UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

**Estudo de Diagramas de Fases de Alguns Variantes
do Modelo ANNNI e de um Modelo Planar Clássico
Helicoidal**

Jair Líbero Cadorin

*Carlos Siliti Ori yohi
libero jair Cadorin*

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

SBI-IFUSP

305M810T2048

SÃO PAULO
1993

530.13

C 1252

①

2.1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Cadorin, Jair Libero

Estudo de diagramas de fases de alguns variantes do
modelo ANNI e de um modelo planar clássico helicoidal.
São Paulo, 1993.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Ins-
tituto de Física. Departamento de Física Experimental
Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Profº Dr. Carlos Seihi Ogi Yokoi

Unitermos: 1. Mecânica estatística; 2. Sistemas mo-
dulados; 3. Transições de fases; 4. Diagramas de fases.

USP/IF/SBI - 62/93

À minha esposa Elzi

Agradecimentos

Ao Professor Carlos Seihiti Orii Yokoi pela orientação, pela dedicação e pela perseverança.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

À Universidade de São Paulo.

Aos colegas do curso de Pós-Graduação e a todos que direta ou indiretamente colaboraram para que este trabalho pudesse ser realizado.

Resumo

Nesse trabalho estudamos dois tipos de modelos para a descrição dos sistemas magnéticos modulados. O primeiro é o modelo ANNNI ("Axial Next-Nearest-Neighbor Ising"). Dentro dos limites da aproximação de campo médio estudamos vários efeitos que surgem quando as interações intraplanares são menores que as interações interplanares. Investigamos em particular a ocorrência de fases desordenadas, assim denominadas por apresentar planos com magnetização nula. Estudamos ainda o comportamento dos pontos de acumulação de pontos de ramificação que determinam o limite entre as transições do tipo comensurável-comensurável e comensurável-incomensurável. Também investigamos duas variantes do modelo ANNNI, um com spin qualquer e outro com spin 1 e anisotropia de campo cristalino. O segundo tipo de modelo estudado, apropriado para sistemas apresentando modulações helicoidais das magnetizações, é um modelo planar clássico com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos numa direção axial. Restringimos o nosso estudo ao zero absoluto de temperatura. Fizemos expansões das magnetizações em série de Fourier para campos baixos e altos. Também fizemos análise de estabilidade das fases comensuráveis, dentro de uma aproximação contínua, utilizando a teoria dos sólitons. Finalmente, estudamos numericamente o diagrama de fases do modelo aplicando o método dos potenciais efetivos.

Abstract

In this work we have studied two types of models for the description of modulated magnetic systems. The first is the ANNNI (Axial Next-Nearest-Neighbor Ising) model. Within the mean-field approximation we have studied various effects which comes about when the intralayer interactions are weaker than the interlayer interactions. We have investigated in particular the possibility of partially disordered phases, characterized by the presence of layers with zero magnetization. We also have studied the behavior of the accumulation points of the branching points, which separates the commensurate-commensurate transitions from the commensurate-incommensurate transitions. We have also investigated two variants of the ANNNI model, one with an arbitrary spin and the other with spin 1 and a term of crystal-field anisotropy. The second type of the model we have studied, appropriate for systems presenting helicoidal modulation of the magnetization, is a classical planar model with nearest and next-nearest interactions along an axial direction. We have restricted our study to the absolute zero of the temperature. The magnetization is expanded in Fourier series for high and low fields. We also analyse the stability of the commensurate phases, within a continuum approximation, using the soliton theory. Finally, we construct numerically the phase diagram of the model using the method of effective potentials.

Índice

1	Introdução	8
2	Teoria de Campo Médio do Modelo ANNNI	15
2.1	Equações de Campo Médio	15
2.2	Método para Construção do Diagrama de Fases	23
2.3	Invariâncias e Simetrias do Modelo ANNNI	32
2.4	Estabilidade Intrínseca das Fases Comensuráveis	37
3	Efeito de Diminuição das Interações Intraplanares no Modelo ANNNI	51
3.1	Introdução	51
3.2	Transição por Mudança de Simetria no Interior das Fases com o mesmo Período	54
3.3	Evolução dos Pontos de Acumulação	64
4	Fases Parcialmente Desordenadas em Variantes do Modelo ANNNI	71
4.1	Introdução	71
4.2	Modelo ANNNI com Spin Qualquer	73
4.3	Modelo ANNNI com Spin 1 e Termo de Campo Cristalino	79
5	Modelo Planar Clássico Helicoidal	89
5.1	Introdução	89
5.2	Invariâncias e Simetrias do Modelo	93
5.3	Diagrama de Fases para $J_2 > 0$	94
5.4	Solução Exata na Ausência do Campo	96
5.5	Expansões para Campos Altos	100

5.6	Expansões para Campos Pequenos	107
5.7	Transição Helicoidal-“Fan”	109
5.8	Estabilidade das Fases Helicoidais Comensuráveis	113
5.9	Estabilidade das Fases “Fan” Comensuráveis	130
5.10	Diagrama de Fases pelo Método dos Potenciais Efetivos	142
6	Considerações Finais	153
A	Método de Newton-Raphson	155
B	Método dos Potenciais Efetivos	162
C	Coefficientes das Expansões das Seções 5.5 e 5.6	168
C.1	Coefficientes da Seção 5.5	168
C.2	Coefficientes da Seção 5.6	169
D	Análise da Equação de “seno-Gordon” Estático	172

Capítulo 1

Introdução

Os estudos que faremos neste trabalho estão baseados na Mecânica Estatística que lida com sistemas macroscópicos consistindo de um número muito grande de partículas. Formulações detalhadas bem como aplicações da Mecânica Estatística são encontradas em muitos livros sobre o assunto — por exemplo, Reif (1988), Pathria (1978) e Huang (1987) — e estão além dos objetivos deste trabalho.

As partículas que compõem o sistema, excetuando-se casos como o do gás ideal, interagem em geral fortemente entre si, resultando em complexos problemas matemáticos que vêm desafiando os físicos estatísticos desde o início do século.

De todos os sistemas interagentes, os sistemas magnéticos nos são de particular importância, uma vez que todos os estudos aqui realizados se enquadram nesta classe. De acordo com a Mecânica Quântica, em muitos sistemas a interação magnética entre os átomos pode ser representada através de spins efetivos localizados (Van Vleck, 1932), e o problema mecânico estatístico reduz-se ao de um sistema de spins localizados interagentes.

Os sistemas magnéticos formam ainda assim um grupo enorme, em que podem existir diversos tipos de interações entre seus spins, além

de estarem sujeitos a interações com agentes externos como campos magnéticos. Por isso os sistemas reais apresentam uma grande variedade de comportamentos, e seu entendimento é um constante desafio para os pesquisadores. A maneira para se abordar teoricamente tais sistemas é criar modelos idealizados capazes de descrever, mesmo que qualitativamente, as suas propriedades características.

Neste trabalho concentrar-nos-emos em dois tipos de modelos. O modelo ANNNI ("Axial Next-Nearest-Neighbor Ising") e dois de seus variantes, e um modelo planar clássico helicoidal. São modelos para sistemas magnéticos *modulados* onde a magnetização apresenta uma variação espacial complexa em relação à rede cristalina. Se a modulação é periódica tal estrutura é denominada comensurável e caso contrário incomensurável. Uma introdução sobre sistemas modulados em geral pode ser encontrada nos artigos de revisão de Pynn (1979), Villain (1983) e Bak (1982).

O modelo ANNNI foi introduzido por Elliott (1961) para descrever a estrutura magnética do érbio. A versão unidimensional do modelo ANNNI foi resolvida exatamente por Stephenson (1970). No ano de 1975, foi introduzido um ponto multicrítico especial, chamado *ponto de Lifshitz* (Hornreich *et al.*, 1975). Observou-se que o modelo ANNNI apresenta ponto de Lifshitz uniaxial; os expoentes críticos correspondentes foram calculados por Redner e Stanley (1977) utilizando expansões em séries de altas temperaturas. Este trabalho foi posteriormente estendido por Oitmaa (1985). Expoentes críticos do ponto de Lifshitz no modelo ANNNI foram calculados também por Selke (1978) por simulação de Monte Carlo.

Entretanto, somente no final dos anos 70 e início dos 80 é que foi percebida toda a riqueza e complexidade do modelo, devido principalmente aos trabalhos pioneiros de Selke e Fisher (1979) utilizando a

simulação de Monte Carlo, e de Bak e Böhm (1980) na aproximação de campo médio, que mostraram a existência de possivelmente infinitas fases comensuráveis e incommensuráveis.

O nome ANNNI foi cunhado por Fisher e Selke (1980) num artigo em que, aplicando expansões em séries de baixas temperaturas, provaram a existência de infinitas fases comensuráveis partindo de um ponto especial, chamado *ponto de multifase*. O comportamento do gráfico do número de onda como função do parâmetro de competição apresenta infinitos patamares e um número infinito de transições de fases de primeira ordem entre os patamares. Esse comportamento a baixas temperaturas sugere a possibilidade de que, a temperaturas mais altas, o comportamento do número de onda possa exibir a chamada *escada do diabo*, uma função insólita assim denominada por Mandelbrot (1983). Com efeito, Aubry (1983) e Bak e Bruisma (1982) provaram a existência de escadas do diabo completas em certos modelos exatamente solúveis, embora a sua existência no modelo ANNNI ainda não tenha sido comprovada.

Na década de 80 o estudo do modelo ANNNI, e mais geralmente de sistemas modulados, teve uma ascensão vertiginosa. Em retrospecto podemos dizer que esse interesse originou-se, à parte a fascinação exercida pelos intrincados diagramas de fases, pelos trabalhos de Aubry (1978) que relacionavam os sistemas modulados aos problemas encontrados em teoria de sistemas dinâmicos (Lichtenberg e Lieberman, 1983), pelo desenvolvimento de um aparato conceitual apropriado baseado na noção de *paredes de domínio* (também denominado de "*sólitons*", "*kinks*", *defeitos* ou *descomensurações*) (Fisher e Fisher, 1982), e do desenvolvimento de facilidades computacionais exigidas para a análise numérica de equações não lineares bem como para simulações Monte Carlo. Além disso não devemos esquecer o poderoso estímulo exercido pelos resultados experi-

mentais cada vez mais sofisticados e refinados (Bak, 1982).

Após a elucidação de algumas propriedades básicas das fases moduladas do modelo ANNNI, vieram na sua esteira outros modelos relacionados. Utilizando campo médio, Yokoi *et al.* (1981) foram os primeiros a estudar o modelo ANNNI na presença de um campo magnético externo. Modelos com interação até terceiros vizinhos ao longo da direção axial (Selke *et al.*, 1985) ou com interações em mais do que uma direção (Hornreich *et al.*, 1979), foram investigados. Também foram considerados modelos de Ising com interações competitivas na árvore de Cayley (Vannimenius, 1981; Thompson, 1982; Yokoi *et al.*, 1985). Nakanishi (1989 e 1990), usando a aproximação de campo médio, mostrou que algumas fases moduladas comensuráveis podem apresentar desordenamento. Neste trabalho estudaremos estes aspectos com mais detalhes e em situações as mais gerais possíveis. Discussões detalhadas abordando uma ampla variedade de assuntos sobre sistemas modulados, particularmente o modelo ANNNI e relacionados, são encontradas em vários artigos de revisão, especialmente Bak (1982), Yeomans (1988) e Selke (1988 e 1992).

O estudo de sistemas onde o ordenamento dos spins segue geometria helicoidal teve seu ponto de partida nas observações de Yoshimori (1959) predizendo o ordenamento helicoidal no MnO_2 . Atualmente conhecem-se muitos metais terras raras como *Tb*, *Dy*, *Ho*, *Eu*, e diversos outros compostos de manganês como $MnAu_2$ e MnP que podem exibir estruturas helicoidais de spins planares. Para uma revisão detalhada e completa, com muitas referências, sobre o magnetismo helicoidal na década de 60, remetemos o leitor aos artigos de Nagamiya (1967) e Cooper (1968). O interesse atual por tais sistemas pode ser medido pelas investigações experimentais recentes. Transições de fases e expansões térmicas do hólmio foram investigadas experimentalmente por

White (1989) e Belovol e Finkel (1976), transições helico-ferromagnéticas no composto $Ho - Tb$, por Plessis *et al.* (1990), histerese no comportamento magnético do hólmio por Vanter *et al.* (1990). Várias novas fases do hólmio na presença de campo magnético foram descobertas por Steinitz *et al.* (1987) e Steinitz *et al.* (1989). Propriedades magnetoelásticas do térbio (Jiles *et al.*, 1984), estrutura de domínios num cristal de térbio (Vorobev *et al.*, 1990) e diagrama de fases magnético do térbio (Kataev *et al.*, 1989) foram investigados. O ponto de Lifshitz no MnP foi investigado por Becerra *et al.* (1980) e Bindilatti *et al.* (1989), e o comportamento da magnetização na fase "fan" por Becerra *et al.* (1988).

Entre os estudos teóricos sobre o magnetismo helicoidal, o modelo planar clássico com interações competitivas na presença de um campo magnético foi considerado por Nagamiya *et al.* (1962) que desenvolveram uma teoria analítica aproximada para mostrar o ordenamento helicoidal formado pelos spins no zero absoluto de temperatura. Mais tarde, Robinson e Erdős (1970), estudaram numericamente as equações de minimização de energia a $T = 0$ do modelo. Os resultados de Nagamiya foram confirmados e melhorados. Uma outra teoria analítica foi desenvolvida por Kitano e Nagamiya (1964) para estudar o modelo anterior, agora para temperaturas finitas. Entretanto, mesmo o estado fundamental continua sendo ainda um grande desafio e novas investigações se fazem necessárias. Nosso trabalho se desenvolverá a partir desta proposta, ou seja, buscaremos resultados melhores e mais completos sobre o diagrama de fases do modelo a $T = 0$.

A seguir detalharemos o plano desta tese.

No capítulo 2 faremos uma revisão da teoria de campo médio para a solução do modelo ANNNI. Na seção 2.1 estabeleceremos as equações de campo médio. Na seção 2.2 discutiremos os métodos utilizados

para a construção do diagrama de fases partindo das equações de campo médio. Na seção 2.3 as propriedades de invariância e simetria do modelo são estudadas. Na seção 2.4 estabeleceremos as condições para que uma estrutura comensurável seja um mínimo local da energia livre.

No capítulo 3 estudaremos os efeitos decorrentes da diminuição das interações intraplanares comparadas às interações interplanares. Na seção 3.2 estudaremos as condições para o surgimento das fases parcialmente desordenadas, e também as transições entre fases com mesmo período mas com simetrias diferentes. Na seção 3.3 discutiremos o comportamento dos pontos de acumulação quando a interação intraplanar é diminuída.

No capítulo 4 estudaremos dois variantes do modelo ANNNI, buscando encontrar fases parcialmente desordenadas nesses modelos. Na seção 4.2 consideraremos o modelo ANNNI com spin qualquer. Verificaremos que o aumento do spin não facilita o surgimento das fases parcialmente desordenadas. Na seção 4.3 consideraremos o modelo ANNNI com spin 1 e termo de campo cristalino. Nesse caso verificaremos que surgem fases parcialmente desordenadas e transição entre fases com mesmo período e diferentes simetrias mesmo quando não diminuimos as interações intraplanares.

No capítulo 5 estudaremos um modelo planar clássico capaz de exibir ordenamento helicoidal no zero absoluto de temperatura. Na seção 5.2 mostraremos que o modelo apresenta propriedades de invariância e simetria análogos ao do modelo ANNNI. Na seção 5.3 construiremos o diagrama de fases para o caso em que não há frustração entre interações primeiras e segundas vizinhas. Na seção 5.4 apresentaremos a solução exata do modelo para campo nulo. Na seção 5.5 obteremos soluções aproximadas na região de campos altos para a estrutura "fan" como uma

expansão em série. Na seção 5.6 obteremos soluções aproximadas na região de campos baixos para estrutura helicoidal na forma de uma expansão em série. Na seção 5.7 investigaremos de uma forma aproximada a transição entre as fases "fan" e helicoidal. Na seção 5.8 investigaremos a estabilidade das fases helicoidais comensuráveis dentro de uma aproximação contínua utilizando a teoria dos sólitons. Na seção 5.9 uma investigação semelhante é feita para as fases "fan" comensuráveis. Finalmente, na seção 5.10 estudaremos o diagrama de fases do modelo pelo método dos potenciais efetivos.

No apêndice A discutiremos o método de Newton aplicado à solução das equações de minimização. Mostraremos como o cálculo numérico pode ser otimizado.

No apêndice B faremos uma breve exposição do método dos potenciais efetivos.

No apêndice C foram coletados vários coeficientes que surgem nas expansões das seções 5.5 e 5.6.

No apêndice D analisaremos a equação de "seno-Gordon" estático que surge na aproximação contínua das seções 5.8 e 5.9.

Capítulo 2

Teoria de Campo Médio do Modelo ANNNI

2.1 Equações de Campo Médio

O modelo ANNNI é talvez o mais simples modelo para sistemas magnéticos modulados apresentando um complexo diagrama de fases e que tem sido útil na descrição de muitas substâncias (Yeomans, 1988). É um modelo de Ising caracterizado por interações competitivas em uma direção particular, na qual os spins primeiros e segundos vizinhos interagem com constante de troca J_1 e J_2 , respectivamente. Nos planos perpendiculares a esta direção os spins se acoplam ferromagneticamente ($J_0 > 0$). É usual tomar a direção axial, aquela perpendicular aos planos, como sendo a direção cartesiana representada pelo eixo z . Quando há competição entre J_1 e J_2 surge o fenômeno denominado frustração (Toulouse, 1977) que possibilita o surgimento de fases moduladas.

O modelo ANNNI com spin $1/2$ na ausência do campo magnético externo é definido pela hamiltoniana,

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (2.1)$$

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

Os spins $\sigma_i = \pm 1$ estão localizados nos sítios l_i de uma rede cúbica simples e as constantes de troca são dadas por

$$J_{ij} = \begin{cases} J_0 & \text{se } l_i - l_j = \pm e_x, \pm e_y \\ J_1 & \text{se } l_i - l_j = \pm e_z \\ J_2 & \text{se } l_i - l_j = \pm 2e_z \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (2.2)$$

onde e_x , e_y e e_z são os versores nas direções dos eixos cartesianos (a constante da rede é tomada igual à unidade). O número de sítios da

rede na direção de qualquer um dos eixos será denotado por N e serão impostas condições de contorno periódicas em todas as direções espaciais. A figura 2.1 ilustra o modelo ANNNI numa rede cúbica simples.

Não se conhece a solução exata desse modelo em mais que uma dimensão (Stephenson, 1970), o que é natural pois mesmo o modelo de Ising convencional somente foi resolvido exatamente em uma e duas dimensões sendo que, neste último caso, apenas na ausência de campo magnético externo (Huang, 1987). Assim, métodos aproximados devem ser empregados, alguns deles citados no capítulo 1. Um dos métodos aproximados mais simples e largamente empregado, embora as suas limitações na descrição quantitativa dos fenômenos críticos seja bem conhecida (Stanley, 1971), é a aproximação de campo médio (veja, por exemplo, Smart, 1966).

A teoria de campo médio no modelo ANNNI foi inicialmente utilizada por Elliott (1961) e, posteriormente, por Bak e Böhm (1980), Yokoi *et al.* (1981), Jensen e Bak (1983) e Selke e Duxbury (1984). Bak e Böhm foram os primeiros a documentar a existência de um grande número de fases comensuráveis, mas foram Selke e Duxbury que exploraram melhor a técnica de campo médio, construindo diagramas de fases mais detalhados.

Um dos métodos para se obter a aproximação de campo médio baseia-se na desigualdade de Bogoliubov (Falk, 1970),

$$F_{\text{exata}} \leq F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \equiv F, \quad (2.3)$$

onde F_0 é a energia livre correspondente a qualquer hamiltoniana $\mathcal{H}_0$ e $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$ uma média térmica tomada em relação a $\mathcal{H}_0$.

Para se obter a aproximação de campo médio toma-se para $\mathcal{H}_0$ uma hamiltoniana livre, isto é, sem envolver interações entre os spins. Para este problema escolhemos

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_i H_i \sigma_i, \quad (2.4)$$

onde H_i são os parâmetros variacionais. A função de partição correspondente Z_0 pode ser calculada facilmente pois o traço é totalmente fatorizável:

$$\begin{aligned} Z_0 &= \text{Tr } e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \text{Tr } \prod_i e^{\beta H_i \sigma_i} = \prod_i \text{Tr } e^{\beta H_i \sigma_i} \\ &= \prod_i (2 \cosh \beta H_i), \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde $\beta = 1/kT$, sendo T a temperatura absoluta e k a constante de Boltzmann. Portanto,

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} \sum_i \ln(2 \cosh \beta H_i). \quad (2.6)$$

Temos também que

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle_0 \langle \sigma_j \rangle_0 + \sum_i H_i \langle \sigma_i \rangle_0, \quad (2.7)$$

onde

$$\langle \sigma_i \rangle_0 = \frac{\text{Tr } \sigma_i e^{\beta \mathcal{H}_0}}{\text{Tr } e^{\beta \mathcal{H}_0}} = \frac{\text{Tr } \sigma_i e^{\beta H_i \sigma_i}}{\text{Tr } e^{\beta H_i \sigma_i}} = \tanh \beta H_i. \quad (2.8)$$

Ao invés dos parâmetros variacionais H_i é conveniente trabalhar com as variáveis

$$m_i \equiv \langle \sigma_i \rangle_0 = \tanh \beta H_i. \quad (2.9)$$

H_i e m_i possuem as interpretações físicas, respectivamente, de campos efetivos e magnetizações locais no sítio i . Para expressar F_0 em termos somente das variáveis m_i observamos inicialmente que

$$m_i = \frac{\partial}{\partial(\beta H_i)} \ln(2 \cosh \beta H_i), \quad (2.10)$$

de modo que $\ln(2 \cosh \beta H_i)$ pode ser escrito como uma integral de m_i em relação a H_i . Assim,

$$\begin{aligned} F(\{m_i\}) = & - kTN^3 \ln 2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \\ & - \sum_i \int_0^{H_i} m_i dH_i + \sum_i H_i m_i, \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde N^3 é o número total de spins do sistema. Integrando-se por partes e utilizando (2.9) resulta

$$\begin{aligned}
F(\{m_i\}) = & -kTN^3 \ln 2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \\
& + kT \sum_i \int_0^{m_i} \tanh^{-1} m_i dm_i.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Na hipótese de que a magnetização seja uniforme dentro dos planos perpendiculares ao eixo z obtemos, após resolver a integral acima,

$$\begin{aligned}
N^{-2} F(\{m_n\}) = & -kTN \ln 2 \\
& - \frac{1}{2} \sum_n [4J_0 m_n^2 + J_1 m_n (m_{n+1} + m_{n-1}) + J_2 m_n (m_{n+2} + m_{n-2})] \\
& + \frac{kT}{2} \sum_n [(1 + m_n) \ln(1 + m_n) + (1 - m_n) \ln(1 - m_n)],
\end{aligned} \tag{2.13}$$

onde m_n denota agora a magnetização por sítio no interior do n -ésimo plano na direção z .

A condição para um extremo da energia livre,

$$\frac{\partial F}{\partial m_n} = 0,$$

leva às equações de campo médio,

$$m_n = \tanh \beta [4J_0 m_n + J_1 (m_{n+1} + m_{n-1}) + J_2 (m_{n+2} + m_{n-2})]. \tag{2.14}$$

Na seção seguinte discutiremos em detalhe os problemas envolvidos na solução desse sistema de equações não lineares.

Na proximidade da transição da fase ordenada para a fase paramagnética, que esperamos ser de segunda ordem, um tratamento analítico aproximado é possível, já que a magnetização por spin pode ser suposta muito pequena. Dessa forma, das equações (2.14), obtemos

$$\begin{aligned} & \beta [4J_0 m_n + J_1(m_{n+1} + m_{n-1}) + J_2(m_{n+2} + m_{n-2})] \\ & = \tanh^{-1} m_n \approx m_n. \end{aligned} \quad (2.15)$$

A transformada de Fourier da equação acima é

$$m_q = \frac{1}{N} \sum_n m_n e^{-iqn}, \quad (2.16)$$

onde

$$m_q \approx \beta J(q) m_q, \quad (2.17)$$

e

$$J(q) = 4J_0 + 2J_1 \cos q + 2J_2 \cos 2q \quad (2.18)$$

é a transformada de Fourier das constantes de troca.

Quando a temperatura do sistema é diminuída a partir da fase paramagnética, a equação acima admite solução não trivial pela primeira vez para valor de q que maximiza $J(q)$ e satisfaça a igualdade $\beta J(q) = 1$. Portanto a temperatura crítica T_c de transição para a fase paramagnética é dada por

$$kT_c = J(q_c), \quad (2.19)$$

onde q_c é o número de onda crítico que maximiza $J(q)$ e é dado por

$$q_c = \begin{cases} 0 & \text{se } \kappa \leq 1/4 \\ \cos^{-1} \frac{1}{4\kappa} & \text{se } \kappa > 1/4, \end{cases} \quad (2.20)$$

sendo que κ mede a competição entre as interações primeiras e segundas vizinhas na direção axial,

$$\kappa = -\frac{J_2}{J_1}. \quad (2.21)$$

A linha crítica $T_c(\kappa)$ é dada por

$$kT_c(\kappa) = \begin{cases} 4J_0 + 2(1 - \kappa)J_1 & \text{se } \kappa \leq 1/4 \\ 4J_0 + \left(\frac{1}{4\kappa} + 2\kappa\right)J_1 & \text{se } \kappa > 1/4 \end{cases} \quad (2.22)$$

O ponto de Lifshitz se localiza em $\kappa = 1/4$, e divide a linha crítica em duas partes conforme a transição se dá para a fase ferromagnética ($\kappa \leq 1/4$) ou fase modulada ($\kappa > 1/4$).

2.2 Método para Construção do Diagrama de Fases

Nesta seção consideraremos o problema do levantamento do diagrama de fases do modelo ANNNI baseados na solução das equações de campo médio (2.14). Embora nos limitemos ao modelo ANNNI, os procedimentos aqui indicados são bastante gerais para serem aplicados à maioria dos modelos para sistemas modulados nos quais a minimização da energia ou da energia livre conduzem a um conjunto de equações não lineares acopladas. Um método completamente diferente que não se baseia na solução das equações de minimização e denominado método do potencial efetivo (Griffiths e Chou, 1986), está discutido no apêndice B.

Para determinar a solução com menor energia livre para um dado conjunto de parâmetros J_0 , J_1 , J_2 e T devemos, em princípio, determinar *todas* as soluções com períodos $Q = 1, 2, 3, \dots, \infty$ e escolher aquela com menor energia livre. Obviamente na prática isso não é possível, pois por um lado a determinação de todas as soluções com um dado período Q é um problema numérico delicado ¹, e de outro a limitação do recurso computacional impõe um limite superior $Q_{\max}$ para valores de Q que podem ser considerados. Entretanto, partindo-se de diferentes condições iniciais podemos obter uma amostra abrangente de soluções para um dado período Q , e considerando-se valor de $Q_{\max}$ suficientemente grande poderemos construir um diagrama de fases aproximado. Esse foi o procedimento adotado por Bak e Böhm (1980) e Yokoi *et al.* (1981) que consideraram $Q_{\max}$ da ordem de 20. Um diagrama de fases construído dessa forma deve ser considerado rudimentar e não confiável, principalmente a temperaturas mais altas onde se espera que haja dominância de fases com períodos longos.

