UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

22/11/96

**EFEITOS DO CAMPO MAGNÉTICO E DO
CAMPO CRISTALINO NO DIAGRAMA DE FASES
DO MODELO ANNNI**

Francisco Ferreira Barbosa Filho

Carlos Seihiti Orii Yokoi

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

Banca Examinadora :

Prof. Carlos Seihiti Orii Yokoi (orientador)
Prof. Carlos Eugênio I. Carneiro (USP)
Prof. José Guilherme M. A. Moreira (UFMG)
Prof. Márcia Cristina B. Barbosa (UFRS)
Prof. Paulo Murilo Oliveira de Castro (UFF)

SÃO PAULO
1996

Prof. Ivo Luiz Caldas
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

530,13
B238e
D
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

**Barbosa Filho, Francisco Ferrelra
Efeitos do Campo Magnético e do Campo Cristalino
no Diagrama de Fases do Modelo ANNNI.**

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

**Área de Concentração: Física do Estado Sólido
Orientador: Prof. Dr. Carlos Selhiti Orii Yokoi.**

**Unitermos: 1. Mecânica Estatística; 2. Sistemas
Modulados; 3. Transições de Fases; 4. Diagramas de
Fases.**

USP/IF/SBI - 62/96

Ao meu filho Pedro Ernesto
À minha companheira Mariana Helena
Aos meus pais e irmãos.

Agradecimentos

Ao Professor Carlos Seiichi Orii Yokoi pela orientação.

Aos professores e funcionários do departamento de Física da UFPI, pelo apoio.

À Mariana e Pedro, pelo apoio, paciência e solidariedade, principalmente no final deste trabalho.

À Susana Araújo Chaves por nos ter apoiado durante todo este período de pós-graduação.

À CAPES, pelo apoio financeiro.

Aos colegas de pós-graduação do Instituto de Física da USP, pelo convívio e pelo apoio.

À Universidade de São Paulo.

Resumo

Neste trabalho estudamos o efeito da temperatura T e do campo magnético externo H sobre o modelo de Ising de spin $1/2$ com interações competitivas J_1 e $J_2 = -pJ_1$ entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, numa direção axial (modelo ANNNI), e o efeito do campo de anisotropia cristalina D sobre o estado fundamental de um modelo ANNNI de spin maior que $1/2$.

No primeiro modelo levantamos os diagramas de fases $p-T$ e $H-T$ na aproximação de campo médio. Nestes diagramas encontramos diversos tipos de transições de fases tais como transições quase-contínuas e transições singular-contínuas. Encontramos também evidências da existência de pontos ípsilon (Υ) e pontos superdegenerados até então só encontrados nos diagramas de fases do estado fundamental de modelos do tipo Frenkel-Kontorova.

No segundo modelo levantamos os diagramas $p-D$ a $T=0$ para os dez primeiros valores de spin S . Estudamos a evolução das fronteiras de fases e de pontos de encontro de mais que duas fases sobre estas fronteiras conforme S é variado. Constatamos que as diferenças entre diagramas com S inteiro e diagramas com S semi-inteiro tendem a desaparecer com o crescimento de S .

Abstract

In this work we studied the effect of the temperature T and external magnetic field H on the spin $1/2$ Ising model with competing interactions J_1 and $J_2 = -pJ_1$ between the first- and second-neighbors, respectively, along an axial direction (ANNNI model), and the effect of the crystal field anisotropy D on the ground state of the ANNNI model with spins greater than $1/2$.

In the first model we built the p – T and H – T phase diagrams in the mean-field approximation. In these phase diagrams we found various types of phase transitions such as quasi-continuous and singular-continuous phase transitions. We also found evidences for the epsilon point (Υ) and super-degenerate points, which have previously been found only on the ground-state phase diagrams of Frenkel-Kontorova type models.

In the second model we built the p – D phase diagrams at $T = 0$ for the first ten values of the spin S . We studied the evolution of the phase boundaries and the points where more than two phases meet as S is varied. We observed that the differences between phase diagrams for integer S and semi-integer S tend to disappear as S is increased.

Índice

1	Introdução	23
2	Modelos FK	37
2.1	Modelos FK com interações convexas	39
2.2	Modelos FK com interações não-convexas	45
2.3	Modelos FK com interações até segundos vizinhos	50
3	Modelo ANNNI	55
3.1	Definição do modelo	57
3.2	Notação para fases moduladas	59
3.3	Estado fundamental	61
3.4	Ponto de multifases e sua vizinhança	64
3.5	Aproximação de campo médio	68
3.6	Modelo ANNNI na presença de campo	74
3.7	Modelo ANNNI na rede de Bethe	80
4	Diagramas de fases e métodos numéricos	83
4.1	Transições de fases e pontos multicríticos	83
4.2	Método do potencial efetivo	87
4.3	O processo de ramificação por combinação de estruturas . .	91
5	Diagrama de fases $p - T$	95

5.1	Características gerais dos diagramas de fases	96
5.2	Fronteira de primeira ordem para-modulada	99
5.3	Linha de multifases	103
5.4	Encolhimento das fases com períodos pares	124
5.5	Fases distintas com o mesmo número de onda	128
6	Diagrama de fases H — T	135
6.1	Características gerais dos diagramas de fases	136
6.2	Fronteira modulada-paramagnética	137
6.3	Fases moduladas para campos baixos	142
6.4	Baixas temperaturas e vizinhança do ponto de multifases . .	146
6.5	Temperaturas intermediárias	149
6.6	Altas temperaturas	155
7	Modelo ANNNI com spin $S \geq 1$ e campo cristalino a $T = 0$	173
7.1	Definição do modelo	177
7.2	Métodos numéricos	180
7.3	Notação para as fases	184
7.4	Características gerais dos diagramas de fases	187
7.5	Fronteira da fase $\langle 2 \rangle$	198
7.6	Fronteira da fase ferromagnética	205
7.7	Fronteiras para-modulada e suas vizinhanças	209
7.8	Degenerescência das fronteiras de fases	214
7.9	Interior da região com fases moduladas: alguns comentários	217
8	Considerações Finais	221
	Referências	223

Lista de Figuras

- 1.1 Exemplos de figuras de difração (a) para um sólido ordenado, (b) para um sólido desordenado (Chaikin e Lubensky, 1995). 24
- 1.2 Exemplos de materiais magnéticos cujas propriedades magnéticas são explicadas por modelos com planos de modulação. (a) representação da liga CeSb à temperatura de 10 K, apresentando planos com magnetização nula, (b) representação da liga MnAu₂, mostrando como os momentos são girados ao passar de um plano a outro; (c) Representação da liga CeAl₂, onde as setas maiores representam átomos de cério (Villain, 1983). 27
- 1.3 Tipos de magnetização modulada: (a) helicoidal, (b) espiral ferromagnética, (c) hélice inclinada, (d) onda de spin longitudinal, (e) onda de spin transversal, (f) leque. H inidica o campo magnético aplicado (Izyumov, 1984). 28
- 1.4 Gráfico do número de onda q para estruturas moduladas em função da temperatura para o composto CeSb (Bak, 1982). . 29
- 1.5 Diagrama de fases (H, T) do composto CeSb construído da análise dos picos do calor específico (Rossat-Mignod, Effantin, Burlet, Chattopadhyay, Regnault, Bartholin, Vettier, Vogt, Ravot e Achart, 1985). 30

- 1.6 Representação esquemática de um sistema com densidade ondulatória de cargas como observado no composto NbSe_3 . Os pontos escuros são átomos de Nióbio, rodeados por uma nuvem eletrônica, simbolizadas por círculos. Os círculos mais escuros representando uma maior densidade de cargas (Villain, 1983). 31
- 1.7 (a) Estrutura Atômica da liga binária $\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_x$, mostrando uma fase modulada de período igual a 4. (b) Diagrama de fases $T - x$. (c) Vetor de onda como função da temperatura (Yeomans, 1988). 32
- 1.8 Monocamadas de criptônio adsorvidas ao grafite. (a) A baixa pressão forma uma estrutura comensurável, (b) a alta pressão forma uma estrutura incomensurável, (c) a pressões intermediárias existem domínios comensuráveis separados por paredes incomensuráveis (Villain, 1983). 34
- 2.1 Os vários tipos de variação do número de onda q (indicado na figura pela ordenada r_α) com um parâmetro físico p : (a) comportamento analítico suave para uma fase incomensurável; (b) escada inofensiva; (c) "escada do diabo" completa; (d) "escada do diabo" incompleta (Selke, 1992). 38
- 2.2 Representação esquemática de modelo FK unidimensional (Selke, 1992). 40
- 2.3 (a) Diagrama de fases do modelo FK usando a técnica de potenciais efetivos. (b) Gráfico do número de onda ω em função do parâmetro de desajuste γ para $K = 1$ (Griffiths e Chou, 1986). 42

2.4	(a) Diagrama de fases no espaço de parâmetros $\gamma - K$ para o modelo onde V é formado pela repetição de parábolas (2.6). (b) O gráfico do número de onda ω em função de γ que forma “escada do diabo” completa (Aubry, 1978).	43
2.5	(a) Diagrama de fases do modelo FK, para V contendo segundo harmônico de amplitude $\epsilon_2 = 1/10$ (Griffiths e Chou, 1986). (b) Diagrama de fases do modelo FK, para V contendo segundo harmônico de amplitude $\epsilon_2 = 1/10$ (Yokoi, 1988).	44
2.6	Representação esquemática de fases presentes nos diagramas do modelo FK com harmônicos superiores no potencial. Os rótulos A e B referem-se às fases simétricas e os rótulos C_1 e C_2 àquelas sem simetria especular (Floría e Sasaki, 1989).	45
2.7	Diagrama de fases para modelo contendo até terceiro harmônico. Com amplitudes dos harmônicos $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 1/4$ e $\epsilon_3 = 1/6$ (Sasaki e Flória, 1989).	46
2.8	Representação esquemática do modelo XY.	46
2.9	(a) Diagrama de fases global do modelo XY quiral. (b) Ampliação de uma região do diagrama mostrado em (a), enfocando pontos de multifases (MP), pontos superdegenerados (SDP) (Yokoi, Tang e Chou, 1988).	47
2.10	Diagrama de fases para o modelo de dupla parábola (Marchand, Hood e Caillé, 1987).	49
2.11	Diagrama de fases global para o modelo de dupla parábola para $K = 1$. (a) V formado pela repetição de parábolas (“scallop potential”). (b) Diagrama de fases para V senoidal (Bassler e Griffiths, 1994).	50

- 2.12 Detalhes do diagrama de fases para o modelo de dupla parábola com V “scalopped” quando $K = 0.5$. (a) Região ampliada do mostrando a sequência alternada de pontos Υ e pontos superdegenerados singular-contínuos. (b) Região ampliada mostrando a região sob influência do ponto Υ (Bassler e Griffiths, 1994). 51
- 2.13 (a) O diagrama de fases próximo à parte terminal da linha de primeira ordem entre as fases α e β . (b) Uma porção do diagrama mostrado em (a) apresentado de forma ampliado. . 52
- 3.1 Modelo ANNNI numa rede cúbica simples (Selke, 1992). . . 57
- 3.2 Tipos de ordenamentos possíveis a baixas temperaturas: (a) ordenamento ferromagnético, (b) ordenamento antiferromagnético, (c) ordenamento com vetor de onda $q = 1/3$, (d) ordenamento antifase (2,2) e (e) fase parcialmente desordenada, destacando com círculos os planos de magnetização nula. As estruturas (b) e (c) estão presentes quando $J_1 < 0$, enquanto (e) pode aparecer para spins inteiros. 59
- 3.3 Estado fundamental mostrando fases com: a) ordenamento ferromagnético ($\cdots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \cdots$), b) ordenamento tipo antifase (2,2) ($\cdots \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow \cdots$) e c) ordenamento antiferromagnético ($\cdots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots$). 63
- 3.4 Ponto de multifases segundo expansões em série a baixas temperaturas (Szpilka e Fisher, 1986). 65

- 3.5 Ponto de multifases segundo o formalismo de paredes de domínios por Szpilka e Fisher (1986, 1987). Observa-se neste diagrama que fases da forma $\langle 2^j 3 \rangle$ sofrem transição de fase de primeira ordem para a fase $\langle 2 \rangle$ para algum valor da temperatura, as fases mistas $\langle 2^j 32^{j+1} 3 \rangle$ são estáveis para um certo intervalo de temperatura com o valor mais baixo da temperatura diferente de zero. O parâmetro $\kappa = -J_2/J_1$ 67
- 3.6 Ponto de Lifshitz (PL) no modelo ANNNI na junção entre as linhas ferro-para, para-modulada (linhas cheias) e ferro-modulada (linha tracejada), conforme a teoria de campo médio. 70
- 3.7 Diagrama de fases do modelo ANNNI, a campo nulo, na aproximação de campo médio, mostrando as principais fases . . . 72
- 3.8 Ampliações do diagrama de fases do modelo ANNNI, a campo nulo, na aproximação de campo médio, mostrando as principais fases comensuráveis quando (a) $p < 1/2$ e (b) $p > 1/2$. . 73
- 3.9 Diagrama de fases esquemático para o modelo ANNNI, mostrando a região entre as fases $\langle 3 \rangle$ e $\langle 2 \rangle$, (Selke, 1992). 74
- 3.10 Diagrama de fases a $T = 0$ do modelo ANNNI na presença de campo para $J_2 < 0$ 75
- 3.11 Diagramas de Fases do modelo ANNNI na aproximação de campo médio. (a) Diagrama de fases $p - T$ para $H = 0.1$ (Randa, 1985). Diagrama de fases $H - T$ para (b) $p = 0.4$, (c) $p = 0.6$ e (d) $p = 4$ (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981). 79
- 3.12 Diagrama de fases $p - T$ do modelo ANNNI na rede de Bethe a campo nulo (Yokoi, de Oliveira e Salinas, 1985). 80
- 3.13 Diagrama de fases $H - T$ para (a) $p = 0.9$, (b) $p = 1.0$, (c) $p = 1.1$ e (d) $p = 1.5$ do modelo ANNNI na rede de Bethe (Tragtenberg e Yokoi, 1995). 82

4.1	Variação do número de onda q como função de $\kappa = -J_2/J_1$ para um valor fixo e baixo da temperatura mostrando uma seqüência de fases comensuráveis. O número de onda q , nesta figura, está normalizado pelo número de onda da fase (2) (Fisher e Selke, 1981).	85
4.2	Diagrama esquemático ilustrando a região do ponto Υ (Sasaki, 1992).	87
4.3	Representação esquemática dos pontos de ramificação que resultam do processo de ramificação por combinação de estruturas das fases no modelo ANNNI (Selke e Duxbury 1983, 1984).	93
5.1	Fronteira Paramagnética-Modulada para os valores de H indicados na figura. Para cada valor de H está mostrado a linha de transições de segunda ordem (cheia), determinada por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981) e a linha de transições de fase de primeira ordem (tracejada), determinadas segundo o esquema de bifurcação e combinação de fases de Selke e Duxbury (1984). Os pontos tricríticos (TCP) são os círculos cheios e o círculo vazio é o ponto de Lifshitz (LP).	97
5.2	Temperaturas limites $T_{F-(Z_3)}$, abaixo da qual temos a transição da fase $1/5$ para a fase paramagnética.	100
5.3	Fronteira paramagnética-modulada, mostrando a região de transição entre a fase paramagnética e as fases moduladas, formando uma seqüência de pontos triplos ($H = 0.005$). . . .	101
5.4	Diagramas de fases para $H = 0.001$	105
5.5	Diagramas de fases para $H = 0.01$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase $1/8$	106

