem dominante:

$$M_1^x = \pm \left\{ \frac{A(q_c)}{6A_{40} - A_{21}^2 \left[\frac{1}{B(0)} + \frac{1}{2B(2q_c)} \right]} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (5.29)$$

A energia livre em ordem dominante será, portanto,

$$N^{-3}(G - G_0) = - \frac{A(q_c)^2}{6A_{40} - A_{21}^2 \left[\frac{1}{B(0)} - \frac{1}{2B(2q_c)} \right]}. \quad (5.30)$$

Os cálculos mostram que as amplitudes dos harmônicos pares de M_n^x são nulas, enquanto a amplitude do terceiro harmônico em ordem dominante é

$$M_3^x = \frac{A_{40}}{2A(3q_c)} M_1^{x^3}. \quad (5.31)$$

Podemos ainda examinar o desenvolvimento em série de Fourier da magnetização longitudinal

$$M_n^y = M_0^y + M_1^y \cos(q_c + \phi) + M_2^y \cos 2(q_c + \phi) + \dots. \quad (5.32)$$

Os cálculos revelam que os harmônicos ímpares é que são agora nulos, ao passo que

$$M_0^y = M - \frac{A_{21}}{4B(0)} M_1^{x^2}, \quad (5.33)$$

$$M_2^Y = - \frac{A_{21}}{4 \beta(2q_c)} M_1^{X^2} . \quad (5.34)$$

Igualando-se as expressões das energias livres (5.25) e (5.30) podemos sem muito trabalho determinar a linha de transição ferro-"fan", que é dada assintoticamente por

$$H_1(T) \simeq H_0(T) - C (\sqrt{6} + 2) \Delta T^2. \quad (5.35)$$

É curioso verificar a existência da relação

$$\frac{H_0(T) - H_1(T)}{H_\lambda(T) - H_0(T)} = \sqrt{6} + 2 \simeq 4,4 , \quad (5.36)$$

que foi observada pela primeira vez por Michelson (1977) num contexto similar. O valor experimental desta razão, entretanto, é aproximadamente 30% menor que aquele predito acima.

5D. Suscetibilidades longitudinal e transversal uniformes

As experiências descritas por Becerra et al. (1980) e Shapira et al. (1981) consistem em grande parte na medida das suscetibilidades perpendiculares e paralelas ao campo aplicado segundo o eixo cristalino $\underline{b}$. A primeira será chamada suscetibilidade transversal uniforme e a segunda suscetibilidade longitudinal uniforme. Por conseguinte, será instrutivo comparar os resultados que decorrem dos cálculos na aproximação de campo médio efetuados sobre o modelo com aqueles fornecidos pela experiência.

Começaremos pela discussão da suscetibilidade transversal uniforme. Na fase paramagnética ela é simplesmente a expressão (5.10) para $q = 0$, ou seja,

$$\chi_p^x = \chi^x(q=0) = \frac{M}{H - 4DM} , \quad (5.37)$$

onde M é a magnetização na fase paramagnética determinada pela equação (5.6). Para um certo valor fixo de T , podemos escrever perto da linha de transição $H_0(T)$ - eventualmente fictícia para $T < T_L$ - a expressão assintótica

$$\chi_p^x \simeq \frac{C_0}{H - H_0(T)} , \quad (5.38)$$

onde

$$C_0 = \left\{ \frac{M^2}{M - H \frac{\partial M}{\partial H}} \right\}_{T, H_0(T)}, \quad (5.39)$$

o que mostra que a suscetibilidade transversal deve divergir com a lei de Curie-Weiss na linha de transição para-ferro. Para determinar a suscetibilidade transversal na fase ferromagnética e próxima à linha $H_0(T)$ podemos empregar a expressão da energia livre (5.21). Aplicando-se um pequeno campo perturbativo h^x , e, portanto, adicionando-se o termo $-h^x M^x$ na equação (5.21), e minimizando-se relativamente a M^x obtemos o resultado assintótico

$$\chi_F^x \simeq -\frac{1}{2} \frac{C_0}{H - H_0(T)}. \quad (5.40)$$

Podemos proceder de modo semelhante na fase "fan". O resultado final, na proximidade do PL, pode ser escrito assintoticamente na forma

$$\chi_H^{x-1} \simeq C_0^{-1}(H - H_0(T)) - C_\lambda^{-1}(H - H_\lambda(T)), \quad (5.41)$$

onde

$$C_\lambda^{-1} = \left\{ \frac{6A_{40} - \frac{A_{21}^2}{B(q_c)}}{6A_{40} - A_{21}^2 \left[\frac{1}{B(0)} + \frac{1}{2B(2q_c)} \right]} \frac{\partial A(q_c)}{\partial H} \right\}_{T, H_\lambda(T)}. \quad (5.42)$$