¹Press *et al.* (1987) dizem: "We make an extreme, but wholly defensible, statement: There is no good, general methods for solving systems of more than one nonlinear equation."

Figura 2.2: Diagrama de fases do modelo ANNNI (Selke e Duxbury, 1984), obtido a partir das soluções numéricas das equações (2.14), com $J_0 = J_1$. L é o ponto de Lifshitz.

Para se construir um diagrama de fases mais detalhado é necessário considerar valores de $Q_{\max}$ bem maiores que 20, da ordem de 10^3 , além de adotar algum processo sistemático baseado em considerações físicas, pois caso contrário o volume de cálculo computacional torna-se proibitivo. Selke e Duxbury (1984) foram capazes de construir um diagrama de fases bastante detalhado do modelo ANNNI, mostrado na figura 2.2, utilizando um processo sistemático que eles denominaram de *processo de ramificação*. As fases nessa figura estão rotuladas segundo uma notação introduzida por Fisher e Selke (1980). Por exemplo, $\langle 3 \rangle$ significa que três planos com magnetizações orientados para cima são segui-

dos por três planos com magnetizações orientados para baixo e assim por diante, e corresponde a uma fase com número de onda $q = 2\pi(1/6)$:

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

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

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

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

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

Suponhamos que queiramos determinar a fronteira à direita de uma fase A e que saibamos, por exemplo, por meio de um cálculo rudimentar com $Q_{\max}$ da ordem de 20, que existe uma fase B à direita de A . Então o método de Selke e Duxbury consiste em confrontar a energia livre da fase A com as energias livres das fases $\langle AB \rangle$, $\langle AAB \rangle$, $\langle AAAB \rangle$, ..., $\langle A^j B \rangle$, Se a transição de fase se dá para uma fase com $j < \infty$ então a transição é de primeira ordem da fase comensurável A para a fase comensurável $\langle A^j B \rangle$, ou seja, a transição é do tipo comensurável-comensurável. Por outro lado, se a transição se dá somente para $j \rightarrow \infty$, então a transição é de segunda ordem para uma fase incomensurável, ou

seja, a transição é do tipo comensurável-incomensurável. O procedimento de Selke e Duxbury encontra a sua justificativa no mecanismo de criação de paredes ou defeitos, pois a estrutura do tipo B pode ser considerada uma parede ou defeito numa matriz formada pelas estruturas do tipo A (Fisher e Szpilka, 1987). A transição comensurável-incomensurável denota uma interação repulsiva entre as paredes, enquanto uma transição comensurável-comensurável indica uma interação atrativa.

O procedimento de Selke e Duxbury pode ser formulado mais precisamente em termos da teoria das *seqüências de Farey*. A seqüência de Farey é uma forma sistemática de gerar todos os números racionais entre 0 e 1 em forma de frações irredutíveis em ordem crescente (Iyanaga e Kawada, 1980). A seqüência de Farey de ordem n é uma seqüência de todas as frações irredutíveis entre 0 e 1 cujos denominadores não ultrapassam n . Assim a seqüência de Farey de ordem 5 é

$$\frac{0}{1}, \frac{1}{5}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{1}{2}, \frac{3}{5}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}, \frac{4}{5}, \frac{1}{1}. \quad (2.23)$$

A condição necessária e suficiente para que a fração a/b seja seguida por c/d , isto é, que c/d seja *adjacente superior* à fração a/b na seqüência de Farey de ordem n é

$$b + d \geq n + 1, \quad bc - ad = 1. \quad (2.24)$$

Neste caso a fração $(a + d)/(b + d)$ é chamada de *mediante* de a/b e c/d . Interpolando-se a seqüência de Farey de ordem n com tais medianes satisfazendo $b + d = n + 1$ obtemos a seqüência de Farey de ordem $n + 1$.

Consideremos o problema de determinar as fronteiras de uma fase comensurável com número de onda $q = 2\pi(P/Q)$. A fração P/Q faz a sua primeira aparição na sequência de Farey de ordem Q . Seja M/N a fração adjacente superior ou inferior a P/Q nesta sequência. Então todas as frações adjacentes de q terão a forma

$$q_l = 2\pi \frac{Pl + M}{Ql + N} \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (2.25)$$

como consequência da construção da sequência de Farey através das medianas. Devemos observar que os números de onda q_l assim gerados coincidem essencialmente com os números de onda das fases obtidas por meio do processo de ramificação de Selke e Duxbury. Entretanto a formulação em termos da sequência de Farey deixa patente que o processo gera todos os números de onda racionais vizinhos a q . Para se determinar a fronteira da fase q comparamos a sua energia livre com as fases q_l dadas pela equação (2.25). Se denotarmos por $\kappa_c(l)$ o valor de κ onde as energias livres das fases q e q_l se igualam, então a transição se dará da fase q para a fase q_l para o menor valor de l tal que

$$\kappa_c(l+1) > \kappa_c(l) \quad \text{se } q < 2\pi(N/M), \quad (2.26)$$

ou

$$\kappa_c(l+1) < \kappa_c(l) \quad \text{se } q > 2\pi(N/M). \quad (2.27)$$

Se $l = \infty$ a transição será do tipo comensurável-incomensurável. Nesses casos podemos efetuar uma interpolação polinomial para obter com bastante precisão o ponto de transição.

Como exemplo consideremos o problema de determinar as fronteiras da fase $q = 2\pi(1/6)$. A sequência de Farey de ordem 6 até a fração $1/4$ é:

$$\frac{0}{1}, \frac{1}{6}, \frac{1}{5}, \frac{1}{4} \quad (2.28)$$

Portanto, para determinar a fronteira superior da fase $q = 2\pi(1/6)$, devemos calcular e comparar a energia livre da fase $q = 2\pi(1/6)$ com as energias das fases,

$$\frac{q_l}{2\pi} = \frac{l+1}{6l+5} = \frac{1}{5}, \frac{2}{11}, \frac{3}{17}, \dots \quad (2.29)$$

e para determinar a fronteira inferior com as energias livres das fases

$$\frac{q_l}{2\pi} = \frac{l+0}{6l+1} = \frac{0}{1}, \frac{1}{7}, \frac{2}{13}, \dots \quad (2.30)$$

O comportamento das energias livres dessas fases está mostrado na figura 2.3. Um gráfico como este é fundamental como ponto de partida para se estudar e construir um diagrama de fases.

Para se determinar as soluções numéricas das equações de minimização utilizamos basicamente dois métodos: o método iterativo e

Figura 2.3: Exemplo de variação da energia livre em função de $\kappa = -J_2/J_1$ no modelo ANNNI. Neste diagrama tomamos $kT/J_1 = 4, 3$ e $J_0 = J_1$.

o método de Newton. No método iterativo a magnetização da i -ésima iteração é calculada através de

$$m_n^{(i)} = \tanh \beta \left[4J_0 m_n^{(i-1)} + J_1 (m_{n+1}^{(i-1)} + m_{n-1}^{(i-1)}) + J_2 (m_{n+2}^{(i-1)} + m_{n-2}^{(i-1)}) \right]. \quad (2.31)$$

com condições de contorno periódicas $m_{n+Q}^{(i)} = m_n^{(i)}$. As principais vantagens do método iterativo são a facilidade de programação, a ausência de

instabilidade numérica e a baixíssima quantidade de memória requisitada, uma vez que necessitamos apenas de um vetor para armazenar a solução inicial e outro para armazenar a solução melhorada. Já o método de Newton pode apresentar instabilidade numérica e utiliza maior quantidade de memória, embora essa não seja uma grande desvantagem porque pode-se aproveitar as simetrias do problema e a natureza esparsa da matriz. Essas questões assim como a formulação precisa do método de Newton estão melhor discutidas no apêndice A. Apesar de não ser tão robusto quanto o método iterativo, o método de Newton é insubstituível nas situações em que inexiste o método iterativo ou ele torna-se lento, como na região de temperaturas altas, pois a convergência do método de Newton é sempre rápida.

Qualquer que seja o método adotado para a solução das equações de minimização, é preciso que seja feita uma escolha adequada da solução tentativa inicial para que se observe a convergência para o tipo de solução desejada. Para períodos pequenos — tipicamente Q menores que 20 — qualquer das escolhas seguintes é adequada: A primeira consiste simplesmente em impor os valores iniciais das magnetizações como $m_n = \pm 1$ de acordo com o processo de ramificação de Selke e Duxbury. Assim, por exemplo, a solução tentativa inicial para uma fase com $q = 2\pi(1/5)$ será $\{m_n\} = \{1, 1, -1, -1, -1\}$. A segunda proposta consiste em tomar a solução inicial como sendo puramente harmônica:

$$m_n = A \cos(qn + \phi), \quad (2.32)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots, Q$. Essas duas formas de se gerar soluções tentativas iniciais são muito grosseiras, acarretando para períodos longos con-

vergências para soluções indesejadas ou mesmo divergência. No caso dos períodos longos verificamos que é necessário ir construindo uma seqüência de soluções com períodos crescentes, e utilizar a solução para a fase q_l para gerar solução tentativa da fase q_{l+1} . Suponhamos então que se tenha a solução para a fase

$$\frac{q_l}{2\pi} = \frac{Pl + M}{Ql + N} = \frac{P_l}{Q_l}, \quad (2.33)$$

e precisamos de uma solução tentativa para a fase

$$\frac{q_{l+1}}{2\pi} = \frac{P(l+1) + M}{Q(l+1) + N} = \frac{P_{l+1}}{Q_{l+1}}. \quad (2.34)$$

Vemos que,

$$Q_{l+1} = Q_l + Q. \quad (2.35)$$

Como Q pode ser par ou ímpar, as paridades dos períodos de q_l e q_{l+1} podem ser diferentes, e assim, as fases não terão estruturas semelhantes. É melhor, então, obter q_{l+2} a partir de Q_l :

$$\frac{q_{l+2}}{2\pi} = \frac{P(l+2) + M}{Q(l+2) + N} = \frac{P_{l+2}}{Q_{l+2}}, \quad (2.36)$$

já que,

$$Q_{l+2} = Q_l + 2Q, \quad (2.37)$$

tem sempre a mesma paridade de Q_l . Considerando-se as seqüências $q_1, q_3, q_5, \dots$ e $q_2, q_4, q_6, \dots$ examinamos todas as fases do tipo q_l .

2.3 Invariâncias e Simetrias do Modelo ANNNI

Os estudos numéricos das estruturas comensuráveis do modelo ANNNI mostram que em geral elas apresentam centros de simetria por reflexão ou por inversão. A figura 2.4 mostra alguns exemplos, onde o sinal $\bullet$ marca centro de simetria por reflexão e o sinal $\times$ marca centro de simetria por inversão.

Diremos que uma fase comensurável é simétrica se apresenta ao menos um centro de simetria no período. As fases comensuráveis não precisam ser necessariamente simétricas, pois existem também fases sem nenhum centro de simetria desse tipo, denominadas assimétricas, como veremos no capítulo 3. Nessa seção pretendemos examinar o número e os tipos de centros de simetria que podem existir numa fase comensurável simétrica.

É fácil verificar que a energia livre (2.13) é invariante sob as seguintes transformações :

$$(1) \ m_n \rightarrow -m_n \quad (2.38)$$

$$(2) \ m_n \rightarrow m_{n+1} \quad (2.39)$$

$$(3) \ m_n \rightarrow m_{-n} \quad (2.40)$$

$$(4) \ m_n \rightarrow -m_{-n}. \quad (2.41)$$

Figura 2.4: Exemplos de fases comensuráveis simétricas. Os sinais • indicam centros de simetria por reflexão, e os sinais x os centros de simetria por inversão. As setas denotam magnetização por sítio na direção z e cada uma representa um plano xy inteiro.

A invariância expressa em (1) implica que a energia livre não é afetada por uma inversão global das magnetizações. A transformação (2) é uma translação por uma unidade de rede e será denotada por T ; a transformação (3), reflexão em torno do eixo perpendicular ao eixo axial do modelo e passando pela origem, por R ; e a transformação (4), inversão em relação à origem, por I .

Vamos demonstrar inicialmente que se uma fase de período Q é simétrica, então ela deve apresentar pelo menos dois centros de simetria no período. A transformação

$$RT^{2n_0} : m_n \rightarrow m_{-n-2n_0}, \quad (2.42)$$

representa reflexão segundo o eixo passando pelo ponto $-n_0$, e

$$RT^{2n_0+1} : m_n \rightarrow m_{-n-2n_0-1}, \quad (2.43)$$

representa reflexão segundo o eixo passando pelo ponto $-n_0 - 1/2$. Analogamente,

$$IT^{2n_0} : m_n \rightarrow -m_{-n-2n_0}, \quad (2.44)$$

representa inversão em relação ao ponto $-n_0$, e

$$IT^{2n_0+1} : m_n \rightarrow -m_{-n-2n_0-1} \quad (2.45)$$

representa inversão em relação ao ponto $-n_0 - 1/2$.

Seja C uma estrutura periódica de período Q e com um eixo de simetria por reflexão passando por $n = n_0$. Então,

$$RT^{-2n_0}C = C, \quad (2.46)$$

e, como $C = T^{-Q}C$,

$$RT^{-2n_0-Q}C = C, \quad (2.47)$$

o que mostra que também existe um eixo de simetria por reflexão passando por $n = n_0 + Q/2$. Ou seja, quando existem eixos de simetria por reflexão numa estrutura periódica de período Q , eles estão espaçados de $Q/2$. Da mesma forma, quando existem centros de simetria por inversão, eles estão separados de $Q/2$.

Para maior comodidade vamos chamar um centro de simetria por reflexão de centro R , e centro de simetria por inversão de centro I . Os centros de simetria podem coincidir com os planos das magnetizações ou se encontrar no ponto médio entre eles. Vamos distinguir os dois casos com os índices 1 e 2, respectivamente. Incidentalmente, se o centro de simetria por inversão coincidir com o plano de magnetização, ou seja, se o centro for do tipo I_1 , então a magnetização desse plano será

necessariamente nula, caso em que é denominado plano desordenado. A partir do fato demonstrado acima de que existem ao menos dois centros de simetria por período, levantamos as seguintes possibilidades quanto aos centros de simetria que podem existir em fases comensuráveis.

1. Se Q for par, pode existir apenas dois centros de simetrias de um único tipo R_1 , R_2 , I_1 ou I_2 . A figura 2.4.a mostra uma fase $q = 2\pi(1/8)$ em que existem apenas dois centros R_1 por período, e a figura 2.4.b uma fase $q = 2\pi(1/8)$ em que existem apenas dois centros I_2 por período.
2. Se Q for par e $Q/2$ também for par pode haver até quatro centros de simetria, dois do tipo R_1 e dois do tipo I_1 , ou dois do tipo R_2 e dois do tipo I_2 . A figura 2.4.c mostra uma fase $q = 2\pi(1/8)$ em que existem quatro centros de simetria por período, dois do tipo R_2 e dois do tipo I_2 .
3. Se Q for par e $Q/2$ for ímpar pode haver até quatro centros de simetria, dois do tipo R_1 e dois do tipo I_2 , ou dois do tipo R_2 e dois do tipo I_1 . A figura 2.4.d mostra uma fase $q = 2\pi(1/6)$ em que existem quatro centros de simetria por período, dois do tipo R_1 e dois do tipo I_2 .
4. Se Q for ímpar pode haver no máximo dois centros de simetria, um do tipo R_1 e outro do tipo R_2 , ou um do tipo I_1 e outro do tipo I_2 . A figura 2.4.e mostra uma fase $q = 2\pi(1/5)$ em que existem um centro do tipo R_1 e outro do tipo R_2 por período.

As propriedades de simetria das fases comensuráveis podem ser utilizadas com proveito na solução das equações de minimização da

energia livre (2.14) para períodos longos. Com efeito, a existência de dois centros de simetria por período implica que existem basicamente $Q/2$ magnetizações independentes a serem determinadas, enquanto a existência de quatro centros de simetria implica que existem basicamente $Q/4$ magnetizações a serem determinadas. Isso reduz praticamente em metade ou em um quarto o número de equações a serem resolvidas, e conseqüentemente o tempo computacional na mesma proporção, o que é muito vantajoso quando precisamos investigar períodos longos, muitas vezes da ordem de 10^3 .

2.4 Estabilidade Intrínseca das Fases Comensuráveis

Uma condição necessária para que uma solução das equações de campo médio (2.14) seja fisicamente aceitável é que ela deve representar um mínimo local da energia livre. É claro que o que nos interessa verdadeiramente é o mínimo absoluto, mas o critério de que seja ao menos um mínimo local pode descartar de imediato certas soluções espúrias. Podemos dizer que uma fase comensurável que seja um mínimo local é intrinsecamente estável, embora não signifique que seja estável em comparação com outras fases.

Nesta seção vamos rever um resultado discutido por Jensen e Bak (1983) em relação à teoria de campo médio do modelo ANNNI, baseado num trabalho anterior de Janssen e Tjon (1983) sobre um modelo diferente. O resultado estabelece que uma solução das equações de campo médio do modelo ANNNI é instável se a matriz jacobiana do mapeamento possuir autovalores complexos de módulo 1. É um resultado muito útil, principalmente para se examinar a estabilidade das estruturas

assimétricas frente às estruturas simétricas. Os resultados que vamos obter sobre os autovalores da matriz jacobiana serão também úteis para o cálculo de pontos de acumulação de pontos de ramificação que serão discutidos no capítulo seguinte.

Vimos que a energia livre F na aproximação de campo médio é dada pela equação (2.13). A condição para que $\{m_n\}$ seja um extremo da energia livre é,

$$\begin{aligned} N^{-2} \frac{\partial F}{\partial m_n} = & kT \tanh^{-1} m_n - 4J_0 m_n - J_1(m_{n-1} + m_{n+1}) \\ & - J_2(m_{n+2} + m_{n-2}) = 0, \end{aligned} \quad (2.48)$$

e a condição para que o extremo seja um mínimo local é,

$$N^{-2} \delta^2 F = N^{-2} \frac{\partial^2 F}{\partial m_n \partial m_{n'}} \delta m_n \delta m_{n'} = A_{nn'} \delta m_n \delta m_{n'} > 0, \quad (2.49)$$

onde

$$\begin{aligned} A_{nn'} = & N^{-2} \frac{\partial^2 F}{\partial m_{n'} \partial m_n} = \left[\frac{kT}{1 - m_n^2} - 4J_0 \right] \delta_{n',n} - \\ & - J_1(\delta_{n',n-1} + \delta_{n',n+1}) - J_2(\delta_{n',n-2} + \delta_{n',n+2}). \end{aligned} \quad (2.50)$$

A equação (2.49) deve valer para δm_n arbitrário, ou seja, a matriz $A = (A_{nn'})$ deve ser *positiva definida*.

Para testar se uma solução das equações de extremo (2.48) com período Q é um mínimo local, vamos seguir Janssen e Tijon (1983)

e considerar o movimento de $N = MQ$, M inteiro, partículas de massa unitária com a energia dada por

$$E = T + V = \sum_n \frac{1}{2} \dot{x}_n^2 + \frac{1}{2} \sum_{nn'} A_{nn'} x_n x_{n'} \quad (2.51)$$

sujeitas a condições periódicas de contorno

$$x_{n+N} = x_n. \quad (2.52)$$

As equações de movimento são,

$$\ddot{x}_n = - \sum_{n'} A_{nn'} x_{n'}. \quad (2.53)$$

Como os $\{m_n\}$ são periódicos com período Q , o mesmo é verdade para $kT/(1-m_n^2) - 4J_0$ que comparecem na expressão para $A_{nn'}$ em (2.50). Portanto a célula unitária do sistema contém Q partículas e podemos buscar soluções em forma de ondas viajantes

$$x_n = x_{mQ+p} = x_{mQ}^p = \sum_q a_q^p e^{i(qm - \omega t)}, \quad (2.54)$$

onde m é a coordenada da célula unitária e p , a coordenada da partícula dentro de célula ($0 \leq p \leq Q - 1$). Os números de onda permitidos são dados por

$$q = 2\pi \frac{k}{M}, \quad (2.55)$$

onde

$$k = \begin{cases} 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{M-1}{2} & \text{se } M \text{ é ímpar} \\ 0, \pm 1, \dots, \pm \frac{M-2}{2}, \frac{M}{2} & \text{se } M \text{ é par.} \end{cases} \quad (2.56)$$

Substituindo a onda viajante de número de onda q ,

$$x_{mQ}^p = a_q^p e^{i(qm - \omega t)}, \quad (2.57)$$

na equação (2.53), resulta,

$$\omega^2 a_q^p e^{i(qm - \omega t)} = \sum_{m'} \sum_{p'} A_{mQ+p, m'Q+p'} a_q^{p'} e^{i(qm' - \omega t)}. \quad (2.58)$$

Logo,

$$\omega^2 a_q^p = \sum_{p'} \left[\sum_{m'} A_{mQ+p, m'Q+p'} e^{iq(m'-m)} \right] a_q^{p'}. \quad (2.59)$$

A soma em m' que aparece na expressão acima é diferente de zero apenas para $m' = m, m - 1$ ou $m + 1$, de forma que,

$$\begin{aligned} \sum_{m'} A_{mQ+p, m'Q+p'} e^{iq(m'-m)} &= A_{pp'} + A_{p, Q+p'} e^{iq} + A_{p, -Q+p'} e^{-iq} \\ &= \tilde{A}_{pp'}(q). \end{aligned} \quad (2.60)$$

Logo, a equação (2.59) pode ser escrita como

$$\omega^2 a_q^p = \sum_{p'} \tilde{A}_{pp'}(q) a_q^{p'}, \quad (2.61)$$

ou, em forma de equação de autovalores,

$$\sum_{p'} [\tilde{A}_{pp'}(q) - \omega^2 \delta_{pp'}] a_q^{p'} = 0. \quad (2.62)$$

A equação (2.62) determina a frequência ω como função de p e q . Como existem Q valores de p e M valores de q , o número total de modos normais será $QM = N$, igual ao número de partículas.

Suponhamos agora que $\omega^2 = 0$ seja um autovalor de (2.62) para algum $q \neq 0, \pi$. Neste caso, a matriz $A = (A_{nn'})$ admite autovalor nulo e portanto não é positiva definida. A onda viajante correspondente é dada por

$$x_n = x_{mQ+p} = x_{mQ}^p = a_q^p e^{iqm}, \quad (2.63)$$

que substituída em (2.53) fornece

$$\sum_{n'} A_{nn'} x_{n'} = 0. \quad (2.64)$$

Usando a definição de $A_{nn'}$ dada em equação (2.50) obtemos

$$\begin{aligned} x_{n+2} + x_{n-2} + \frac{J_1}{J_2}(x_{n+1} + x_{n-1}) - \\ - \frac{1}{J_2} \left[\frac{kT}{1 - m_n^2} - 4J_0 \right] x_n = 0. \end{aligned} \quad (2.65)$$

É conveniente escrever esta equação de diferença sob a forma de um mapeamento quadridimensional:

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ x_{n+2} \\ x_{n+3} \\ x_{n+4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & A & B_n & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_n \\ x_{n+1} \\ x_{n+2} \\ x_{n+3} \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

onde

$$A = -\frac{J_1}{J_2}, \quad (2.67)$$

$$B_n = \frac{1}{J_2} \left[\frac{kT}{1 - m_n^2} - 4J_0 \right]. \quad (2.68)$$

Definindo a matriz jacobiana do mapeamento

$$J_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & A & B_n & A \end{pmatrix} \quad (2.69)$$

e o vetor

$$X_n = \begin{pmatrix} x_n \\ x_{n+1} \\ x_{n+2} \\ x_{n+3} \end{pmatrix}, \quad (2.70)$$

temos que

$$\begin{aligned} X_{n+Q} &= J_{n+Q-1} X_{n+Q-1} \\ &= J_{n+Q-1} \cdots J_n X_n = J^{(n)} X_n, \end{aligned} \quad (2.71)$$

onde a matriz $J^{(p)}$ é a matriz jacobiana da Q -ésima iterada do mapeamento dada pelo produto

$$J^{(p)} = J_{p+Q-1} \cdots J_p, \quad (2.72)$$

que em geral depende de p ($= 0, 1, \dots, Q-1$).

Agora, como $n+Q$ e n diferem de uma unidade em m , vemos da equação (2.63) que com $n = mQ + p$,

$$X_{n+Q} = \begin{pmatrix} x_{(m+1)Q}^p \\ x_{(m+1)Q}^{p+1} \\ x_{(m+1)Q}^{p+2} \\ x_{(m+1)Q}^{p+3} \end{pmatrix} = e^{iq} \begin{pmatrix} a_q^p e^{iqm} \\ a_q^{p+1} e^{iqm} \\ a_q^{p+2} e^{iqm} \\ a_q^{p+3} e^{iqm} \end{pmatrix} = e^{iq} X_n. \quad (2.73)$$

Logo, substituindo na equação (2.71) resulta

$$J^{(n)} X_n = X_{n+Q} = e^{iq} X_n, \quad (2.74)$$

o que mostra que e^{iq} é um autovalor de $J^{(n)}$.

Portanto, se a matriz A admite autovalor nulo $\omega = 0$, então a matriz $J^{(p)}$ do mapeamento admite autovalor complexo de módulo 1, e^{iq} , e reciprocamente. Segue-se que uma fase comensurável tal que a matriz jacobiana $J^{(p)}$ admite autovalor complexo de módulo 1 é *não é estável*.

Vemos que a determinação dos autovalores da matriz $J^{(p)}$ é fundamental para estudar a estabilidade de uma fase comensurável. Uma propriedade notável da matriz $J^{(p)}$, o dela ser um elemento de um grupo *simplético*, facilita sobremodo essa tarefa.

Por um cálculo direto podemos verificar que as matrizes J_n definidas na equação (2.69) satisfazem a equação

$$\widetilde{J}_n G J_n = G, \quad (2.75)$$

onde G é a matriz,

$$G = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -A & 1 \\ -1 & A & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.76)$$

e $\widetilde{J}_n$ indica a transposta da matriz J_n . Portanto, as matrizes J_n são elementos do grupo *simplético* $S_p(4)$ gerados por G (Hall, 1967). É fácil verificar que se $A, B \in S_p(4)$ então $C = AB$ satisfaz $\widetilde{C}GC = G$, isto é, $C \in S_p(4)$, como deve ser pela propriedade de fechamento do grupo. Segue-se que a matriz $J^{(p)} = J_{p+Q-1} \cdots J_{p+1} J_p$, satisfaz,

$$\widetilde{J^{(p)}} G J^{(p)} = G. \quad (2.77)$$

Seja λ um autovalor de $J^{(p)}$ com autovetor V :

$$J^{(p)} V = \lambda V. \quad (2.78)$$

Então,

$$(\widetilde{J^{(p)}} G J^{(p)}) V = G V = \widetilde{J^{(p)}} G (\lambda V), \quad (2.79)$$

o que implica

$$\widetilde{J^{(p)}} (G V) = \lambda^{-1} (G V). \quad (2.80)$$

Portanto, λ^{-1} é um autovalor de $\widetilde{J^{(p)}}$ com autovetor GV .