- 5.6 Diagramas de fases para $H = 0.02$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase $3/16$. A fase $3/16$ com rótulo A apresenta a estrutura de magnetização $\langle \bar{2}3\bar{3} \rangle$, enquanto a fase $3/16$ com rótulo B tem estrutura $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{3} \rangle$ 107
- 5.7 Diagramas de fases para $H = 0.05$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase $2/13$. A fase $2/13$ com rótulo A apresenta a estrutura de magnetização $\langle \bar{3}4\bar{3}3 \rangle$, enquanto a fase $2/13$ com rótulo B tem estrutura $\langle \bar{2}5\bar{3}3 \rangle$ 108
- 5.8 Diagramas de fases para $H = 0.06$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase $1/6$, onde a fase com rótulo A tem estrutura $\langle \bar{3}3 \rangle$ e a fase com rótulo B apresenta a estrutura $\langle \bar{2}4 \rangle$. 109
- 5.9 Diagramas de fases para $H = 0.07$. No detalhe o estrangulamento da fase $1/6$ 110
- 5.10 Diagramas de fases para $H = 0.09$. No detalhe a linha de transições entre a fase $1/5$ e a fase $1/6$, que parece ser do tipo singular-contínua. 111
- 5.11 Diagramas de fases para $H = 0.10$. No detalhe vemos o início da formação do estrangulamento das fronteiras de algumas fases como a $3/17$ e a $2/11$ 112
- 5.12 Diagramas de fases para $H = 0.11$ 113
- 5.13 Diagramas de fases para $H = 0.13$ 114
- 5.14 Diagramas de fases para $H = 0.14$ 115
- 5.15 Diagramas de fases para $H = 0.15$ 116
- 5.16 Diagramas de fases para $H = 0.16$ 117
- 5.17 Diagramas de fases para $H = 0.20$ 118
- 5.18 Diagramas de fases para $H = 0.25$ 119
- 5.19 Diagramas de fases para $H = 0.30$ 120
- 5.20 Diagramas de fases para $H = 0.50$ 121

5.21	Diagramas de fases para $H = 1.0$	122
5.22	Diagramas de fases para $H = 1.50$	123
5.23	Estrutura de magnetização da fase $1/5$	125
5.24	Estrutura de magnetização da fase $1/6$	126
5.25	Ampliação da região de estrangulamentos no diagramas de fases para $H = 0.11$	130
5.26	Perfil de magnetização da fase $1/6$. (a) Estrutura $(1/6)A$ e (b) estrutura $(1/6)B$	131
5.27	Fase tipo marola. Estrutura da fase $2/11$ para valores altos de campo e temperatura.	132
6.1	Fronteira modulada-paramagnética para diversos valores de p indicados na figura. As linhas cheias são linhas críticas enquanto as linhas tracejadas são linhas de transições de pri- meira ordem. TCP designa o ponto tricrítico.	138
6.2	Região da fronteira modulada-paramagnética de primeira or- dem do diagrama de fases com $p = 0.6$, mostrando a in- terseção das seqüências de transições entre as fases $1/5$ e $2/11$, e $2/11$ e $5/28$ que são transições do tipo singular-contínua. No detalhe é mostrado a ampliação da transição entre a fase $2/11$ e $1/5$, como explicado no texto.	139
6.3	Ampliação do diagrama de fases com $p = 0.6$ para a região de campos baixos, destacando os comportamentos de fases de períodos pares e ímpares, indicadas na figura, frente ao aumento do campo. Os rótulos A e B, após o número de onda, indicam os tipos de estruturas associadas às fases para valores dados de H , T ou p , conforme é explicado no texto. .	143

- 6.4 Estrutura de magnetização da fase 3/16 para três regiões do diagrama de fases com $p = 0.6$ com os valores do campo indicados. a) A estrutura $\langle \bar{2}3\bar{3} \rangle$ existe para campos fracos ($H \lesssim 0.002$). b) A estrutura $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{3}3 \rangle$ existe para campos intermediários ($0.002 \lesssim H \lesssim 0.15$). c) A estrutura $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{2}4 \rangle$ é estável para campos fortes ($H \gtrsim 0.15$). 145
- 6.5 Os gráficos das energias das fases (3/16)A (linha cheia) e (3/16)B (linha pontilhada) em função do campo para para valores de T e p indicados na figura. 146
- 6.6 Detalhe da fase 3/16 no diagrama de fases $p - T$ para os valores de H aí indicados. Os estrangulamentos das fronteiras da fase, indicam transições entre fases diferentes e de mesmo período. 147
- 6.7 Região ampliada correspondente ao intervalo de temperaturas intermediárias no diagrama de fases com $p = 0.6$. As regiões 1 e 1', as regiões de transições quase-contínuas, 2, região domínio do ponto Υ e 3 é uma região de fases com períodos muito longos. 150
- 6.8 (a) Ampliação da região rotulada por 1 na figura 1.7 onde ocorrem as transições entre a fase 1/5 e (2/11)A. (b) Ampliação da região delimitada pelo retângulo em (a). (c) Ampliação da região delimitada pelo retângulo em (b). 152

6.9	(a) Fases adjacentes na configuração inicial. (b) Separação das fronteiras α - γ e β - γ devido à presença das fases $\alpha\gamma$ e $\beta\gamma$. (c) Aparecimento da fase $\alpha\beta\gamma$ resultado da combinação entre as fases $\alpha\gamma$ e β ou α e $\beta\gamma$. (d) Novos desdobramentos das fronteiras de fases. Desta figura observamos que as fronteiras $\alpha - \beta$, $\alpha\gamma - \beta\gamma$, $\alpha\gamma^2 - \beta\gamma^2$, $\dots$ não são separadas pelas combinações entre fases adjacentes. O significado no diagrama de fases H - T dos rótulos α , β e γ está explicado no texto.	153
6.10	Provável candidato a ponto ípsilon.	154
6.11	Diagrama de fases para $p = 0.6$ mostrando a região de altas temperaturas ampliada.	156
6.12	diagrama de fases para $p = 0.4$	159
6.13	diagrama de fases para $p = 0.45$	160
6.14	diagrama de fases para $p = 0.5$	161
6.15	diagrama de fases para $p = 0.51$	162
6.16	diagrama de fases para $p = 0.52$	163
6.17	diagrama de fases para $p = 0.55$	164
6.18	diagrama de fases para $p = 0.59$	165
6.19	diagrama de fases para $p = 0.6$	166
6.20	diagrama de fases para $p = 0.61$	167
6.21	diagrama de fases para $p = 0.62$	168
6.22	diagrama de fases para $p = 0.65$	169
6.23	diagrama de fases para $p = 0.8$	170
6.24	diagrama de fases para $p = 1.0$	171
6.25	diagrama de fases para $p = 4.0$	172

7.1	(a) Estado fundamental do modelo BEG modificado e (b) diagrama de fases $p - T$ na aproximação de campo médio (Jensen, Penson, Bennemann, 1987).	174
7.2	Representação esquemática do modelo de spins S envolvendo interações até segundos vizinhos (Selke, 1992).	179
7.3	Estruturas de magnetização para a fase $1/5$ do diagrama de fases com $S=5/2$	183
7.4	Estruturas de magnetização para a fase $1/5$ do diagrama de fases com $S = 3$	184
7.5	Diagrama de fases para $S = 1$	190
7.6	Diagrama de fases para $S = 3/2$	191
7.7	Diagrama de fases para $S = 2$	192
7.8	Diagrama de fases para $S = 5/2$	193
7.9	Diagrama de fases para $S = 3$	194
7.10	Diagrama de fases para $S = 7/2$	195
7.11	Diagrama de fases para $S = 4$	196
7.12	Diagrama de fases para $S = 9/2$	197
7.13	Representação esquemática da fronteira da fase $1/4$ indicando as fases moduladas adjacentes com número de onda q e os pontos triplos (ou quádruplos) indicados por $P_A(q)$	198
7.14	Gráfico das coordenadas dos pontos $P_A(q)$ como função de S para diferentes valores de q indicados na figura. Os círculos cheios correspondem a $p(q)$ e os círculos vazios a $D(q)$. . .	201
7.15	Sobreposição dos diagramas de fases para $S = 1, 2, 3$ e 4 , mostrando que as linhas de transição $1/6-1/4$ coincidem para todos os valores inteiros de S , enquanto as outras linhas mudam suas posições.	202

- 7.16 Sobreposição dos diagramas de fases para $S = 3/2, 5/2, 7/2$ e $9/2$, mostrando que todas as linhas de transição mudam de posição para valores crescentes e semi-inteiros de S . Observamos claramente que as linhas de transição $1/6-1/4$ e $1/5-1/4$ convergem a um limite para valores crescentes de S 203
- 7.17 Representação esquemática da fronteira da fase ferromagnética indicando as fases moduladas adjacentes com números de onda q e os pontos triplos $P_F(q)$ 206
- 7.18 Gráfico dos parâmetros $p(q)$ e $D(q)$ (referentes aos pontos $P_F(q)$ da fronteira ferro-moduladas) como função de S . Os valores de q estão indicados na figura. 208
- 7.19 Sobreposição dos diagramas de fases para os valores de S inteiros, mostrando que F_1 permanece fixo, enquanto os outros pontos mudam suas posições com o aumento de S 210
- 7.20 Sobreposição dos diagramas de fases para os valores de S semi-inteiros, mostrando que F'_1 permanece fixo, enquanto os outros pontos mudam suas posições com o aumento de S . . . 211
- 7.21 Dependência em S dos parâmetros (a) D e (b) p para o ponto PT 212
- 7.22 Dependência com S do ponto de multifases. Os gráficos mostrados são para de $S = 1/2, 3/2, 5/2$ e $7/2$ 214
- 7.23 Sobreposição dos diagramas de fases para os valores de S inteiro, mostrando a evolução da fronteira para- $\{3\}$ com o aumento de S 215
- 7.24 Transição entre fases de mesmo período ($q/2\pi = 1/5$). Região ampliada do diagrama de fases com $S = 5/2$ 219
- 7.25 Estruturas de magnetizações da fase $1/6$ nos diagramas de fases com a) e b) S inteiro e c) e d) S semi-inteiro. 220

Capítulo 1

Introdução

As partículas podem condensar-se formando uma variedade muito grande de estruturas em equilíbrio e fora de equilíbrio. Estas estruturas são caracterizadas pelas posições médias e correlações entre as partículas. Existem estruturas com um alto grau de ordenamento, caso de sólidos cristalinos, e estruturas mais desordenadas, caso de líquidos e gases, passando por estruturas com propriedades intermediárias entre estes dois extremos.

Os sólidos podem ser divididos em duas classes bem distintas: sólidos ordenados, incluindo cristais periódicos e quase-periódicos, e sólidos sem nenhum ordenamento ou amorfos. Na primeira categoria, a dos sólidos ordenados, se encontram os cristais ordinários, com ordenamentos periódicos, e os cristais modulados e quase-cristais, com ordenamentos quase-periódicos. Por outro lado, na segunda categoria, a dos sólidos amorfos, se encontram os vidros, vidros de spins, etc.

Experimentalmente a distinção entre cristais, cristais modulados, quase-cristais e sólidos amorfos é feita observando-se as figuras de difração produzidas por tais materiais através do espalhamento da luz, raios X ou nêutrons. As figuras de difração geradas por um sólido ordenado apresentam pontos bem definidos, revelando o ordenamento dos constituintes deste material. Nos sólidos amorfos estas figuras são manchas sem qualquer resolução, mostrando a aleatoriedade com que estão distribuídos seus

constituíntes. Este fato é ilustrado esquematicamente na figura 1.1.

Figura 1.1: Exemplos de figuras de difração (a) para um sólido ordenado, (b) para um sólido desordenado (Chaikin e Lubensky, 1995).

Um cristal ordinário é uma estrutura periódica no espaço, isto é, apresenta invariância translacional para qualquer um dos três vetores independentes da rede primitiva $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ e $\mathbf{a}_3$. As figuras de difração neste caso possuem picos bem definidos, localizados pelo vetor de onda $\mathbf{Q}$ dado por

$$\mathbf{Q} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3, \quad (1.1)$$

onde n_1 , n_2 , n_3 são inteiros e $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ e $\mathbf{b}_3$ são os vetores da rede recíproca.

Alguns materiais cristalinos, quando submetidos à variação de um certo parâmetro, como a temperatura, a pressão, o campo elétrico, o campo magnético, etc., desenvolvem uma modulação espacial periódica para uma dada propriedade local. Estas propriedades locais podem ser vetoriais ou escalares. A magnetização, a polarização, a densidade de cargas, dentre outras, são alguns exemplos de quantidades físicas que podem apresentar padrões de modulação. O vetor $\mathbf{Q}$, que localiza os picos da figura de difração para um cristal com modulação é dado por

$$\mathbf{Q} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3 + m \mathbf{q}, \quad (1.2)$$

onde n_1, n_2, n_3 e m são inteiros, $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ e $\mathbf{b}_3$ são os vetores da rede recíproca e $\mathbf{q}$ é o vetor de onda associado à modulação. O valor $m = 0$, que localiza o pico principal, define a rede não modulada, isto é, uma fase cristalina ordinária. Já os valores com $m \neq 0$ localizam as manchas satélites das figuras de difração (Pynn, 1979). A relação de $\mathbf{q}$ com os vetores da rede recíproca $\mathbf{b}_i$ depende de parâmetros como a temperatura, a pressão, etc. Esta é a principal diferença entre um cristal modulado e um quase-cristal. Para este último as figuras de difração não apresentam qualquer dependência com a temperatura ou outro parâmetro. Os quase-cristais formam uma classe de materiais descobertos por Shechtman, Blech, Gratias, Cahn (1984), estudando a liga $\text{Al}_{1-x}\text{Mn}_x$ com $x = 0.14$. Um texto básico sobre o tema é de D. Gratias (1987).

Na fase modulada existe uma periodicidade adicional competindo com a periodicidade da rede cristalina ordinária. Uma vez que os quatro vetores $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ e $\mathbf{q}$ estão no espaço recíproco tridimensional podemos escrever

$$\mathbf{q} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3. \quad (1.3)$$

Se k_1, k_2, k_3 são todos racionais diz-se que a fase modulada é *comensurável*, enquanto se pelo menos um dos k_i é um número irracional a fase modulada é classificada como uma fase *incomensurável*. As estruturas moduladas mais simples são aquelas em que $\mathbf{q}$ é simplesmente um múltiplo escalar de um dos vetores da rede recíproca $\mathbf{b}_i$, por exemplo,

$$\mathbf{q} = q \mathbf{b}_3. \quad (1.4)$$

Nesse caso a modulação pode ser descrita do seguinte modo: alguma quantidade física que é constante em cada plano de átomos perpendicular a $\mathbf{b}_3$ varia de plano para plano com um período $1/q$ em unidades de $|\mathbf{a}_3|$. Exemplos são as estruturas magnéticas de vários compostos de lantanídeos ou terras-raras, como ilustrado na figura 1.2.

Segundo Cummings (1990) existem cinco categorias em que se encaixam os materiais estruturalmente modulados. São elas modulação por orientação, modulação por deslocamento, modulação interfacial, modulação por composição e modulação por crescimento interno (“intergrowth”). Estas cinco categorias não são exclusivas; alguns materiais podem pertencer a duas ou mais destas categorias. Aqui faremos uma discussão mais detalhada para os casos de modulação por orientação, modulação por interface e por crescimento interno, por estarem relacionados com os tipos de modelos estudados neste trabalho: o modelo FK (Frenkel-Kontorova) e o modelo ANNNI (Axial Next-Nearest Neighbor Ising), que serão apresentados nos capítulos 2 e 3, respectivamente.