A expressão (5.41) mostra que χ^x é contínua na linha de transição para-"fan", mas que em geral é descontínua na linha de transição "fan"-ferro. Esses resultados devem ser comparados com as curvas experimentais mostradas na figura 21. Devemos, no entanto, tomar o cuidado de considerar os efeitos de desmagnetização, particularmente na transição para-ferro. De acordo com a equação (5.38) devemos esperar uma divergência de χ^x nesta fronteira, mas devido aos efeitos de desmagnetização, a suscetibilidade observada é limitada por N^{-1} , onde N é o fator de desmagnetização. Não insistiremos neste ponto que está discutido cuidadosamente no trabalho de Shapira et al. (1981).

FIGURA 21 -

Suscetibilidade transversal uniforme em função do campo magnético aplicado segundo o eixo cristalino $\underline{b}$ para várias temperaturas diferentes. [apud Becerra et al. (1980)]

A suscetibilidade longitudinal na fase paramagnética resulta diretamente da equação (5.6). Efetuando-se a derivação obtemos

$$\chi_p^Y = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{1 + J_{oH}}{\frac{kT}{1-M^2} - J(0) + 2D} . \quad (5.43)$$

Na fase ferromagnética as equações de minimização (5.5) mostram que subsiste a relação $H = 4DM^Y$, de modo que

$$\chi_F^Y = \frac{1}{4D} . \quad (5.44)$$

Portanto a suscetibilidade longitudinal é constante na fase ferromagnética e em geral descontínua na transição para a fase paramagnética. A figura 22 mostra os resultados experimentais, onde se pode observar claramente a constância da suscetibilidade longitudinal na fase ferromagnética.

FIGURA 22 - Suscetibilidade longitudinal uniforme em função do campo magnético aplicado segundo o eixo cristalino $\underline{b}$. Para campos elevados temos a fase paramagnética, e depois, conforme decrescemos o campo, a fase "fan", e finalmente a fase ferromagnética, onde a suscetibilidade longitudinal se mantém praticamente constante. [apud Shapira et al. (1981)]

6. ANÁLISE SEGUNDO O MÉTODO DE GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO

O estudo da hamiltoniana modelo na aproximação de campo médio fornece um conjunto de resultados que estão em concordância qualitativa com os dados experimentais existentes. Neste capítulo procuraremos mostrar que o comportamento crítico do modelo no PL deve ser idêntico àquele observado no modelo ANNNI. Em particular, desejamos esclarecer como um modelo vetorial ($n = 2$) pode conduzir a um PL pertencente à mesma classe de universalidade dum modelo escalar ($n = 1$). Nesta discussão as noções oriundas do método de GR discutido no capítulo 3 serão fundamentais.

Principiaremos escrevendo a hamiltoniana efetiva do modelo s^4 associado à hamiltoniana modelo (4.1):

$$\bar{\mathcal{H}}[\vec{S}_i] = \beta \mathcal{H}[\vec{S}_i] + \sum_i \omega(|\vec{S}_i|), \quad (6.1)$$

onde a função peso $\omega(s)$ é a mesma definida pela equação (3.3). A função de partição é

$$Z = \int \prod_{\vec{x}} dS_{\vec{x}}^{\alpha} e^{-\bar{\mathcal{H}}[\vec{S}_i]} \quad (6.2)$$

Observamos que, em contraste com o modelo ANNNI em que os "spins" eram escalares, agora os "spins" são vetores clássicos com duas componentes.