Agora, $J^{(p)}$ e $\widetilde{J^{(p)}}$ têm o mesmo polinômio característico:

$$\begin{aligned} P(\lambda) &= \det(J^{(p)} - \lambda I) = \det(\widetilde{J^{(p)}} - \lambda I) \\ &= \lambda^4 - T_1\lambda^3 + T_2\lambda^2 - T_3\lambda + T_4, \end{aligned} \quad (2.81)$$

onde

$$T_k = \text{tr}_k J^{(p)} \quad (2.82)$$

é o traço de ordem k (Beyer, 1984). Observemos que devido à propriedade de invariância do traço pela permutação cíclica dos elementos do produto, T_k independe de p . Segue-se que, se λ é raiz de $P(\lambda)$, também o é λ^{-1} . Mas,

$$P(\lambda^{-1}) = \frac{1}{\lambda^4} (T_4\lambda^4 - T_3\lambda^3 + T_2\lambda^2 - T_1\lambda + 1) = \frac{Q(\lambda)}{\lambda^4}. \quad (2.83)$$

Os polinômios $P(\lambda)$ e $Q(\lambda)$ têm as 4 raízes em comum e portanto são idênticos $Q(\lambda) \equiv P(\lambda)$. Logo,

$$T_4 = 1 \text{ e } T_3 = T_1, \quad (2.84)$$

e obtemos

$$P(\lambda) = \lambda^4 - T_1\lambda^3 + T_2\lambda^2 - T_1\lambda + 1. \quad (2.85)$$

Os traços T_1 e T_2 são dados explicitamente pelas fórmulas

$$\begin{aligned} T_1 &= \sum_i J_{ii}^{(p)}, \\ T_2 &= \sum_i J_{ii}^{(p)} \sum_{j>i} J_{jj}^{(p)} - \sum_{i \neq j} J_{ij}^{(p)} J_{ji}^{(p)}. \end{aligned} \quad (2.86)$$

Notemos que a propriedade $T_4 = 1$ resulta também do fato de que o mapeamento preserva a área:

$$\text{tr}_4 J^{(p)} = \det J^{(p)} = \prod_{n=0}^{Q-1} \det J_{p+n} = \prod_{n=0}^{Q-1} 1 = 1. \quad (2.87)$$

A equação secular

$$P(\lambda) = \lambda^4 - T_1\lambda^3 + T_2\lambda^2 - T_1\lambda + 1 = 0 \quad (2.88)$$

tem a forma de uma equação recíproca. Assim, definindo

$$X = \lambda + \frac{1}{\lambda}, \quad (2.89)$$

a equação (2.88) reduz-se a uma equação de segundo grau

$$X^2 - T_1 X + T_2 - 2 = 0. \quad (2.90)$$

As soluções de (2.90) quando substituídas em (2.89) dão os seguintes valores possíveis de λ :

$$\lambda_1 = \frac{X_+ + \sqrt{\Delta_+}}{2}, \quad (2.91)$$

$$\lambda_2 = \frac{X_+ - \sqrt{\Delta_+}}{2}, \quad (2.92)$$

$$\lambda_3 = \frac{X_- + \sqrt{\Delta_-}}{2}, \quad (2.93)$$

$$\lambda_4 = \frac{X_- - \sqrt{\Delta_-}}{2}, \quad (2.94)$$

com

$$\Delta_{\pm} = X_{\pm}^2 - 4, \quad (2.95)$$

$$X_{\pm} = \frac{T_1 \pm \sqrt{\Delta}}{2}, \quad (2.96)$$

$$\Delta = T_1^2 - 4T_2 + 8. \quad (2.97)$$

Portanto ao todo existem 4 possibilidades distintas para os autovalores λ :

1. Tipo *a*: $\Delta > 0, \Delta_+ > 0, \Delta_- > 0$.

Os quatro autovalores são todos reais, da forma: $\lambda_1, \lambda_1^{-1}, \lambda_2, \lambda_2^{-1}$.

2. Tipo *b*: $\Delta > 0, \Delta_+ > 0, \Delta_- < 0$ ou $\Delta_+ < 0, \Delta_- > 0$.

Dois autovalores são reais e dois são complexos conjugados com módulo 1: $\lambda_1, \lambda_1^{-1}, \lambda_2, \lambda_2^*$, com $|\lambda_2| = 1$.

3. Tipo *c*: $\Delta > 0, \Delta_+ < 0, \Delta_- < 0$.

Os quatro autovalores são complexos conjugados, dois a dois, com módulo 1: $\lambda_1, \lambda_1^*, \lambda_2, \lambda_2^*$, com $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$.

4. Tipo *d*: $\Delta < 0$.

Os quatro autovalores são complexos, módulo diferente de 1: $\lambda, \lambda^{-1}, \lambda^*, \lambda^{*-1}$.

Na figura 2.5 apresentamos um gráfico típico, mostrando o comportamento dos autovalores da matriz jacobiana definida anteriormente para a fase com $q = 2\pi(1/6)$ e $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$, no diagrama T versus $\rho = J_0/J_1$.

Figura 2.5: Gráfico da variação dos autovalores para $q = 2\pi(1/6)$ e $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$. As letras a, b, c e d se referem aos 4 tipos de conjuntos de autovalores possíveis da matriz jacobiana.

Capítulo 3

Efeito de Diminuição das Interações Intraplanares no Modelo ANNNI

3.1 Introdução

Conforme vimos no capítulo 2, o modelo ANNNI é caracterizado por interações competitivas numa direção particular e interações ferromagnéticas somente entre primeiros vizinhos, nos planos perpendiculares. Os parâmetros de interação competitivos são J_1 e J_2 entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Nos planos, são descritos por J_0 .

A grande maioria dos trabalhos sobre o modelo ANNNI se limitou em considerar o caso $J_0 = J_1$. Recentemente, usando a aproximação de campo médio, o diagrama de fases do modelo ANNNI foi investigado para a razão $\rho = J_0/J_1$ arbitrária por Nakanishi (1989 e 1990), que mostrou a ocorrência de fases comensuráveis com planos desordenados, isto é, com magnetização zero, para várias estruturas comensuráveis.

Na verdade, Yokoi *et al.* (1981) já haviam observado esse efeito. Na região modulada próximo da fronteira com a região paramagnética, a magnetização tem comportamento aproximadamente senoidal,

$$m_n = A \cos(qn + \phi). \quad (3.1)$$

Figura 3.1: Diferentes estruturas de fases comensuráveis de período 6 observadas na teoria de campo médio do modelo ANNNI com $\rho = J_0/J_1 < 3/10$ (Yokoi, 1991).

Yokoi mostrou que, devido aos termos de Umklapp, na estrutura com $q = 2\pi(1/6)$, a fase ϕ é 0 para $\rho = J_0/J_1 > 3/10$ e $\pi/6$ para $\rho < 3/10$, antevendo assim a possibilidade de ocorrência de dois tipos de estruturas com o período 6. Essas estruturas são designados por A, quando $\phi = 0$ e por B quando $\phi = \pi/6$, como ilustrado na figura 3.1 (Na figura φ corresponde ao nosso ϕ dividido por $q = 2\pi(1/6)$). A estrutura tipo A é aquela geralmente observada no modelo ANNNI e apresenta centros de simetria dos tipos R_1 e I_2 , enquanto a estrutura tipo B tem centros de simetria dos tipos R_2 e I_1 , e portanto apresenta planos com magnetização

Figura 3.2: Diagrama de fases mostrando a fase $1/6$ com fases tipo A e B separados por uma região estreita onde a fase tipo C é estável (Yokoi, 1991).

nula, chamados planos desordenados.

Estudos realizados recentemente por Yokoi (1991) não somente confirmaram os resultados até então apresentados, como também mostraram a existência de uma terceira estrutura, que chamou de C , ilustrada na figura 3.1. A estrutura tipo C é caracterizada pelo fato de não apresentar nenhum centro de simetria, e portanto foi chamada de assimétrica. A figura 3.2 mostra a forma da fase $1/6$ encontrada por Yokoi (1991).

Neste capítulo investigamos melhor a ocorrência das estruturas B e C para outras fases e para todos os valores possíveis de $\rho = J_0/J_1$, e exploramos também outros aspectos do problema não tratados nos tra-

balhos citados.

Todos os cálculos são feitos com base na aproximação de campo médio descrita na seção 2.1. Embora esta aproximação aplicada ao modelo ANNNI para $J_0 = J_1$ tenha se revelado extremamente bem sucedida, estando em acordo qualitativo com resultados obtidos através de outras técnicas (Selke, 1988), não há tanta certeza assim quando se supõe $J_0 < J_1$. De fato, muito recentemente, resultados baseados numa aproximação de campo médio melhorada, onde o modelo é tratado exatamente ao longo da direção axial das interações competitivas (Nakanishi, 1992), e cálculos de Monte Carlo (Rotthaus e Selke, 1992), apresentam evidências contra a existência de fases comensuráveis com planos desordenados no modelo ANNNI real. Portanto, é possível que alguns resultados apresentados aqui não reflitam o que deveria acontecer num modelo ANNNI real, mas apenas propriedades matemáticas próprias da aproximação adotada.

3.2 Transição por Mudança de Simetria no Interior das Fases com o mesmo Período

A figura 3.3 mostra o diagrama de fases do modelo ANNNI para $\rho = J_0/J_1 = 0,2$ obtido pelo emprego de métodos descritos na seção 2.2. Como características gerais observamos que, além do visível estrangulamento da fase $1/6$, todas as fases comensuráveis tornam-se muito mais estreitas do que no caso $J_0 = J_1$, denunciando que a estabilidade das fases comensuráveis fica diminuída. Na escala da figura não podemos observar a fase assimétrica $1/6C$, nem o estrangulamento das fases como $1/8$, $1/10$ e $3/14$.

Nesta seção iremos estudar como a predominância das fases do tipo A , B e C numa mesma fase comensurável varia como função do

Figura 3.3: Diagrama de fases global para $\rho = J_0/J_1 = 0,2$.

parâmetro $\rho = J_0/J_1$.

Vamos inicialmente considerar o caso mais simples, o da fase $1/6$. A figura 3.4 mostra o diagrama de fases no plano T versus $\rho = J_0/J_1$ para $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$ onde somente encontramos a fase comensurável $1/6$, embora possam ocorrer transições entre estruturas do tipo A , B e C conforme a temperatura é alterada. A transição entre essas fases foi determinada monitorando-se os autovalores da matriz jacobiana conforme os critérios discutidos na seção 2.4. A estrutura B é estável nas regiões de

Figura 3.4: Diagrama de fases T versus ρ para $\kappa = 1/2$.

altas temperaturas para $\rho < 3/10$. Entretanto, conforme a temperatura é diminuída, a estrutura B deixa de ser um mínimo local da energia livre, isto é, torna-se instável a uma certa temperatura T_B . Semelhantemente, se a temperatura é aumentada a partir de A , verifica-se uma instabilidade de A a uma temperatura dada por T_A . Como $T_A < T_B$, confirma-se a existência da estrutura tipo C . Observamos que a fase C é mais larga na região central do gráfico, estreitando-se cada vez mais conforme aproximamos de $\rho = \rho_c(1/6) = 3/10$, acima da qual só está presente a fase A .

Figura 3.5: Largura da fase $1/6C$ em unidades de temperatura para $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$.

Por outro lado, a fase C se estreita também quando $\rho \rightarrow 0$, sendo que nesse limite somente a fase B está presente. A figura 3.5 mostra a largura da fase C como função do parâmetro ρ . Embora o modelo ANNNI real torne-se um conjunto de cadeias unidimensionais desacopladas no limite $\rho \rightarrow 0$, e portanto sem fases ordenadas, a aproximação de campo médio ainda permite fases ordenadas, um defeito da aproximação sem contrapartida no modelo ANNNI real.

Consideremos agora a fase $3/14$, que também pode apresentar

Figura 3.6: Gráfico de $\bar{\kappa}$ da fase 3/14 para diferentes valores de ρ . A linha diagonal marca a transição entre as fases do tipo A e B.

fases parcialmente desordenadas. Entretanto, como pode ser observado no diagrama de fases global da figura 3.3, esta fase apresenta um comportamento oblíquo no plano T versus κ de modo que não podemos variar o valor de ρ sem alterar κ . Denotemos por

$$\bar{\kappa}(T) = \frac{\kappa_e(T) + \kappa_d(T)}{2}, \quad (3.2)$$

o valor médio de κ entre as fronteiras à esquerda (κ_e) e à direita (κ_d) da fase 3/14. A linha $\bar{\kappa}(T)$ atravessa o meio da fase 3/14 e é equivalente à

Figura 3.7: Projeção da linha de transição entre as fases *A* e *B* no plano (T, ρ) .

linha $\kappa = 1/2$ para a fase $1/6$. A figura 3.6 mostra as linhas $\kappa(T)$ para diferentes valores do parâmetro ρ , assim como a localização da transição entre as fases *A* e *B*. A fase *C* também está presente, mas é extremamente estreita para aparecer na escala adotada. A reta onde as linhas $\kappa(T)$ terminam é T_c , a temperatura de transição entre a região modulada e paramagnética. A figura 3.7 é uma projeção da linha de transição entre as fases *A* e *B*, mostrada na figura 3.6, no plano (T, ρ) . Extrapolando a curva da figura 3.7 encontramos que a fase *B* existe somente para valores de ρ menores que $\rho_c(3/14) = 0,2316\dots$

De modo semelhante estudamos também as fases $1/8$ e $1/10$. Obtivemos numericamente $\rho_c(1/8) = 0,2095\dots$ e $\rho_c(1/10) = 0,1904\dots$. A tabela 3.1 resume os resultados numéricos para $\rho_c(q/2\pi)$ para diferentes fases juntamente com valores analíticos obtidos por Nakanishi (1989).

$q/2\pi$	$\rho_c(\text{analítico})$	$\rho_c(\text{numérico})$
1/6	0,3	0,3
1/8	0,23 ...	0,2095 ...
1/10	0,20 ...	0,1904 ...
3/14	0,28 ...	0,2316 ...

Tabela 3.1: Comparação entre os valores de ρ_c calculados numericamente e os resultados analíticos de Nakanishi (1989).

Observamos pela tabela que os valores calculados por Nakanishi coincidem apenas para o caso $q = 2\pi(1/6)$. Isso se deve ao caráter aproximado dos cálculos de Nakanishi para períodos maiores onde não se levou em consideração o efeito dos termos de harmônicos superiores. Para verificar esse fato fizemos um cálculo analítico exato para as fases $q = 2\pi(1/6)$ e $q = 2\pi(1/8)$, e obtivemos resultados que concordam plenamente com aqueles obtidos numericamente.

Para ilustrar o procedimento, vamos considerar inicialmente a fase $q = 2\pi(1/6)$. Próximo da região paramagnética a magnetização média dos spins é muito pequena, indo a zero para $T \rightarrow T_c$. Assim, podemos expandir a função tangente hiperbólica inversa nas equações (2.14) e obter

$$\begin{aligned} & \beta [4J_0 m_n + J_1(m_{n+1} + m_{n-1}) + J_2(m_{n+2} + m_{n-2})] \\ &= m_n + \frac{m_n^3}{3} + \frac{m_n^5}{5} + \dots \end{aligned} \quad (3.3)$$

Vamos agora buscar solução m_n sob a forma do "Ansatz"

$$m_n = M_1 \cos(qn + \phi) + M_3 \cos 3(qn + \phi) + M_5 \cos 5(qn + \phi) \dots, \quad (3.4)$$

onde existem apenas os harmônicos ímpares e supomos que $M_k = O(M_1^k)$. Substituindo-se a expansão (3.4) em (3.3) mantendo-se termos de até ordem M_1^5 e comparando-se os termos de mesmo harmônico obtemos

$$\begin{aligned} M_1 &= 2 \left[\frac{J(q)}{kT} - 1 \right]^{1/2}, \\ M_3 &= AM_1^3, \\ M_5 &= BM_1^5, \end{aligned} \quad (3.5)$$

com

$$A = \frac{1}{12} \left[\frac{J(3q)}{kT} - 1 \right]^{-1}, \quad (3.6)$$

$$B = \frac{1}{240} \left[1 - \frac{J(5q)}{kT} \right]^{-1} \left\{ 5 \left[1 - \frac{J(3q)}{kT} \right]^{-1} - 3 \right\}. \quad (3.7)$$

onde definimos

$$J(nq) = 4J_0 + 2J_1 \cos nq + 2J_2 \cos 2nq. \quad (3.8)$$

Substituindo-se agora a expansão da magnetização com $\phi = 0$ na expressão para a energia livre (2.13) e mantendo-se termos de até ordem M_1^6 obtemos

$$N^{-3}F_A = A_1 M_1^2 + A_2 M_4^2 + A_3 M_1^6 + \dots, \quad (3.9)$$

onde

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{4}(kT - 4J_0 - J_1 + J_2), \\ A_2 &= \frac{kT}{32}, \\ A_3 &= \left(A + \frac{11}{40}\right) \frac{kT}{24}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Analogamente, tomando-se $\phi = \pi/2$ obtemos

$$N^{-3}F_B = A_1 M_1^2 + A_2 M_4^2 + A'_3 M_1^6 + \dots, \quad (3.11)$$

onde

$$A'_3 = \frac{3}{320}kT. \quad (3.12)$$

Note-se que consideramos expansões até a ordem em que os coeficientes em F_A e F_B diferem entre si. Essa diferença origina-se devido aos termos

de "Umklapp". Igualando-se as energias livres para $T = T_c$, ou seja, fazendo $A_3 = A'_3$, e usando que para $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$ a temperatura crítica é dada por $kT_c = 4J_0 + J_1 - J_2$ obtemos

$$\rho_c(1/6) = \frac{3}{10}, \quad (3.13)$$

em concordância com os cálculos anteriores (Yokoi *et al.*, 1981; Nakanishi, 1989) e com o cálculo numérico da figura 3.4.

O cálculo para a fase 1/8 pode ser feito semelhantemente, exceto que devemos ir uma ordem além nas expansões para que surja diferença entre as fases A e B . Os resultados finais são

$$\begin{aligned} N^{-3}F_A &= A_1 M_1^2 + A_2 M_1^4 + A_3 M_1^6 + A_4 M_1^8 + \dots, \\ N^{-3}F_B &= A_1 M_1^2 + A_2 M_1^4 + A_3 M_1^6 + A'_4 M_1^8 + \dots, \end{aligned} \quad (3.14)$$

onde

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{4}(kT - 4J_0 - J_1\sqrt{2}), \\ A_2 &= \frac{kT}{32}, \\ A_3 &= \frac{1}{4}A^2(kT - 4J_0 + J_1\sqrt{2}) + \frac{A}{24}kT + \frac{kT}{96}, \\ A_4 &= \left(\frac{A^2}{16} + \frac{A}{40} + \frac{17}{3584} \right) J_1, \\ A'_4 &= \left(\frac{3A^2}{16} + \frac{3A}{80} + \frac{9}{1792} \right) J_1. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Fazendo-se $A_4 = A'_4$ com A e $J(nq)$ definidos anteriormente, equações (3.6) e (3.8), e tomando-se $kT = kT_c = J(\pi/4)$, obtemos finalmente ρ_c para $q = 2\pi(1/8)$,

$$\rho_c(1/8) = \frac{\sqrt{2}}{20} \left(1 + 6\sqrt{\frac{3}{28}} \right) = 0,2095836\dots, \quad (3.16)$$

em pleno acordo com o resultado numérico. Para estudarmos estruturas com períodos mais longos precisamos levar em conta mais termos tanto na expansão para m_n quanto para a energia livre, implicando cálculos cada vez mais extensos. Por essa razão não é uma tarefa simples descobrir analiticamente quais são as fases comensuráveis que podem apresentar a fase tipo B .

3.3 Evolução dos Pontos de Acumulação

Ao analisar a fronteira da fase $\langle 3 \rangle$ por meio do processo de ramificação, Duxbury e Selke (1983) e Selke e Duxbury (1984) observaram um comportamento regular bastante interessante. Para temperaturas suficientemente baixas a fase $\langle 3 \rangle$ faz fronteira com a fase $\langle 23 \rangle$, mas para temperaturas acima de um certo valor $T_b(1)$, $\langle 3 \rangle$ passa a fazer a fronteira com a fase $\langle 233 \rangle$, e em geral para temperaturas acima de $T_b(j)$ a fase $\langle 3 \rangle$ passa a fazer fronteira com a fase $\langle 23^j \rangle$. A fronteira da fase $\langle 3 \rangle$ apresenta quebras nesses pontos, denominados de *pontos de ramificação*, que são pontos triplos onde se encontram as fases $\langle 3 \rangle$, $\langle 23^j \rangle$ e $\langle 23^{j+1} \rangle$. O cálculo de pontos de ramificação para j grande é um problema numérico que exige grande precisão porque as diferenças das energias livres ficam cada

vez menores. Usando 128 bits para representar um número real, Selke e Duxbury calcularam os pontos de ramificação até $j = 13$ e observaram que os segmentos de curva da fronteira entre a fase $\langle 3 \rangle$ e as fases $\langle 23^j \rangle$ tornam-se cada vez menores, aparentemente convergindo para um *ponto de acumulação* conforme $j \rightarrow \infty$. Extrapolando os resultados numéricos Selke e Duxbury localizaram o ponto de acumulação em $kT_{ac}/J_1 = 2,87$ e $J_2/J_1 = -0,56$.

Para temperaturas abaixo de T_{ac} a fase $\langle 3 \rangle$ sofre uma transição de primeira ordem do tipo comensurável-comensurável para fases do tipo $\langle 23^j \rangle$, enquanto para $T > T_{ac}$, a transição é contínua do tipo comensurável-incomensurável. Portanto, o ponto de acumulação separa uma fronteira composta de linhas de transição de primeira ordem de uma fronteira caracterizada por uma transição contínua. Essa diferença pode ser relacionada à diferença no comportamento da interação entre as paredes ou defeitos do tipo $\langle 2 \rangle$ numa matriz formada pela estrutura comensurável $\langle 3 \rangle$. Usando esse fato Siems e Tentrup (1989) foram capazes de localizar o ponto de acumulação com precisão muito maior, obtendo $kT_{ac}/J_1 = 2,8563 \dots$ e $J_2/J_1 = -0,5615 \dots$.

Um comportamento análogo é observado na fronteira à esquerda da fase $\langle 3 \rangle$, com a diferença de que as transições ocorrem para fases do tipo $\langle 43^j \rangle$, convergindo também para um ponto de acumulação a uma temperatura diferente daquela do lado direito. Contudo, devido a intervenção da fase ferromagnética nesta região, é possível que o ponto de acumulação seja virtual, isto é, sobrepujado pela fase ferromagnética.

Nesta seção iremos estudar a evolução dos pontos de acumulação como função do parâmetro $\rho = J_0/J_1$. Segundo Siems e Tentrup (1989) a interação entre as paredes ou defeitos $\langle B \rangle$ a grandes distâncias numa fase comensurável $\langle A \rangle$ está relacionada aos autovalores da matriz jaco-

biana dessa fase, sendo repulsiva se os autovalores forem todos reais (tipo a) e atrativa se forem todos complexos (tipo d) (Ver seção 2.4 para a classificação dos autovalores da matriz jacobiana). Portanto o ponto de acumulação deve-se localizar ao longo da linha no diagrama de fases onde os autovalores da matriz jacobiana J mudam do tipo d , para baixas temperaturas, para o tipo a , para temperaturas mais altas. Calculando a diferença entre as energias livres $\Delta F = F_{\langle A \rangle} - F_{\langle A \rangle B}$ para $j \rightarrow \infty$ ao longo dessa linha determinamos a localização do ponto de acumulação pela condição $\Delta F = 0$.

A figura 3.8 mostra como variam as temperaturas do ponto de acumulação da fase $\langle 3 \rangle$ quando é variado o parâmetro $\rho = J_0/J_1$. A curva superior D corresponde aos pontos de acumulação da fronteira direita e a curva inferior E à fronteira esquerda. A figura 3.9 mostra por sua vez a evolução dos pontos de acumulação no plano (T, κ) para diferentes valores do parâmetro ρ .

Observamos na figura 3.8 que as temperaturas dos pontos de acumulação decrescem rapidamente quando ρ é diminuída, indo a zero já para $\rho = \rho_{\langle 3 \rangle}(T = 0) = 3/4$. Portanto para $\rho < 3/4$ toda a fronteira da fase $\langle 3 \rangle$ será do tipo comensurável-incomensurável. Essa sensibilidade dos pontos de acumulação em relação à variação da interação intraplanar J_0 é algo surpreendente e mostra que os detalhes do diagrama de fases do modelo ANNNI sofrem forte influência dos parâmetros do modelo.

O resultado $\rho_{\langle 3 \rangle}(T = 0) = 3/4$ é exato, como mostraremos num cálculo assintótico a baixas temperaturas. A mudança dos autovalores do tipo a para tipo d ocorre quando Δ dada na equação (2.97) da seção 2.4 se anula. Como a fase $\langle 3 \rangle$ apresenta simetria do tipo A , a magnetização num período é da forma $\{m_1, m_2, m_1, -m_1, -m_2, -m_1\}$ e portanto a matriz jacobiana (2.72) tem a forma

Figura 3.8: Temperaturas do ponto de acumulação da fase (3) como função do parâmetro $\rho = J_0/J_1$.

$$J = (J_1 J_2 J_1)^2, \quad (3.17)$$

No limite $T \rightarrow 0$, as magnetizações m_1 e m_2 são dadas assintoticamente por

Figura 3.9: Evolução dos pontos de acumulação da fase (3) no plano (T, κ) para diferentes valores de ρ .

$$\begin{aligned} m_1 &\approx 1 - 2e^{-8J_0/kT}, \\ m_2 &\approx 1 - 2e^{-(8J_0+6J_1)/kT}, \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde tomamos $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$. Calculando-se agora J em ordem dominante, assim como os traços T_1 e T_2 , e substituindo-se na equação $\Delta = T_1^2 - 4T_2 + 8 = 0$ encontra-se

Figura 3.10: Temperaturas dos pontos de acumulação na fronteira direita das fases $\langle 3 \rangle$, $\langle 23 \rangle$ e $\langle 223 \rangle$ como função do parâmetro ρ .

$$\rho_{\langle 3 \rangle}(T) \approx \frac{3}{4} - \frac{kT}{8J_1} \ln \frac{kT}{2J_1}, \quad (3.19)$$

que fornece além do valor limite, os comportamentos das curvas para baixas temperaturas na figura 3.8.

Fizemos também cálculos numéricos dos pontos de acumulação nas fronteiras direitas das fases $\langle 23 \rangle$ e $\langle 223 \rangle$ que estão mostrados na

figura 3.10.