Figura 1.2: Exemplos de materiais magnéticos cujas propriedades magnéticas são explicadas por modelos com planos de modulação. (a) representação da liga CeSb à temperatura de 10 K, apresentando planos com magnetização nula, (b) representação da liga MnAu₂, mostrando como os momentos são girados ao passar de um plano a outro; (c) Representação da liga CeAl₂, onde as setas maiores representam átomos de cério (Villain, 1983).

a) *Modulação por orientação* – Materiais nesta categoria são caracterizados por uma propriedade vetorial local cuja orientação ou módulo varia periodicamente com período espacial b. Aqui estão incluídos helimagnetos e cristais líquidos colestéricos. Materiais ferroelétricos podem ser incluídos tanto nesta categoria como na de materiais com modulação por deslocamento. Exemplos de estruturas magnéticas com modulação são mostradas esquematicamente nas figuras 1.2 e 1.3. Terras-raras como Tb e Dy apresentam estruturas magnéticas moduladas helicoidais com magnetizações perpendiculares ao eixo da modulação (figura 1.3-a). Já nos compostos envolvendo Tm as magnetizações são paralelas ao eixo de modulação (figura 1.3-d). Além dos terras-raras, materiais puros como Cr, e ligas como CrMn,

Figura 1.3: Tipos de magnetização modulada: (a) helicoidal, (b) espiral ferromagnética, (c) hélice inclinada, (d) onda de spin longitudinal, (e) onda de spin transversal, (f) leque. H indica o campo magnético aplicado (Izyumov, 1984).

EuAs_3 , CeSb e CeBi podem apresentar estruturas magnéticas moduladas.

A liga CeSb , estudada através de espalhamento de nêutrons por Rossat-Mignod, Burlet, Bartholin, Vogt e Lagnier (1980), Rossat-Mignod, Effantin, Burlet, Chattopadhyay, Regnault, Bartholin, Vettier, Vogt, Ravot e Achart (1985) parece apresentar uma série de transições entre fases comensuráveis sucessivas. O gráfico experimental 1.4 mostra que o número de onda da modulação, quando desenhado em função da temperatura, apresenta uma série de patamares correspondentes aos seus valores racionais. Observa-se experimentalmente que o vetor de onda assume valores racionais fixos para um certo intervalo da temperatura quanto do campo, formando patamares em vez de mudar continuamente. Este tipo de dependência do vetor de onda com a temperatura ou o campo é conhecido como “escada do diabo” (Mandelbrot, 1977). O diagrama de fases para esta liga, no espaço de parâmetros $H - T$, está mostrado na figura 1.5. A riqueza do diagrama de fases despertou o interesse de vários teóricos e muitos trabalhos foram publicados

Figura 1.4: Gráfico do número de onda q para estruturas moduladas em função da temperatura para o composto CeSb (Bak, 1982).

na tentativa de explicá-lo. von Boehm e Bak (1979) foram os primeiros introduzindo um modelo parecido com o modelo ANNNI. Pokrovsky e Uimin (1982), considerando um modelo ANNNI em que as interações intra-plano eram muito mais fortes que as interações inter-planos, conseguiram reproduzir a topologia do diagrama de fases determinado experimentalmente por Rossat-Mignod, Burlet, Bartholin, Vogt e Lagnier (1980), mas não a existência de fases parcialmente desordenadas, isto é, fases com planos de magnetização nula. A existência de fases parcialmente desordenadas é contestada por Izyumov (1984), que acha improvável a existência de planos de magnetização nula.

b) *Modulação por deslocamento* – Materiais nesta categoria possuem estrutura cristalina ordinária em suas fases de alta simetria. O aparecimento de uma fase modulada quando a temperatura ou pressão é variada é caracterizado por um parâmetro de ordem η representando um particular deslocamento de átomos, dentro de cada célula unitária, de suas posições de equilíbrio. O deslocamento, representado como um campo de deslocamentos

Figura 1.5: Diagrama de fases (H, T) do composto CeSb construído da análise dos picos do calor específico (Rossat-Mignod, Effantin, Burlet, Chattopadhyay, Regnault, Bartholin, Vettier, Vogt, Ravot e Achart, 1985).

$\eta(\mathbf{r})$ em modelos contínuos, varia periodicamente ou quase-periodicamente e pode ser caracterizado por um, dois ou três vetores de onda não colineares $\mathbf{q}_i$ e seus harmônicos, dependendo da dimensionalidade do parâmetro de ordem. Nesta categoria temos sistemas com densidade de carga ondulatória (“charge density wave” ou CDW) que sofrem transições tipo deslocamento forçadas por uma instabilidade da superfície de Fermi dos elétrons de condução, e sistemas que sofrem transições que não envolvem diretamente os elétrons de condução. A figura 1.6 mostra uma representação esquemática do CDW. Um exemplo de material pertencente a esta última classe é o condutor orgânico quase-unidimensional TTF-TCNQ, que se torna incomensurável em 54 K (Bak e Emery, 1976). Compostos de metais de transição e calcogênios dão uma classe particularmente rica de materiais CDW. Estão incluídos como materiais apresentando estados CDW compostos como o NbSe₂, TaSe₂, entre outros.

c) *Modulação interfacial* – Esta categoria consiste de materiais tendo regiões com estrutura cristalina simples separadas por defeitos peri-

Figura 1.6: Representação esquemática de um sistema com densidade ondulatória de cargas como observado no composto NbSe_3 . Os pontos escuros são átomos de Níóbio, rodeados por uma nuvem eletrônica, simbolizadas por círculos. Os círculos mais escuros representando uma maior densidade de cargas (Villain, 1983).

ódicos ou quase-periódicos tais como defeitos empilhados (“stacking faults”), fronteira tipo antifase (“antiphase boundaries”), plano de cisalhamento (“shear planes”) ou duas fronteiras (“twin boundaries”). Compostos de metais de transição (ou ligas) freqüentemente exibem regiões de estrutura cristalina regular comensurável separados por defeitos planares. Estes planos de defeitos podem ser defeitos empilhados (no caso de politipos), duas fronteiras, fronteira tipo antifase no qual colunas de átomos A e B são trocados, ou planos de cisalhamento no qual estruturas regulares são deslocadas paralelamente aos planos de defeitos por uma fração de uma constante de rede caracterizado por um vetor de deslocamento $\mathbf{R}$. Exemplos de sistemas exibindo modulação por interface são CuPd , TiO_{2-x} , Ag_3Mg , CuAu , Cu_3Pt , Au_3Mn , Au_3Cd , Au_3Zn e $\text{Ti}_{1+x}\text{Al}_{3-x}$. Estudos recentes dos carbonetos de metais de transição M_7C_3 ($\text{M} = \text{Fe}, \text{Cr}, \text{Mn}$) revelaram fases moduladas devido à modulação interfacial por duas fronteiras e fronteira antifase. Muitas destas estruturas parecem exibir o comportamento de “escada do diabo”. Em alguns casos, superestruturas de períodos longos resultam da formação de fronteira tipo antifase, no qual aparecem dois tipos de domínios com uma seqüência complicada porém periódica. Loiseau, van Tendeloo, Portier e Ducastelle (1985), usando difração de elétrons e microscopia eletrônica de alta resolução, estudaram propriedades do composto TiAl_3 para concentra-

ções de Al no intervalo 71 – 73% e temperaturas entre 700 e 1200 K. A figura 1.7-a mostra uma estrutura de período 4 para este composto. Na figura 1.7-b é mostrado o diagrama de fases onde para baixas temperaturas apenas três fases de períodos 3, 8 e 22 são estáveis e para altas temperaturas um número muito grande de fases tornam-se estáveis. E finalmente, a figura 1.7-c mostra a dependência do número de onda com a temperatura. Neste

Figura 1.7: (a) Estrutura Atômica da liga binária $Ti_{1-x}Al_x$, mostrando uma fase modulada de período igual a 4. (b) Diagrama de fases $T - x$. (c) Vetor de onda como função da temperatura (Yeomans, 1988).

composto foi encontrado fases com períodos bastante longos. Sequências semelhantes de períodos longos são encontradas em simulações computacionais com o modelo ANNNI.

d) *Modulação através da concentração* – Alguns compostos intermetálicos exibem uma composição que varia espacialmente, exibindo uma modulação periódica da diferença entre as densidades ($\rho_1 - \rho_2$) atribuídas a dois constituintes. Exemplos de materiais com este comportamento são ligas de CuAu e feldspatos Mn-Si, Cu_{2-x}S e Cu_9BiS_6 . Esta categoria se sobrepõe bastante à categoria de modulação por interface.

e) *Modulação por crescimento interno ("intergrowth")* – Nesta categoria estão os materiais com duas ou mais subredes interpenetrantes com períodos de redes que são incomensuráveis em uma ou mais direções. Compostos com crescimento interno podem ser *lineares*, quando a estrutura hospedeira possui canais abertos nos quais cadeias do segundo material estão contidas, ou podem ser *planares*, quando camadas formadas por dois materiais alternam-se como nos compostos de intercalação. Exemplos de materiais com crescimento linear é o $\text{Hg}_{3-8}\text{AsF}_6$, e de materiais planares são os íons de metais alcalinos Cs, Rb e K intercalando-se no grafite. Monocamadas adsorvidas sobre superfícies cristalinas, por exemplo Kr ou Xe sobre o grafite, também podem ser colocadas nesta categoria. Uma representação esquemática de monocamada de criptônio adsorvida sobre grafite está mostrado na figura 1.8.

A teoria das transições de fases em sistemas modulados ainda é incompleta apesar de se estudar materias apresentando fases moduladas desde o início da década de 60. Tenta-se explicar as propriedades de grande parte de materiais exibindo modulação de fases através de modelos apresentando competição entre escalas de comprimento, como é o caso do modelo FK, ou entre interações, como no modelo ANNNI. O Modelo FK representa o protótipo de modelos usados para explicar o comportamento de materiais

envolvendo monocamadas adsorvidas e compostos de intercalação. O modelo ANNNI, por sua vez, é o protótipo de modelos magnéticos usados para explicar muitas propriedades dos materiais magnéticos modulados. Entretanto, para cristais não magnéticos e isolantes, modelos tão simples não são possíveis. Competição entre interações repulsivas de curto alcance e interações coulombianas ou de dipolo de longo alcance desempenham um

Figura 1.8: Monocamadas de criptônio adsorvidas ao grafite. (a) A baixa pressão forma uma estrutura comensurável, (b) a alta pressão forma uma estrutura incomensurável, (c) a pressões intermediárias existem domínios comensuráveis separados por paredes incomensuráveis (Villain, 1983).

papel fundamental em alguns casos

Nos capítulos 2 e 3 apresentaremos os principais resultados, conhecidos na literatura, sobre os modelos FK e ANNNI, respectivamente. A ênfase nesta apresentação será para os resultados referentes a diagramas de fases. No capítulo 4 apresentaremos uma discussão sobre os novos tipos de transição de fases e pontos multicríticos que podem surgir nos diagramas de fases de sistemas modulados, bem como os métodos para determiná-los. Nos capítulos 5 e 6 apresentaremos os diagramas de fases do modelo ANNNI na presença de um campo magnético na aproximação de campo médio. No capítulo 7 apresentaremos os resultados para o estado fundamental do modelo ANNNI de spin S na presença de um campo cristalino D . Para este modelo levantamos o diagrama de fases do estado fundamental para os casos $S = 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2, 4$ e $9/2$. No capítulo 8 apresentaremos as conclusões.

Capítulo 2

Modelos FK

No capítulo anterior falamos sobre uma categoria de materiais que caracterizam-se por apresentar modulação de propriedades físicas locais como a magnetização, a polarização, a densidade de cargas, a posição das partículas, etc. Esse comportamento é descrito experimentalmente através do vetor de onda associado às figuras de difração produzidos pelo espalhamento da luz, raios X ou nêutrons. O vetor de onda é uma função que pode depender da temperatura, pressão, campo magnético ou algum outro parâmetro físico. De uma forma geral há quatro tipos de comportamentos para o número de onda q como função de um certo parâmetro físico p , como ilustrado na figura 2.1. Na figura 2.1-a o número de onda varia analiticamente, indicando que valores racionais de q ocorrem apenas com medida nula num certo intervalo finito de variação em p , enquanto os valores irracionais tomam a medida inteira deste intervalo. Diz-se então que o material apresenta uma fase incommensurável através de todo o intervalo de variação. Em outras situações $q(p)$ pode apresentar platôs num número finito de valores racionais (figura 2.1-b), formando seqüências de fases comensuráveis separadas por transições de fase de primeira ordem. Este comportamento é chamado “escada inofensiva” (Villain e Gordon, 1980). Na figura 2.1-c, $q(p)$ apresenta uma infinidade de platôs com transições singular-contínuas quando se vai de um platô a outro (cf. capítulo 4 para definição de transição

Figura 2.1: Os vários tipos de variação do número de onda q (indicado na figura pela ordenada r_α) com um parâmetro físico p : (a) comportamento analítico suave para uma fase incommensurável; (b) escada inofensiva; (c) “escada do diabo” completa; (d) “escada do diabo” incompleta (Selke, 1992).

singular-contínua). Este tipo de comportamento é conhecido como “escada do diabo” (Mandelbrot, 1977). A “escada do diabo” pode ser completa, caso em que a soma das larguras dos platôs é idêntica ao intervalo de variação em p . Quando a soma das larguras dos platôs é menor que o intervalo de variação diz-se que a “escada do diabo” é incompleta. Este último comportamento está mostrado na figura 2.1-d.

Um modo de tentar compreender este comportamento complexo teoricamente é construir modelos que sejam suficientemente complexos para imitar o fenômeno de interesse, e ao mesmo tempo sejam suficientemente simples para permitir uma análise exata ou uma série de aproximações bem definidas. Um ingrediente básico desses modelos é a existência de competição nas propriedades físicas dos sistemas. Por exemplo, nos materiais

onde uma espécie de átomo está adsorvida à superfície de um outro material, existe a competição entre comprimentos a e b , associados ao potencial do substrato e à energia de interação entre os átomos adsorvidos, respectivamente. Nos sistemas magnéticos o caráter oscilatório das interações entre os momentos magnéticos propicia a competição entre interações ferromagnética e antiferromagnética. Para explicar o comportamento de sistemas modulados existem dois modelos canônicos muito estudados: modelo FK, para sistemas unidimensionais tipo massa-mola e o modelo ANNNI para sistemas de spins. O modelo FK e suas generalizações terão alguns de seus resultados apresentados neste capítulo, enquanto os resultados para o modelo ANNNI serão deixados para o capítulo 3. Trabalhos recentes de revisão tratando desses modelos são o artigo de Selke (1992) sobre os modelos FK e ANNNI e Griffiths (1990) sobre modelos tipo FK.

2.1 Modelos FK com interações convexas

O modelo de Frenkel-Kontorova ou FK é um dos mais antigos modelos para sistemas modulados. Proposto por Dehlinger (1929), foi estudado por muitos autores em diferentes contextos, especialmente por Frenkel e Kontorova (1938), cujos nomes são atualmente associados ao modelo. Pode ser visualizado como um sistema clássico de partículas ou átomos em uma dimensão colocados em um potencial periódico e conectados por molas, como esquematizado na figura 2.2. A energia potencial total é dada por

$$E = \sum_i [W(u_i - u_{i-1}) + V(u_i)] \quad (2.1)$$

onde

$$W(u_i - u_{i-1}) = \frac{k}{2}(u_i - u_{i-1} - \gamma)^2 \quad (2.2)$$

Figura 2.2: Representação esquemática de modelo FK unidimensional (Selke, 1992).