Introduzindo-se a transformada de Fourier dos

"spins"

$$S_{\vec{q}}^{\alpha} = \sum_{\vec{x}} S_{\vec{x}}^{\alpha} e^{i \vec{q} \cdot \vec{x}}, \quad (6.3)$$

a hamiltoniana efetiva pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[\vec{S}_{\vec{q}}] = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} \sum_{\alpha=1}^2 \bar{u}_2^{\alpha}(\vec{q}) S_{\vec{q}}^{\alpha} S_{-\vec{q}}^{\alpha} + \\ & + \frac{b}{4} \int_{\vec{q} \vec{q}' \vec{q}''} \sum_{\alpha, \beta=1}^2 S_{\vec{q}}^{\alpha} S_{\vec{q}'}^{\alpha} S_{\vec{q}''}^{\beta} S_{-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''}^{\beta} - \beta H S_0^Y, \end{aligned} \quad (6.4)$$

onde

$$\bar{u}_2^{\alpha}(\vec{q}) = a - \beta J(\vec{q}) \mp 2\beta D, \quad (6.5)$$

com os sinais $-$ e $+$ correspondendo, respectivamente, a $\alpha = x$ e $\alpha = y$. A função de partição será

$$Z = \int [dS] e^{-\mathcal{H}[\vec{S}_{\vec{q}}]}, \quad (6.6)$$

onde

$$\int [dS] = \int \prod_{\vec{x}, \alpha} dS_{\vec{x}}^{\alpha} = \int \prod_{\vec{x}, \alpha} \frac{dS_{\vec{x}}^{\alpha}}{\sqrt{N^{\alpha}}}, \quad (6.7)$$

com a convenção

$$d S_{\vec{q}}^{\alpha} d S_{-\vec{q}}^{\alpha} = 2 d(\operatorname{Re} S_{\vec{q}}^{\alpha}) d(\operatorname{Im} S_{\vec{q}}^{\alpha}) . \quad (6.8)$$

Convém eliminar o termo linear S_0^y fazendo-se a translação de variáveis

$$S_{\vec{q}}^y \rightarrow S_{\vec{q}}^y + M \delta(\vec{q}) , \quad (6.9)$$

e escolhendo-se M satisfazendo a equação

$$-\beta H + \bar{u}_2^y(0) M + b M^3 = 0 . \quad (6.10)$$

Então, a menos de um termo independente de "spin", a hamiltoniana efetiva será

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{H}}[\vec{S}_{\vec{q}}] = & \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} \sum_{\alpha=1}^2 u_2^{\alpha}(\vec{q}) S_{\vec{q}}^{\alpha} S_{-\vec{q}}^{\alpha} + w \int_{\vec{q}, \vec{q}'} S_{\vec{q}}^y \left(\sum_{\alpha=1}^2 S_{\vec{q}'}^{\alpha} S_{-\vec{q}-\vec{q}'}^{\alpha} \right) + \\ & + u \int_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} \sum_{\alpha, \beta=1}^2 S_{\vec{q}}^{\alpha} S_{\vec{q}'}^{\alpha} S_{\vec{q}''}^{\beta} S_{-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''}^{\beta} , \end{aligned} \quad (6.11)$$

onde

$$\begin{aligned} u_2^x(\vec{q}) &= \bar{u}_2^x(\vec{q}) + b M^2 , \quad u_2^y(\vec{q}) = \bar{u}_2^y(\vec{q}) + 3b M^2 , \\ w &= b M , \quad u = b/4 . \end{aligned} \quad (6.12)$$

Como por hipótese $D > 0$, teremos sempre satisfeita a desigualdade $u_2^y(\vec{q}) > u_2^x(\vec{q})$. Portanto o campo $S_{\vec{q}}^x$ é "soft", e $S_{\vec{q}}^y$ é "non-soft". A integração dos campos $S_{\vec{q}}^y$ produzirá uma hamiltoniana efetiva onde somente estarão presentes os campos $S_{\vec{q}}^x$. Com isso em mente escreveremos a função de partição sob a forma

$$Z = \int [dS_{\vec{q}}^x] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2^x(\vec{q}) S_{\vec{q}}^x S_{-\vec{q}}^x - u \int_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} S_{\vec{q}}^x S_{\vec{q}'}^x \right. \\ \left. S_{\vec{q}''}^x S_{-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''}^x \right\} \int [dS_{\vec{q}}^y] \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2^y(\vec{q}) S_{\vec{q}}^y S_{-\vec{q}}^y \right. \\ \left. - w \int_{\vec{q}, \vec{q}'} S_{\vec{q}}^y \left(\sum_{\alpha=1}^2 S_{\vec{q}}^{\alpha} S_{-\vec{q}-\vec{q}'}^{\alpha} \right) - u \int_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} S_{\vec{q}}^y S_{\vec{q}'}^y \right. \\ \left. \left(S_{\vec{q}''}^y S_{-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''}^y + 2 S_{\vec{q}}^x S_{-\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''}^x \right) \right\}. \quad (6.13)$$