Observamos que quando as temperaturas dos pontos de acumulação dessas fases vão para zero também parece que ρ tende para $3/4$. Com efeito, cálculos assintóticos análogos ao que foi feito para a fase $\langle 3 \rangle$, mostram que para uma fase $\langle 2^j 3 \rangle$

$$\rho_{\langle 2^j 3 \rangle}(T) \approx \frac{3}{4} - \frac{kT}{8J_1} \ln \left[\frac{kT}{2(j+1)^2 J_1} \right]. \quad (3.20)$$

Dessa forma, todas as fases $\langle 2^j 3 \rangle$ têm fronteiras onde somente transições de segunda ordem ocorrem se $\rho \leq 3/4$. E todas as fases $\langle 2^j 3(2^{j+1}3)^m \rangle$ e $\langle 2^{j+1}3(2^j3)^m \rangle$ iniciam em $T = 0$ se $\rho \leq 3/4$. Entretanto essas fases obviamente não esgotam a totalidade das fases comensuráveis possíveis, de forma que não podemos afirmar que para $\rho < 3/4$ todas as fases comensuráveis brotam do ponto de multifases.

Capítulo 4

Fases Parcialmente Desordenadas em Variantes do Modelo ANNNI

4.1 Introdução

No capítulo anterior estudamos o modelo ANNNI usual prestando particular atenção na possibilidade de ocorrência das estruturas com planos desordenados e transição de fases entre estruturas com simetrias diferentes dentro de uma fase comensurável com mesmo período. Vimos que nem todas as estruturas comensuráveis podem apresentar desordenamento e, mesmo assim, isto só é possível para valores de J_0 suficientemente menores do que J_1 . Comentamos a possibilidade da aproximação de campo médio, usada para a solução do modelo, não ser adequada, haja vista a sua discutível validade quando o parâmetro de acoplamento J_0 fica pequeno.

Nas duas próximas seções estudaremos duas variantes do modelo ANNNI em busca do mesmo tipo de fenômeno, mas em condições em que a aproximação de campo médio seja confiável.

O primeiro modelo é simplesmente uma generalização do modelo ANNNI para um spin S qualquer. Como para S inteiro estados com $S = 0$ são possíveis, poderíamos esperar que fases desordenadas surgissem com

maior facilidade. Entretanto verificamos que planos desordenados são ainda mais difíceis de ocorrer para spins $S > 1/2$.

O segundo modelo que consideramos é uma generalização do modelo de Blume-Capel (Blume, 1966; Capel, 1966) com a introdução de interação competitiva entre segundos vizinhos numa direção espacial. O modelo resultante pode ser descrito por uma hamiltoniana do modelo ANNNI com spin $S = 1$ e termo de campo cristalino. Nesse modelo, com a escolha adequada da interação do campo cristalino, verificamos não somente a ocorrência de planos desordenados mas também transições entre estruturas com simetrias diferentes. Esses efeitos ocorrem mesmo para $J_0 = J_1$ onde esperamos que a aproximação de campo médio não apresente problemas.

Jensen *et al.* (1987) investigaram um modelo ANNNI com spin $S = 1$ e termos de interação quadrupolares, cuja hamiltoniana é uma generalização do modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) (Blume *et al.*, 1971). Esse modelo é mais complexo do que o segundo modelo que estudamos pela presença do termo de interação quadrupolar. Eles introduziram o modelo para explicar certos resultados experimentais acerca do composto Ce_3Al_{11} . Dentro da aproximação de campo médio eles mostraram que, dependendo da razão entre os parâmetros competitivos J_1 e J_2 , a fase ferromagnética é estável somente numa região de temperaturas intermediárias entre 0 e T_c , ou seja, que tem um comportamento reentrante. Verificaram ainda a ocorrência de fases parcialmente desordenadas, mesmo à temperatura zero.

Um modelo de Blume-Capel de spin $S = 1$ e interações competitivas ao longo dos ramos da árvore de Cayley foi estudado Tomé e Salinas (1989), que detectaram fases moduladas e comportamento caótico. Entretanto, as fases parcialmente desordenadas não foram encontradas.

Para investigar a relevância de modelos com interações competitivas em sistemas reais, Roeder e Yeomans (1985) estudaram o efeito de vacâncias recozidas no diagrama de fases do modelo ANNNI de spin $S = 1/2$. Esse modelo mapeia-se facilmente num modelo ANNNI com spin $S = 1$ e termo de campo cristalino D , que nesse contexto está relacionado ao potencial químico que controla o número de impurezas presentes no sistema. Esse modelo é exatamente o segundo modelo considerado neste capítulo. Entretanto, Roeder e Yeomans estudaram o diagrama de fases somente para $D < 0$, enquanto nos interessava mais o caso $D > 0$ onde há possibilidade de fases com planos desordenados.

4.2 Modelo ANNNI com Spin Qualquer

O modelo é definido numa rede cúbica simples com N spins em cada direção espacial num total de N^3 spins. Os spins $\sigma_i = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$ interagem com constantes de troca J_{ij} dadas como no modelo ANNNI usual pela definição (2.2). A hamiltoniana do modelo é

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (4.1)$$

A aproximação de campo médio será obtida através da desigualdade de Bogoliubov (2.3) com a hamiltoniana tentativa livre

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_i H_i \sigma_i, \quad (4.2)$$

onde H_i são os parâmetros variacionais. Assim encontramos para a fun-

cional de energia livre

$$F(\{H_i\}) = - N^3 \beta^{-1} \ln(2S + 1) - \sum_i \int_0^{H_i} M_i dH_i \\ - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} M_i M_j + \sum_i H_i M_i, \quad (4.3)$$

onde $\beta = 1/kT$,

$$M_i \equiv \langle \sigma_i \rangle_0 = S B_S(S\beta H_i), \quad (4.4)$$

e

$$B_S(x) = \left(1 + \frac{1}{2S}\right) \coth \left(1 + \frac{1}{2S}\right) x - \frac{1}{2S} \coth \frac{1}{2S} x, \quad (4.5)$$

é a função de Brillouin.

É conveniente reescrever a equação (4.3) sob a forma

$$S^{-2}(F - F_0) = kTS^{-2} \sum_i \int_0^{m_i} B_S^{-1}(m_i) dm_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j, \quad (4.6)$$

onde definimos

$$F_0 = -N^3 \beta^{-1} \ln(2S + 1) \quad (4.7)$$

e introduzimos a magnetização reduzida

$$m_i = S^{-1}M_i. \quad (4.8)$$

Supondo-se que a magnetização nos planos seja uniforme, e denotando por m_n a magnetização reduzida no n -ésimo plano, obtemos

$$\begin{aligned} N^{-2} S^{-2}(F - F_0) &= S^{-2}kT \sum_n \int_0^{m_n} B_S^{-1}(x) dx \\ &- \frac{1}{2} \sum_n (4J_0 m_n^2 + 2J_1 m_n m_{n+1} + 2J_2 m_n m_{n+2}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

A condição de extremo $\partial F / \partial m_n = 0$ leva ao sistema de equações

$$\frac{S^2}{kT} [4J_0 m_j + J_1(m_{j-1} + m_{j+1}) + J_2(m_{j-2} + m_{j+2})] = B_S^{-1}(m_n). \quad (4.10)$$

Para analisar o que ocorre na fase modulada próximo da linha crítica vamos escrever as equações (4.9) e (4.10) sob forma de expansões em potências de m_n . Para isso é suficiente obter a expansão da função inversa de Brillouin. Partindo da definição (4.5) chega-se após alguns cálculos ao resultado

$$B_S^{-1}(m_n) = \sum_{k=1}^{\infty} b_{2k-1} m_n^{2k-1}, \quad (4.11)$$

onde os três primeiros coeficientes b_{2k-1} são dados por

$$b_1 = \frac{12S^2}{(2S+1)^2 - 1}, \quad (4.12)$$

$$b_3 = \frac{144 S^4 [(2S+1)^4 - 1]}{5 [(2S+1)^2 - 1]^4}, \quad (4.13)$$

$$b_5 = \frac{5184 S^6 [(2S+1)^4 - 1]^2}{25 [(2S+1)^2 - 1]^7} - \frac{10368 S^6 [(2S+1)^6 - 1]}{105 [(2S+1)^2 - 1]^6}. \quad (4.14)$$

Em primeira ordem em m_n a equação de minimização (4.10) fica

$$\begin{aligned} & \frac{S^2}{kT} [4J_0 m_n + J_1(m_{n+1} + m_{n-1}) + J_2(m_{n+2} + m_{n-2})] \\ & \approx \frac{12S^2}{(2S+1)^2 - 1} m_n. \end{aligned} \quad (4.15)$$

A transformada de Fourier da equação acima fornece

$$\frac{S^2}{kT} J(q) m_q \approx \frac{12S^2}{(2S+1)^2 - 1} m_q. \quad (4.16)$$

Deduzimos portanto que a temperatura crítica será dada por

$$\frac{12}{(2S+1)^2 - 1} kT_c = \max_q \{J(q)\} = J(q_c), \quad (4.17)$$

onde $J(q)$ é a transformada de Fourier das constantes de troca, equação (2.18), e q_c é o vetor de onda crítico, equação (2.20). É interessante observar que, no diagrama de fases $(\tilde{T}, \kappa)$, onde $\tilde{T}$ é a temperatura reduzida

$$\tilde{T} = \frac{12}{(2S+1)^2 - 1} T, \quad (4.18)$$

as linhas críticas de modelos ANNNI coincidem para todos os valores de spin S , inclusive quanto à localização do ponto de Lifshitz. Obviamente não esperamos que essa coincidência se estenda a detalhes do diagrama de fases no interior da fase modulada.

Para investigar a possibilidade de ocorrência de fases com planos desordenados no modelo vamos considerar a fase $q = 2\pi(1/6)$. A magnetização nessa fase pode ser expandida sob a forma

$$m_n = M_1 \cos(qn + \phi) + M_3 \cos 3(qn + \phi) + \dots \quad (4.19)$$

onde não aparecem harmônicos pares porque estamos interessados apenas nas fases com simetrias do tipo A ou B . Substituímos agora a expansão (4.19) na equação de minimização (4.10) e mantemos termos até de ordem $\mathcal{O}(M_1^3)$ com o "Ansatz" de que $M_n = \mathcal{O}(M_1^n)$. Igualando-se os coeficientes de mesmos harmônicos encontramos

$$M_1 = \sqrt{\frac{4}{3b_3} \left[\frac{S^2}{kT} J(q) - b_1 \right]}, \quad (4.20)$$

$$M_3 = AM_1^3, \quad (4.21)$$

onde

$$A = -\frac{1}{4b_1 - S^2(kT)^{-1}J(3q)}, \quad (4.22)$$

$$J(nq) = 4J_0 + 2J_1 \cos nq + 2J_2 \cos 2nq. \quad (4.23)$$

Substituindo-se a expansão (4.19) para a magnetização com $\phi = 0$ (fase A) e $\phi = \pi/2$ (fase B) na expressão (4.9) para a energia livre observamos que a diferença entre eles surge apenas no termo de ordem M_1^6 . Os coeficientes desses termos são dados, respectivamente, por

$$C_A = \frac{kT}{S^2} \left(\frac{b_1}{2} A^2 + \frac{b_3}{4} A + \frac{11b_5}{192} \right) - \frac{A^2}{2} J(3q), \quad (4.24)$$

$$C_B = \frac{kT}{S^2} \frac{9b_5}{192}. \quad (4.25)$$

Fazendo $C_A = C_B$ em $\kappa = 1/2$ e $T = T_c$ obtemos

$$\rho_c(S) = \frac{3}{4} - \frac{15}{28} \frac{[(2S+1)^6 - 1][(2S+1)^2 - 1]}{[(2S+1)^4 - 1]^2}. \quad (4.26)$$

Para $S = 1/2$ obtemos $\rho_c(S = 1/2) = 3/10$, como deve ser. Alguns valores para valores maiores de spins são: $\rho_c(S = 1) = 21/80 = 0,2625 \dots$, $\rho_c(S = 3/2) = 141/578 = 0,2439 \dots$ e $\rho_c(S = 2) = 633/2704 = 0,2340 \dots$. Claramente vemos que o valor de ρ_c decresce conforme cresce

o valor do spin S , tendendo ao limite $\rho_c(S \rightarrow \infty) = 3/14 = 0,2142\dots$ para spin infinito.

Concluimos que o aumento de S não tende a facilitar o surgimento de fases com planos desordenados, mas que ao contrário tende a inibi-los já que o valor de ρ_c decresce com o aumento de S . Aparentemente o surgimento de fases com planos desordenados envolve um delicado balanço entre os ganhos em entropia e energia interna, não permitindo um quadro intuitivo simples.

4.3 Modelo ANNNI com Spin 1 e Termo de Campo Cristalino

Vamos considerar o modelo definido através da hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + D \sum_i \sigma_i^2, \quad (4.27)$$

onde os spins podem assumir os valores $\sigma_i = 0, \pm 1$. O parâmetro D descreve o campo cristalino de íon único. As constantes de troca J_{ij} são as mesmas do modelo ANNNI, definidas em (2.2) da seção 2.1. Observemos que com $J_0 = J_1 = J > 0$ e $J_2 = 0$ o modelo reduz-se ao chamado modelo de Blume-Capel (Blume, 1966; Capel, 1966).

Antes de mais nada é importante investigar o estado fundamental do modelo. Como a interação entre os spins num mesmo plano é ferromagnética ($J_0 > 0$), é natural supor que a $T = 0$ todos os spins num dado plano perpendicular ao eixo z estarão num mesmo estado 0 ou ± 1 . Então a energia do sistema E será dada por

$$N^{-2}E = \sum_n (-2J_0\sigma_n^2 - J_1\sigma_n\sigma_{n+1} - J_2\sigma_n\sigma_{n+2} + D\sigma_n^2), \quad (4.28)$$

onde o índice n indica o plano e N é o número de spins em cada uma das direções espaciais. Como possíveis estados fundamentais consideramos as seguintes fases: $\langle + \rangle$, $\langle 0 \rangle$, $\langle + + -- \rangle$ e $\langle + + 0 - -0 \rangle$. As energias correspondentes a cada uma dessas fases são

$$N^{-3}E_{\langle + \rangle} = D - 2J_0 - J_1 - J_2, \quad (4.29)$$

$$N^{-3}E_{\langle 0 \rangle} = 0, \quad (4.30)$$

$$N^{-3}E_{\langle ++-- \rangle} = D - 2J_0 + J_2, \quad (4.31)$$

$$N^{-3}E_{\langle ++0--0 \rangle} = (2D - 4J_0 - J_1 + J_2)/3. \quad (4.32)$$

Comparando-se essas energias obtemos o diagrama de fases da figura 4.1.

Para $D < 2J_0$ o estado fundamental é o mesmo do modelo ANNNI usual, a fase ferromagnética $\langle + \rangle$ sendo favorável para $\kappa < 1/2$ e a antifase (2,2) $\langle + + -- \rangle$ sendo favorável para $\kappa > 1/2$. Entretanto, para valores de $D > 2J_0$ surge a possibilidade das fases paramagnética $\langle 0 \rangle$ e fases com planos desordenados $\langle + + 0 - -0 \rangle$.

A aproximação de campo médio do modelo será obtida da forma usual pela aplicação da desigualdade de Bogoliubov (2.3). Como hamiltoniana tentativa livre escolheremos

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_i H_i \sigma_i + D \sum_i \sigma_i^2, \quad (4.33)$$

Figura 4.1: Estado fundamental D versus κ .

onde H_i são os parâmetros variacionais. Obtemos então

$$\begin{aligned}
 F = & - \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j + \sum_i H_i m_i \\
 & - \beta^{-1} \sum_i \ln(1 + 2e^{-\beta D} \cosh \beta H_i),
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

onde $\beta = 1/kT$ e definimos

$$m_i \equiv \langle \sigma_i \rangle_0 = \frac{\sinh \beta H_i}{\cosh \beta H_i + \frac{1}{2} e^{\beta D}}. \quad (4.35)$$

É possível reescrever a equação (4.34) sob a forma

$$F - F_0 = \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} m_i m_j - \sum_i \int_0^{m_i} H_i dm_i, \quad (4.36)$$

onde

$$F_0 = -N^3 \beta^{-1} \ln(1 + 2e^{-\beta D}) \quad (4.37)$$

e onde H_i é dado implicitamente como função de M_i pela equação (4.35). Supondo-se agora que a magnetização seja uniforme num dado plano perpendicular à direção z obtemos

$$\begin{aligned} N^{-2} [F(\{m_n\}) - F_0] = & - \sum_n (2J_0 m_n^2 + J_1 m_n m_{n+1} + J_2 m_n m_{n+2}) \\ & + \sum_n \int_0^{m_n} H_n dm_n, \end{aligned} \quad (4.38)$$

onde m_n denota a magnetização por spin no n -ésimo plano. H_n e m_n se relacionam através de

$$m_n = \frac{\sinh \beta H_n}{\cosh \beta H_n + \frac{1}{2} e^{\beta D}}. \quad (4.39)$$

Aplicando-se a condição de extremo $\partial F / \partial m_n = 0$ à equação (4.38) obtemos

$$H_n = 4J_0 m_n + J_1(m_{n+1} + m_{n-1}) + J_2(m_{n+2} + m_{n-2}). \quad (4.40)$$

As equações acima, juntamente com as equações (4.39), constituem um sistema de equações para as magnetizações nos planos m_n . Observamos que, como seria de se esperar, no limite $D \rightarrow -\infty$ essas equações coincidem com as do modelo ANNNI usual.

Na fase ordenada próximo à transição contínua para a fase paramagnética podemos considerar a expansão das equações acima em potências de m_n . Para isso é suficiente obter a partir da equação (4.39) uma expressão para a expansão de H_n em potências de m_n . O resultado final pode ser escrito sob a forma

$$H_n = \beta^{-1} \sum_{k=1}^{\infty} a_{2k-1} m_n^{2k-1}, \quad (4.41)$$

onde os três primeiros coeficientes da expansão são

$$a_1 = a, \quad (4.42)$$

$$a_3 = \frac{1}{6} a^2 (3 - a), \quad (4.43)$$

$$a_5 = \frac{1}{40} a^3 (3a^2 - 15a + 2), \quad (4.44)$$

com

$$a = 1 + \frac{1}{2}e^{\beta D}. \quad (4.45)$$

Mantendo-se apenas o termo linear a equação (4.40) fica

$$\beta [4J_0 m_n + J_1(m_{n+1} + m_{n-1}) + J_2(m_{n+2} + m_{n-2})] \approx a m_n. \quad (4.46)$$

A transformada de Fourier da equação acima fornece

$$\beta J(q) m_q \approx a m_q, \quad (4.47)$$

onde m_q é a transformada de Fourier da magnetização e $J(q)$ é a transformada de Fourier das constantes de troca. Deduz-se portanto que a temperatura crítica é dada pela condição $a = \beta \max_q \{J(q)\} = \beta J(q_c)$, ou seja

$$kT_c \left(1 + \frac{1}{2}e^{D/kT_c}\right) = \max_q \{J(q)\} = J(q_c). \quad (4.48)$$

Uma análise da equação acima mostra que não há solução para T_c , se

$$D > D_L = (0.46305 \dots) J(q_c). \quad (4.49)$$

D/J_1	kT_c/J_1	ρ_c
$-\infty$	2,70	0,30
-5,00	2,51	0,29
0,00	1,70	0,26
0,50	1,49	0,26
1,00	1,35	0,32
1,50	1,59	0,53
2,00	1,96	0,79
2,50	2,34	1,06

Tabela 4.1: Alguns valores de ρ_c obtidos resolvendo-se a equação (4.50) juntamente com a equação para a temperatura crítica (4.48).

Portanto D_L deve marcar um ponto tricrítico ou um ponto crítico terminal, a partir do qual a transição da fase paramagnética para a fase ordenada torna-se de primeira ordem. A natureza desse ponto pode ser analisada a partir da expansão de Landau da energia livre, mas não nos preocupamos em nos aprofundar nesse aspecto do problema.

A figura 4.2 mostra um diagrama de fases do modelo no plano (T, D) para um valor fixo do parâmetro $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$ e com $J_0 = J_1$. Esse valor de κ foi escolhido por uma questão de simplicidade, pois para esse κ esperamos encontrar apenas a fase $q = 2\pi(1/6)$. Observa-se que para valores de D pequenos a estrutura do tipo A tende a ser mais estável, enquanto valores maiores favorecem a estrutura do tipo B . Entre a fase do tipo A e a fase paramagnética a transição é contínua e descrita pela equação (4.48). Entretanto, entre a fase do tipo B e a paramagnética, a transição é contínua até $D = D_L \approx 2,54J_1$. Para $D_L < D < 2,75J_1$ a transição é de primeira ordem, caracterizada por uma mudança abrupta nas magnetizações médias por spin. Nesse caso D_L parece marcar um ponto crítico terminal.

A figura 4.3 mostra um outro diagrama de fases, no plano (T, κ) , para um valor fixo de $D = 2,2J_1$ e com $J_0 = J_1$. O diagrama de fases é incompleto pois somente algumas fases foram representadas. O nosso propósito neste diagrama de fases é mostrar que existem as fases $1/6A$ e $1/6B$, e que ocorre uma transição entre elas conforme variamos a temperatura, justamente como foi encontrado no caso do modelo ANNNI usual para $J_0 < 3J_1/10$. Entretanto, neste caso $J_0 = J_1$, e a fase estável a temperaturas mais baixas é do tipo B e não A .

Como fizemos anteriormente nas seções 3.2 e 4.2, também neste caso estudamos a condição para a existência das fases $1/6A$ e $1/6B$ no plano (T, κ) . Igualando-se os coeficientes de sexta ordem nas expansões da energia livre (4.38) nas fases $1/6A$ e $1/6B$ para $T = T_c$ e $\kappa = 1/2$ obtivemos a condição

$$a_5 - \frac{2kT}{3J_1}a_3^2 = 0, \quad (4.50)$$

onde os coeficientes a_3 e a_5 são dados em (4.42) e (4.44). A tabela 4.1 lista algumas soluções dessa equação para ρ_c como função do campo cristalino D . Observamos que no caso limite $D \rightarrow -\infty$ recuperamos o resultado do modelo ANNNI usual $\rho_c = 3/10$. Por outro lado, fixando-se a razão $\rho = J_0/J_1$ a equação (4.50) fornece também o valor máximo de D para que exista a fase com simetria A . Para $\rho = 1$ esse valor é $D = 2,3868 \dots J_1$.

Figura 4.2: Diagrama de fases, apresentando as fases $q = 2\pi(1/6)$ com simetrias dos tipos A e B (parcialmente desordenada), no plano T versus D . Aqui, $J_0/J_1 = 1$ e $\kappa = -J_2/J_1 = 1/2$.

Figura 4.3: Diagrama de fases no plano T versus $\kappa = -J_2/J_1$. Para este diagrama tomamos $D = 2,2J_1$ e $\rho = J_0/J_1 = 1$. Observamos a ocorrência da fase $1/6B$ a baixas temperaturas, e da fase $1/6A$ a temperaturas mais altas.

Capítulo 5

Modelo Planar Clássico Helicoidal

5.1 Introdução

São conhecidos um grande número de materiais tais como terras raras *Tb*, *Dy*, *Ho*, *Eu*, e os compostos de manganês *MnO₂*, *MnAu₂* e *MnP*, que podem apresentar um ordenamento planar helicoidal de spins (Cooper, 1968). Os modelos que são invocados para descrever esse comportamento supõem em geral uma sucessão de camadas formadas por momentos magnéticos confinados nos planos dessas camadas. Dentro de cada camada as interações são ferromagnéticas, enquanto as interações entre planos são competitivas, sendo atribuídas às interações do tipo RKKY (Nagamiya, 1967). São justamente essas interações competitivas causando efeitos de frustração que possibilitam o surgimento de ordenamentos helicoidais.

O modelo que vamos estudar pode ser descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i, \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{S}_i$ são spins clássicos unitários confinados no plano XY . Os spins estão localizados nos sítios i de uma rede cúbica simples de parâmetro

Figura 5.1: Modelo planar clássico helicoidal na presença de um campo magnético externo.

de rede unitário, como ilustrado na figura 5.1. H é o campo magnético externo e as constantes de troca são dadas por

$$J_{ij} = \begin{cases} J_0 & \text{se } l_i - l_j = \pm e_x, \pm e_y \\ J_1 & \text{se } l_i - l_j = \pm e_z \\ J_2 & \text{se } l_i - l_j = \pm 2e_z \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.2)$$

Denotando por θ_i o ângulo formado pelo spin S_i com o eixo x , temos

$$S_i = \cos \theta_i e_x + \sin \theta_i e_y. \quad (5.3)$$

de modo que podemos reescrever a hamiltoniana (5.1) sob a forma

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \cos(\theta_i - \theta_j) - H \sum_i \cos \theta_i, \quad (5.4)$$

onde supomos que o campo magnético externo está aplicado na direção x , isto é, $\mathbf{H} = H \mathbf{e}_x$.

Estaremos interessados apenas no estudo das propriedades desse modelo no zero absoluto de temperatura. Nesse caso todos os spins num mesmo plano terão a mesma orientação, e a hamiltoniana (5.4) reduz-se a

$$\mathcal{H} = -2N^3 J_0 + N^2 E(\{\theta_n\}), \quad (5.5)$$

onde N é o número de spins em cada uma das direções espaciais e

$$\begin{aligned} E(\{\theta_n\}) = & - J_1 \sum_{n=1}^N \cos(\theta_{n+1} - \theta_n) - J_2 \sum_{n=1}^N \cos(\theta_{n+2} - \theta_n) \\ & - H \sum_{n=1}^N \cos \theta_n \end{aligned} \quad (5.6)$$

corresponde à energia de uma cadeia unidimensional na direção z . θ_n denota o ângulo formado pelos spins do n -ésimo plano e supomos condições de contorno periódicas $\theta_{n+N} = \theta_n$. Vemos, portanto, que no zero absoluto o problema fica reduzido à determinação do estado fundamental do modelo unidimensional descrito pela equação (5.6). A condição para que uma dada configuração $\{\theta_n\}$ seja um extremo da energia (5.6) é dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial \theta_n} = & H \sin \theta_n - J_1 [\sin(\theta_{n+1} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-1})] \\ & - J_2 [\sin(\theta_{n+2} - \theta_n) - \sin(\theta_n - \theta_{n-2})] = 0. \end{aligned} \quad (5.7)$$

O modelo unidimensional (5.6) a $T = 0$ foi investigado inicialmente por Nagamiya *et al.* (1962) através de uma teoria analítica aproximada. Mais tarde Robinson e Erdős (1970) estudaram o mesmo modelo numericamente. Recentemente o modelo acrescido de um termo de anisotropia da forma

$$\frac{K}{36}(1 - \cos 6\theta_n) \quad (5.8)$$

foi considerado por Sasaki (1992). O trabalho de Sasaki concentra-se para valores de K grandes e não tem aplicabilidade para $K = 0$, que é o nosso caso. Devemos também mencionar que o modelo unidimensional para temperaturas finitas foi estudado por Carazza *et al.* (1991). Finalmente, Harris *et al.* (1991) investigaram o modelo tridimensional para temperaturas e campos pequenos.