é a energia de interação entre partículas vizinhas e

$$V(u_i) = \frac{K}{(2\pi)^2} (1 - \cos 2\pi u_i) \quad (2.3)$$

é o potencial externo de período $a = 1$, u_i é a posição do i -ésimo átomo em relação ao i -ésimo mínimo do potencial e $\gamma = 1 - b$ é o desajuste entre o período do potencial e a periodicidade b da rede. O objetivo ao tratar esse problema é determinar a solução ou soluções que minimizam a energia (2.1), ou seja, queremos determinar o estado fundamental do sistema de partículas. Estas soluções podem ser determinadas via equação de equilíbrio de forças

$$\frac{\partial E}{\partial u_i} = 0, \quad \forall i. \quad (2.4)$$

Aplicando esta equação à energia dada por (2.1) obtemos a seguinte equação de diferenças

$$u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1} = \frac{K}{2k\pi} \sin(2\pi u_i). \quad (2.5)$$

Desde que foi proposto por Dehlinger (1929), várias tentativas foram feitas no sentido de determinar o estado fundamental do modelo FK. A tentativa de solução para este modelo feita por Dehlinger consistia em linearizar o lado direito da equação (2.5). Frank e van der Merwe (1949 a, b),

tomando o limite do contínuo, mostraram que o estado fundamental do modelo apresenta fase incomensurável. Uma maneira de obter soluções para a equação de diferenças sem recorrer a aproximações, como aquelas propostas por Dehlinger e Frank van der Merwe, seria iterando a equação de diferenças. Fornecendo duas das posições, digamos u_{i-1} e u_i , determinamos a terceira, u_{i+1} . A dificuldade com este procedimento iterativo reside nas infinitas possibilidades de escolha das duas posições iniciais. Além disso, não é possível saber qual destas soluções representa de fato o estado fundamental, uma vez que estas soluções podem representar tanto o estado fundamental, como estados metaestáveis ou instáveis, conforme discutido em Aubry e Le Daeron (1983). Esta é uma questão importante quando desejamos construir diagramas de fases. No capítulo 4 apresentamos dois procedimentos numéricos que contornam estas dificuldades. O primeiro é o método de potenciais efetivos (Griffiths e Chou, 1986) e o segundo é o método de ramificação por combinação de estruturas (Selke e Duxbury, 1984).

Ying (1971) foi o primeiro a construir um diagrama de fases aproximado para o modelo FK. Um dos defeitos deste diagrama é a presença de transições de primeira ordem não permitidos pela teoria rigorosa de Aubry (1978). Esta deficiência foi posteriormente sanada por Griffiths e Chou (1986). A figura 2.3-a mostra o diagrama de fases do estado fundamental do modelo FK construído por Griffiths e Chou (1986) usando a técnica dos potenciais efetivos. Nesta figura são mostradas as principais fases, rotuladas pelo número de onda, ω , também conhecida como “winding number”. O número de onda ω , quando assume valores racionais, tem a forma P/Q , onde P é um inteiro representando o número de comprimentos de ondas contidos no período Q . A figura 2.3-b mostra o gráfico $\gamma-\omega$, para $K = 1$. Nele notamos a existência de muitos patamares. A extensão dos patamares no gráfico γ em função de ω mostra a largura de estabilidade das fases existentes nos respectivos diagramas de fases para um valor particular da amplitude K do

Figura 2.3: (a) Diagrama de fases do modelo FK usando a técnica de potenciais efetivos. (b) Gráfico do número de onda ω em função do parâmetro de desajuste γ para $K = 1$ (Griffiths e Chou, 1986).

potencial. Entre os patamares maiores existem patamares menores. Entre estes existem outros cada vez menores e assim sucessivamente, formando uma “escada do diabo”.

Uma variante do modelo FK tinha sido estudado anteriormente por Aubry (1978) de forma exata. Aubry, nesta variante do modelo FK considerou um potencial V formado pela repetição de parábolas (“scalloped potential”), tendo a forma

$$V(u_i) = -\frac{K}{2}[u_i - \text{Int}(u_i + 1/2)]^2. \quad (2.6)$$

Aubry determinou o diagrama de fases exato no espaço de parâmetros $\gamma-K$ que reproduzimos na figura 2.4-a. O gráfico $\omega-\gamma$ mostrado na figura 2.4-b, mantendo constante a amplitude K , forma uma “escada do diabo” completa.

Uma outra variante do modelo FK é aquela em que o potencial V inclui harmônicos de ordens mais altas. Nesta classe de modelos o potencial é dado por

Figura 2.4: (a) Diagrama de fases no espaço de parâmetros $\gamma - K$ para o modelo onde V é formado pela repetição de parábolas (2.6). (b) O gráfico do número de onda ω em função de γ que forma “escada do diabo” completa (Aubry, 1978).

$$V(u_i) = \frac{K}{(2\pi)^2} \left[1 - \cos 2\pi u_i + \sum_{p=2}^{\infty} \epsilon_p (1 - \cos 2p\pi u_i) \right]. \quad (2.7)$$

A amplitude ϵ_p é real e, em geral, pequena. O caso em que V é formado pelo primeiro e segundo harmônicos foi estudado por Chou e Griffiths (1986) e Yokoi (1988). Os diagramas de fases construídos por Chou e Griffiths (1986) e por Yokoi (1988), no espaço de parâmetros $\gamma - K$ com $\epsilon_2 = 1/10$, são mostrados nas figura 2.5-a e 2.5-b. Quando comparado com o diagrama para $\epsilon_2 = 0$ da figura 2.3-a, notamos mudanças nas fronteiras das fases que passam a apresentar estrangulamentos. O número de estrangulamentos ao longo das fronteiras das fases cresce à medida que aumenta o período Q . As línguas agora são divididas por barras horizontais nos estrangulamentos. Através destas barras horizontais existem transições de fases de primeira ordem entre estados fundamentais distintos tendo o mesmo número de onda ω . Estas fases distinguem-se pela simetria apresentada

Figura 2.5: (a) Diagrama de fases do modelo FK, para V contendo segundo harmônico de amplitude $\epsilon_2 = 1/10$ (Griffiths e Chou, 1986). (b) Diagrama de fases do modelo FK, para V contendo segundo harmônico de amplitude $\epsilon_2 = 1/10$ (Yokoi, 1988).

na distribuição das partículas dispostas ao longo da cadeia, recebendo os rótulos A e B como ilustrado esquematicamente na figura 2.6. As fases marcadas por A são semelhantes àsquelas que aparecem no modelo FK com um harmônico, caracterizando-se por não existir átomos nos máximos do potencial, enquanto naquelas marcadas com B existe um átomo localizado no máximo do potencial. As barras horizontais formam seqüências no diagrama de fases que aparentemente convergem para um ponto de acumulação (Griffiths e Chou, 1986). Estes pontos de acumulação por sua vez formam seqüências ao longo das fronteiras das fases (Yokoi, 1988). Ao longo das fronteiras das fases $\omega = 0$, $1/2$ e $1/3$ Yokoi encontrou pontos de acumulação de barras e ao longo da fronteira da fase $\omega = 0$ mostrou evidências de que existe uma seqüência infinita de pontos de acumulação que converge para $K = 0$, $\gamma = 0$. Tragtenberg (1993) também estudou o diagrama de fases para o modelo FK com segundo harmônico, mas com amplitudes ϵ_2 negativas. As fronteiras das fases, nesse caso, são muito parecidas com as fronteiras

Figura 2.6: Representação esquemática de fases presentes nos diagramas do modelo FK com harmônicos superiores no potencial. Os rótulos A e B referem-se às fases simétricas e os rótulos C₁ e C₂ àquelas sem simetria especular (Floría e Sasaki, 1989).

das fases no diagrama com $\epsilon_2 = 0$, isto é, não apresentam estrangulamentos. Tragtenberg (1993), no entanto, constatou a existência de transições de fases entre fases de mesmo período mas com simetrias diferentes. Sasaki e Floría (1989) estudaram o caso em que o potencial V contém até o terceiro harmônico. Os valores das amplitudes dos harmônicos considerados são $\epsilon_2 = 1/4$ e $\epsilon_3 = 1/6$. O diagrama de fases para este modelo é mostrado na figura 2.7. Neste modelo detectaram a existência de estados fundamentais sem simetria rotuladas por C₁ e C₂ na figura 2.6.

2.2 Modelos FK com interações não-convexas

Modelos FK com energia de interação entre átomos não-convexas têm sido muito estudados ultimamente. Uma função se diz convexa se ao traçarmos uma reta ligando quaisquer dois pontos de seu gráfico todos os pontos intermediários permanecem abaixo desta reta. Diz-se que uma

Figura 2.7: Diagrama de fases para modelo contendo até terceiro harmônico. Com amplitudes dos harmônicos $\epsilon_1 = 1$, $\epsilon_2 = 1/4$ e $\epsilon_3 = 1/6$ (Sasaki e Flória, 1989).

função W é localmente convexa quando

$$W''(x) \geq 0, \quad (2.8)$$

e localmente não-convexa caso contrário.

Figura 2.8: Representação esquemática do modelo XY.

O modelo XY quiral na presença de campo, estudado por Yokoi, Tang e Chou (1988), é um exemplo de modelo com interações não-convexas. A energia do modelo XY quiral é dada pela equação (2.1) onde

$$W(u_i - u_{i-1}) = 1 - \cos 2\pi(u_i - u_{i-1} - \Delta/2\pi), \quad (2.9)$$

e o potencial externo tem a forma

$$V(u_i) = H(1 - \cos 2\pi u_i). \quad (2.10)$$

A variável u_i pode ser interpretado como sendo o ângulo (em unidades de 2π) formado entre um spin clássico planar no i -ésimo sítio e o campo magnético aplicado. Δ é o parâmetro de quiralidade e H a magnitude do campo. A figura 2.8 é uma representação esquemática de um modelo XY quiral. Quando o parâmetro Δ é nulo, o modelo reduz-se ao modelo XY clássico unidimensional. O diagrama de fases global para o modelo XY quiral no espaço de parâmetros $\Delta - H$ é mostrado na figura 2.9-a. Na figura 2.9-b é mostrado uma ampliação deste diagrama. Uma generalização

Figura 2.9: (a) Diagrama de fases global do modelo XY quiral. (b) Ampliação de uma região do diagrama mostrado em (a), enfocando pontos de multifases (MP), pontos superdegenerados (SDP) (Yokoi, Tang e Chou, 1988).

do modelo XY quiral na presença de campo é obtido incluindo um termo de anisotropia de spin de degenerescência p . Este modelo foi estudado por Micheletti, Seno e Yeomans (1995), para degenerescência sêxtupla de spins. As interações entre spins neste modelo são dadas por

$$W(u_{i-1} - u_i) = -\cos 2\pi(u_{i-1} - u_i + \Delta/6), \quad (2.11)$$

e o potencial é da forma

$$V(u_i) = H(1 - \sin 2\pi u_i) + \frac{K}{36}(1 - \sin 12\pi u_i), \quad (2.12)$$

onde K é o parâmetro de anisotropia de spins com degenerescência sêxtupla. Micheletti, Seno e Yeomans (1995) levantaram, inicialmente, o diagrama $\Delta - H$ para $K = \infty$ localizando linhas de transição de primeira ordem e linhas superdegeneradas. Em seguida, usando uma abordagem perturbativa, analisaram o comportamento das fases neste diagrama para valores finitos porém muito grandes de K , e demonstraram a existência de um ponto Υ .

Um outro modelo com interações não-convexas é o modelo FK com W formado por parábolas duplas. Este modelo foi estudado por Marchand, Hood e Caillé (1987, 1988) e Bassler e Griffiths (1994). Como mostrado no trabalho de Bassler e Griffiths (1994) as interações entre as partículas para este modelo são da forma

$$W(\Delta u) = \min\{W_A(\Delta u), W_B(\Delta u)\}, \quad (2.13)$$

onde

$$W_A(\Delta u) = \frac{1}{2}(\Delta u - \delta)^2 - \mu \Delta u, \quad (2.14)$$

Figura 2.10: Diagrama de fases para o modelo de dupla parábola (Marchand, Hood e Caillé, 1987).

$$W_B(\Delta u) = \frac{1}{2}(\Delta u + \delta)^2 - \mu \Delta u, \quad (2.15)$$

com $\Delta u = u_i - u_{i-1}$ e μ um campo. O problema foi considerado sob a ação de potencial do tipo senoidal, equação (2.3), e potencial formado pela repetição de parábolas, equação (2.6). A figura 2.10 mostra o diagrama de fases para o modelo FK com interações de dupla parábola obtido por Marchand, Hood e Caillé (1987, 1988) que chamam a atenção para a importância das interações serem convexas ou não-convexas para que se observe comportamentos complexos nos diagramas de fases. A figura 2.11 mostra o diagrama de fases levantados por Bassler e Griffiths (1994) no espaço de parâmetros $\mu - \delta$, para $K = 1$. Neste diagrama, para valores suficientemente baixos do parâmetro μ , verificaram a existência de uma seqüência alternada de pontos Υ e pontos superdegenerados (SDP) simples. Na figura 2.12 são mostrados detalhes ampliados do diagrama da figura 2.11-a. Um dos pontos interessantes na análise feita pelos autores diz respeito ao fato do sistema usar a parte não-convexa da interação para valores baixos do parâmetro μ , enquanto a parte

Figura 2.12: Detalhes do diagrama de fases para o modelo de dupla parábola com V “scalopped” quando $K = 0.5$. (a) Região ampliada do mostrando a sequência alternada de pontos Υ e pontos superdegenerados singular-contínuos. (b) Região ampliada mostrando a região sob influência do ponto Υ (Bassler e Griffiths, 1994).

anisotropia. As interações entre primeiros e segundos vizinhos são dados respectivamente por

$$W_1(u_{i+1} - u_i) = -J \cos 2\pi(u_{i+1} - u_i)$$

$$W_2(u_{i+2} - u_i) = \cos 2\pi(u_{i+2} - u_i). \quad (2.17)$$

e o potencial por

$$V(u_i) = \frac{K}{36}(1 - \cos 12\pi u_i) - H \cos 2\pi u_i. \quad (2.18)$$

onde u_i , K e H têm os mesmos significados definidos anteriormente para o modelo XY quiral. J é a interação ferromagnética entre primeiros vizinhos.

Figura 2.13: (a) O diagrama de fases próximo à parte terminal da linha de primeira ordem entre as fases α e β . (b) Uma porção do diagrama mostrado em (a) apresentado de forma ampliado.

A interação entre segundos vizinhos é antiferromagnética, tendo sido escolhida como a unidade de energia. Em seu trabalho, Sasaki (1992) forneceu indícios numéricos para a existência de ponto Υ , conforme mostrado na figura 2.13.