Efetuiremos a última integral perturbativamente. A razoabilidade deste procedimento esteia-se nos argumentos de GR, pois um tratamento análogo àquele desenvolvido na seção 3E demonstraria que os acoplamentos correspondentes à perturbação seriam pequenos nas proximidades do ponto fixo. Representando-se as variáveis $S_{\vec{q}}^x$ com linhas cheias e as variáveis $S_{\vec{q}}^y$ com linhas pontilhadas, os vértices perturbativos são

Na figura 23 estão representados alguns gráficos relevantes para o cálculo da integral (6.13).

FIGURA 23 - Gráficos relevantes de um e dois vértices. O número entre parênteses indica a multiplicidade do gráfico.

Após a integração, a hamiltoniana efetiva tomará, a menos de um termo independente de "spin", a forma

$$\overline{\mathcal{H}}[S_{\vec{q}}^x] = \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} u_2(\vec{q}) S_{\vec{q}}^x S_{-\vec{q}}^x + \frac{1}{4!} \int_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} u_4(\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}'')$$

$$S_{\vec{q}}^x S_{\vec{q}'}^x S_{\vec{q}''}^x S_{-\vec{q}-\vec{q}''-\vec{q}'}^x + (\text{termo de 6 "spins"}) \quad (6.14)$$

onde

$$\begin{aligned} u_2(\vec{q}) = & u_2^x(\vec{q}) + 4u \int_{\vec{p}} u_2^{Y^{-1}}(\vec{p}) - 96u^2 M^2 u_2^{Y^{-1}}(0) \\ & \int_{\vec{p}} u_2^{Y^{-1}}(\vec{p}) - 48u^2 \int_{\vec{p}} u_2^{Y^{-1}}(\vec{p}) \int_{\vec{p}} u_2^{Y^{-1}}(\vec{p}) u_2^{Y^{-1}}(\vec{p}+\vec{q}) \\ & + O(u^3), \end{aligned} \quad (6.15)$$

$$\begin{aligned} u_4(\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}'') = & 24u - 192u^2 M^2 u_2^{Y^{-1}}(\vec{q}+\vec{q}') \\ & - 96u^2 \int_{\vec{p}} u_2^{Y^{-1}}(\vec{p}) u_2^{Y^{-1}}(\vec{p}+\vec{q}+\vec{q}') + O(u^3). \end{aligned} \quad (6.16)$$

Comparando a hamiltoniana efetiva obtida acima com aquela correspondente ao modelo ANNNI, eq. (3.59), verificamos que são idênticas. Em particular, nos dois casos o coeficiente do termo quadrático q_i^2 numa das direções espaciais pode se anular conforme variamos os parâmetros do modelo. Estes parâmetros são p e T no modelo ANNNI, e T e H no modelo sob consideração. Portanto, os dois pontos de Lifshitz aparentemente distintos são na realidade idênticos, e toda a análise da seção 3D aplica-se também

a este ponto de Lifshitz. A concordância dos cálculos teóricos com os resultados experimentais é bastante notável. Em particular, o coeficiente de "crossover" calculado em primeira ordem em $\epsilon = 4,5 - d = 1,5$ fornece $\phi = 0,625$, o qual deve ser confrontado com o valor experimental obtido por Becerra et al. (1980) $\phi = 0,63 \pm 0,04$.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Conquanto acreditemos que linhas já escritas sejam suficientemente esclarecedoras dos nossos trabalhos, parece-nos apropriado um comentário final sobre os novos resultados que decorreram dos mesmos.

No estudo do modelo ANNNI na presença de um campo magnético na aproximação de campo médio podemos citar: a possibilidade do comportamento tricrítico (fato em parte antecipado por Coutinho Filho e Moura (1980)), a determinação da expressão desta linha tricrítica e o estudo de sua estabilidade, a possibilidade de surgimento dos pontos terminais críticos e duplamente críticos, e a determinação dos diagramas de fases na região modulada.