Os diagramas de fases tanto no trabalho de Nagamiya *et al.* (1962) quanto no trabalho de Robinson e Erdős (1970) são, segundo os padrões atuais, rudimentares. Basta observar que neles são mostradas apenas fases comensuráveis de período máximo três, quando esperamos a ocorrência de fases comensuráveis de períodos maiores como em outros sistemas modulados. O objetivo principal do nosso trabalho foi a de refinar o diagrama de fases do modelo, buscando em particular certificar

a ocorrência de fases moduladas comensuráveis de períodos maiores que três.

Estaremos preocupados em levantar o diagrama de fases do modelo no plano (H, α) , onde o parâmetro

$$\alpha = \frac{J_1}{J_2}, \quad (5.9)$$

mede a competição entre as interações primeiras e segundas vizinhas.

5.2 Invariâncias e Simetrias do Modelo

Examinemos algumas propriedades de invariância e simetria do modelo definido pela equação (5.6). É fácil verificar que a energia é invariante sob as seguintes transformações :

$$(1) \theta_n \rightarrow -\theta_n, \quad (5.10)$$

$$(2) \theta_n \rightarrow \theta_{n+1}, \quad (5.11)$$

$$(3) \theta_n \rightarrow \theta_{-n}, \quad (5.12)$$

$$(4) \theta_n \rightarrow -\theta_{-n}, \quad (5.13)$$

$$(5) \theta_n \rightarrow \theta_n + \pi, \quad H \rightarrow -H. \quad (5.14)$$

A invariância expressa em (5) implica que não é necessário estudar o caso de campos negativos, pois pode ser obtida do caso dos campos positivos por rotação de todos os spins por 180° . A invariância dada por (1), significa que tanto as hélices levógiras quanto as destrógiras têm

a mesma energia. Essa propriedade não é verificada em modelos com interações quirais (Yokoi *et al.*, 1988). A transformação (2) representa uma translação por uma unidade de rede, a transformação (3) representa uma reflexão em torno do eixo perpendicular à direção axial do modelo e passando pela origem e a transformação (4) representa uma inversão em torno da origem.

Como as propriedades de invariância (1) — (4) são as mesmas daquelas do modelo ANNNI, discutidas na seção 2.3, todas as conclusões daquela seção são aplicáveis também para o caso do modelo planar clássico helicoidal.

5.3 Diagrama de Fases para $J_2 > 0$

O comportamento do modelo difere profundamente conforme o sinal da constante de troca J_2 seja positiva ou negativa. Isso porque para $J_2 > 0$ não há frustração e o sistema se ordena ferro ou antiferromagneticamente, enquanto para $J_2 < 0$ o sistema está frustrado. Por uma questão de completeza iremos analisar o diagrama de fases do modelo para $J_2 > 0$, dedicando-nos somente ao caso $J_2 < 0$ nas demais seções.

É fácil ver que para $J_2 > 0$ e $H = 0$ o sistema se ordena ferromagneticamente para $\alpha > 0$ e antiferromagneticamente para $\alpha < 0$. É claro que para $\alpha > 0$ a ordem ferromagnética persistirá mesmo na presença de campo magnético, com todos os spins alinhando-se no sentido do campo magnético. Por outro lado, para $\alpha < 0$ a aplicação do campo magnético fará com que os spins se inclinem no sentido do campo, formando uma configuração conhecida como "*spin flop*". Designando por θ o ângulo formado por spins numa subrede com o campo e por $-\theta$ o ângulo formado por spins da outra subrede, a energia da configuração

(5.6) fica

$$N^{-1}E = -J_1 \cos 2\theta - J_2 - H \cos \theta, \quad (5.15)$$

A condição para que E seja um extremo em relação a θ é

$$N^{-1} \frac{\partial E}{\partial \theta} = (H + 4J_1 \cos \theta) \sin \theta = 0. \quad (5.16)$$

Essa equação sempre apresenta uma solução ferromagnética com $\theta = 0$, enquanto para $H \leq 4 |J_1|$ também apresenta uma solução “spin flop” com

$$\theta = \cos^{-1} \left(\frac{-H}{4J_1} \right). \quad (5.17)$$

Comparando as energias desses dois tipos de soluções concluimos que a fase antiferromagnética persiste para campos

$$H < H_0 = 4 |J_1|. \quad (5.18)$$

O diagrama de fases para esse caso está mostrado na figura 5.2.

Com isso esgotamos o estudo do caso $J_2 > 0$. Da próxima seção em diante estaremos interessados apenas no caso $J_2 < 0$.

Figura 5.2: Diagrama de fases no plano H versus α para $J_2 > 0$.

5.4 Solução Exata na Ausência do Campo

Na ausência do campo podemos buscar soluções em que os spins em planos sucessivos avançam de um ângulo constante q .

$$\theta_{n+1} = \theta_n + q. \quad (5.19)$$

Nesse caso os extremos dos spins estão sobre uma hélice cilíndrica de passo $2\pi/q$, donde a denominação de estrutura helicoidal. A expressão (5.6)

Figura 5.3: Comportamento do número de onda q como função de α para $H = 0$.

para a energia fica

$$N^{-1}E = -J_1 \cos q - J_2 \cos 2q. \quad (5.20)$$

A condição para que a energia E seja um extremo relativamente a q é

$$N^{-1} \frac{\partial E}{\partial q} = \text{sen} q (J_1 + 4J_2 \cos q) = 0, \quad (5.21)$$

Figura 5.4: Estrutura helicoidal com $q = 2\pi(3/14) = 77,1428\dots^\circ$. A figura do meio mostra as projeções dos vetores de spins no plano yz , e a figura inferior é uma vista superior da hélice, ou as projeções dos vetores de spins no plano xy , onde se observa claramente o avanço regular da rotação dos spins.

Figura 5.5: Estrutura helicoidal com $q = 2\pi(1/20) = 18^\circ$.

que admite as soluções ferromagnética $q = 0$, antiferromagnética $q = \pi$ e para $|\alpha| \leq 4$ também a solução helicoidal

$$q = \cos^{-1} \left(-\frac{\alpha}{4} \right), \quad (5.22)$$

onde lembramos que $\alpha = J_1/J_2$.

No caso $J_2 > 0$ podemos verificar que para $\alpha > 0$ a estrutura de menor energia é a ferromagnética, enquanto para $\alpha < 0$ é antiferromagnética, em pleno acordo com a discussão da seção anterior.

No caso $J_2 < 0$ verificamos que para $\alpha \leq -4$ a estrutura de menor energia é ferromagnética, para $-4 < \alpha < 4$ é helicoidal, e que para $\alpha \geq 4$ é antiferromagnética. A figura 5.3 mostra a variação do número de onda q como função de α para $H = 0$.

A figura 5.4 mostra a estrutura helicoidal de spins com $q = 2\pi(3/14) = 77,1428\dots^\circ$, que é a estrutura de menor energia para $H = 0$ e $\alpha = -4 \cos 3\pi/7 = 0,890083\dots$. A figura 5.5 mostra outra estrutura helicoidal, com $q = 2\pi(1/20) = 18^\circ$ e $\alpha = -4 \cos \pi/10 = -3,80\dots$. Vemos que na figura 5.5 a hélice realiza apenas uma volta completa dentro de um período de 20 planos, enquanto na figura 5.4 a hélice correspondente realiza 3 voltas em um período de 14 planos.

5.5 Expansões para Campos Altos

Para campos suficientemente altos é natural supor que os spins estarão quase ou completamente paralelos com o campo magnético. Portanto suporemos que todos os ângulos θ_n são pequenos e conseqüentemente $|\sin \theta_n| \ll 1$. Nagamiya *et al.* (1962) propuseram buscar as

soluções para $\text{sen} \theta_n$ em forma de expansão em série de Fourier

$$\text{sen } \theta_n = \sum_{k=1}^{\infty} A_k \cos k(nq + \phi). \quad (5.23)$$

Eles determinaram apenas o primeiro harmônico da expansão, enquanto nós nos propomos obter a expansão até o quinto harmônico. O procedimento adotado para determinar as amplitudes é direto porém bastante trabalhoso. Escrevendo $nq + \phi \equiv \psi$ substituímos θ_n dado por (5.23) na equação de minimização (5.7) e expandimos a expressão resultante em potências de A_k . Usando identidades trigonométricas a equação pode ser reescrita sob a forma

$$\sum_{k=1}^{\infty} [f_k(q, \{A_k\}) \cos k\psi + g_k(q, \{A_k\}) \text{sen} k\psi] = H \sum_{k=1}^{\infty} A_k \cos k\psi. \quad (5.24)$$

Para que a equação acima seja válida para qualquer ψ é necessário que

$$f_k(q, \{A_k\}) = HA_k, \quad (5.25)$$

$$g_k(q, \{A_k\}) = 0, \quad (5.26)$$

para $k = 1, 2, 3, \dots$. Para resolver esse conjunto de equações acopladas fizemos o "Ansatz" de que $A_k = \mathcal{O}(A_1^k)$. Então as equações (5.25), corretas em $\mathcal{O}(A_1^5)$, ficam para $k = 1, 2, 3, 4$ e 5 , respectivamente,

$$0 = A_1(a_1 + b_1 A_1^2 + c_1 A_1 A_3 + d_1 A_1^4 + e_1 A_2^2), \quad (5.27)$$

$$HA_2 = A_2 \left\{ J(2q) - J(0) + \frac{A_1^2}{4} [J(0) - J(q) - J(2q) + J(3q)] \right\}, \quad (5.28)$$

$$0 = a_2 A_3 + b_2 A_1^3 + c_2 A_1^2 A_3 + d_2 A_1^5, \quad (5.29)$$

$$HA_4 = A_4 [J(4q) - J(0)], \quad (5.30)$$

$$0 = a_3 A_5 + b_3 A_1^2 A_3 + c_3 A_1^5. \quad (5.31)$$

Os coeficientes a_i , b_i e c_i estão apresentados no apêndice C.1 e,

$$J(nq) = 2J_1 \cos nq + 2J_2 \cos 2nq. \quad (5.32)$$

As equações (5.28) e (5.30) mostram que os coeficientes dos harmônicos pares se anulam,

$$A_2 = A_4 = 0. \quad (5.33)$$

Para determinar A_1 em ordem dominante é suficiente considerar a equação (5.27) em ordem A_1^3 , que fica

$$A_1(a_1 + b_1 A_1^2) = 0, \quad (5.34)$$

que admite as soluções trivial $A_1 = 0$ e para $a_1 < 0$ a solução não trivial

$$A_1 = \sqrt{-\frac{a_1}{b_1}}. \quad (5.35)$$

Os ângulos de desvios de spins em relação ao campo aplicado são dados nessa ordem por

$$\text{sen}\theta_n = A_1 \cos(nq + \phi), \quad (5.36)$$

que foi a solução encontrada inicialmente por Nagamiya *et al.* (1962). Vemos que a direção dos spins oscila em relação ao campo com número de onda q . Essa estrutura é denominada “fan” pois a projeção dos spins no plano xy lembra um leque. A transição para a fase “fan” será determinada pela condição $\max_q \{a_1\} = 0$, ou seja, o campo crítico de transição da fase paramagnética para a fase “fan” é dada por

$$H_c = \max_q \{J(q)\} - J(0) = J(q_c) - J(0). \quad (5.37)$$

O vetor de onda crítico q_c sobre a linha de transição entre as fases paramagnética e “fan” é dado por

$$q_c = \begin{cases} 0 & \text{para } \alpha \leq 4 \\ \cos^{-1}\left(-\frac{\alpha}{4}\right) & \text{para } -4 < \alpha < 4 \\ \pi & \text{para } \alpha \geq 4, \end{cases} \quad (5.38)$$

onde lembramos que $\alpha = J_1/J_2$. Observamos que para $\alpha \leq 4$ e $\alpha \geq 4$ a fase “fan” degenera-se em fases ferromagnética e antiferromagnética,

Figura 5.6: Diagrama de fases aproximado do modelo para $J_2 < 0$.

respectivamente. É interessante observar que, coincidentemente, o vetor de onda crítico q_c é igual ao vetor de onda q (5.22) da fase helicoidal para campo nulo. Substituindo o valor do vetor de onda crítico (5.38) na equação para o campo crítico H_c obtemos

$$\frac{H_c}{|J_2|} = \begin{cases} 0 & \text{para } \alpha \leq 4 \\ \frac{1}{4}(\alpha + 4)^2 & \text{para } -4 < \alpha < 4 \\ 4\alpha & \text{para } \alpha \geq 4. \end{cases} \quad (5.39)$$

A figura 5.6 mostra um diagrama de fases do modelo para $J_2 < 0$ onde

as linhas críticas de transição para a fase “fan” estão representadas.

Soluções mais precisas no interior da fase “fan”, são obtidas resolvendo-se as equações (5.27) , (5.29) e (5.31), para as amplitudes A_k . O resultado até o quinto harmônico é

$$\text{sen}\theta_n = A_1 \text{sen}(nq + \phi) + A_3 \text{sen } 3(nq + \phi) + A_5 \text{sen } 5(nq + \phi), \quad (5.40)$$

onde

$$A_1 = \sqrt{\frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}}, \quad (5.41)$$

$$A_3 = -\frac{b_2}{a_2} A_1^3, \quad (5.42)$$

$$A_5 = \frac{b_3 b_2 - c_3 a_2}{a_3 a_2} A_1^5, \quad (5.43)$$

com

$$a = b_1 c_2 + d_1 a_2 - c_1 b_2, \quad (5.44)$$

$$b = a_1 c_2 + b_1 a_2, \quad (5.45)$$

$$c = a_1 a_2. \quad (5.46)$$

A figura 5.7 mostra a estrutura da fase “fan” para $q = 2\pi(1/20)$, $\alpha = J_1/J_2 = -3,80$ e $H = 0,01 | J_2 |$ obtida através da expansão (5.40).

Figura 5.7: Estrutura "fan" $q = \pi/10$, $\alpha = J_1/J_2 = -3,80$ e $H = 0,01 |J_2|$. A figura do meio mostra as projeções dos vetores de spins no plano zy , enquanto a figura de baixo as projeções dos vetores de spins no plano xy .

5.6 Expansões para Campos Pequenos

Vimos que na ausência do campo magnético os spins descrevem uma hélice cilíndrica para $|\alpha| < 4$. É natural supor que a aplicação do campo magnético tenderá a distorcer a hélice forçando os spins no sentido do campo magnético. Para analisar essa situação Nagamiya *et al.* (1962) propuseram uma solução para os ângulos θ_n da forma

$$\theta_n = nq + \phi + \sum_{k=1}^{\infty} B_k \text{sen} k(nq + \phi), \quad (5.47)$$

onde as amplitudes B_k da série de Fourier descrevem a distorção da hélice. Nagamiya *et al.* (1962) obtiveram a expansão (5.47) até o segundo harmônico, enquanto nós nos propomos obter a expansão até o quinto harmônico. O procedimento adotado para determinar essas amplitudes é análogo daquele da seção anterior. Escrevendo $nq + \phi \equiv \psi$ substituímos θ_n dado por (5.47) na equação de minimização (5.7) e expandimos a expressão resultante em potências de B_k , já que para campos pequenos esperamos que a distorção da hélice seja pequena. Usando identidades trigonométricas a equação pode ser reescrita sob a forma

$$\sum_{k=1}^{\infty} [f_k(q, \{B_k\}, H) \cos k\psi + g_k(q, \{B_k\}, H) \text{sen} k\psi] = 0. \quad (5.48)$$

Para que a equação acima seja válida para qualquer ψ é necessário que

$$f_k(q, \{B_k\}, H) = 0 \text{ e } g_k(q, \{B_k\}, H) = 0 \text{ para } k = 1, 2, 3, \dots \quad (5.49)$$

Para resolver esse conjunto de equações acopladas fazemos o "Ansatz" de que $B_k = \mathcal{O}(H^k)$, e obtemos em ordem dominante

$$B_k = C_k H^k. \quad (5.50)$$

Os coeficientes acima estão apresentados no apêndice C.2.

Figura 5.8: Projeção da estrutura helicoidal distorcida com $q = 2\pi(3/14)$, $\alpha = J_1/J_2 = -0,89$ e $H = 0,5 |J_2|$.

A figura 5.8 mostra um exemplo de estrutura helicoidal distorcida calculada usando os resultados acima.

Se nas expressões acima desprezamos B_3 , B_4 e B_5 , a solução $\{\theta_n\}$ fica bastante simplificada:

$$\theta_n = nq + \phi + B_1 \sin(nq + \phi) + B_2 \sin 2(nq + \phi), \quad (5.51)$$

onde

$$B_1 = \frac{2H}{J(0) - 2J(q) + J(2q)}, \quad (5.52)$$

$$B_2 = \frac{3J(q) - 4J(2q) + J(3q)}{[J(q) - J(3q)][J(0) - 2J(q) + J(2q)]^2} H^2. \quad (5.53)$$

Estes resultados concordam com aqueles obtidos pela primeira vez por Nagamiya *et al.* (1962).

5.7 Transição Helicoidal-“Fan”

A validade dos resultados obtidos nas duas seções anteriores para campos altos e campos baixos torna-se discutível para campos intermediários. Com efeito, nada impede que estruturas moduladas muito mais complicadas do que hélice distorcida ou “fan” tornem-se favoráveis. Os nossos cálculos que postulam de antemão estruturas desse tipo não podem ser considerados confiáveis a campos intermediários. Entretanto, se supormos que somente as estruturas postuladas são possíveis, podemos determinar aproximadamente o valor do campo em que ocorre a transição comparando a energia dessas duas fases.

Em princípio o cálculo pode ser feito em qualquer ordem de aproximação, mas nesta seção contentar-nos-emos em apresentar o resultados em ordem mais baixa. Para campos baixos, a estrutura helicoidal distorcida é dada em ordem mais baixa de aproximação por

$$\theta_n = nq + \phi + B_1 \sin(nq + \phi), \quad (5.54)$$

onde B_1 é dada pela fórmula (5.52). Substituindo essa forma de θ_n na expressão da energia (5.6) e mantendo-se termos de até ordem B_1^2 encontramos

$$N^{-1} E_{\text{heli}} = -\frac{J(q)}{2} + \frac{H^2}{2[J(0) - 2J(q) + J(2q)]}. \quad (5.55)$$

Lembramos que ao derivarmos a expressão acima não levamos em consideração termos de "Umklapp". Ou seja, as somas do tipo $\sum_{i=1}^N \cos n k q$ que surgem no cálculo da energia foram sempre consideradas nulas, o que é verdade somente se kq não for um múltiplo de 2π . Se q for da forma $q = 2\pi(P/Q)$, então kq será um múltiplo de 2π para valores de k múltiplos de Q . Como o maior valor de k que surge nos cálculos é 4, a energia calculada é correta nesse sentido apenas para períodos maiores que 4.

O número de onda q da fase helicoidal distorcida para dados valores de α e H deve ser determinada de tal forma que a energia (5.55) seja mínima. Isso leva à equação

$$\alpha + 4 \cos q = \frac{2 [\alpha - 2 \cos q (\alpha + 2 - 8 \sin^2 q)]}{[J(0) - 2J(q) + J(2q)]^2} H^2, \quad (5.56)$$

onde lembramos que $\alpha = J_1/J_2$. Na equação acima se fixarmos q teremos uma relação entre H e α que determina a linha de estabilidade da fase

helicoidal de período q . Observamos que nesse cálculo mesmo uma fase comensurável da forma $q = 2\pi(P/Q)$, com P e Q inteiros, será estável apenas sobre uma linha. É claro que, pelo fato de termos desprezado termos de "Umklapp", uma fase comensurável pode muito bem apresentar uma faixa de estabilidade. Esse ponto será investigado melhor nas seções 5.8 e 5.9. Nesse caso a linha assim determinada deverá se situar aproximadamente no ponto médio da fase comensurável. Este conhecimento pode ser útil como ponto de partida para a busca de soluções numéricas mais precisas. Por exemplo, para $q = 2\pi(1/6)$ temos

$$\alpha = -2 - \frac{8H^2}{25 |J_2|^2}, \quad (5.57)$$

que deve localizar aproximadamente a fase comensurável $q = 2\pi(1/6)$ próximo a $H = 0$.

No caso da fase "fan", utilizando a aproximação em ordem mais baixa (5.6) obtivemos, por cálculos análogos ao caso helicoidal, o resultado

$$N^{-1}E_{\text{fan}} = E_{\text{ferro}} + \frac{(H_c - H)^2}{2J(0) - 3J(q) + J(2q)}, \quad (5.58)$$

onde também foram desconsiderados termos de "Umklapp". O número de onda q deve ser determinado através da condição de que a energia seja mínima,

$$\alpha + 4 \cos q = \frac{-\frac{3}{2}\alpha + \cos q(2\alpha - 4 - 16\sin^2 q)}{2J(0) - 3J(q) + J(2q)}(H_c - H). \quad (5.59)$$

As mesmas considerações que fizemos sobre o significado da linha no plano (H, α) para um dado q no caso helicoidal valem também aqui. Para o caso particular $q = 2\pi(1/6)$ obtemos

$$H_c - H = \frac{6}{7}(\alpha + 2) |J_2|, \quad (5.60)$$

que descreve a localização aproximada da fase $q = 2\pi(1/6)$ para H próximo de H_c .

Na região próxima do ponto $\alpha = -4$ e $H = 0$, é possível obter uma expressão assintótica para a linha de transição entre as regiões helicoidal e "fan". De acordo com as equações (5.56) e (5.59),

$$\alpha + 4 \cos q \rightarrow 0, \quad (5.61)$$

se $H \rightarrow 0$ ou $H \rightarrow H_c$, conforme o caso. Portanto, podemos aproximadamente fazer $\cos q = -\alpha/4$ nessa região. Igualando-se as energias na fase helicoidal (5.55) e na fase "fan" (5.58) obtemos em ordem dominante

$$H_{\text{heli-fan}} \approx 0,122(\alpha + 4)^2 |J_2|, \quad (5.62)$$

que é válida assintoticamente próximo de $\alpha = -4$ e $H = 0$. Lembramos que a equação que descreve a linha de transição entre as fases "fan" e ferromagnética é dada pela equação (5.39), ou seja

Figura 5.9: Fases helicoidal e "fan" na região próxima de $\alpha = -4$.

$$H_{\text{fan-ferro}} = 0,25(\alpha + 4)^2 |J_2|. \quad (5.63)$$

Essas duas linhas podem ser vistas na figura 5.9.

5.8 Estabilidade das Fases Helicoidais Comensuráveis

Na seção anterior desprezamos os termos de "Umklapp" no cômputo de energia tanto das fases helicoidais quanto das fases "fan".

Essa também foi a atitude de Nagamiya *et al.* (1962) no seu trabalho. Entretanto os termos de "Umklapp" são justamente o que distingue uma estrutura comensurável de uma incomensurável, e não podem ser desprezados no estudo das fases comensuráveis. Com efeito, os termos de "Umklapp" são os responsáveis pelo ancoramento ("pinning") de uma estrutura comensurável à rede cristalina, fixando a fase ϕ da modulação em expansões do tipo (5.23) e (5.47). Além disso, com a inclusão do termo de "Umklapp" a fase comensurável torna-se estável numa região finita do diagrama de fases em distinção às fases incomensuráveis que são estáveis apenas ao longo de linhas (Cowley, 1980; Bruce, 1980; Bruce e Cowley, 1980).

Nesta seção pretendemos analisar a estabilidade das fases comensuráveis na região de campos baixos com a inclusão dos termos de "Umklapp" na aproximação contínua. Iremos desenvolver os cálculos supondo que a desestabilização das fases comensuráveis é causada pelo mecanismo de criação de defeitos, também chamados de paredes de domínio, descomensurações, "kinks" ou sólitons (Bak, 1982). Essa última denominação origina-se do fato de que, na aproximação contínua, os defeitos surgem como soluções tipo sóliton da equação de "seno-Gordon" estático. Os nossos cálculos se assemelham àqueles levados a cabo para o modelo de Frenkel-Kontorova por Theodorou e Rice (1978) e no modelo ANNNI por Bak e Böhm (1980).

Consideremos uma fase comensurável com número de onda $q = q_0 = 2\pi P/Q$. O ângulo θ_n que o n -ésimo spin dessa fase faz com o campo magnético pode sempre ser escrito sob a forma

$$\theta_n = q_0 n + \phi_n, \quad (5.64)$$

onde ϕ_n é uma função periódica de período Q ($\phi_{Q+n} = \phi_n$). Expandindo ϕ_n em série de Fourier podemos escrever

$$\phi_n = \sum_q \phi_q e^{iqn} = \phi_0 + \sum_q' \phi_q e^{iqn}, \quad (5.65)$$

onde $\sum_q'$ indica que se deve excluir da soma o termo $q = 0$. Escrevendo

$$\phi_0 = \phi \quad \text{e} \quad \varphi_n = \sum_q' \phi_q e^{iqn}, \quad (5.66)$$

temos que

$$\theta_n = q_0 n + \phi + \varphi_n. \quad (5.67)$$

Na equação acima ϕ pode ser interpretado como sendo a fase que fixa a estrutura helicoidal em relação ao campo magnético, enquanto φ_n descreve a distorção da estrutura helicoidal devido à aplicação do campo. Para campos pequenos é natural supor que $|\varphi_n| \ll 1$. Nos nossos cálculos vamos reter apenas o harmônico principal na expansão (5.66) de φ_n , de modo que escrevendo

$$\phi_{q_0} = A e^{i\alpha}, \quad (5.68)$$

temos

$$\varphi_n = \phi_{q_0} e^{iq_0 n} + \text{c.c.} = 2A \cos(q_0 n + \alpha). \quad (5.69)$$

Assim θ_n é descrito nessa aproximação por

$$\theta_n = q_0 n + \phi + \varphi_n = q_0 n + \phi + 2A \cos(q_0 n + \alpha). \quad (5.70)$$

É conveniente para os cálculos observar que a energia do modelo (5.6) pode ser escrita

$$E = \Re\{E\}, \quad (5.71)$$

onde $\Re$ indica que a parte real deve ser tomada e

$$E = - \sum_n [J_1 e^{i(\theta_{n+1} - \theta_n)} + J_2 e^{i(\theta_{n+2} - \theta_n)} + H e^{i\theta_n}]. \quad (5.72)$$

Substituindo na equação acima os θ_n dados pela expressão (5.67) e levando-se em conta que $|\varphi_n| \ll 1$ obtemos a expansão

$$E = \sum_{l=0}^{\infty} E_l, \quad (5.73)$$

onde

$$E_l = - \frac{i^l}{l!} [J_1 e^{iq_0} \sum_n (\varphi_{n+1} - \varphi_n)^l + J_2 e^{i2q_0} \sum_n (\varphi_{n+2} - \varphi_n)^l + H e^{i\phi} \sum_n e^{iq_0 n} \varphi_n^l]. \quad (5.74)$$

Agora, substituindo-se a expansão de Fourier (5.66) para φ_n obtemos

$$N^{-1} E_l = - \frac{i^l}{l!} \sum_{q_1 \dots q_l} \phi_{q_1} \dots \phi_{q_l} \left\{ [J_1 e^{iq_0} \prod_{j=1}^l (e^{iq_j} - 1) + J_2 e^{i2q_0} \prod_{j=1}^l (e^{i2q_j} - 1)] \Delta(\sum_{j=1}^l q_j) + H e^{i\phi} \Delta(q_0 + \sum_{j=1}^l q_j) \right\}, \quad (5.75)$$

onde usamos o fato de que

$$\sum_n e^{iqn} = N \Delta(q), \quad (5.76)$$

sendo que a função $\Delta(q)$ é dada por

$$\Delta(q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta_{q/2\pi, n} = \begin{cases} 1 & \text{se } q = 0 \pmod{2\pi} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.77)$$

Portanto nas somas em (5.75) sobrevivem somente aqueles termos para os quais o argumento da função Δ é zero, denominados termos *normais* (N), e aqueles para os quais o argumento é múltiplo de 2π , denominados termos de “*Umklapp*” (U).