Finalmente, a expressão da energia livre para o modelo ANNNI na aproximação de campo médio, conforme apresentado no capítulo 3, pode ser escrita na forma da equação (2.16) com as interações entre as partículas sendo da forma

$$W_1(u_i - u_{i-1}) = -\frac{J_1}{2}(u_i - u_{i-1})^2, \quad (2.19)$$

$$W_2(u_i - u_{i-2}) = -\frac{J_2}{2}(u_i - u_{i-2})^2, \quad (2.20)$$

Neste caso u_i é a magnetização média no i -ésimo plano. O potencial externo é da forma

$$\begin{aligned}
 V(u_i) = & -kT \ln 2 - (2J_0 + J_1 + J_2)u_i^2 - Hu_i \\
 & + \frac{kT}{2}[(1 - u_i) \ln(1 - u_i) + (1 + u_i) \ln(1 + u_i)]. \quad (2.21)
 \end{aligned}$$

Alguns dos resultados obtidos para modelos com interações não-convexas até primeiros vizinhos são também obtidos no estudo de modelos com interações até segundos vizinhos. Sasaki (1992) no seu estudo do modelo XY com anisotropia de spins com degenerescência sêxtupla já havia evidenciado numericamente muitos destes resultados. No capítulo 5 e 6 deste trabalho mostraremos resultados obtidos por nós para o modelo ANNNI na presença de campo na aproximação de campo médio. Os nossos resultados apresentam muitos dos comportamentos complexos observados para os diversos sistemas discutidos nesta seção.

Capítulo 3

Modelo ANNNI

O modelo ANNNI (Axial Next-Nearest-Neighbor Ising) foi introduzido no início da década de sessenta por Elliott (1961) com o objetivo de explicar as propriedades magnéticas observadas nos experimentos com terras-raras. O grande interesse pelas propriedades do modelo ANNNI veio em meados da década de setenta com o trabalho de Hornreich, Luban e Shtrikman (1975) que descobriram a existência, para este modelo, de um ponto multicrítico especial: o ponto de Lifshitz. Desde então muitos trabalhos foram publicados usando os mais variados métodos, como aproximação de campo médio (Bak e von Boehm, 1980; Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981; Öttinger, 1983 e Randa, 1985), simulação Monte Carlo (Selke e Fisher, 1979), expansões em série a altas temperaturas (Redner e Stanley, 1977; Oitmaa, 1985) e a baixas temperaturas (Fisher e Selke, 1980, 1981; Szpilka e Fisher, 1986), etc.

O interesse no estudo do modelo ANNNI se deve à sua simplicidade e à sua capacidade de explicar diversos aspectos dos resultados observados experimentalmente para uma grande classe de materiais. Assim o comportamento de ligas binárias como TiAl_3 (Loiseau, van Tendeloo, Portier e Ducastelle, 1985) ou Cu_3Pd (Broddin, van Tendeloo, van Landuyt, Amelinckx, Poltier, Guymont e Loiseau, 1986) foram analisados usando o modelo ANNNI. Muitas das propriedades dos materiais magnéticos como os

terras-raras e seus compostos também podem ser explicadas por este modelo. Dos materiais magnéticos o mais famoso é o CeSb, pela riqueza de detalhes apresentada no seu diagrama de fases (cf. figura 1.5). Este composto foi estudado por Rossat-Mignod e colaboradores (Rossat-Mignod, J., P. Burlet, H. Bartholin, O. Vogt e R. Lagnier, 1980; Rossat-Mignod, J., J. M. Effantin, C. Vettier e O. Vogt, 1985).

A primeira tentativa de levantar o diagrama de fases global para o modelo ANNNI foi feita por Bak e von Boehm (1980), resolvendo $Q \leq 20$ equações de campo médio acopladas. O diagrama de fases levantado por Bak e von Boehm (1980) foi posteriormente detalhado por Selke e Duxbury (1984) usando o método de bifurcação por combinação de estruturas por eles proposto (cf. seção 4.2). Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981) estudaram o comportamento deste modelo na presença de um campo magnético. Além do campo médio, expansões em série a baixas temperaturas foi usada por Smith e Yeomans (1983), Pokrovski e Uimin (1982), Uimin (1984) e Szpilka (1985) no estudo deste modelo na presença do campo.

O modelo ANNNI é um protótipo para sistemas com variáveis discretas de spins e interações competitivas uniaxiais de alcance finito. Generalizações do modelo ANNNI incluem os modelos com interações axiais além de segundos vizinhos e modelos com spin maior que $1/2$. Modelos com interações até terceiros vizinhos foram estudados por Selke e Barreto e Yeomans (1985). Nosso maior interesse em generalizações do modelo ANNNI é com relação a modelos que levam em conta spins maiores que $1/2$ e interações com o campo cristalino, pois para estes modelos é previsto a existência de fases parcialmente desordenadas. Estas fases, como foi visto no primeiro capítulo, são encontradas em resultados experimentais para alguns materiais magnéticos como o CeSb. Maiores detalhes sobre este tema deixaremos para o início do capítulo 7, onde apresentaremos os resultados existentes na literatura para o modelo ANNNI na presença de campo cristalino e com

spín maiores que $1/2$.

Figura 3.1: Modelo ANNNI numa rede cúbica simples (Selke, 1992).

3.1 Definição do modelo

O modelo ANNNI é um sistema de spins de Ising sobre uma rede hipercúbica d -dimensional com interações ferromagnéticas entre primeiros vizinhos ($J_0 > 0$) nas $(d - 1)$ direções espaciais, e interações entre primeiros vizinhos (J_1) e segundos vizinhos (J_2) que podem competir ao longo da direção axial restante (figura 3.1). Neste trabalho tomaremos em geral $J_1 > 0$ e $J_2 < 0$. Seu hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = -J_0 \sum_{\langle r, r' \rangle} S_r S_{r'} - \sum_r (J_1 S_r S_{r+\hat{z}} + J_2 S_r S_{r+2\hat{z}} + H S_r), \quad (3.1)$$

onde a primeira soma é sobre todos os pares primeiros vizinhos perpendiculares ao eixo axial (eixo z), $\hat{z}$ denota o vetor unitário ao longo do eixo z e H representa o campo magnético uniforme aplicado sobre o sistema de spins $1/2$, $S_r = \pm 1/2$. A magnitude da competição entre as interações J_1 de primeiros vizinhos, e J_2 de segundos vizinhos, pode ser medida através do parâmetro

$$p = -\frac{J_2}{J_1}. \quad (3.2)$$

O tipo de ordenamento observado ao longo da direção axial dependerá do valor do parâmetro p . Consideremos a situação na qual a temperatura é baixa o suficiente para que os spins dentro dos planos apresentem ordenamento ferromagnético forte. A figura 3.2 mostra os vários tipos de ordenamentos observados no caso geral em que J_1 e J_2 podem assumir tanto valores positivos quanto negativos e a magnitude do spin é maior ou igual a $1/2$. Consideremos o caso $J_1 > 0$ e $J_2 < 0$. O ordenamento neste caso é ferromagnético (figura 3.2-a) ao longo da direção axial se p é baixo o suficiente, isto é, $J_1 \gg |J_2|$. Para valores altos de p , isto é, $J_1 \ll |J_2|$, o sistema ordena-se como uma "fase antiferromagnética" de período 4 (figura 3.2-d), chamado estado antifase (2,2). A situação com valores intermediários de p é a região de fases moduladas. As fases moduladas surgem como um compromisso entre os ordenamentos ferromagnético e antifase (2,2). Ainda nas figuras 3.2-b e c são mostrados ordenamentos possíveis no caso em que $J_1, J_2 < 0$. A figura 3.2-e mostra um tipo possível de ordenamento para o caso em que spins inteiros são considerados e termos de campo cristalino estejam presentes.

Figura 3.2: Tipos de ordenamentos possíveis a baixas temperaturas: (a) ordenamento ferromagnético, (b) ordenamento antiferromagnético, (c) ordenamento com vetor de onda $q = 1/3$, (d) ordenamento antifase (2,2) e (e) fase parcialmente desordenada, destacando com círculos os planos de magnetização nula. As estruturas (b) e (c) estão presentes quando $J_1 < 0$, enquanto (e) pode aparecer para spins inteiros.

3.2 Notação para fases moduladas

Os complexos ordenamentos dos spins observados nos diagramas de fases apresentam várias nuances que requerem uma notação que descreva de modo econômico as diferentes estruturas. Consideremos inicialmente a situação em que o campo é nulo. Observemos que à temperatura $T = 0$ os spins dentro dos planos perpendiculares à direção z apresentam ordenamento ferromagnético. Assim a descrição da estrutura magnética pode ser feita considerando a distribuição de camadas com spins apontando “para baixo”

($\downarrow$) ou “para cima” ($\uparrow$) ao longo da direção z . A notação por Fisher e Selke (1981) considera as estruturas como sendo formadas por uma seqüência de bandas, cada banda consistindo de camadas tendo a mesma orientação de spins. Assim uma fase consistindo de m bandas será denotada por

$$\langle n_1 \ n_2 \ n_3 \ \cdots \ n_m \rangle, \quad (3.3)$$

representando uma seqüência periódica de camadas com a banda n_1 seguida pela banda n_2 de orientação oposta a n_1 , e assim por diante, concluindo com uma banda n_m . Esta notação pode ser estendida diretamente para a situação em que $T > 0$, desde que cada plano tenha uma magnetização líquida não nula que aponte para cima ou para baixo. Assim a fase formada por uma banda com 3 planos com spins apontando para baixo, seguido por 3 planos com spins apontando para cima, seguido de 2 planos com spins apontando para baixo, e que seria representada esquematicamente como

$$\cdots \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \cdots,$$

é identificada nessa notação por

$$\langle 3 \ 3 \ 2 \rangle,$$

também podendo ser identificada pelo número de onda (em unidades de 2π)

$$q = \frac{3}{16},$$

onde 3 é o número de ondas, ou a metade do número de mudanças no sinal da magnetização, presentes no período formado por 16 spins. Outros exemplos são

$$\cdots \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \cdots, \quad \langle 2 \rangle = \text{antifase } (2,2), \quad q = 1/4,$$

$$\cdots \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \cdots, \quad \langle 2333 \rangle, \quad q = 2/11,$$

$$\cdots \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \downarrow \cdots, \quad \langle 2223 \rangle, \quad q = 2/9.$$

Na presença de um campo magnético, autores como Smith e Yeomans (1983) e Szpilka (1985) adotaram uma notação ligeiramente modificada em relação àquela usada no caso de campo nulo. Devido à quebra de simetria por inversão de spins, a maneira como descrevemos o arranjo das seqüências de bandas deve trazer a informação sobre a direção do campo H . Para isso colocou-se uma barra em cima dos números que indicam bandas com spins orientados contrariamente ao campo. Por exemplo, a fase formada pela seqüência de m bandas de comprimentos $n_1, n_2, \dots, n_m$ seria denotada na presença de campo como

$$\langle \bar{n}_1 \ n_2 \ \bar{n}_3 \ \cdots \ n_m \rangle. \quad (3.4)$$

3.3 Estado fundamental

Examinemos o que ocorre a temperatura nula e a campo nulo para um modelo ANNNI com $N = L^d$ spins, onde L é o comprimento da aresta do sistema. Uma vez que dentro das camadas o ordenamento é sempre ferromagnético, necessitamos considerar apenas a direção axial e tratar o sistema como uma cadeia de spins com as interações J_1 e J_2 . Assim trocaremos os vetores da rede r pelos índices i numerando os planos, ficando com

$$\mathcal{H} = L^d \frac{(d-1)}{2} J_0 + L^{d-1} E \quad (3.5)$$

onde

$$E = - \sum_i (J_1 S_i S_{i+1} + J_2 S_i S_{i+2}). \quad (3.6)$$

O estado fundamental do modelo (3.6) foi estudado por Morita e Horiguchi (1972), obtendo-se o diagrama de fases $J_1 - J_2$ da figura 3.3. A fase ferromagnética tem energia

$$E_F = (-1 + p) J_1 L, \quad (3.7)$$

e a antifase $(2, 2)$ ou $\langle 2 \rangle$

$$E_{\langle 2 \rangle} = -p J_1 L. \quad (3.8)$$

Da comparação entre as energias E_F e $E_{\langle 2 \rangle}$ verifica-se que a fase ferromagnética é favorecida para $p < 1/2$, enquanto a fase $\langle 2 \rangle$ é favorecida para $p > 1/2$. A linha $p = 1/2$ é a linha de multifases. Nesta linha coexistem infinitas fases: qualquer fase possuindo uma seqüência arbitrária de bandas com larguras de bandas maiores ou iguais a dois são degeneradas com as fases ferro e $\langle 2 \rangle$. Por exemplo, a fase $1/5$ ou $\langle 23 \rangle$ com ordenamento $\cdots \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \cdots$ possui energia por spin igual a

$$L^{-1} E_{1/5} = -\frac{1}{5} (1 + 3p) J_1. \quad (3.9)$$

Analogamente as fases $2/9$ ou $\langle 2223 \rangle$, $3/16$ ou $\langle 233 \rangle$, e $3/14$ ou $\langle 223 \rangle$ têm energias por spin dadas por

$$L^{-1} E_{2/9} = -\frac{1}{9} (1 + 7p) J_1, \quad (3.10)$$

Figura 3.3: Estado fundamental mostrando fases com: a) ordenamento ferromagnético ($\cdots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \cdots$), b) ordenamento tipo antifase (2,2) ($\cdots \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow \cdots$) e c) ordenamento antiferromagnético ($\cdots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots$)

$$L^{-1}E_{3/16} = -\frac{1}{4}(1 + 2p)J_1, \quad (3.11)$$

$$L^{-1}E_{3/14} = -\frac{1}{7}(1 + 5p)J_1, \quad (3.12)$$

respectivamente. Todas as expressões acima para as energias têm o mesmo valor que as fases ferro e $\langle 2 \rangle$ sobre a linha $J_1 = -2J_2$. Isto evidencia a degenerescência elevada da linha de multifases. A demonstração de que este é de fato uma linha infinitamente degenerado foi dada por Redner (1981). Usando um argumento simples, estabeleceu uma relação de recorrência entre o número de estados existentes numa cadeia de tamanho L e o número de estados na cadeia de tamanho $L + 1$. O resultado para a entropia residual

por spin é

$$s = k_B \ln \frac{1 + \sqrt{5}}{2}. \quad (3.13)$$

De forma análoga, a linha $J_1 = 2J_2$ representa também uma linha de multifases. A degenerescência da linha de multifases é quebrada pela temperatura. Apenas algumas das fases que coexistem na linha de multifases apresentam estabilidade à temperatura finita, como mostra abordagens baseadas em expansões em série a baixas temperaturas (Fisher e Selke, 1981, Szpilka e Fisher, 1987).