No estudo do modelo ANNNI na presença de um campo magnético através do método de GR mencionamos: a prova explícita de que a superfície crítica tem caráter $n = 2$, e de que a linha tricrítica tem comportamento tricrítico usual.

Finalmente, no estudo de um modelo microscópico para o PL observado no composto MnP destacamos: a demonstração na aproximação de campo médio de que o modelo é capaz de explicar qualitativamente todos os fatos experimentais, e a demonstração através do método de GR de que o PL pertence à mesma classe de universidade daquele do modelo ANNNI.

APÊNDICE 1 - Lista dos gráficos relevantes para a determinação das relações de recorrência em ordem ϵ para o modelo ANNNI na presença de um campo magnético. O número entre parênteses indica a multiplicidade destes gráficos.

Gráficos que contribuem para $\bar{h}$:

(1)

(1)

Gráficos que contribuem para $\bar{r}_0$:

(2)

(2)

Gráficos que contribuem para $\bar{r}_1$:

(6)

(1)

(1)

(6)

(4)

(4)

(4)

(4)

(1)

(1)

Gráficos que contribuem para $\bar{r}_2$:

(2)

(2)

(1)

Gráficos que contribuem para $\bar{w}_0$:

(24)

(4)

(4)

(24)

(24)

(24)

(6)

(24)

(24)

(6)

Gráficos que contribuem para $\overline{w}_2$:

(4)

(24)

(24)

Gráficos que contribuem para $\bar{u}$:

(72)

(2)

(24)

(24)

(72)

(2)

(16)

(144)

(144)

(6)

(96)

(96)

(192)

(6)

(24)

(24)

(24)

(24)

(36)

(36)

(96)

(24)

(96)

(252)

(6)

(96)

APÊNDICE 2 - Os coeficientes A, B e C que comparecem nas equações (5.14), (5.16) e (5.35).

$$A = \frac{a}{b}$$

$$B = \frac{a}{b^2} \left(\frac{ac}{b} - d \right)$$

$$C = \frac{M_L}{2\beta} \left(\frac{k T_L}{1 - M_L^2} - J_0 + 2D \right) \frac{a}{b^2} \left(\frac{b}{a} \alpha_T^2 + 2 \alpha_T \alpha_H - \frac{a}{b} \alpha_H^2 \right)$$

$$a = H_L \left(J_{0H} - \frac{J_0 + 2D}{T_L} \right)$$

$$b = J_0 + 2D + J_{0H} H_L - \frac{k T_L}{1 - M_L^2}$$

$$c = J_{0H} - \frac{k T_L H_L}{16 D^2 (1 - M_L^2)^2}$$

$$d = J_{0T} - \frac{k}{1 - M_L^2}$$

$$M_L = \frac{H_L}{4D}$$

APÊNDICE 3 - A energia livre paramagnética G_0 e os coeficientes A_{ij} da equação (5.18).

$$N^{-3} G_0 = -kT \ln 2 + \frac{1}{2} kT [(1+M) \ln(1+M) + (1-M) \ln(1-M)] - \frac{1}{2} J(0) M^2 + DM^2 - HM$$

$$A_{20} = \frac{1}{2} [J(0) - 2D + HM^{-1}]$$

$$A_{02} = \frac{kT}{2(1-M^2)}$$

$$A_{21} = \frac{1}{2M} \left[\frac{kT}{1-M^2} - J(0) + 2D - HM^{-1} \right]$$

$$A_{03} = \frac{kTM}{3(1-M^2)^2}$$

$$A_{40} = \frac{1}{8M^2} \left[\frac{kT}{1-M^2} - J(0) + 2D - HM^{-1} \right]$$

$$A_{22} = \frac{kT}{2(1-M^2)^2} - \frac{3kT}{4M^2(1-M^2)} + \frac{3[J(0) - 2D + HM^{-1}]}{4M^2}$$