Vamos inicialmente considerar apenas a contribuição devido aos termos normais. Na aproximação em que conservamos apenas o primeiro harmônico $q_j = \pm q_0$, a equação $\sum_{j=1}^l q_j = 0$ pode ser satisfeita para l par da forma $l = 2k$ de $\binom{2k}{k}$ modos diferentes. Logo,

$$N^{-1}E_{2k}^{(N)} = - \frac{i^{2k}}{(2k)!} \binom{2k}{k} |\phi_{q_0}|^{2k} [J_1 e^{iq_0} | e^{iq_0} - 1 |^{2k} + J_2 e^{i2q_0} | e^{i2q_0} - 1 |^{2k}]. \quad (5.78)$$

Lembrando que $\phi_{q_0} = Ae^{i\alpha}$ obtemos, já tomando a parte real,

$$N^{-1}E_{2k}^{(N)} = - \frac{(-1)^k 2^k}{(k!)^2} [J_1 \cos q_0 (1 - \cos q_0)^k + J_2 \cos 2q_0 (1 - \cos 2q_0)^k] A^{2k}. \quad (5.79)$$

Por outro lado, a equação $q_0 + \sum_{j=1}^l q_j = 0$ pode ser satisfeita para l ímpar da forma $l = 2k + 1$ de $\binom{2k}{k}$ formas diferentes. Portanto,

$$N^{-1}E_{2k+1}^{(N)} = - \frac{i^{2k+1}}{(2k+1)!} \binom{2k}{k} \phi_{-q_0} |\phi_{q_0}|^{2k} H e^{i\phi}. \quad (5.80)$$

Com $\phi_{q_0} = Ae^{i\alpha}$ e tomando-se a parte real obtemos

$$N^{-1}E_{2k+1}^{(N)} = \frac{(-1)^k}{(2k+1)(k!)^2} \sin(\phi - \alpha) H A^{2k+1}. \quad (5.81)$$

Juntando os resultados (5.79) e (5.81) podemos escrever a parte normal da energia sob a forma

$$N^{-1}E^{(N)} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l A^l, \quad (5.82)$$

onde os coeficientes a_l são

$$\begin{aligned} a_{2k} = & - \frac{(-1)^k 2^k}{(k!)^2} [J_1 \cos q_0 (1 - \cos q_0)^k \\ & + J_2 \cos 2q_0 (1 - \cos 2q_0)^k], \end{aligned} \quad (5.83)$$

$$a_{2k+1} = \frac{(-1)^k}{(2k+1)(k!)^2} \sin(\phi - \alpha) H A^{2k+1}. \quad (5.84)$$

Os três primeiros coeficientes a_l são dados por

$$a_0 = -\frac{1}{2} J(q_0), \quad (5.85)$$

$$a_1 = \sin(\phi - \alpha) H A, \quad (5.86)$$

$$a_2 = [2J(q_0) - J(2q_0) - J(0)]/2, \quad (5.87)$$

onde

$$J(nq) = 2J_1 \cos nq + 2J_2 \cos 2nq. \quad (5.88)$$

Mantendo-se somente até termos de segunda ordem em A ,

$$N^{-1}E^{(N)} = a_0 + a_1A + a_2A^2. \quad (5.89)$$

A condição para que $E^{(N)}$ seja um extremo é

$$N^{-1}\frac{\partial E^{(N)}}{\partial A} = a_1 + 2a_2A = 0. \quad (5.90)$$

Portanto, a amplitude A é dada em ordem dominante por

$$A = -\frac{a_1}{2a_2} = -\frac{H}{2J(q_0) - J(0) - J(2q_0)} \sin(\phi - \alpha). \quad (5.91)$$

Substituindo esse resultado para a amplitude na expressão (5.89) para a energia obtemos

$$N^{-1}E^{(N)} = -\frac{1}{2}J(q_0) - \frac{H^2}{2[2J(q_0) - J(0) - J(2q_0)]} \sin^2(\phi - \alpha). \quad (5.92)$$

Para que a energia seja mínima é preciso que $\phi - \alpha = (2k + 1)\pi/2$. Escolhendo-se $\phi - \alpha = -\pi/2$ ou

$$\alpha = \phi + \pi/2 \quad (5.93)$$

para que a amplitude A dada por (5.91) seja positiva, e substituindo esse valor de α em (5.70) obtemos

$$\theta_n = q_0 n + \phi - 2A \sin(nq_0 + \phi). \quad (5.94)$$

Observamos que a fase ϕ não é determinada quando consideramos apenas as contribuições à energia dos termos normais. Para determinar a fase ϕ devemos considerar o termo dominante de "Umklapp", ou seja, o termo de "Umklapp" de ordem mais baixa. Observando a expressão (5.75) para E_l percebemos que o primeiro termo de "Umklapp" ocorre para $l = Q - 1$ e $q_j = q_0 (j = 1, \dots, Q - 1)$ quando

$$q_0 + \sum_{j=1}^{Q-1} q_j = Qq_0 = 2\pi P. \quad (5.95)$$

Logo a contribuição de "Umklapp" de ordem mais baixa é

$$N^{-1} E_{Q-1}^{(U)} = -\frac{i^{Q-1}}{(Q-1)!} H e^{i\phi} \phi_{q_0}^{Q-1}. \quad (5.96)$$

Lembrando que $\phi_{q_0} = A e^{i\alpha}$, onde $\alpha = \phi + \pi/2$, e tomando-se a parte real obtemos

$$N^{-1} E_{Q-1}^{(U)} = \frac{(-1)^Q}{(Q-1)!} H A^{Q-1} \cos Q\phi. \quad (5.97)$$

O valor de ϕ deve ser escolhido de tal forma a minimizar essa energia de "Umklapp". Portanto,

$$\phi = \begin{cases} 2k\pi/Q & \text{se } Q \text{ é ímpar} \\ (2k+1)\pi/Q & \text{se } Q \text{ é par.} \end{cases} \quad (5.98)$$

Concluimos, portanto, que a fase ϕ na expressão (5.94) para θ_n é fixada pela energia de "Umklapp" da ordem de H^Q .

Passaremos agora a investigar a estabilidade da fase comensurável que acabamos de determinar. Vamos supor que a instabilidade surge como uma variação espacial suave da fase ϕ , mantendo-se a amplitude A constante. Portanto, vamos calcular a energia de uma fase descrita por

$$\theta_n = q_0 n + \phi_n + \varphi_n, \quad (5.99)$$

onde

$$\varphi_n = -2A \sin(q_0 n + \phi_n), \quad (5.100)$$

e estudar em que condições torna-se energeticamente favorável para que surja uma variação espacial de ϕ_n . É claro que uma variação espacial de ϕ_n significa que em geral a fase é incomensurável, de modo que estamos estudando a transição da fase comensurável para uma fase incomensurável.

Substituindo θ_n dado por (5.99) na expressão (5.72) para E podemos escrevê-la novamente como uma expansão da forma (5.73) onde

agora

$$\begin{aligned}
 E_l = & - \frac{i^l}{l!} [J_1 e^{iq_0} \sum_n e^{i(\phi_{n+1}-\phi_n)} (\varphi_{n+1} - \varphi_n)^l \\
 & + J_2 e^{i2q_0} \sum_n e^{i(\phi_{n+2}-\phi_n)} (\varphi_{n+2} - \varphi_n)^l \\
 & + H e^{i\phi} \sum_n e^{iq_0 n + i\phi_n} \varphi_n^l].
 \end{aligned} \tag{5.101}$$

Novamente podemos classificar os termos que aparecem na expressão acima em normais (N) e de "Umklapp" (U). Iremos inicialmente calcular a contribuição dos termos normais. Para $l = 0$ expandindo-se as diferenças $\phi_{n+1} - \phi_n$ e $\phi_{n+2} - \phi_n$ até ordem quadrática e usando

$$\begin{aligned}
 \phi_{n+1} - \phi_n & \approx \frac{d\phi}{dn}, \\
 \phi_{n+2} - \phi_n & \approx 2 \frac{d\phi}{dn},
 \end{aligned} \tag{5.102}$$

obtemos, já tomando-se a parte real,

$$\begin{aligned}
 E_0^{(N)} = & -N(J_1 \cos q_0 + J_2 \cos 2q_0) + \int \left\{ [J_1 \sin q_0 + 2J_2 \sin 2q_0] \frac{d\phi}{dn} \right. \\
 & \left. + \frac{1}{2} [J_1 \cos q_0 + 2J_2 \cos 2q_0] \left(\frac{d\phi}{dn} \right)^2 \right\} dn.
 \end{aligned} \tag{5.103}$$

Observamos que o termo envolvendo o campo H foi desprezado por conter o fator fortemente oscilante $e^{iq_0 n}$. Para $l = 1$ obtemos

$$N^{-1}E_1^{(N)} = -HA, \quad (5.104)$$

onde foram desprezados os termos envolvendo fatores fortemente oscilantes. Analogamente obtemos para o termo $l = 2$ o resultado

$$N^{-1}E_2^{(N)} = A^2[2J_1 \cos q_0(1 - \cos q_0) + 2J_2 \cos 2q_0(1 - \cos 2q_0)]. \quad (5.105)$$

Observamos que surgem também termos envolvendo derivadas de ϕ na expressão de $E_2^{(N)}$, mas como eles são da ordem de A^2 podem ser desprezados em comparação com aquelas que surgem em $E_0^{(N)}$. Juntando os resultados acima concluímos que em ordem A^2 ,

$$\begin{aligned} E^{(N)} = E_C^{(N)} + \int \left\{ [J_1 \sin q_0 + 2J_2 \sin 2q_0] \frac{d\phi}{dn} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} [J_1 \cos q_0 + 2J_2 \cos 2q_0] \left(\frac{d\phi}{dn} \right)^2 \right\} dn, \end{aligned} \quad (5.106)$$

onde $E_C^{(N)}$ é a energia normal da fase comensurável.

Vamos agora considerar o termo de "Umklapp" de ordem mais baixa, que ocorre para o termo contendo o campo magnético na expressão (5.101) quando $l = Q - 1$. Desprezando-se todos os termos contendo fatores fortemente oscilantes obtemos

$$E_{Q-1}^{(U)} = \frac{(-1)^Q}{(Q-1)!} HA^{Q-1} \int dn \cos Q\phi(n). \quad (5.107)$$

Somando-se as contribuições normais (5.106) e de "Umklapp" (5.107) obtemos finalmente

$$\begin{aligned} \Delta E = E - E_C = \int \left\{ -\delta \left(\frac{d\phi}{dn} \right) + \frac{a}{2} \left(\frac{d\phi}{dn} \right)^2 \right. \\ \left. + V[1 + (-1)^Q \cos(Q\phi)] \right\} dn, \end{aligned} \quad (5.108)$$

onde $E_C = E_C^{(N)} + E_C^{(U)}$ é a energia da fase comensurável e

$$\delta = -J_1 \sin q_0 - 2J_2 \sin 2q_0, \quad (5.109)$$

$$a = J_1 \cos q_0 + 2J_2 \cos 2q_0, \quad (5.110)$$

$$V = HA^{Q-1}/(Q-1)!. \quad (5.111)$$

Segundo a equação (5.38) o valor do parâmetro $\alpha = J_1/J_2$ em que a fase helicoidal com número de onda q_0 é estável a campo nulo é dado por

$$\alpha_0 = -4 \cos q_0. \quad (5.112)$$

Em termos de α_0 os parâmetros δ e a definidos em (5.109) e (5.110) ficam

$$\delta = \frac{1}{4} \sqrt{16 - \alpha_0^2} (\alpha - \alpha_0), \quad (5.113)$$

$$a = \frac{1}{4}(\alpha\alpha_0 - 2\alpha_0^2 + 16). \quad (5.114)$$

Para campos pequenos, onde $\alpha \approx \alpha_0$,

$$a \approx (16 - \alpha_0^2)/4. \quad (5.115)$$

Observamos que o parâmetro a é sempre positivo pois na região helicoidal $|\alpha| < 4$. Entretanto, próximo à fase antiferromagnética $q_0 = \pi$ temos que $\alpha_0 = -4$, de modo que a análise deixa de ser válida. Isso mostra que a instabilidade da fase antiferromagnética não parece ser devido ao mecanismo de criação de defeitos, mas provavelmente a uma transição de primeira ordem.

O comportamento da funcional ΔE em termos da função $\phi(n)$ está analisado em detalhe no apêndice D. O limite de estabilidade da fase comensurável é dado pela condição

$$|\delta| = 2\sqrt{aV}/\pi^2. \quad (5.116)$$

Visto que $\delta \propto \alpha - \alpha_0$ e $V \propto H^Q$, concluimos que a fronteira de estabilidade da fase comensurável se comporta como

$$|\alpha - \alpha_0| \propto H^{Q/2}. \quad (5.117)$$

Figura 5.10: Região de estabilidade da fase $q = 2\pi(1/6)$ de acordo com os resultados desta seção, equação (5.117), mostrando a forma de cuspide.

Portanto os nossos cálculos indicam que todas as fases comensuráveis devem apresentar uma certa largura para $H > 0$. Essa largura é proporcional a $H^{Q/2}$, e portanto será muito estreita para períodos Q longos. As regiões de estabilidade das fases comensuráveis para campos baixos apresentam formas de cúspides, como exemplificado na figura 5.10, num comportamento semelhante ao observado no modelo de Frenkel-Kontorova (Theodorou e Rice, 1978) e no modelo ANNNI (Bak e Böhm, 1980).

As soluções $\phi(n)$ que minimizam a funcional ΔE além do li-

Figura 5.11: Acima, gráfico do anti-sóliton $\phi(n)$ em função de n , para $q_0 = 2\pi(1/3)$, $\alpha = 2$ e $H/|J_2| = 1$. Nos outros dois gráficos vemos as projeções nos planos xz e xy da estrutura helicoidal com um anti-sóliton mostrado no gráfico ao alto.

Figura 5.12: Acima, gráfico do anti-sóliton $\phi(n)$ para $q = 2\pi(1/3)$, $\alpha = 1$ e $H/|J_2| = 2$. Nos dois gráficos seguintes estão mostradas as projeções da estrutura helicoidal com o anti-sóliton acima.

mite de estabilidade da fase comensurável representam sólitons ou anti-sólitons regularmente espaçados. Os sólitons (anti-sólitons) representam regiões em que a fase $\phi(n)$ avança (retarda) de aproximadamente $2\pi/Q$. A figura 5.11 mostra o gráfico do anti-sóliton $\phi(n)$ no caso $Q = 3$ e $q_0 = 2\pi/3$ para $H/|J_2| = 1$ e $\alpha = 2$. A figura também mostra as projeções nos planos xz e xy da estrutura helicoidal correspondente. Observamos na região de inflexão da curva do anti-sóliton os spins giram mais lentamente, retardando nessa região praticamente de $2\pi/3$. As três direções onde há a maior concentração de vetores, representam as duas regiões longe do centro do anti-sóliton, uma à esquerda e a outra à direita. Estas regiões formam praticamente uma fase comensurável, $q = 2\pi(1/3)$, neste exemplo. Na figura 5.12 aumentamos o campo para $H = 2|J_2|$. Comparando com a figura 5.11, observamos uma diminuição na largura do anti-sóliton quando o campo aumenta e também uma diminuição da largura da região onde há o retardamento na rotação de $2\pi/3$ dos spins. Além disso podemos ainda observar uma tendência dos vetores de spins se orientarem paralelamente ao campo magnético.

5.9 Estabilidade das Fases “Fan” Comensuráveis

Nesta seção vamos estudar a estabilidade das fases “fan” comensuráveis próximo à linha crítica de transição para a fase ferromagnética. O procedimento adotado é o mesmo da seção anterior e baseia-se na análise da estabilidade contra criação de sólitons ou anti-sólitons numa aproximação contínua.

Vamos considerar uma fase “fan” comensurável de número de onda dada por $q = q_0 = 2\pi(P/Q)$. Próximo à linha crítica de transição para a fase ferromagnética os ângulos que os spins formam com o campo

magnético são pequenos, isto é, $|\theta_n| \ll 1$. Expandindo-se os cossenos da expressão (5.6) obtemos

$$E = \sum_{l=0}^{\infty} E_l, \quad (5.118)$$

onde

$$E_l = -\frac{(-1)^l}{(2l)!} \sum_n \left[J_1(\theta_{n+1} - \theta_n)^{2l} + J_2(\theta_{n+2} - \theta_n)^{2l} + H\theta_n^{2l} \right]. \quad (5.119)$$

Introduzindo-se a representação em série de Fourier para θ_n ,

$$\theta_n = \sum_q \theta_q e^{iqn}, \quad (5.120)$$

na expressão (5.119) obtemos

$$\begin{aligned} N^{-1}E_l = & -\frac{(-1)^l}{(2l)!} \sum_{q_1 \dots q_{2l}} \theta_{q_1} \dots \theta_{q_{2l}} \left[J_1(e^{iq_1} - 1) \dots (e^{iq_{2l}} - 1) \right. \\ & + J_2(e^{2iq_1} - 1) \dots (e^{2iq_{2l}} - 1) \\ & \left. + H \right] \Delta(q_1 + \dots + q_{2l}), \end{aligned} \quad (5.121)$$

onde usamos o fato de que

$$\sum_n e^{iqn} = N\Delta(q), \quad (5.122)$$

sendo que a função $\Delta(q)$ é dada por

$$\Delta(q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta_{q/2\pi, n} = \begin{cases} 1 & \text{se } q = 0 \pmod{2\pi} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.123)$$

Podemos distinguir dois tipos de contribuições para a expressão de E_l , os termos *normais* (N) tais que $q_1 + \dots + q_{2l} = 0$ e os termos de “*Umklapp*” (U) tais que $q_1 + \dots + q_{2l}$ são múltiplos de 2π .

Nos nossos cálculos vamos manter apenas o harmônico principal na série de Fourier para θ_n , equação (5.120), de modo que

$$\theta_n = \theta_{q_0} e^{iq_0 n} + \theta_{-q_0} e^{-iq_0 n} = 2A \cos(q_0 n + \phi), \quad (5.124)$$

onde fizemos

$$\theta_{q_0} = A e^{i\phi}. \quad (5.125)$$

Vamos calcular primeiramente a contribuição devida aos termos normais. Como $q_i = \pm q_0$, há $\binom{2l}{l}$ formas diferentes de satisfazer a condição $q_1 + \dots + q_{2l} = 0$. Logo a contribuição normal a E_l é

$$N^{-1} E_l^{(N)} = - \frac{(-1)^l}{(2l)!} |\theta_{q_0}|^{2l} \binom{2l}{l} [J_1 |e^{iq_0} - 1|^{2l} + J_2 |e^{2iq_0} - 1|^{2l} + H], \quad (5.126)$$

Utilizando (5.125) obtemos

$$N^{-1}E_l^{(N)} = a_l A^{2l}, \quad (5.127)$$

onde

$$a_l = -\frac{(-1)^l}{(l!)^2} 2^l \left[J_1(1 - \cos q_0)^l + J_2(1 - \cos 2q_0)^l + \frac{H}{2^l} \right], \quad (5.128)$$

de modo que a contribuição normal total à energia (5.118) é dada por

$$N^{-1}E^{(N)} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l A^{2l}. \quad (5.129)$$

Os três primeiros coeficientes a_l são:

$$a_0 = -J_1 - J_2 - H, \quad (5.130)$$

$$a_1 = 2 \left[J_1(1 - \cos q_0) + J_2(1 - \cos 2q_0) + \frac{H}{2} \right], \quad (5.131)$$

$$a_2 = -J_1(1 - \cos q_0)^2 - J_2(1 - \cos 2q_0)^2 - \frac{H}{4}. \quad (5.132)$$

Usando a definição (5.32) para $J(nq)$ podemos escrever

$$a_1 = -[J(q_0) - J(0) - H], \quad (5.133)$$

$$a_2 = -\frac{1}{4}[3J(0) - 4J(q_0) + J(2q_0) + H]. \quad (5.134)$$

Para determinar a amplitude A em ordem dominante é suficiente tomar somente os três primeiros termos da expansão

$$N^{-1}E^{(N)} \approx a_0 + a_1 A^2 + a_2 A^4. \quad (5.135)$$

A condição para que $E^{(N)}$ seja um extremo é

$$N^{-1} \frac{\partial E^{(N)}}{\partial A} \approx 2A(a_1 + 2a_2 A^2) = 0. \quad (5.136)$$

Portanto, a amplitude A é dada em ordem dominante por

$$A = \left\{ \frac{2[J(q_0) - J(0) - H]}{4J(q_0) - 3J(0) - J(2q_0) - H} \right\}^{1/2}. \quad (5.137)$$

Vemos que a solução para A somente é possível se,

$$H \leq J(q_0) - J(0) = H_c, \quad (5.138)$$

onde H_c é o campo crítico para a transição entre a fase ferromagnética e a fase "fan". A energia dada pela equação (5.135) fica, então,

$$N^{-1}E^{(N)} = N^{-1}E_F - \frac{(H_c - H)^2}{4J(q_0) - 3J(0) - J(2q_0) - H}. \quad (5.139)$$

onde E_F é a energia da fase ferromagnética.

Vemos que a fase ϕ em (5.125) não é fixada se considerarmos apenas os termos normais. Vamos então considerar as contribuições devida ao termos de "Umklapp". Na aproximação (5.124) em que consideramos apenas o primeiro harmônico, $q_i = \pm q_0$, a condição para que $q_1 + \dots + q_{2l}$ seja um múltiplo de 2π é satisfeita em ordem mais baixa para

$$l = L = \begin{cases} Q/2 & \text{se } Q \text{ par} \\ Q & \text{se } Q \text{ ímpar,} \end{cases} \quad (5.140)$$

de forma que a contribuição de "Umklapp" para E_L é dada por

$$\begin{aligned} N^{-1}E_L^{(U)} = & - \frac{(-1)^L}{(2L)!} \theta_{q_0}^{2L} [J_1(e^{iq_0-1})^{2L} \\ & + J_2(e^{2iq_0-1})^{2L} + H] + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (5.141)$$

Lembrando que $q_0 j L = 2\pi(P/Q)L$ é um múltiplo de π , e usando θ_{q_0} definido em (5.125), obtemos

$$\begin{aligned} N^{-1} E^{(U)} = N^{-1} E_L^{(U)} = & - \frac{2^{L+1}}{(2L)!} [J_1(1 - \cos q_0)^L \cos q_0 L \\ & + J_2(1 - \cos 2q_0)^L + (-1)^L 2^{-L} H] A^{2L} \cos 2L\phi, \end{aligned} \quad (5.142)$$

que é a contribuição em ordem dominante do termo de "Umklapp" à energia. A condição de minimização da energia exige que se o fator multiplicando $\cos 2L\phi$ for positivo devemos ter

$$2L\phi = (2n+1)\pi \Rightarrow \phi = \frac{(2n+1)\pi}{2L}, \quad (5.143)$$

e se for negativo,

$$2L\phi = 2n\pi \Rightarrow \phi = \frac{n\pi}{L}. \quad (5.144)$$

Assim, a fase ϕ é fixada pelo termo de "Umklapp" em ordem $A^{2L} \sim (H_c - H)^L$, onde $L = Q/2$ para Q par e $L = Q$, para Q ímpar.

Passaremos agora a analisar a estabilidade da fase comensurável supondo que a fase ϕ possa variar lentamente com n enquanto a amplitude A se mantém constante. Ou seja, escreveremos θ_n dada em (5.124) sob a forma

$$\theta_n = Ae^{i(q_0 n + \phi_n)} + \text{c.c.} = 2A \cos(q_0 n + \phi_n). \quad (5.145)$$

Como antes, vamos inicialmente calcular a contribuição dos termos normais. Escrevendo

$$\theta_{n+j} - \theta_n = 4A \sin \left[q_0 n + \frac{1}{2}(q_0 j + \phi_n + \phi_{n+j}) \right]$$

$$\text{sen} \left[\frac{1}{2}(-q_0 j + \phi_n - \phi_{n+j}) \right], \quad (5.146)$$

e desprezando todos os termos multiplicados ao fator fortemente oscilante $\cos(2q_0 n + q_0 j + \phi_{n+j} + \phi_n)$ obtemos

$$\begin{aligned} \sum_n (\theta_{n+j} - \theta_n)^2 &= 4A^2 \sum_n [1 - \cos q_0 j \cos(\phi_{n+j} - \phi_n) \\ &\quad + \text{sen} q_0 j \text{sen}(\phi_{n+j} - \phi_n)]. \end{aligned} \quad (5.147)$$

Agora, usando expansões para senos e cossenos até ordem quadrática resulta

$$\begin{aligned} \sum_n (\theta_{n+j} - \theta_n)^2 &= 8NA^2 \text{sen}^2 \frac{q_0 j}{2} + 4A^2 \text{sen} q_0 j \sum_n (\phi_{n+j} - \phi_n) \\ &\quad + 2A^2 \cos q_0 j \sum_n (\phi_{n+j} - \phi_n)^2. \end{aligned} \quad (5.148)$$

Analogamente,

$$\begin{aligned} \sum_n (\theta_{n+j} - \theta_n)^4 &= 96NA^4 \text{sen}^4 \frac{j q}{2} \\ &\quad + \frac{3A^4}{16} \left(\text{sen} q_0 j - \frac{1}{2} \text{sen} 2q_0 j \right) \sum_n (\phi_{n+j} - \phi_n) \\ &\quad + \frac{3A^4}{32} \left(\cos q_0 j - \frac{1}{2} \cos 2q_0 j \right) \sum_n (\phi_{n+j} - \phi_n)^2. \end{aligned} \quad (5.149)$$

Os termos $\sum_n \theta_n^m$ são iguais àqueles calculados anteriormente para a parte comensurável.

Assim, substituindo (5.148) e (5.149) na expressão para a energia, (5.119), obtemos

$$E^{(N)} = E_C^{(N)} + b \sum_n (\phi_{n+1} - \phi_n) + c \sum_n (\phi_{n+1} - \phi_n)^2 + d \sum_n (\phi_{n+2} - \phi_n) + e \sum_n (\phi_{n+2} - \phi_n)^2, \quad (5.150)$$

onde, $E_C^{(N)}$ é a energia normal da fase comensurável e

$$b = 2J_1 \sin q_0 A^2 - \frac{J_1}{128} A^4 + \dots, \quad (5.151)$$

$$c = J_1 \cos q_0 A^2 - \frac{J_1}{256} \left(\cos q_0 - \frac{1}{2} \cos 2q_0 \right) A^4 + \dots, \quad (5.152)$$

$$d = 2J_2 \sin 2q_0 A^2 - \frac{J_2}{128} \left(\sin 2q_0 - \frac{1}{2} \sin 4q_0 \right) A^4 + \dots, \quad (5.153)$$

$$e = J_2 \cos 2q_0 A^2 - \frac{J_2}{256} A^4 + \dots. \quad (5.154)$$

Passamos agora para os termos de "Umklapp". Conforme vimos no cálculo da parte comensurável, o termo de "Umklapp" é aquele que ocorre para a ordem $2L$ na expansão para a energia. Ou seja, devemos calcular termos do tipo $\sum_n (\theta_{n+j} - \theta_n)^{2L}$.