3.4 Ponto de multifases e sua vizinhança

Usando expansões em série a baixas temperaturas Fisher e Selke (1980, 1981) estudaram o comportamento das fases próximo ao ponto de multifases. Desta expansão determinaram que uma infinidade de fases comensuráveis distintas da forma

$$\langle 2^n 3 \rangle \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.14)$$

nascem diretamente do ponto de multifases em $p = 1/2$ e $T = 0$, formando um leque de fases estáveis entre as fases ferromagnética e a antifase $(2, 2)$, no plano $p - T$, conforme mostrado esquematicamente na figura 3.4. O número de onda caracterizando as fases periódicas que nascem do ponto de multifases toma os valores

$$q = \frac{j+1}{2j+3}, \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.15)$$

dando origem a uma variação tipo escada quando se vai de uma fase a outra através de transições de primeira ordem, conforme está mostrado na

Figura 3.4: Ponto de multifases segundo expansões em série a baixas temperaturas (Szpilka e Fisher, 1986).

figura 4.1. Observamos que este comportamento é o mesmo mostrado na figura 2.1-b do capítulo 2, para uma escada inofensiva, exceto para o último degrau que é “diabólico”. A análise de Fisher e Selke (1980, 1981) indica que de todas as fases coexistindo no ponto de multifases apenas fases dadas pela equação (3.15) são estáveis e nascem diretamente deste ponto. Entretanto outras fases que coexistem no ponto de multifases podem adquirir estabilidade para algum valor de temperatura $T > 0$. Para estudar o intervalo de estabilidade destas fases bem como a possível estabilidade de outras fases que não existem no ponto de multifases, Szpilka e Fisher (1986, 1987) e Fisher e Szpilka (1987) introduziram uma abordagem baseada no conceito de paredes de domínios. Esta técnica considera as fases perto do ponto de multifases como sendo formadas por *domínios* de bandas de largura 2 separados por *paredes* formadas por bandas de largura 3. Denota-se as distâncias axiais entre as sucessivas paredes por $n_1, n_2, \dots$ em uma dada seqüência de camadas de domínios de bandas 2 e paredes de bandas 3. Por exemplo, para $\langle 2^23 \rangle$ temos $n_1 = 7$ e para $\langle 232^23 \rangle$ temos $n_1 = 5, n_2 = 7$. A energia

livre reduzida por spin, f , para um sistema de L camadas com N paredes pode ser expandida na forma

$$f = f_0 + \frac{1}{L} \sigma(T, p) + \sum_{i=1}^N [W_2(T, p; n_i) + W_3(T, p; n_i, n_{i+1}) + \dots], \quad (3.16)$$

onde f_0 é a densidade de energia livre de fundo da fase $\langle 2 \rangle$ pura, σ é a tensão superficial de uma parede simples isolada e W_n ($n = 2, 3, \dots$) são os potenciais de interações entre n paredes. Os resultados referentes a expansão em série a baixas temperaturas (Fisher e Selke, 1981) podem ser atribuídos ao termo de "ordem zero" da expansão da energia em função dos potenciais de interação. Considerando a expansão de f até o termo contendo o potencial W_2 , interação entre pares de paredes, a aparência da vizinhança do ponto de multifases já sofre alterações significativas (Szpilka e Fisher, 1986). Nas estruturas $\langle 2^j 3 \rangle$ W_2 decai exponencialmente com a distância n_i entre as paredes ao mesmo tempo que apresenta uma modulação senoidal. Estes ingredientes fazem com que W_2 apresente um mínimo para algum n_j . Este mínimo do potencial W_2 está relacionado com a fase $\langle 2^j 3 \rangle$ da qual ocorre a transição para a fase $\langle 2 \rangle$. Szpilka e Fisher verificaram que à medida que diminui a temperatura os valores de $j = j_{\max}$, para os quais acontecem os mínimos em W_2 , tornam-se cada vez maiores para temperaturas decrescentes, isto é, $T \rightarrow 0$, $j_{\max} \rightarrow \infty$. Isto assegura que existe um valor limite de temperatura para o qual uma dada fase $\langle 2^j 3 \rangle$, que nasce do ponto de multifases, sofrerá transição de fase de primeira ordem para a fase $\langle 2 \rangle$. Este comportamento está mostrado na figura 3.5. Considerando a expansão até o termo em W_3 , é possível verificar que as fronteiras $\langle 2^j 3 \rangle - \langle 2^{j+1} 3 \rangle$ tornam-

Figura 3.5: Ponto de multifases segundo o formalismo de paredes de domínios por Szpilka e Fisher (1986, 1987). Observa-se neste diagrama que fases da forma $\langle 2^j 3 \rangle$ sofrem transição de fase de primeira ordem para a fase $\langle 2 \rangle$ para algum valor da temperatura, as fases mistas $\langle 2^j 3 2^{j+1} 3 \rangle$ são estáveis para um certo intervalo de temperatura com o valor mais baixo da temperatura diferente de zero. O parâmetro $\kappa = -J_2/J_1$.

se instáveis, dando lugar ao aparecimento da fase mista $\langle 2^j 3 2^{j+1} 3 \rangle$ (Szpilka e Fisher, 1986). Estas novas fases são estáveis apenas para uma pequena região do diagrama de fases, limitada a um certo intervalo de temperaturas. Estas regiões tornam-se cada vez menores à medida que aumentam os valores de j . Este comportamento das fases está mostrado na figura 3.5. Novas fases são esperadas ao se considerar termos de ordens mais altas de interações entre paredes, W_n , para $n \geq 4$ (Szpilka e Fisher, 1986, 1987).

3.5 Aproximação de campo médio

A região de baixas temperaturas está com o comportamento razoavelmente bem estabelecido graças às técnicas de expansões em série a baixas temperaturas (Fisher e Selke, 1980, 1981) e o formalismo de paredes de domínios (Szpilka e Fisher, 1986). O mesmo pode se dizer da região de altas temperaturas que foi estudada usando o formalismo de expansões em série a altas temperaturas (Redner e Stanley, 1977; Oitmaa, 1985). Para a região com temperaturas intermediárias nenhuma destas abordagens é de uso prático. O comportamento das fases nesta região do diagrama de fases é estudado, o mais das vezes, usando a aproximação de campo médio. A aproximação de campo médio aplicada ao hamiltoniano (3.1) fornece a seguinte expressão para a energia livre de Gibbs por sítio para uma rede hipercúbica com lados de tamanho L (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981),

$$\begin{aligned}
 f = & -kT \ln 2 \\
 & + \frac{kT}{2L} \sum_i [(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)] \\
 & - \frac{1}{2L} \sum_i [4J_0 m_i^2 + J_1 m_i (m_{i-1} + m_{i+1}) + J_2 m_i (m_{i-2} + m_{i+2})] \\
 & - H \sum_i m_i,
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

onde m_i é dado pela solução do sistema de L equações acopladas

$$m_i = \tanh \beta [H + 4J_0 m_i + J_1 (m_{i-1} + m_{i+1}) + J_2 (m_{i-2} + m_{i+2})]. \tag{3.18}$$

Este conjunto de equações admite, em geral, mais de uma solução. Neste caso a solução fisicamente relevante, dentre todas as soluções possíveis, é aquela que fornece o mínimo para a energia livre de Gibbs (3.17). O problema de determinar o diagrama de fases na aproximação de campo médio consiste em resolver um número $L \rightarrow \infty$ de equações não-lineares acopladas. Uma vez que não é possível uma solução analítica geral, recorre-se a algum tipo de aproximação para as equações de campo médio, ou então elas são resolvidas numericamente para L finito. Uma das aproximações que se aplica à região de altas temperaturas baseia-se no fato das amplitudes das magnetizações serem pequenas ligeiramente abaixo da linha de transição com a fase paramagnética. Isso permite que se faça expansões do tipo

$$\tanh^{-1} m_i = m_i + \frac{1}{3}m_i^3 + \dots \quad (3.19)$$

na equação (3.18). A linha paramagnética-ferromagnética pode então ser determinada supondo $m_i = m_0$ para todo i . Assim, para $J_1 = J_0$, obtém-se

$$\frac{kT_{P-F}}{J_0} = 2(3 - p). \quad (3.20)$$

Ao longo da linha paramagnética-modulada supõe-se que as amplitudes além de pequenas apresentam um comportamento ondulatório, isto é, $m_i = A \cos(iq + \phi)$. A linha crítica neste caso é dada por

$$\frac{kT_{P-M}}{J_0} = 4 + 2p + \frac{1}{4p}. \quad (3.21)$$

Ainda muito próximo à fronteira de transição com a fase paramagnética a linha de transição entre a fase ferromagnética e modulada é determinada aproximadamente por (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981)

$$\frac{kT_{F-M}}{J_0} = 2(3 - p) - (2 - \sqrt{6})16(p - 1/4)^2. \quad (3.22)$$

As linhas T_{P-F} e T_{P-M} são linhas de transições de segunda ordem, enquanto a linha T_{F-M} é de primeira ordem. A mudança de comportamento da linha

Figura 3.6: Ponto de Lifshitz (PL) no modelo ANNNI na junção entre as linhas ferro-para, para-modulada (linhas cheias) e ferro-modulada (linha tracejada), conforme a teoria de campo médio.

crítica quando se passa da região de fases moduladas para a região com

ordenamento ferromagnético caracteriza-se pelo anulamento do vetor de onda. Isto acontece no ponto $(p, kT/J) = (1/4, 11/2)$ indicado como PL na figura 3.6. Este ponto é um ponto multicrítico, conhecido como *ponto de Lifshitz*. Segundo Hornreich, Luban e Shtrikman (1975), pontos de Lifshitz são pontos nos quais ocorre o encontro de três linhas, sendo uma fase uniformemente ordenada (ferromagnética), uma outra espacialmente modulada e uma terceira fase desordenada (paramagnética). As propriedades deste ponto são discutidas no artigo de revisão por Hornreich (1980).

Quando nos afastamos da linha crítica, indo para a região de temperaturas mais baixas, começam a surgir fases moduladas e transições entre elas. Nesse caso cálculos analíticos aproximados foram realizados apenas para temperaturas altas próximas à fase paramagnética (Bak e von Boehm, 1980). Precisamos então resolver as equações de campo médio numericamente, escolhendo as soluções fisicamente relevantes, isto é, aquelas que minimizam a energia livre. Um dos métodos mais eficientes para se proceder com esta abordagem é o *método de ramificação por combinação de estruturas* desenvolvido por Selke e Duxbury (1984). Este método é discutido na seção 4.2. Com este procedimento Selke e Duxbury conseguiram elucidar muitos detalhes envolvidos nos diversos tipos de transições de fases ocorrendo na região de fases moduladas. O diagrama de fases $p - T$ na aproximação de campo médio, construído segundo o esquema de Selke e Duxbury (1984) é mostrado na figura 3.7. Neste diagrama estão mostrados as regiões de estabilidade das principais fases comensuráveis. Nas figuras 3.8-a e 3.8-b são mostradas ampliações das regiões vizinhas à fase $1/6$ para $p < 1/2$ e $p > 1/2$, respectivamente. O processo de ramificação por combinação de estruturas permite que se faça uma análise sistemática e coerente dos vários comportamentos apresentados pelas fases no diagrama global $p - T$. Os resultados de campo médio para a região entre as fases $\langle 3 \rangle$ e $\langle 2 \rangle$ são resumidos no diagrama de fases esquemático mostrado na figura 3.9. Nele identificamos

Figura 3.7: Diagrama de fases do modelo ANNNI, a campo nulo, na aproximação de campo médio, mostrando as principais fases

duas regiões separadas por curvas tracejadas finas de forma parabólica localizadas entre duas fases comensuráveis principais. Conforme discutido em Selke (1988), possivelmente essa linha separa o regime de transições onde temos “escadas do diabo” completas (região hachurada) do regime de transições formando “escadas do diabo” incompletas (acima da região hachurada). As linhas cheias (ainda neste diagrama esquemático) representam transições de primeira ordem enquanto as linhas tracejadas grossas representam transições contínuas. As fases incommensuráveis estão representadas por linhas pontilhadas.

Figura 3.8: Ampliações do diagrama de fases do modelo ANNNI, a campo nulo, na aproximação de campo médio, mostrando as principais fases comensuráveis quando (a) $p < 1/2$ e (b) $p > 1/2$.

Figura 3.9: Diagrama de fases esquemático para o modelo ANNNI, mostrando a região entre as fases $\langle 3 \rangle$ e $\langle 2 \rangle$, (Selke, 1992).

3.6 Modelo ANNNI na presença de campo

O objetivo principal ao considerar extensões ou modificações do modelo ANNNI é tentar melhor explicar os resultados experimentais como o do espalhamento de nêutrons pelo composto CeSb na presença do campo. Assim é de interesse estudar a resposta de várias estruturas moduladas ao campo aplicado, bem como a dependência dos diagramas de fases e pontos multicríticos com o campo. Vários autores estudaram o efeito do campo magnético sobre o diagrama de fases. Pokrovski e Uimin (1982) realizaram expansões em série a baixas temperaturas considerando o caso em que J_0 , o acoplamento entre spins do mesmo plano, era muito mais forte que os acoplamentos entre spins de planos vizinhos. Smith e Yeomans (1982, 1983), Uimin (1984) e Szpilka (1985) estudaram o comportamento deste modelo próximo ao ponto de multifases. Yokoi, Coutinho-Filho, Salinas (1981) e

Öttinger (1983) trataram este modelo na aproximação de campo médio.

O diagrama de fases do estado fundamental do modelo ANNNI na presença de campo para $J_2 < 0$ está mostrado na figura 3.10 (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981; Uimin, 1984; DeSimone e Stratt, 1985). O diagrama de fases apresenta as fases ferromagnética e antifase (2, 2) para $p > 0$, enquanto para $p < 0$, apresenta uma fase antiferromagnética para $-1/2 < p < 0$, uma antifase (2,2) para $p < -1/2$ e uma fase com número de onda (em unidades de 2π) $q = 1/3$ saindo do ponto $p = -1/2$ e delimitada pela fases antiferromagnética, ferromagnética e antifase (2,2). A degenerescência

Figura 3.10: Diagrama de fases a $T = 0$ do modelo ANNNI na presença de campo para $J_2 < 0$.

da linha de multifases no diagrama de fases do modelo ANNNI na presença de campo, como aconteceu para o caso a campo nulo, é quebrada para valores não nulos de T . Expansões em série a baixas temperaturas foram

efetuadas por Smith e Yeomans (1982, 1983), Uimin (1984) e Szpilka (1985). A diferença diz respeito, agora, à estabilidade das fases saindo da linha de multifases. Segundo Szpilka (1985) as fases saindo dos pontos sobre a linha de multifases são da forma

$$\langle 2^j 3 \rangle, \quad j = 1, 3, 5, \dots \quad (3.23)$$

com vetor de onda

$$q_j = \frac{j+1}{2j+3}, \quad j = 1, 3, 5, \dots \quad (3.24)$$

enquanto as fases associadas aos valores pares de j são estáveis somente a partir de um certo valor da temperatura, muito próximo de zero. Anteriormente Smith e Yeomans (1982, 1983) haviam sugerido que apenas fases com períodos ímpares eram estáveis nas proximidades do ponto de multifases.

Tratamento de campo médio para o modelo ANNNI na presença de campo foi primeiramente efetuado por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981), e posteriormente por Öttinger (1983) e Randa (1985). Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981), dentro da aproximação de campo médio, estabeleceram uma série de resultados. Determinaram que a superfície crítica de transição ordem-desordem é descrita pela equação

$$\frac{kT}{1 - m_0^2} = \max J(q) = J(q_c), \quad (3.25)$$

onde

$$m_0 = \tanh \beta [H + J(0)m_0], \quad (3.26)$$

e

$$J(q_c) = 4J_0 - 2J_2 - \frac{J_1^2}{4J_2}. \quad (3.27)$$

Para campos fracos a equação (3.25) toma a forma

$$kT \approx J(q_c) - \frac{J(q_c)}{[J(q_c) - J(0)]^2} H^2. \quad (3.28)$$

Ainda segundo Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981), para valores mais altos do campo aplicado e para temperaturas mais baixas existe a possibilidade de transições de fases de primeira ordem. Os pontos tricríticos marcando a mudança de regime sobre a superfície separando a fase paramagnética e fases moduladas são dados pelas equações

$$\frac{kT_{TCP}}{J(q_c)} = 1 - \left\{ 3 + 2 \left[\frac{J(0)}{J(q_c) - J(0)} + \frac{J(2q_c)}{J(q_c) - J(2q_c)} \right] \right\}^{-1}, \quad (3.29)$$

e

$$\begin{aligned} \pm H_{TCP} = & -J(0)[1 - kT_{TCP}/J(q_c)]^{1/2} \\ & + \frac{1}{2} kT_{TCP} \ln \frac{1 + [1 - kT_{TCP}/J(q_c)]^{1/2}}{1 - [1 - kT_{TCP}/J(q_c)]^{1/2}}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Investigando a estabilidade dos pontos tricríticos a partir da expressão da energia livre na expansão de Landau, estes autores determinaram que um novo ponto multicrítico aparece em $p = 2.946...$ no caso $J_0 = J_1$. Este ponto corresponde ao limite de estabilidade da linha de pontos tricríticos. Para valores de p acima deste limite o sistema exhibe dois pontos terminais (“end-points”) distintos, a saber, um ponto crítico terminal (“critical endpoint”)

e um ponto crítico terminal duplo (“doublecritical endpoint”), como em metamagnetos (Kincaid e Cohen, 1975). Além desse tratamento analítico, os mesmos autores levaram a cabo cálculos numéricos no sentido de levantar diagramas $H - T$ para $p = 0.4, 0.6$ e 4.0 mostrados na figura 3.11.