$$A_{04} = \frac{kT}{12} \frac{1+3M^2}{(1-M^2)^3}$$

REFERÊNCIAS

- Amit D J 1978 "Field Theory, The Renormalization Group, and Critical Phenomena" (McGraw-Hill Inc.)
- Bak P e von Boehm J 1980 Phys. Rev. B21 5297
- Bak P 1981 Phys. Rev. Lett. 46 791
- Baker G A 1962 Phys. Rev. 126 2071
- Barber M N e Duxbury P M 1981 J. Phys. A14 L251, 1982 J. Phys. A15 3219
- Becerra C C, Shapira Y, Oliveira Jr N F e Chang T S 1980 Phys. Rev. Lett. 44 1692
- Berlin T H e Kac M 1952 Phys. Rev. 86 821
- Brush S G 1967 Rev. Mod. Phys. 39 883
- Coutinho Filho M D e Moura M A 1980 J. Magn. Magn. Mater. 15-18 433
- Domb C e Green M S 1976 "Phase Transitions and Critical Phenomena" vol. 6 (Academic Press Inc.)
- Droz M e Coutinho Filho M D 1976 AIP Conf. Proc. nº 29 pág. 465
- Elliott R J 1961 Phys. Rev. 124 346
- Falk H 1970 Am. J. Phys. 38 858
- Felcher G P 1966 J. Appl. Phys. 37 1056
- Fisher M E 1974 Rev. Mod. Phys. 46 597
- Fisher M E e Selke W 1980a Phys. Rev. Lett. 44 1502 , 1980b Proc. R. Soc. London 302 1

- Garel T e Pfeuty P 1976 J. Phys. C9 L245
- Hiyamizu S e Nagamiya T 1972 Intern. J. Magn. 2 33
- Hornreich R M, Luban M e Shtrikman S 1975 Phys. Rev. Lett.
35 1678
- Hornreich R M, Liebmann R, Schuster H G e Selke W 1979 Z.
Physik B35 91
- Hornreich R M 1980 J. Magn. Magn. Mater. 15-18 387
- Hubbard J 1972 Phys. Lett. 39A 365
- Ishikawa Y, Komatsubara T e Hirahara E 1969 Phys. Rev. Lett.
23 532
- Kincaid J M e Cohen E G D 1975 Phys. Rep. 22 57
- Kitano Y e Nagamiya T 1964 Prog. Theor. Phys. 31 1
- Komatsubara T, Suzuki T e Hirahara E 1969 J. Phys. Soc.
Japan 26 208, 1970 Ibid. 28 317
- Ma S K 1976 "Modern Theory of Critical Phenomena" (Benjamin,
N.Y.)
- Mandelbrot B B 1977 "Fractals: Form, Change and Dimension"
(Freeman, San Francisco)
- Michelson A 1977 Phys. Rev. B16 577
- Moon R M, Cable J W e Shapira Y 1981 J. Appl. Phys. 52 2025
- Morita T e Horiguchi T 1972 Phys. Lett. 38A 223
- Nelson D e Fisher M E 1975 Phys. Rev. B11 1030
- Niemeyer Th e van Leeuwen J M J 1973 Phys. Rev. Lett. 31
1411

- Obara H, Endoh Y, Ishikawa Y e Komatsubara T 1980 J. Phys. Soc. Japan 49 928
- Redner S e Stanley H E 1977a Phys. Rev. B16 4901, 1977b J. Phys. C10 4765
- Rujan P 1981 Phys. Rev. B24 6620
- Selke W 1978 Z. Phys. B29 133
- Selke W e Fisher M E 1979 Phys. Rev. B20 257, 1980 Z. Phys. B40 71
- Shapira Y, Becerra C C, Oliveira Jr N F e Chang T S 1981 Phys. Rev. B24 2780
- Siegert A J F 1963 Brandeis Lectures, vol. 3, pág. 159 (W. A. Benjamin, Inc.)
- Tajima K, Ishikawa Y e Obara H 1980 J. Magn. Magn. Mater. 15-18 373
- Takase A, Yashima H e Kasuya T 1979 J. Phys. Soc. Japan 47 531
- Toulouse G e Pfeuty P 1975 "Introduction au Groupe de Renormalization et à ses Application" (Presse Universitaire de Grenoble).
- Villain J e Gordon M B 1980 J. Phys. C13, 3117
- Villain J e Bak P 1981 J. Physique 42 657
- von Boehm J e Bak P 1979 Phys. Rev. Lett. 42 122
- Yokoi C S O, Coutinho Filho M D e Salinas S R 1981a Phys. Rev. B24 4047, 1981b Ibid. B24 5430
- Wilson K G 1971 Phys. Rev. B4, 3174 e 3184
- Wilson K G e Fisher M E 1972 Phys. Rev. Lett. 28 240
- Wilson K G e Kogut J B 1974 Physics Reports 12C 77