Substituindo a expressão (5.146) nessa soma vemos que a contribuição de "Umklapp" tem a forma

$$\sum_n (\theta_{n+j} - \theta_n)^{2L} = (4A)^{2L} \sin^{2L} \left(\frac{q_0 j}{2} \right) \frac{(-1)^L}{2^{2L-1}}$$

$$\sum_n \cos 2L \left(q_0 n + \frac{q_0 j}{2} + \phi_n \right). \quad (5.155)$$

Temos também que

$$\sum_n \theta_n^{2L} = (2A)^{2L} \sum_n \cos^{2L}(q_0 n + \phi_n). \quad (5.156)$$

Como $Lq_0 j n$ é múltiplo de π , podemos escrever a contribuição dominante à energia devida ao termo de "Umklapp" na forma

$$\begin{aligned} N^{-1} E^{(U)} = & -\frac{2^{L+1}}{(2L)!} [J_1(1 - \cos q_0)^L \cos q_0 L + J_2(1 - \cos 2q_0)^L \\ & + (-1)^L 2^{-L} H] A^{2L} \sum_n \cos 2L \phi_n. \end{aligned} \quad (5.157)$$

Comparando com a energia devida ao termo de "Umklapp" da parte comensurável, temos que

$$E^{(U)} = E_C^{(U)} + |V| \sum_n (1 \pm \cos 2L \phi_n), \quad (5.158)$$

onde

$$\begin{aligned} V = & -\frac{2^{L+1}}{(2L)!} A^{2L} [J_1(1 - \cos q_0)^L \cos L q_0 \\ & + J_2(1 - \cos 2q_0)^L + (-1)^L 2^{-L} H], \end{aligned} \quad (5.159)$$

e o sinal defronte ao cosseno na equação (5.158) é + se $V > 0$ e - se $V < 0$.

Juntando as contribuições (5.150) devido aos termos normais com a contribuição em ordem dominante (5.158) devido aos termos de "Umklapp" obtemos para a energia o resultado

$$\begin{aligned} E - E_C = \Delta E = & b \sum_n (\phi_{n+1} - \phi_n) + c \sum_n (\phi_{n+1} - \phi_n)^2 \\ & + d \sum_n (\phi_{n+2} - \phi_n) + e \sum_n (\phi_{n+2} - \phi_n)^2 \\ & + V \sum_n (1 \pm \cos 2L\phi_n), \end{aligned} \quad (5.160)$$

onde os coeficientes b , c , d e e foram definidos em (5.151) — (5.154). Fazendo-se agora a aproximação do contínuo,

$$\phi_{n+1} - \phi_n \approx \frac{d\phi}{dn}, \quad (5.161)$$

$$\phi_{n+2} - \phi_n \approx 2 \frac{d\phi}{dn}, \quad (5.162)$$

obtemos finalmente

$$\Delta E = \int dn \left[-\delta \frac{d\phi}{dn} + \frac{a}{2} \left(\frac{d\phi}{dn} \right)^2 + |V| (1 \pm \cos 2L\phi) \right], \quad (5.163)$$

onde

$$a = 2c + 8e \approx 2A^2[J_1 \cos q_0 + J_2 \cos 2q_0], \quad (5.164)$$

$$\delta = -b - 2d \approx -2A^2[J_1 \sin q_0 + J_2 \sin 2q_0]. \quad (5.165)$$

Nas expressões para a e δ desprezamos todas as potências iguais ou superiores a A^4 .

A expressão para ΔE tem a mesma forma da expressão análoga obtida para o caso helicoidal da seção anterior, embora os coeficientes a , δ e V sejam diferentes. Conforme está discutido no apêndice D, o limite de estabilidade da fase comensurável é dado pela equação

$$|\delta| = 2\sqrt{a|V|}/\pi^2. \quad (5.166)$$

Definindo α_0 segundo

$$\alpha_0 = -4 \cos q_0, \quad (5.167)$$

e lembrando a definição $\alpha = J_1/J_2$, obtemos

$$a = A^2 |J_2| (\alpha\alpha_0 - 2\alpha_0^2 + 16)/2, \quad (5.168)$$

$$\delta = A^2 |J_2| \sqrt{16 - \alpha_0^2}(\alpha - \alpha_0)/4. \quad (5.169)$$

Próximo à linha crítica e na região de estabilidade da fase comensurável podemos fazer a aproximação $\alpha \approx \alpha_0$, de modo que $a \approx A^2 |J_2| (16 - \alpha_0^2)/4 > 0$. Assim usando o fato de que $\delta \propto A^2(\alpha - \alpha_0)$ e $|V| \propto A^{2L} \propto |H - H_c|^{2L}$, obtemos para a forma assintótica da fronteira de estabilidade da fase "fan" o resultado

$$|\alpha - \alpha_0| \propto |H - H_c|^{2L}, \quad (5.170)$$

ou, lembrando da definição (5.140) para L podemos escrever finalmente

$$|\alpha - \alpha_0| \propto \begin{cases} |H_c - H|^{\frac{Q-2}{4}} & \text{se } Q \text{ par} \\ |H_c - H|^{\frac{Q-1}{2}} & \text{se } Q \text{ é ímpar.} \end{cases} \quad (5.171)$$

Portanto, as regiões de estabilidade das fases "fan" comensuráveis apresentam formas de cúspides, como ilustrado para o caso da fase $q_0 = 2\pi(1/6)$ na figura 5.13. É interessante observar que o expoente da forma assintótica (5.171) difere do expoente da fórmula assintótica correspondente (5.117) para a fase helicoidal mesmo que as fases tenham o mesmo número de onda q_0 .

5.10 Diagrama de Fases pelo Método dos Potenciais Efetivos

Em princípio o diagrama de fases do modelo planar clássico helicoidal poderia ser levantado pelos mesmos métodos apresentados na seção 2.2. Entretanto as equações de minimização (5.7) para esse modelo parecem ser menos tratáveis que aquelas do modelo ANNNI. Por

Figura 5.13: Região de estabilidade da fase "fan" $q_0 = 2\pi(1/6)$ próxima à linha crítica

exemplo, por envolverem funções trigonométricas, não parece haver processos iterativos simples para resolvê-las. O método de Newton, discutido em detalhe no Apêndice A, pode ser aplicado sem dificuldades para períodos curtos (≤ 100), mas apresenta problema de divergência para períodos mais longos devido, provavelmente, à dificuldade em escolher uma solução tentativa adequada.

Confrontado com essas dificuldades resolvemos aplicar o método dos potenciais efetivos (Ver Apêndice B) ao problema. A grande van-

tagem do método reside na sua robustez. O procedimento converge infalivelmente ao estado fundamental, não sendo necessário nenhuma hipótese adicional como no caso dos métodos apresentados na seção 2.2. Em contrapartida o método requer em geral muito maior volume computacional, problema esse que fica agravado quando se trata de aplicar o método aos modelos com interações estendendo-se aos segundos vizinhos. A maioria das aplicações do método limita-se aos problemas com interações restritas aos primeiros vizinhos (Griffiths e Chou, 1986; Chou e Griffiths, 1986; Yokoi *et al.*, 1988; Sasaki e Floria, 1989), enquanto a aplicação aos sistemas com interações até segundos vizinhos ainda é incipiente (Sasaki, 1992). Devido aos recursos computacionais limitados o diagrama de fases obtido é ainda imperfeito, mas permite estabelecer com segurança a existência de fases comensuráveis de períodos mais longos que aqueles detectados por Nagamiya *et al.* (1962) e Robinson e Erdős (1970).

Um raciocínio análogo àquele apresentado no apêndice B para o caso em que existe interação apenas com primeiros vizinhos permite escrever a seguinte “equação de autovalores aditivo” para o nosso problema,

$$\begin{aligned} \lambda + R(u, u') = & V(u) + W_1(u - u') \\ & + \min_{u''} [W_2(u - u'') + R(u', u'')], \end{aligned} \quad (5.172)$$

com as definições

$$V(x) = -H \cos 2\pi x, \quad (5.173)$$

$$W_1(x) = \alpha \cos 2\pi x, \quad (5.174)$$

$$W_2(x) = -\cos 2\pi x, \quad (5.175)$$

onde utilizamos o sistema de unidades em que $J_2 = -1$ e como sempre $\alpha = J_1/J_2$. A variável u , limitada ao intervalo $[0, 1)$, está relacionada à variável angular θ que o spin faz com o campo magnético segundo

$$\theta = 2\pi u. \quad (5.176)$$

O "autovalor" λ fornece a energia por spin do estado fundamental dados α e H , e a "autofunção" $R(u, u')$ é o potencial efetivo. Uma vez que tenhamos determinado $R(u, u')$ obtemos o mapeamento

$$\tau : (u, u') \rightarrow (u', u'' = \tau(u, u')), \quad (5.177)$$

onde u'' é o valor que minimiza $W_2(u - u'') + R(u', u'')$ dados u e u' . O atrator desse mapeamento é o estado fundamental para os valores dados de α e H .

O procedimento numérico empregado começa pela discretização uniforme da variável contínua u no intervalo $[0, 1)$ segundo

$$u_i = (i - 1)/\mathcal{N} \quad (i = 1, 2, \dots, \mathcal{N}), \quad (5.178)$$

onde $\mathcal{N}$ é o número de pontos em que foi subdividido o intervalo unitário. A "equação de autovalores aditivo" é, então, resolvida iterativamente

para dados valores de α e H , seguindo o procedimento descrito no Apêndice B. O processo é interrompido quando a máxima diferença entre duas sucessivas soluções aproximadas para R ficarem menores do que uma certa tolerância ε . A seguir o mapeamento τ é iterado para se determinar o atrator que descreve o estado fundamental para aqueles valores de α e H .

No caso de modelos com interações com segundos vizinhos o potencial efetivo R é uma função de duas variáveis, enquanto no caso de modelos com interações com primeiros vizinhos é uma função de uma única variável. Isso faz com que o tempo computacional para uma iteração completa fique aumentado por um fator $\mathcal{N}$ se comparado ao caso dos modelos com iteração somente entre primeiros vizinhos. Um microcomputador tipo IBM-PC 386 gasta cerca de 1h e 30min para calcular um ponto do diagrama de fases usando uma discretização de $\mathcal{N} = 100$ e 500 iterações.

As figuras 5.14 a 5.16 mostram alguns exemplos de potenciais efetivos $R(u, u')$ calculados para diferentes valores de α e H e diferentes discretizações $\mathcal{N}$. Como no caso unidimensional o potencial efetivo parece ser uma função contínua embora apresente descontinuidades na sua derivada. É interessante observar a existência de uma simetria por reflexão em relação ao centro do quadrado unitário. Com efeito, no caso particular desse problema em que V , W_1 e W_2 são dados pelas equações (5.173) a (5.175) é fácil verificar que o potencial efetivo $R(u, u')$ que satisfaz a "equação de autovalores aditivo" deve apresentar a propriedade

$$R(u, u') = R(1 - u, 1 - u'). \quad (5.179)$$

Figura 5.14: Potencial efetivo $R(u, u')$ e o mapeamento correspondente $\tau(u, u')$, para $\alpha = -2$ e $H = 0,3 |J_2|$ com $N = 75$.

Figura 5.15: Potencial efetivo $R(u, u')$ e o mapeamento $\tau(u, u')$ para $\alpha = 0$ e $H = 2 |J_2|$ com $N = 55$.

Figura 5.16: Potencial efetivo $R(u, u')$ e o mapeamento $\tau(u, u')$ para $\alpha = 2$ e $H = |J_2|$ com $N = 45$.

Figura 5.17: Órbita de 3 ciclos, gerada com os mesmos dados da figura 5.16. Vemos aqui a geração da fase $1/3$.

Esta é uma relação útil em procedimentos numéricos pois reduz em metade o número de valores distintos do potencial efetivo e conseqüentemente o tempo computacional.

As figuras 5.14 a 5.16 também mostram a função $u'' = \tau(u, u')$ do mapeamento τ definida na equação (5.177). As rugosidades observadas nas superfícies devem-se provavelmente aos valores relativamente pequenos de discretização N .

A figura 5.17 ilustra uma órbita fechada de 3 ciclos gerada a partir da iteração do mapa τ da figura 5.16. As projeções dos vértices nos planos coordenados definem a configuração de spins ou a fase do estado

Figura 5.18: Diagrama de fases no plano H versus $\alpha = J_1/J_2$ obtido pela aplicação do método do potencial efetivo.

fundamental encontrada. Para uma melhor visualização, traçamos retas paralelas a um dos eixos coordenados, passando pelos pontos projetados. Os pontos de cruzamento das retas com o outro eixo são os valores $\{u_n\}$ da configuração de spins.

A determinação da fronteira de uma fase comensurável com um dado número de onda q_0 foi feita através de um processo de busca binária (Press *et al.*, 1987) no parâmetro α para um dado valor do campo H . A figura 5.18 apresenta o diagrama de fases resultante onde são mostradas

Figura 5.19: Diagrama de fases mostrando apenas a fase $q_0 = 2\pi(1/4)$. A linha sólida mostra o resultado obtido pelo método dos potenciais efetivos, enquanto a linha pontilhada foi obtida por um cálculo analítico aproximado.

as fases comensuráveis $q_0/2\pi = 1/6, 1/5, 1/4, 1/3$ e $1/2$. Foi empregada uma discretização de $N = 100$, critério de convergência para R de $\epsilon = 10^{-6}$ e um número máximo de iterações igual a 500. Na figura 5.19 mostramos uma ampliação da região de estabilidade da fase $q_0/2\pi = 1/4$ juntamente com a fronteira (linha pontilhada) obtida por um cálculo analítico aproximado, onde comparamos a energia $N^{-1}E = -|J_2| - H^2/[(4\alpha + 8)|J_2|^2]$ da fase $q_0/2\pi = 1/4$ com as energias das fases helicoidal e “fan”, (5.55) e (5.58), respectivamente, com as condições de

minimização (5.56) e (5.59), obtidas na seção 5.7. Observamos que há uma boa concordância entre os dois resultados, indicando a consistência dos dois procedimentos.

Capítulo 6

Considerações Finais

Para concluir a tese acreditamos que seja apropriado enfatizar os resultados originais que foram obtidos no nosso trabalho, já que receamos que isso não fique claro quando apresentados imersos aos resultados conhecidos.

O capítulo 2, embora dedicado à revisão da teoria de campo médio do modelo ANNNI, apresenta alguns resultados novos. O método de escolher as fases para a construção do diagrama de fases baseado na seqüência de Farey na seção 2.2 foi desenvolvido por nós. A discussão das invariâncias e simetrias do modelo ANNNI na seção 2.3 é inteiramente nova. A discussão da seção 2.4 sobre a estabilidade intrínseca das fases comensuráveis foi incluída por não estar disponível de uma forma completa na literatura.

Nos capítulos 3 e 4 a maior parte dos resultados são novos.

No capítulo 5, as expansões das estruturas helicoidal e "fan" nas seções 5.5 e 5.6 foram obtidas até ordens maiores do que aquelas já existentes. As seções 5.8 e 5.9, analisando a estabilidade das fases comensuráveis através da teoria dos sólitons e a aplicação do método do potencial efetivo ao modelo na seção 5.10, são inteiramente novas.

No apêndice A, a otimização do método de Newton para a classe

de problemas que surge no estudo de sistemas modulados parece não se encontrar discutida em nenhum lugar na literatura.

Apêndice A

Método de Newton-Raphson

Vimos que a minimização da energia livre de campo médio do modelo ANNNI, ou a minimização da energia do modelo planar clássico helicoidal a $T = 0$ leva a um conjunto de equações não lineares acopladas, que em geral só podem ser resolvidas numericamente.

No caso do modelo ANNNI é possível resolver as equações usando um método iterativo simples, conforme discutimos na seção 2.2, mas no caso do modelo planar o método iterativo não é aplicável, e métodos alternativos como o método de Newton-Raphson devem ser adotados. Este é talvez o método para solução de equações não lineares mais familiar e de convergência mais rápida (Press *et al.*, 1987), mas uma discussão nos parece oportuna porque as equações não lineares que surgem tanto do modelo ANNNI quanto no modelo planar apresentam características que podem reduzir em muito o tempo computacional.

Para sermos mais específicos iremos considerar as equações de minimização do modelo ANNNI. Se estamos interessados em soluções com período Q satisfazendo $m_{n+Q} = m_n$ devemos resolver o conjunto de equações

$$f_n(\{m_n\}) = m_n - \tanh \beta [4J_0 m_n + J_1(m_{n+1} + m_{n-1})]$$

$$+ J_2(m_{n+2} + m_{n-2})] = 0 \quad (\text{A.1})$$

para $n = 0, 1, 2, \dots, Q$. Seja $\{m_n^{(i)}\}$ uma solução tentativa aproximada, e $\{m_n^{(i+1)}\}$ uma solução melhorada que queremos determinar. Escrevendo

$$m_n^{(i+1)} = m_n^{(i)} + \delta m_n^{(i)} \quad (\text{A.2})$$

e substituindo na equação (A.1) mantendo-se apenas termos lineares em $\delta m_n^{(i)}$ resulta

$$\begin{aligned} f_n(\{m_n^{(i+1)}\}) &= f_n(\{m_n^{(i)} + \delta m_n^{(i)}\}) = f_n(\{m_n^{(i)}\}) + \delta m_n^{(i)} \\ &- s_n^2(\{m_n^{(i)}\})\beta \left[4J_0\delta m_n^{(i)} + J_1(\delta m_{n+1}^{(i)} + \delta m_{n-1}^{(i)}) \right. \\ &\left. + J_2(\delta m_{n+2}^{(i)} + \delta m_{n-2}^{(i)}) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde

$$s_n(\{m_n^{(i)}\}) = \text{sech}\beta \left[4J_0m_n^{(i)} + J_1(m_{n+1}^{(i)} + m_{n-1}^{(i)}) + J_2(m_{n+2}^{(i)} + m_{n-2}^{(i)}) \right]. \quad (\text{A.4})$$

Impondo-se que $f_n(\{m_n^{(i+1)}\}) = 0$ obtemos o seguinte sistema de equações lineares para $\delta m_n^{(i)}$:

$$J_2\delta m_{n-2} + J_1\delta m_{n-1} + a_n\delta m_n + J_1\delta m_{n+1} + J_2\delta m_{n+2} = b_n, \quad (\text{A.5})$$

onde

$$\begin{aligned} a_n(\{m_n^{(i)}\}) &= 4J_0 - [\beta s_n^2(\{m_n^{(i)}\})]^{-1}, \\ b_n(\{m_n^{(i)}\}) &= \frac{f_n(\{m_n^{(i-1)}\})}{\beta s_n^2(\{m_n^{(i)}\})}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

O sistema linear (A.5) pode ser escrito como

$$A\delta m = B, \quad (\text{A.7})$$

onde

$$\delta m = \begin{pmatrix} \delta m_1 \\ \delta m_2 \\ \vdots \\ \delta m_Q \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_Q \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

e

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & J_1 & J_2 & 0 & \dots & \dots & 0 & J_2 & J_1 \\ J_1 & a_2 & J_1 & J_2 & 0 & \dots & \dots & 0 & J_2 \\ J_2 & J_1 & a_3 & J_1 & J_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & J_2 & J_1 & a_4 & J_1 & J_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & J_2 & J_1 & a_{Q-2} & J_1 & J_2 & 0 \\ J_2 & 0 & \dots & \dots & 0 & J_2 & J_1 & a_{Q-1} & J_1 \\ J_1 & J_2 & 0 & \dots & \dots & 0 & J_2 & J_1 & a_Q \end{pmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Substituindo-se a solução da equação linear na equação (A.2) obtemos a solução melhorada $m_n^{(i+1)}$, e o processo é então repetido até que obtenhamos uma convergência desejada $\max_n |\delta m_n^{(i)}| < \varepsilon$.

Uma importante propriedade da matriz A é de ser uma matriz pentadiagonal com alguns elementos extras nos cantos superior direito e inferior esquerdo. Essa é uma característica também observada no caso do modelo planar. A natureza pentadiagonal decorre das interações se estenderem até segundos vizinhos, e os elementos nos cantos resultam da imposição das condições de contorno periódicas. Como para períodos grandes a matriz é esparsa, as rotinas padrões do método de Newton não são adequadas porque a necessidade de memória cresce como Q^2 enquanto o tempo computacional cresce como Q^3 , tornando-se rapidamente proibitivo.

Com o objetivo de otimizar os procedimentos numéricos, desenvolvemos um algoritmo que consiste numa implementação adequada do método de eliminação de Gauss-Jordan (Press *et al.*, 1987). Para economizar memória os elementos não nulos da matriz $A(Q \times Q)$ são armazenados em outras três matrizes, uma nova matriz $A(Q \times 5)$, uma matriz $C(Q \times 2)$ e finalmente uma matriz $D(Q \times 2)$. Isso reduz o total de memória utilizada de Q^2 palavras para somente $9Q$. Os elementos da nova matriz $A(Q \times Q)$ são assim definidos:

$$a_{i1} = J_2, a_{i2} = J_1, a_{i3} = a_{ii}, a_{i4} = J_1 \text{ e } a_{i5} = J_2 \quad (i = 1, 2, 3, \dots, Q).$$

(A.10)

A matriz C é formada por todos os elementos das duas últimas colunas de $A(Q \times Q)$ e a matriz D é formada por todos os elementos das duas últimas linhas de $A(Q \times Q)$, exceto os 4 últimos do canto inferior direito, os quais foram incorporados em C .

Então a forma geral da antiga matriz $A(Q \times Q)$ fica sendo

$$A = \begin{pmatrix} a_{13} & a_{14} & a_{15} & 0 & \dots & \dots & 0 & c_{11} & c_{12} \\ a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & 0 & \dots & \dots & 0 & c_{22} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & a_{Q-4,1} & a_{Q-4,2} & a_{Q-4,3} & a_{Q-4,4} & a_{Q-4,5} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{Q-3,1} & a_{Q-3,2} & a_{Q-3,3} & a_{Q-3,4} & c_{Q-3,1} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & a_{Q-2,1} & a_{Q-2,2} & a_{Q-2,3} & c_{Q-2,1} & c_{Q-2,2} \\ d_{11} & 0 & \dots & \dots & 0 & d_{1,Q-3} & d_{1,Q-2} & c_{Q-1,1} & c_{Q-1,2} \\ d_{21} & d_{22} & 0 & \dots & \dots & 0 & d_{2,Q-2} & c_{Q1} & c_{Q2} \end{pmatrix}. \quad (A.11)$$

O algoritmo proposto procura zerar todos os elementos abaixo da diagonal principal com operações que envolvam apenas os $9Q$ novos elementos redefinidos. Isso é feito utilizando-se a propriedade de que a solução do sistema de equações não se altera se uma linha for mudada de lugar, somada a outra linha ou multiplicada por um fator constante. O algoritmo abaixo, escrito em FORTRAN, permite uma quase triangulação da matriz acima.

DO I=1,Q-4

```
DO K=I+1,I+2
AX=A(K,I-K+3)/A(I,3)
DO J=I-K+4,I-K+5
A(K,J)=A(K,J)-A(I,K+J-I)*AX
ENDDO
DO J=1,2
C(K,J)=C(K,J)-C(I,J)*AX
ENDDO
B(K)=B(K)-B(I)*AX
ENDDO
DO K=1,2
AX=D(K,I)/A(I,3)
DO J=I+1,I+2
D(K,J)=D(K,J)-A(I,J-I+3)*AX
ENDDO
DO J=1,2
C(K-Q+16,J)=C(K-Q+16,J)-C(I,J)*AX
ENDDO
B(K-Q+16)=B(K-Q+16)-B(I)*AX
ENDDO
ENDDO
```

Após a aplicação do algoritmo a matriz toma a forma geral,

$$A = \begin{pmatrix} a_{13} & a_{14} & a_{15} & 0 & \dots & \dots & 0 & c_{11} & c_{12} \\ 0 & a_{23} & a_{24} & a_{25} & 0 & \dots & 0 & c_{21} & c_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & a_{Q-3,3} & a_{Q-3,4} & c_{Q-3,1} & c_{Q-3,2} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & a_{Q-2,2} & a_{Q-2,3} & c_{Q-2,1} & c_{Q-2,2} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & d_{1,Q-3} & d_{1,Q-2} & c_{Q-1,1} & c_{Q-1,2} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & d_{2,Q-3} & d_{2,Q-2} & c_{Q1} & c_{Q2} \end{pmatrix}. \quad (A.12)$$

O conjunto de 4 equações no canto inferior direito pode ser resolvido independentemente do resto, por qualquer método conhecido, e as variáveis $\delta m_{Q-3}, \delta m_{Q-2}, \delta m_{Q-1}$ e δm_Q encontradas. As variáveis restantes, δm_i , com $i = 1, 2, 3, \dots, Q-4$, são então obtidas por uma simples substituição reversa,

$$\delta m_i = a_{i3}^{-1}(b_i - c_{i2}\delta m_Q - c_{i1}\delta m_{Q-1} - a_{i5}\delta m_{i+2} - a_{i4}\delta m_{i+1}), \quad (A.13)$$

tomando-se sucessivamente $i = Q-4, Q-5, \dots, 3, 2, 1$.

Obviamente, tal algoritmo não melhora em nada o problema quanto à instabilidade numérica, uma vez que sua função é reduzir a quantidade total de memória e também o volume de cálculo computacional em cima do sistema linear. O número total de iterações necessárias para solucionar o sistema não linear não é alterado e as considerações discutidas na seção 2.2 também se aplicam aqui.

Apêndice B

Método dos Potenciais Efetivos

Na seção 2.2 discutimos os problemas envolvidos na construção de diagramas de fases partindo das equações de minimização da energia ou energia livre. A principal dificuldade é que em geral muitas soluções satisfazem as equações de equilíbrio para um mesmo conjunto de parâmetros associados ao modelo, o que torna o procedimento suscetível a erros sistemáticos causados por ignorar configurações energeticamente favoráveis.

Griffiths e Chou (1986) desenvolveram um método completamente diferente, por eles denominado *método do potencial efetivo*. O método não se baseia na solução das equações de minimização e permite determinar, em princípio, a configuração de menor energia de forma automática. Nesta seção faremos uma breve exposição do método, sendo que uma discussão mais aprofundada pode ser encontrada nos artigos de Chou e Griffiths (1986) e Griffiths (1990).