Outros tratamentos de campo médio são aqueles realizados por Öttinger (1983) que procurou soluções para as equações de campo médio via mapeamento, e Randa (1985) que empregou o mesmo tratamento usado por Bak e von Boehm (1980). Randa (1985) apresentou o diagrama de fases $p - T$ para $H = 0.1$, mostrado na figura 3.11-a. Neste diagrama notamos que o estado fundamental ($T = 0$) (cf. figura 3.10) não está correto. Além disso, por usar um método de solução limitado, as fronteiras das fases não são determinadas corretamente.

Neste trabalho daremos continuidade ao trabalho numérico de Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981), visando elucidar os diagramas de fases $H - T$ através de métodos que permitam considerar fases de períodos maiores que os encontrados nos diagramas citados acima. Estes diagramas e os diagramas para outros valores de p serão apresentados no capítulo 6. Antes disso, no capítulo 5, apresentaremos diagramas de fases $p - T$ para diversos valores de H .

Figura 3.11: Diagramas de Fases do modelo ANNNI na aproximação de campo médio. (a) Diagrama de fases $p - T$ para $H = 0.1$ (Randa, 1985). Diagrama de fases $H - T$ para (b) $p = 0.4$, (c) $p = 0.6$ e (d) $p = 4$ (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981).

3.7 Modelo ANNNI na rede de Bethe

O modelo ANNNI foi estudado na rede de Bethe por Yokoi, de Oliveira e Salinas (1985), que construíram o diagrama de fases $p - T$ a campo nulo e investigaram algumas propriedades das regiões apresentando comportamentos caóticos. O diagrama de fases $p - T$ a campo nulo obtido por estes autores é reproduzido na figura 3.12. Mais tarde Tragtenberg (1993) e Tragtenberg e Yokoi (1995) investigaram este mesmo modelo na presença de campo.

Figura 3.12: Diagrama de fases $p - T$ do modelo ANNNI na rede de Bethe a campo nulo (Yokoi, de Oliveira e Salinas, 1985).

A rede de Bethe corresponde à região central de uma árvore de Cayley. O modelo tratado pelos autores acima é um modelo de spins definido numa árvore de Cayley de coordenação z e com N gerações. As interações entre os spins são dadas pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (3.31)$$

onde (i, j) denota spins primeiros vizinhos separados de uma geração, $((i, j))$ denota spins segundos vizinhos separados de duas gerações, e H é a intensidade do campo magnético. A relação de recorrência, no limite em que o número de coordenação $z \rightarrow \infty$, envolvendo as magnetizações M_n nas camadas é da forma

$$M_n = \tanh\left[\frac{1}{T}(M_{n-1} - pM_{n-2} + H)\right], \quad (3.32)$$

que pode ser escrita como um mapeamento bidimensional da forma

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= y_n, \\ y_{n+1} &= \tanh\left[\frac{1}{T}(y_n - px_n + H)\right], \end{aligned} \quad (3.33)$$

se definimos

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

Tragtenberg (1993) e Tragtenberg e Yokoi (1995) levantaram os diagramas $H - T$ para vários valores de p . Na figura 3.13 estão mostrados apenas alguns destes diagramas. No diagrama da figura 3.13-a para $p = 0.9$ é notável o comportamento apresentado pelas fases $5/32$ e $17/109$ que existem em regiões desconexas do diagrama de fases. O diagrama 3.13-b com $p = 1.0$ caracteriza-se por estar quase totalmente ocupado pela fase $1/6$ e somente para campos mais fortes é que são observadas outras fases moduladas que parecem nascer diretamente da origem. Na figura 3.13-c é observado o estrangulamento da fronteira da fase $1/6$ e finalmente na figura 3.13-d notamos o estreitamento da fase $3/14$ e simultaneamente o alargamento da fase $1/5$. Alguns destes comportamentos são observados nos diagramas $p - T$ e $H - T$ estudados por nós nos capítulos 5 e 6.

(a)

(b)

(c)

(d)

Figura 3.13: Diagrama de fases $H - T$ para (a) $p = 0.9$, (b) $p = 1.0$, (c) $p = 1.1$ e (d) $p = 1.5$ do modelo ANNNI na rede de Bethe (Tragtenberg e Yokoi, 1995).

Capítulo 4

Diagramas de fases e métodos numéricos

Neste capítulo discutiremos inicialmente as transições de fases e pontos multicríticos encontrados nos diagramas de fases de sistemas modulados. Em seguida apresentaremos dois métodos numéricos utilizados no nosso trabalho para a construção dos diagramas de fases, que são o método do potencial efetivo e o método de ramificação por combinação de estruturas.

4.1 Transições de fases e pontos multicríticos

Os diagramas de fases dos sistemas modulados exibem outras transições de fases além das familiares transições de primeira e de segunda ordem. Segundo Bassler e Griffiths (1994), estas novas transições são as *transições singular-contínuas* e as *transições quase-contínuas*. Nas transições singular-contínuas o gráfico do número de onda em função de algum parâmetro apresenta a estrutura conhecida como “escada do diabo” (Mandelbrot, 1977). Elas descrevem a situação onde existem transições entre um número infinito de fases arranjadas em uma estrutura hierárquica construída do seguinte modo. Sejam $\langle A \rangle$ e $\langle B \rangle$ os símbolos para duas fases periódicas. Entre $\langle A \rangle$ e

$\langle B \rangle$ colocamos $\langle AB \rangle$ para formar a seqüência

$$\langle A \rangle, \langle AB \rangle, \langle B \rangle. \quad (4.1)$$

A seguir, entre pares adjacentes colocamos suas combinações para formar a nova seqüência

$$\langle A \rangle, \langle A^2B \rangle, \langle AB \rangle, \langle A^2B \rangle, \langle B \rangle, \quad (4.2)$$

e continuamos o processo indefinidamente. Dizemos que a transição entre as fases $\langle A \rangle$ e $\langle B \rangle$ é singular-contínua se a ordem de ocorrência das fases ao variarmos um parâmetro obedece a esta hierarquia. Bassler e Griffiths (1994) preferiram chamá-la de hierarquia diatômica ao invés de árvore de Farey (Hardy e Wright, 1979) como é feito em diversos trabalhos. Um exemplo de transição singular-contínua é o que ocorre no modelo FK, mostrado na figura 2.3-a. Se associarmos à fase $\langle A \rangle$ o número de onda $1/1$ e à fase $\langle B \rangle$ o número de onda $0/1$, a nova fase $\langle AB \rangle$ terá número de onda $(1+0)/(1+1) = 1/2$ e analogamente para as fases sucessivas das séries. Um gráfico destes números de onda em função da largura de estabilidade das fases ao longo de um dos eixos associado a algum parâmetro do sistema, por exemplo o parâmetro γ no diagrama da figura 2.3-a, resultará no gráfico mostrado na figura 2.3-b, que é uma “escada do diabo”, com um degrau em $\omega = 0$ e outro em $\omega = 1$. Um outro tipo de transição encontrado em diagramas de sistemas modulados é a transição quase-contínua (Fisher e Selke, 1981). Uma transição quase-contínua é o ponto de acumulação de uma seqüência infinita de transições de fases de primeira ordem da forma

$$\langle A \rangle, \langle AB \rangle, \langle AB^2 \rangle, \langle AB^3 \rangle, \dots, \langle AB^l \rangle, \dots \quad (4.3)$$

com transições de fases de primeira ordem entre $\langle A \rangle$ e $\langle AB \rangle$, entre $\langle AB \rangle$ e $\langle AB^2 \rangle$, e assim por diante *ad infinitum*. A separação entre estas transições vai diminuindo conforme aumenta a “potência” de B, isto é, o número de estruturas de tamanho B. O resultado é a transição de uma fase comensurável (período finito) $\langle B \rangle$ para uma fase incomensurável (período infinito) $\langle AB^l \rangle$ ($1 \rightarrow \infty$). Este tipo de transição é observado em modelos tipo Frenkel-Kontorova com W não-convexo (Yokoi, Tang e Chou, 1988) e no modelo ANNNI a campo nulo nos diagramas $p - T$ (Fisher e Selke, 1981). A figura 4.1 ilustra este tipo de transição para o modelo ANNNI.

Figura 4.1: Variação do número de onda q como função de $\kappa = -J_2/J_1$ para um valor fixo e baixo da temperatura mostrando uma seqüência de fases comensuráveis. O número de onda q , nesta figura, está normalizado pelo número de onda da fase $\langle 2 \rangle$ (Fisher e Selke, 1981).

Além dos pontos críticos e multicríticos usuais, os diagramas de fases de sistemas modulados podem apresentar os seguintes pontos multicríticos: *pontos superdegenerados* e *pontos ípsilon* (Υ). Um ponto superdegenerado (Bassler e Griffiths, 1994) é um ponto sobre um diagrama de fases no qual o estado fundamental não é apenas degenerado, mas é tão degenerado que tem uma entropia finita, isto é, o número de estados fun-

damentais cresce exponencialmente com o tamanho do sistema. Bassler e Griffiths (1994) chamam a atenção para a seguinte classificação sobre pontos superdegenerados:

1. *Ponto superdegenerado de fase finita* – possui apenas um número finito de fases em sua vizinhança separadas uma das outras ou por transições de primeira ordem ou por transições de segunda ordem. Exemplo deste tipo de ponto é encontrado no diagrama de fases do modelo XY quiral, indicado na figura 2.9-b pelo rótulo SDP.
2. *O ponto superdegenerado singular-contínuo* – caracteriza-se por existir em sua vizinhança um número infinito de fases que terminam neste ponto e estão separadas uma das outras por transições de fases singular-contínuas. Este ponto está mostrado na figura 2.12-a, indicado pelo rótulo SDP.
3. *O ponto superdegenerado quase-contínuo* – caracteriza-se por existir próximo a ele um número infinito de fases, separadas umas das outras por transições de primeira ordem que se acumulam sobre uma de transições quase-contínuas, sob a qual jaz o ponto superdegenerado. Este ponto foi encontrado no modelo XY chiral (Yokoi, Tang e Chou, 1988). No modelo ANNNI, o ponto de multifases no limite em que $T \rightarrow 0$ é, também um ponto superdegenerado quase-contínuo (Szpilka e Fisher, 1986).

Um ponto Υ ocorre no final de uma linha de transição de primeira ordem entre duas fases α e β quando a tensão superficial, isto é, a energia necessária para a criação de um defeito entre as fases α e β , vai a zero, e onde as interfaces entre α e β e entre β e α passam a sofrer um processo de repulsão (Bassler, Sasaki e Griffiths, 1991). A figura 4.2 mostra uma representação esquemática da vizinhança desse ponto. As fases que aparecem na vizinhança de um ponto Υ formam uma estrutura hierárquica bem

Figura 4.2: Diagrama esquemático ilustrando a região do ponto Υ (Sasaki, 1992).

definida que é mais complicada que aquela associada com uma transição singular-contínua. Bassler e Griffiths chamam a região do diagrama de fases consistindo desta estrutura o *domínio do ponto Υ* . Exemplos deste tipo de estrutura foram encontrados nos modelos XY chiral na presença de campo e anisotropia de spins sêxtupla (Micheletti, Seno, Yeomans, 1995), no modelo XY com interações entre segundos vizinhos na presença de campo e de anisotropia de spins sêxtupla (Sasaki, 1992) e para o modelo FK de dupla-parábola (Bassler e Griffiths, 1994). No nosso estudo dos diagramas de fases H – T a p constante do modelo ANNNI na aproximação de campo médio encontramos indícios de que este ponto está presente.

4.2 Método do potencial efetivo

Diferentemente dos métodos baseados na equação de equilíbrio de forças, que fornecem indistintamente tanto estados metaestáveis quanto instáveis, o método do potencial efetivo fornece, em princípio, com absoluta certeza o verdadeiro estado fundamental do sistema. Além disso fornece a energia por partícula, bem como informações adicionais sobre as excitações

ocorrendo no sistema. O método de potenciais efetivos, para um sistema envolvendo apenas interação entre primeiros vizinhos, baseia-se na solução da seguinte equação de autovalores não-linear

$$R(u) + \lambda = V(u) + \min_{u'} [W(u - u') + R(u')], \quad (4.4)$$

onde V e W são o potencial externo e a interação entre as partículas do sistema, respectivamente (Griffiths e Chou, 1986). Estas são quantidades conhecidas do problema. O potencial efetivo $R(u)$ e a energia por partícula λ são as quantidades a serem determinadas. Fisicamente o potencial efetivo pode ser visto como o potencial devido a todas as outras partículas à esquerda e que atua sobre uma dada partícula mantida fixa numa certa posição. A generalização da equação (4.4) para sistemas envolvendo interações entre primeiros (W_1) e segundos (W_2) vizinhos é imediata (Sasaki, 1992). Neste caso a equação toma a forma

$$R(u, u') + \lambda = V(u) + W_1(u - u') + \min_{u''} [W_2(u - u'') + R(u', u'')]. \quad (4.5)$$

Por ser altamente não-linear é em geral impossível resolver analiticamente a equação de autovalor por minimização (4.4) ou (4.5). Temos que resolvê-las numericamente, e neste caso inicialmente discretiza-se a variável contínua u em N_g subintervalos igualmente espaçados que chamaremos de grades. Em sistemas com interações entre primeiros vizinhos o tempo de CPU para o cálculo de R é proporcional a N_g^2 (Griffiths e Chou, 1986), enquanto para sistemas até segundo vizinhos é proporcional a N_g^3 . Assim, por exemplo, se duplicamos o tamanho da grade passando de N_g para $2N_g$, para sistemas com interações até primeiros ou segundos vizinhos tempo computacional será aumentado de aproximadamente 4 ou 8 vezes, respectivamente.

Como para melhorar a precisão dos resultados temos sempre de usar grades de tamanhos maiores, explorar detalhes mais finos em diagrama de fases exige tempo computacional exponencialmente crescente.