Consideremos um modelo unidimensional com interações apenas entre os primeiros vizinhos descrito por uma expressão de energia da forma

$$E(\{u_n\}) = \sum_n [V(u_n) + W(u_n - u_{n-1})]. \quad (\text{B.1})$$

Diversos modelos são descritos por uma expressão desse tipo, mas convém pensar num modelo específico nas discussões. Vamos considerar um modelo de spins clássicos com interações do tipo Dzyaloshinsky-Moriya submetido a um campo magnético, chamado de modelo XY quiral (Yokoi *et al.*, 1988). Nesse caso

$$W(u - u') = 1 - \cos 2\pi(u - u' - \Delta), \quad (\text{B.2})$$

$$V(u) = H(1 - \cos 2\pi u), \quad (\text{B.3})$$

onde $2\pi u$ é o ângulo formado pelo spin com o campo magnético externo H que tende a alinhar os spins e Δ é o parâmetro de quiralidade que tende a rotacionar os spins. A competição entre esses dois efeitos é que leva ao surgimento de fases moduladas nesse modelo.

A equação básica do método dos potenciais efetivos pode ser obtida ao tomarmos o limite $T \rightarrow 0$ na equação de autovalores que surge na aplicação da técnica de matriz de transferência para $T > 0$ (Sacco *et al.*, 1979). Entretanto uma argumentação intuitiva revela melhor o conteúdo físico da equação. Consideremos uma configuração de spins no estado fundamental e denotemos por $R_n(u_n)$ a energia potencial devido a todos os spins que estão no lado esquerdo do n -ésimo spin. Então a energia potencial devido a todos os spins no lado esquerdo do $(n + 1)$ -ésimo spin pode ser escrita sob a forma

$$R_{n+1}(u_{n+1}) = V(u_{n+1}) + \min_{u_n} [R(u_n) + W(u_{n+1} - u_n)], \quad (\text{B.4})$$

onde incluímos a contribuição do campo externo e da interação entre n -ésimo e o $(n + 1)$ -ésimo spin foi ajustada de tal modo a minimizar a energia potencial. Se supormos que para valores crescentes de n a função $R_n(u)$ tende a um limite da forma $n\lambda + R(u)$, então λ e $R(u)$ devem satisfazer a equação

$$\lambda + R(u') = V(u') + \min_u [W(u' - u) + R(u)]. \quad (\text{B.5})$$

A equação acima é a equação fundamental do método dos potenciais efetivos, e pode ser chamada de equação de autovalores aditivo em analogia com a equação de autovalores da álgebra linear. A função $R(u)$ que equivale à autofunção do problema é chamada de potencial efetivo.

Mostremos que λ é a energia por spin do estado fundamental. Usando (B.5) repetidamente obtemos,

$$n\lambda + R(u_1) = \min_{u_2, u_3, \dots, u_{n+1}} \left\{ \sum_{i=1}^n [V(u_i) + W(u_i - u_{i+1})] + R(u_{n+1}) \right\}. \quad (\text{B.6})$$

Supondo que $R(u)$ seja limitada e tomando-se o limite $n \rightarrow \infty$ obtemos

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \min_{u_1, u_2, \dots, u_n} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [V(u_i) + W(u_i - u_{i+1})], \quad (\text{B.7})$$

o que mostra que λ é a energia do estado fundamental por spin do sistema.

Na prática, a busca das soluções da equação (B.5) só pode ser feita numericamente, restringindo-se u e u' a um conjunto discreto de $\mathcal{N}$ valores uniformemente distribuídos no intervalo $[0, 1)$, ou seja, $u, u' = i/\mathcal{N}$, onde $i = 0, 1, 2, \dots, \mathcal{N} - 1$. O método numérico adotado é do tipo iterativo, ou seja,

$$R^{(j+1)}(u') = V(u') + \min_u [R^{(j)}(u) + W(u' - u)] - \lambda^{(j)}, \quad (\text{B.8})$$

onde $\lambda^{(j)}$ é escolhido de tal modo que o valor mínimo de $R^{(j+1)}$ seja zero. Como u e u' possuem $\mathcal{N}$ valores discretos, para cada valor de u' à esquerda, é necessário varrer os $\mathcal{N}$ valores de u à direita. Assim, o número de operações envolvidas é proporcional a $\mathcal{N}^2$. A escolha da função inicial $R^{(0)}$ pode ser qualquer, como por exemplo, $R^{(0)} = V$. Na iteração seguinte $R^{(0)}$ é substituída por $R^{(1)}$ e o processo é repetido. Entretanto, com a simples substituição de $R^{(0)}$ por $R^{(1)}$ o procedimento em geral não converge. A alternativa é tomar a média das duas últimas funções previamente calculadas,

$$R^{(j+1)} \leftarrow \frac{R^{(j+1)} + R^{(j)}}{2}. \quad (\text{B.9})$$

O processo iterativo é continuado até que se observe a autoconsistência, ou seja, até que,

$$| R^{(j+1)} - R^{(j)} | < \varepsilon, \quad (\text{B.10})$$

Figura B.1: Potencial efetivo do modelo XY quirral com $H = 1,3$, $\Delta = 0,43$ e $N = 300$.

onde ϵ é a tolerância admitida. A experiência mostra que esse processo iterativo sempre converge, qualquer que seja a escolha da função inicial $R^{(0)}$. A figura B.1 mostra um exemplo de potencial efetivo para o modelo XY quirral obtido pelo processo numérico que descrevemos.

A equação (B.5) define um mapa $u = \tau(u')$, onde u é o valor que minimiza $W(u' - u) + R(u)$. Partindo de um ponto qualquer u_0 , a iteração do mapeamento converge para um atrator cuja órbita corresponde a um estado fundamental do sistema. Na figura B.2 está mostrado um exemplo do mapa $\tau(u)$ bem como do atrator do modelo XY quirral correspondente ao potencial efetivo representado na figura B.1. Comparando as duas figuras, observamos que a função R é contínua mas tem alguns “bicos”

Figura B.2: Mapa τ do modelo XY quiral com mesmos dados da figura B.1 A órbita de dois ciclos é mostrada. A linha pontilhada representa o processo inicial transiente.

(“kinks”) nos pontos onde τ é descontínua. Às vezes tais “bicos” são tão pouco evidentes que não é possível percebê-los na escala da figura adotada.

Apêndice C

Coeficientes das Expansões das Seções 5.5 e 5.6

C.1 Coeficientes da Seção 5.5

$$a_1 = J(q) - J(0) - H, \quad (\text{C.1})$$

$$b_1 = \frac{1}{8} [2J(0) - 3J(q) + J(2q)], \quad (\text{C.2})$$

$$c_1 = \frac{1}{8} [-2J(q) + 3J(2q) - J(3q)], \quad (\text{C.3})$$

$$d_1 = \frac{1}{64} [3J(0) - 5J(q) + 2J(2q)], \quad (\text{C.4})$$

$$e_1 = \frac{1}{4} [J(0) - 2J(2q) + J(3q)], \quad (\text{C.5})$$

$$a_2 = J(3q) - J(0) - H, \quad (\text{C.6})$$

$$b_2 = \frac{1}{8} [-J(q) + J(2q)], \quad (\text{C.7})$$

$$c_2 = \frac{1}{4} [J(0) - 2J(q) + J(2q) - J(3q) + J(4q)], \quad (\text{C.8})$$

$$d_2 = \frac{1}{128} [-5J(q) + 4J(2q) + J(4q)], \quad (\text{C.9})$$

$$a_3 = J(5q) - J(0) - H, \quad (\text{C.10})$$

$$b_3 = \frac{1}{8} [-2J(q) + J(2q) - J(3q) + 2J(4q)], \quad (\text{C.11})$$

$$c_3 = \frac{1}{128} [-J(q) + J(4q)]. \quad (\text{C.12})$$

C.2 Coeficientes da Seção 5.6

$$C_1 = \frac{1}{a_1}, \quad (\text{C.13})$$

$$C_2 = \frac{C_1}{b_2} \left(\frac{1}{2} - C_1 b_1 \right), \quad (\text{C.14})$$

$$C_3 = \frac{1}{c_3} \left(\frac{C_1^2}{8} + \frac{C_2}{2} - C_1 C_2 c_1 - C_1^3 c_2 \right), \quad (\text{C.15})$$

$$C_4 = \frac{1}{d_4} \left(\frac{C_1 C_2}{4} + \frac{C_1^3}{48} + \frac{C_3}{2} - C_2^2 d_1 - C_1^4 d_2 - C_1 C_3 d_3 - C_1^2 C_2 d_5 \right), \quad (\text{C.16})$$

$$C_5 = \frac{1}{e_6} \left(\frac{C_1^4}{384} + \frac{C_2^2}{8} + \frac{C_1 C_3}{4} + \frac{C_1^2 C_2}{16} + \frac{C_4}{2} - C_2 C_3 e_1 - C_1 C_4 e_2 - C_1^3 C_2 e_3 - C_1 C_2^2 e_4 - C_1^5 e_5 - C_1^2 C_3 e_7 \right), \quad (\text{C.17})$$

sendo que,

$$a_1 = \frac{1}{2} [J(0) - 2J(q) + J(2q)], \quad (\text{C.18})$$

$$b_1 = \frac{1}{8} [2J(0) - J(q) - 2J(2q) + J(3q)], \quad (\text{C.19})$$

$$b_2 = \frac{1}{2} [-J(q) + J(3q)], \quad (\text{C.20})$$

$$c_1 = -\frac{1}{4} [-J(0) - J(q) + 2J(2q) + J(3q) - J(4q)], \quad (\text{C.21})$$

$$c_2 = \frac{1}{48} [3J(0) - 5J(q) + 4J(2q) - 3J(3q) + J(4q)], \quad (\text{C.22})$$

$$c_3 = \frac{1}{2} [-2J(q) + J(2q) + J(4q)], \quad (\text{C.23})$$

$$d_1 = \frac{1}{8} [2J(q) - 3J(3q) + J(5q)], \quad (\text{C.24})$$

$$d_2 = \frac{1}{384} [4J(0) - 6J(q) + 5J(3q) - 4J(4q) + J(5q)], \quad (\text{C.25})$$

$$d_3 = -\frac{1}{4} [-J(0) + 2J(2q) + J(3q) - J(4q) - J(5q)], \quad (\text{C.26})$$

$$d_4 = \frac{1}{2} [-2J(q) + J(3q) + J(5q)], \quad (\text{C.27})$$

$$d_5 = \frac{1}{16} [2J(0) - 2J(q) + J(3q) - 2J(4q) + J(5q)], \quad (\text{C.28})$$

$$e_1 = \frac{1}{4} [J(q) + J(2q) - J(3q) - 2J(4q) + J(6q)], \quad (\text{C.29})$$

$$e_2 = -\frac{1}{4} [-J(0) + J(2q) - J(3q) + J(4q) + J(5q) - J(6q)], \quad (\text{C.30})$$

$$e_3 = -\frac{1}{96} [-3J(0) + 2J(q) + 5J(2q) - 5J(3q) - J(4q) + 3J(5q) - J(6q)], \quad (\text{C.31})$$

$$e_4 = \frac{1}{16} [J(0) - J(2q) + J(3q) - J(4q) - J(5q) + J(6q)], \quad (\text{C.32})$$

$$e_5 = \frac{1}{3840} [5J(0) - 12J(q) + 15J(2q) - 15J(3q) + 11J(4q) - 5J(5q) + J(6q)], \quad (\text{C.33})$$

$$e_6 = \frac{1}{2} [-2J(q) + J(4q) + J(6q)], \quad (\text{C.34})$$

$$e_7 = \frac{1}{16} [2J(0) - 3J(q) + 3J(2q) - 3J(3q) + 2J(4q) - 2J(5q) + J(6q)]. \quad (\text{C.35})$$

Nas expressões acima,

$$J(nq) = 2J_1 \cos nq + 2J_2 \cos 2nq. \quad (\text{C.36})$$

Apêndice D

Análise da Equação de “seno-Gordon” Estático

Nas seções 5.8 e 5.9 deparamos com o problema de determinar a função $\phi(n)$ que minimiza uma funcional da forma

$$\Delta E = \int dn \left[-\delta \left(\frac{d\phi}{dn} \right) + \frac{a}{2} \left(\frac{d\phi}{dn} \right)^2 + V(1 \pm \cos Q\phi) \right], \quad (\text{D.1})$$

onde $V > 0$. A solução para esse problema foi obtida por diversos autores discutindo situações físicas muito diferentes, incluindo átomos adsorvidos em superfícies (Frank e van der Merwe, 1949), cristais líquidos colestéricos (de Gennes, 1968) e transições de fases estruturais (Bak e Emery, 1976).

É conveniente fazer a mudança de variáveis

$$\phi = \frac{\pi}{Q} + \frac{2\theta}{Q} \quad (\text{D.2})$$

se o sinal defronte ao cosseno na equação (D.1) for negativo e

$$\phi = \frac{2\theta}{Q} \quad (\text{D.3})$$

se o sinal for positivo. Então obtemos

$$\Delta E = \frac{4a}{Q^2} \mathcal{E} \quad (\text{D.4})$$

com

$$\mathcal{E} = \int dn \left[-\gamma \left(\frac{d\theta}{dn} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{dn} \right)^2 + K(1 + \cos 2\theta) \right], \quad (\text{D.5})$$

onde

$$\gamma = \frac{Q\delta}{2a}, \quad K = \frac{Q^2 V}{4a}. \quad (\text{D.6})$$

Para que a funcional $\mathcal{E}$ seja um extremo, a função $\theta(n)$ deve satisfazer a equação diferencial

$$\frac{d^2\theta}{dn^2} + 2K \sin 2\theta = 0, \quad (\text{D.7})$$

que é equivalente à equação de movimento de um pêndulo simples, e é também conhecida como equação de "seno-Gordon" estático. Posto que

$$\frac{d}{dn} \left(\frac{d\theta}{dn} \right)^2 = 2 \left(\frac{d\theta}{dn} \right) \frac{d^2\theta}{dn^2} = -2 \frac{d}{dn} [K(1 - \cos 2\theta)], \quad (\text{D.8})$$

concluimos que

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{dn} \right)^2 + K(1 - \cos 2\theta) \equiv \frac{2K}{k^2} \quad (\text{D.9})$$

é uma constante. Se $k > 1$ as soluções da equação diferencial (D.7) são oscilantes, enquanto se $k < 1$ as soluções são rotatórias. As soluções que minimizam a funcional $\mathcal{E}$ são do tipo rotatório com $k < 1$. A partir da equação (D.9) obtemos facilmente que

$$F(k, \theta) \equiv \int_0^\theta \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} = \pm \frac{2\sqrt{K}}{k} (n - n_0), \quad (\text{D.10})$$

onde $F(k, \theta)$ é a integral elíptica de primeira espécie e n_0 é tal que $\theta(n_0) = 0$. k e n_0 são as constantes de integração da equação diferencial (D.7).

As soluções $\theta(n)$ da equação (D.10) podem ser expressas sob a forma

$$\theta(n) = \text{am} \left[\pm \frac{2\sqrt{K}}{k} (n - n_0) \right] \quad (\text{D.11})$$

onde am é a amplitude. As soluções acima representam *sólitons* ou *anti-sólitons* igualmente espaçados conforme tomamos o sinal $+$ ou $-$, respectivamente. A figura D.1 mostra a forma típica dessas soluções.

Figura D.1: A função $\theta(n)$ para o caso de tomarmos o sinal + ou -, representando sólitons ou anti-sólitons igualmente espaçados, respectivamente.

O espaçamento l entre os sólitons ou entre os anti-sólitons é determinado pela condição $\theta(n+l) = \theta(n) + \pi$ e é dado por

$$l = \frac{kK(k)}{\sqrt{K}}, \quad (\text{D.12})$$

onde $K(k)$ é a função elíptica completa de primeira espécie. Para $k \rightarrow 1$, $l \rightarrow \infty$, a função $\theta(n)$ dada na equação (D.11) toma a forma simples

$$\theta(n) = -\frac{\pi}{2} + 2 \tan^{-1} e^{\pm 2\sqrt{K}(n-n_0)} \quad (\text{D.13})$$

que representa um único sóliton ou um único anti-sóliton conforme tomamos o sinal + ou -, respectivamente.

Substituindo a solução $\theta(n)$ dada por (D.11) na equação (D.5) para $\mathcal{E}$ obtemos para a energia por sóliton ou anti-sóliton o resultado

$$\begin{aligned} e &= \int_0^l dn \left[-\gamma \left(\frac{d\theta}{dn} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{d\theta}{dn} \right)^2 + K(1 + \cos 2\theta) \right] \\ &= \mp 2\gamma + \frac{2\sqrt{K}}{\pi^2 k} [2E(k) - k'^2 K(k)] \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

onde $E(k)$ é a função elíptica completa de segunda espécie e $k' = \sqrt{1 - k^2}$ é o módulo complementar. Minimizando-se a densidade de energia e/l em relação a k obtemos

$$\gamma = \pm \frac{2\sqrt{K}}{\pi^2 k} E(k), \quad (\text{D.15})$$

onde o sinal + vale para os sólitons e o sinal - para os anti-sólitons. A equação acima admite solução somente se

$$|\gamma| \geq \frac{2\sqrt{K}}{\pi^2}. \quad (\text{D.16})$$

Portanto para $|\gamma| < 2\sqrt{K}/\pi^2$ a solução que minimiza $\mathcal{E}$ é a solução uniforme da forma $\theta(n) = (2m+1)\pi/2$, e corresponde a uma fase comensurável, enquanto para $|\gamma| \geq 2\sqrt{K}/\pi^2$ a solução que minimiza $\mathcal{E}$ consiste

de sólitons ou anti-sólitons igualmente espaçados de uma distância l dada por (D.12), e corresponde a uma fase incomensurável. Substituindo γ e K dadas em (D.6) na equação (D.16) obtemos a condição de estabilidade da fase comensurável sob a forma

$$|\delta| < \frac{2\sqrt{aV}}{\pi^2}. \quad (\text{D.17})$$

Para $l \gg 1$ podemos obter para a energia por sóliton ou por anti-sóliton a fórmula assintótica

$$e = \left(\frac{2\sqrt{K}}{\pi^2} - |\gamma| \right) + \frac{16\sqrt{K}}{\pi^2} e^{-2\sqrt{K}l}. \quad (\text{D.18})$$

O primeiro termo pode ser interpretado como sendo a energia de criação dos sólitons ou anti-sólitons, enquanto o segundo termo representa a energia de repulsão entre os sólitons ou anti-sólitons.

Referências

Aubry, S. (1978) In *Solitons and Condensed Matter*, A. R. Bishop e T. Schneider, eds., Springer, Berlin.

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

Bak, P. (1982) *Rep. Prog. Phys.*, **45**, 587.

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

Bak, P. e Bruisna, R. (1982) *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 249.

Bak, P. e Emery, V. J. (1976) *Phys. Rev. Lett.*, **36**, 978.

Becerra, C. C., Oliveira Jr., N. F. e Shapira, Y. (1988) *Journal de Physique*, **49**, C8-895.

Becerra, C. C., Shapira, Y., Oliveira Jr., N. F. e Chang, T. S. (1980) *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 1692.

Belovol, V. S. e Finkel, V. A. (1976) *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **71**, 1059.

Beyer, W. H. (1984) *CRC Standard Mathematical Tables*, p. 38, CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida.

- Bindilatti, V., Becerra, C. C. e Oliveira Jr., N. F. (1989) *Phys. Rev. B* **40**, 9412.
- Blume, M. (1966) *Phys. Rev.*, **141**, 517.
- Blume, M., Emery, V. J. e Griffiths, R. B. (1971) *Phys. Rev. A*, **4**, 1071.
- Bruce, A. D. (1980) *Advances in Physics*, **29**, 111.
- Bruce, A. D. e Cowley, R. A. (1980) *Advances in Physics*, **29**, 219.
- Capel, H. W. (1966) *Physica*, **32**, 966.
- Carazza, B., Rastelli, E. e Tassi, A. (1991) *Z. Phys. B*, **84**, 301.
- Chou, W. e Griffiths, R. B. (1986) *Phys. Rev. B*, **34**, 6219.
- Cooper, B. R. (1968) *Sol. St. Phys.*, **21**, 393.
- Cowley, R. A. (1980) *Advances in Physics*, **29**, 1.
- de Gennes, P. G. (1968) *Solid. St. Commun.*, **6**, 163.
- Duxbury, P. M. e Selke, W. (1983) *J. Phys.* , **A16**, L741.
- Elliott, R. J. (1961) *Phys. Rev.*, **124**, 346.
- Falk, H. (1970) *Am. Journ. Phys.*, **38**, 858.
- Fisher, M. E. e Fisher, D. S. (1982) *Phys. Rev.*, **B25**, 3192.
- Fisher, M. E. e Selke, W. (1980) *Phys. Rev. Lett.*, **44**, 1502.

- Fisher, M. E. e Szpilka, A. M. (1987) *Phys. Rev.* **B36**, 5343.
- Frank, F. C. e van der Merwe, J. H. (1949) *Proc. R. Soc.*, **198**, 205.
- Griffiths, R. B. (1990) *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VII*, 69.
- Griffiths, R. B. e Chou, W. (1986) *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 1929.
- Hall, G. G. (1967) *Applied Group Theory*, Longman, London.
- Harris, A. B., Rastelli, E. e Tassi, A. (1991) *Phys. Rev. B*, **44**, 2624.
- Hornreich, R. M., Liebman, R., Schuster, H. G. e Selke, W. (1979) *Z. Phys.* **B35**, 91.
- Hornreich, R. M., Luban, M. e Shtrikman, S. (1975) *Phys. Rev. Lett.*, **35**, 1678.
- Huang, K. (1987) *Statistical Mechanics*, New York, John & Sons.
- Iyanaga, S. e Kawada, Y. (1980), (eds.) *Encyclopedic Dictionary of Mathematics*, vol. I, pág. 16, Tb MIT Press, Cambridge.
- Janssen, T. e Tijon, J. A. (1983) *J. Phys. A*, **16**, 673.
- Jensen, M. H. e Bak, P. (1983) *Phys. Rev. B*, **27**, 6853.
- Jensen, P. J., Penson, K. A. e Bennemann, K. H. (1987) *Phys. Rev. B*, **35**, 7306.
- Jiles, D. C. et al. (1984) *J. Phys. F: Met. Phys.*, **14**, 3061.

- Kataev, G. I., Sattarov, M. R. e Tishin, A. M. (1989) *Phys. Stat. Sol. A* **114**, K79.
- Kitano, Y. e Nagamiya, T. (1964) *Progr. Theoret. Phys.*, **31**, 1.
- Lichtenberg, A. J. e Lieberman, M. A. (1983) *Regular and Stochastic Motion* (Springer-Verlag).
- Mandelbrot, B. B. (1983) *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman.
- Nagamiya, T. (1967) *Sol. St. Phys.*, **20**, 305.
- Nagamiya, T., Nagata, K. e Kitano, Y. (1962) *Progr. Theoret. Phys.*, **27**, 1253.
- Nakanishi, K. (1989) *J. Phys. Soc. Jpn.*, **58**, 1296.
- Nakainshi, K. (1990) *J. Phys. Soc. Jpn.*, **59**, 2986.
- Nakanishi, K. (1992) *J. Phys. Soc. Jpn.*, **61**, 2901.
- Oitmaa, J. (1985) *J. Phys. A: Math. Gen.*, **18**, 365.
- Pathria, R. K. (1978) *Statistical Mechanics*, Oxford, Pergamon.
- Plessis, P. de V. du, Botha, W. e Brits, G. H. F. (1990) *J. Magn. Mag. Mat.*, **90/91**, 57.
- Press, H. W. et al. (1987) *Numerical Recipes*, Cambridge, Cambridge University Press.
- Pynn, R. (1979) *Nature*, **281**, 433.

- Redner, S. e Stanley, H. E. (1977) *Phys. Rev. B*, **16**, 4901.
- Reif, F. (1988) *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, Singapore, McGraw-Hill.
- Robinson, J. M. e Erdős, P. (1970) *Phys. Rev. B*, **2**, 2642.
- Roeder, H. e Yeomans, J. (1985) *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **18**, L163.
- Rotthaus, F. e Selke, W. (1992) *J. Phys. Soc. Jpn.*, **62**, 378.
- Sacco, J. E., Widom, A. e Sokoloff, J. B. (1979) *J. Stat. Phys.*, **21**, 497.
- Sasaki, K. (1992) *J. Stat. Phys.*, **68**, 1013.
- Sasaki, K. e Floria, L. M. (1989) *J. Phys.: Condens. Matter*, **1**, 2179.
- Selke, W. (1988) *Phys. Rep.*, **170**, 213.
- Selke, W. (1992) *Phase Transition Critical Phenomena*, eds. C. Domb e J. L. Lebowitz, Academic Press. Vol. 15.
- Selke, W. (1978) *Z. Phys. B*, **29**, 133.
- Selke, W., Barreto, M. e Yeomans, J. (1985) *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **18**, L393.
- Selke, W. e Duxbury, P. M. (1984) *Z. Phys.*, **B57**, 49.
- Selke, W. e Fisher, M. E. (1979) *Phys. Rev. B*, **20**, 257.
- Siems, R. e Tentrup, T. (1989) *Phase Transitions*, **16/17**, 287.

- Smart, S. (1966) *Effective Field Theories of Magnetism*, W. B. Saunders, Philadelphia.
- Stanley, H. G. (1971) *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press.
- Steinitz, M. O., Kahrizi, M. e Tindall, D. A. (1987) *Phys. Rev. B* **36**, 783.
- Steinitz, M. O., Kahrizi, M., Tindall, D. A. e Ali, N. (1989) *Phys. Rev. B*, **40**, 763.
- Stephenson, J. (1970) *Can. J. Phys.*, **48**, 1724.
- Theodorou, G. e Rice, T. M. (1978) *Phys. Rev. B*, **18**, 2840.
- Thompson, C. J. (1982) *J. Stat. Phys.*, **27**, 441.
- Tome, T. e Salinas, S. R. A. (1989) *Phys. Rev.*, **A39**, 2206.
- Toulouse, G. (1977) *Communications on Physics*, **2** 115.
- Vannimenus, J. (1981) *Z. Phys.*, **B43**, 141.
- Vanter, A. M., Plessis, P. de V. du, Eloff, G. A. e Fawcett, E. (1990) *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**, 1363.
- Van Vleck, J. H. (1932) *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*, Oxford University Press, London.
- Villain, J. (1983) *La Recherche*, **14**, 1498.

- Vorobev, V. V., Krupotkin, M. Ya. e Finkel, V. A. (1990) *Fiz. Tverd. Tela.* **32**, 1265.
- White, G. K. (1989) *J. Phys.: Condens. Matter*, **1**, 6987.
- Yeomans, J. (1988) *Sol. St. Phys.*, **41**, 151.
- Yokoi, C. S. O. (1991) *Phys. Rev. B*, **43**, 8487.
- Yokoi, C. S. O., Coutinho-Filho, M. D. e Salinas, S. R. (1981) *Phys. Rev. B*, **24**, 4047.
- Yokoi, C. S. O., Oliveira, M. J. e Salinas, S. R. A. (1985) *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 163.
- Yokoi, C. S. O., Tang, L. H. e Chou, W. (1988) *Phys. Rev. B*, **37**, 2173.
- Yoshimori, A. (1959) *J. Phys. Soc. Jpn.*, **14**, 807 .