Existem dois procedimentos numéricos conhecidos para a obtenção da solução da equação de autovalores: o processo iterativo devido a Griffiths e Chou (1986) e o método (numericamente) exato (Floría e Griffiths, 1988; Karp, 1978; von Golitschek, 1982). Discutiremos apenas o processo iterativo que foi o procedimento usado no nosso trabalho. O processo iterativo consiste em gerar aproximações sucessivas $R^{(n)}$ para R , fornecendo respostas aproximadas dentro de uma certa precisão ϵ pré-estabelecida. O potencial efetivo, usando uma certa grade de N_g pontos, é calculado iterativamente segundo a fórmula

$$R^{(n)} = \frac{1}{2}[R^{(n-1)} + \mathcal{K}R^{(n-1)}] - \lambda_n, \quad (4.6)$$

onde n denota a n -ésima iteração e $\mathcal{K}$ denota o operador, que no caso de interações primeiros vizinhos, tem a forma

$$\mathcal{K}R(u) = V(u) + \min_{u'}[W(u - u') + R(u')], \quad (4.7)$$

e no caso com interações até segundos vizinhos é da forma

$$\mathcal{K}R(u, u') = V(u) + W_1(u - u') + \min_{u''}[W_2(u - u'') + R(u', u'')], \quad (4.8)$$

e λ_n é uma constante determinada de forma que a função $R^{(n)}$ satisfaça a condição de normalização

$$\min R = 0. \quad (4.9)$$

A função inicial $R^{(0)}$ pode ser qualquer. Tipicamente escolhemos $R^{(0)} = V$. Continua-se a iteração na forma descrita acima, até que

$$\max |R^{(n)} - R^{(n-1)}| \leq \varepsilon, \quad (4.10)$$

onde ε é a tolerância admitida no cálculo. $R^{(n)}$ e λ_n são então considerados como sendo aproximações adequadas para a autofunção e autovalor, respectivamente. Para se determinar o estado fundamental de problemas envolvendo apenas interações entre primeiros vizinhos considera-se o mapeamento

$$\tau: u \longrightarrow u', \quad (4.11)$$

onde para cada u associa-se o valor de u' em que é atingido o mínimo na equação de autovalor aditivo (4.4). Na solução de problemas envolvendo interações até segundos vizinhos o mapeamento toma a forma

$$\tau: (u, u') \longrightarrow u'', \quad (4.12)$$

onde o valor de u'' é associado agora aos valores u e u' em que o mínimo em (4.5) é atingido. Iterando-se o mapeamento τ atinge-se a órbita do estado fundamental u_n , que para um sistema com interações entre primeiros vizinhos, tem a propriedade

$$\tau(u_n) = u_{n-1}, \quad (4.13)$$

enquanto para sistemas com interações até segundos vizinhos, tem-se

$$\tau(u_{n+1}, u_n) = u_{n-1}. \quad (4.14)$$

O método dos potenciais efetivos é um bom ponto de partida para iniciar a exploração das propriedades dos diagramas de fases. Fazendo uma varredura inicial com um tamanho de passo razoável obtém-se uma estimativa grosseira das fronteiras de fases. A precisão com que se obtém a localização da fronteira depende do tamanho da grade, N_g , usado na discretização da variável. O tempo computacional, para sistemas com interações até segundos vizinhos, é proporcional N_g^3 . Por outro lado, para pontos próximos a fronteiras de fases o processo iterativo converge mais lentamente. Com base nestes fatos concluímos que o método de potenciais efetivos é um instrumento eficiente na obtenção de informações preliminares, tornando-se inadequado quando desejamos explorar detalhes, caso em que precisamos recorrer a grades maiores. Os nossos cálculos utilizando este método usaram grades de tamanho 128. Nos sistemas com interações que envolvem apenas primeiros vizinhos o tamanho da grade pode ser aumentado bastante sem comprometer muito o tempo computacional, pois neste caso ele é proporcional ao quadrado do tamanho da grade, isto é, N_g^2 .

4.3 O processo de ramificação por combinação de estruturas

Como observamos na seção anterior, o método dos potenciais efetivos torna-se inviável quando desejamos obter diagramas de fases detalhados para modelos envolvendo interações até segundos vizinhos. Nesses casos é mais prático partir diretamente das equações de equilíbrio de forças. Em princípio deveríamos determinar todos as possíveis soluções com períodos $Q = 1, 2, 3, \dots, \infty$ e depois escolher aquela com a menor energia ou energia livre. Na prática essa busca exaustiva não é possível, uma vez que a busca de todas as soluções com um dado período Q é um problema numérico delicado, e de outro lado a limitação dos recursos computacionais impõe

um limite superior $Q_{\max}$ para os valores de Q que podem ser considerados. Partindo de condições de contornos iniciais diferentes e considerando conjuntos de equações de tamanho máximo $Q_{\max} = 20$, Bak e von Boehm (1980) e Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981) levantaram diagramas de fases aproximados para o modelo ANNNI. Estes diagramas são boas aproximações nas regiões de baixas temperaturas, mas falham na descrição das fases para altas temperaturas, onde fases de períodos mais longos estão presentes. Na construção de diagramas de fases mais detalhados devemos considerar períodos máximos $Q_{\max} \approx 10^3$ além de adotar algum processo sistemático baseado em considerações físicas, pois caso contrário o volume de cálculo computacional torna-se proibitivo. Selke e Duxbury (1983, 1984) foram capazes de construir um diagrama de fases bastante detalhado usando um processo sistemático que eles denominaram de *processo de ramificação por combinação de estruturas*.

O processo de ramificação por combinação de estruturas procura determinar o ponto de ramificação em que duas fases adjacentes, digamos $\langle A \rangle$ e $\langle B \rangle$, torna-se instável frente à fase construída pela combinação das estruturas dessas fases, $\langle AB \rangle$. O ponto de ramificação é determinado ao longo da fronteira entre as fases $\langle A \rangle$ e $\langle B \rangle$, como sendo aquele ponto a partir do qual $E_{\langle AB \rangle} < E_{\langle A \rangle}, E_{\langle B \rangle}$. Assim, a partir do ponto de ramificação a fronteira $\langle A \rangle - \langle B \rangle$ se bifurca passando a existir as fronteiras $\langle A \rangle - \langle AB \rangle$ e $\langle AB \rangle - \langle B \rangle$. A figura 4.3 representa esquematicamente o processo de ramificação das fases para o modelo ANNNI, com a fase $\langle 3 \rangle$ representando a fase $\langle A \rangle$ e a $\langle 2 \rangle$ representando a fase $\langle B \rangle$. Se prosseguirmos ao longo da fronteira $\langle A \rangle - \langle AB \rangle$, por exemplo, encontraremos novo ponto de ramificação. Acima deste ponto passam a existir as fronteiras $\langle A \rangle - \langle AAB \rangle$ e $\langle AAB \rangle - \langle AB \rangle$. O processo quando continuado gera a hierarquia de fases mostrada abaixo.

Figura 4.3: Representação esquemática dos pontos de ramificação que resultam do processo de ramificação por combinação de estruturas das fases no modelo ANNNI (Selke e Duxbury 1983, 1984).

$n = 0$	A								B
$n = 1$	A				AB				B
$n = 2$	A		A^2B		AB		AB^2		B
$n = 3$	A	A^3B	A^2B	A^2BAB	AB	$ABAB^2$	AB^2	AB^3	B

Suponhamos que queiramos determinar a fronteira à direita da fase $\langle A \rangle$, com a fase $\langle B \rangle$ sendo a fase à direita de $\langle A \rangle$. À medida que variamos algum parâmetro termodinâmico vão aparecendo pontos de ramificação e novas transições com a fase $\langle A \rangle$. As fases adjacentes ao longo da fronteira da fase $\langle A \rangle$ após o l -ésimo ponto de ramificação será da forma $\langle A^l B \rangle$. Se l é finito a transição é de primeira ordem, ou seja, do tipo comensurável-comensurável. Se $l \rightarrow \infty$, então a transição será do tipo comensurável-incomensurável.

As regras para o cálculo do número de onda das fases são aquelas da seqüências de Farey. As fases $\langle A \rangle$ e $\langle B \rangle$, com números de ondas $q_A = P_A/Q_A$ e $q_B = P_B/Q_B$, combinam-se formando a fase $\langle AB \rangle$ com número de onda $q_{AB} = (P_A + P_B)/(Q_A + Q_B)$. Por exemplo, no caso do modelo ANNNI a campo nulo, os números de onda das fases comensuráveis é gerada a partir das fases ferromagnética e $\langle 2 \rangle$ pela árvore de Farey mostrada abaixo.

$$\begin{array}{rcll}
 n=0 & \rightarrow & \frac{0}{2} & \frac{1}{4} \\
 n=1 & \rightarrow & & \frac{1}{6} \\
 n=2 & \rightarrow & \frac{1}{8} & \frac{2}{10} \\
 n=3 & \rightarrow & \frac{1}{10} & \frac{2}{14} \quad \frac{3}{16} \quad \frac{3}{14} \\
 n=4 & \rightarrow & \frac{1}{12} & \frac{2}{14} \quad \frac{3}{22} \quad \frac{3}{20} \quad \frac{4}{22} \quad \frac{5}{28} \quad \frac{5}{24} \quad \frac{4}{18}
 \end{array}$$

Observamos que o número de onda da fase ferromagnética foi escrito sob a forma $0/2$, e que no processo de formação da árvore não se deve simplificar as frações mesmo que redutíveis.

Capítulo 5

Diagrama de fases $p - T$

O diagrama de fases no plano $p-T$, para valor constante do campo H , foi levantado pela primeira vez por Randa (1985). Neste trabalho, utilizando o método de solução das equações de campo médio de Bak e von Boehm (1980), ele determinou as fronteiras das fases com períodos menores que 20 e obteve o diagrama de fases da figura 3.11-a para $H/J_1 = 0.1$. Devido às limitações do método de solução das equações de campo médio empregado pelo autor, pode-se notar algumas falhas quanto às fronteiras das fases na região de altas temperaturas. Além disso nesse diagrama de fases o estado fundamental é dado erroneamente como sendo formado pelo estado ferromagnético para $p < 0.55$ e pela fase $q/2\pi = 1/5$ para $p > 0.55$, o que não concorda com o estado fundamental exato mostrado na figura 3.10.

Neste capítulo estudaremos o comportamento dos diagramas de fases $p - T$ do modelo ANNNI com $J_0 = J_1$ mantendo constante o valor do campo. Neste e no próximo capítulo adotaremos o sistema de unidades tal que a constante de Boltzmann $k = 1$ e $J_1 = 1$. O estudo será feito dentro da aproximação de campo médio usando o método de ramificação por combinação de estruturas para levantar as fronteiras das fases (Selke e Duxbury, 1984). Este método permite examinar fases de períodos suficientemente grandes para se conseguir a topologia correta das fases na região de

altas temperaturas. A técnica dos potenciais efetivos funcionou como um método auxiliar ao método de ramificação por combinação de estruturas, permitindo a confirmação dos resultados obtidos pelo primeiro método.

Em concordância com os resultados conhecidos na literatura (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981; Smith e Yeomans, 1982, 1983; Uimin, 1984 e Szpilka, 1985) observamos que o campo induz uma série de modificações na estrutura das fases, nas transições entre elas e na aparência dos diagramas de fases. As fases de períodos ímpares, por exemplo, apresentam na presença de campo uma largura relativa de estabilidade que é maior que as das fases de períodos pares. Outro ponto é a presença de fases com um mesmo número de onda q mas apresentando múltiplas estruturas e estrangulamentos nas fronteiras de fases. Finalmente, notamos a presença de novos tipos de transições e de novas estruturas não presentes no diagrama de fases a campo nulo.

5.1 Características gerais dos diagramas de fases

Na presença de um campo $H \neq 0$, a linha crítica de transição para-ferro desaparece, o mesmo ocorrendo com o ponto de Lifshitz que dá lugar ao ponto tricrítico (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981). Agora temos somente a fronteira para-modulada, formada pelas linha de transição de primeira ordem, localizada abaixo do ponto tricrítico (TCP), e pela linha de transição de segunda ordem, localizada acima do TCP. A figura 5.1 mostra a localização do ponto tricrítico, a linha de transições de primeira ordem (tracejada) e a linha crítica (cheia) no diagrama de fases $p - T$ para vários valores de H . Examinaremos agora as fronteiras para-modulada de primeira ordem para $T < T_{TCP}$, indicada por linhas tracejadas na figura 5.1. Inicialmente observamos que para valores baixos do campo T_{TCP} diminui à medida que H cresce, atingindo um mínimo para $H \approx 0.03$, após o qual aumenta

com o crescimento de H (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981).

Figura 5.1: Fronteira Paramagnética-Modulada para os valores de H indicados na figura. Para cada valor de H está mostrado a linha de transições de segunda ordem (cheia), determinada por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981) e a linha de transições de fase de primeira ordem (tracejada), determinadas segundo o esquema de bifurcação e combinação de fases de Selke e Duxbury (1984). Os pontos tricríticos (TCP) são os círculos cheios e o círculo vazio é o ponto de Lifshitz (LP).

A presença do campo H provoca mudanças sensíveis na aparência dos diagramas de fases $p - T$ mesmo para valores tão baixos quanto $H = 0.001$. É o que se observa comparando o diagrama de fases apresentado na figura 3.7 para campo nulo e os diagramas de fases apresentados nas figuras 5.4–5.19 para $0.001 \leq H \leq 0.3$. Observando estes diagramas de fases notamos que a fronteira para-modulada e o ponto de multifases deslocam-se

gradualmente para a direita à medida que aumentamos o valor do campo H . Isso leva ao desaparecimento das fases que estão mais à esquerda. Gradualmente, estas vão desaparecendo à medida que o campo aumenta, isto é, a região de estabilidade da fase paramagnética tende a se tornar cada vez mais preponderante à medida que cresce o campo. Observamos que são as fases formadas por bandas mais largas as primeiras a tornarem-se instáveis frente à fase paramagnética.

Nos diagramas de fases notamos que as fases de períodos ímpares tendem a ocupar uma área relativa maior que a área ocupada pela fases pares à medida que se aumenta o campo. Este fato pode ser constatado comparando-se as áreas ocupadas, por exemplo, pelas fases $1/6$ e $1/5$ nos diagramas de fases das figuras 5.4–5.16.

Observamos também o aparecimento de estrangulamentos das fronteiras de fases que não são observados a campo nulo. No diagrama de fases da figura 5.8 para $H = 0.06$ é mostrado no detalhe o estrangulamento da fronteira da fase $1/6$. Estes estrangulamentos estão associados à mudanças na estrutura da fase, isto é, o estrangulamento marca uma transição entre fases de mesmo período mas com estrutura de magnetização diferentes. As novas estruturas ausentes a campo nulo surgem na região de altas temperaturas para valores de campo acima de um limite que é particular para cada fase. O menor valor de campo para o qual o estrangulamento de uma fase foi observado foi $H=0.01$ (diagrama de fases da figura 5.5) para a fase $1/8$. Para baixas temperaturas a estrutura $\langle 44 \rangle$ é estável, enquanto para altas temperaturas é a estrutura $\langle 35 \rangle$ que é a estável. Outros exemplos podem ser vistos para valores mais altos do campo. Por exemplo, a fase $2/13$ no diagrama de fases 5.7 para $H = 0.05$ ou a fase $1/6$ nos diagramas de fases 5.8–5.16.

5.2 Fronteira de primeira ordem para-modulada

A fronteira de primeira ordem indicada por linhas tracejadas na figura 5.1 foi determinada usando o esquema de bifurcação por combinação de estruturas (Selke e Duxbury, 1984). Ao longo da linha de primeira ordem são observadas seqüências de pontos triplos, para campos baixos e para campos mais altos observamos que a fronteira de primeira ordem passa a cortar linhas de transição singular-contínuas, conforme passaremos a discutir.

Iniciaremos a análise da linha de primeira ordem da fronteira para-modulada começando por valores baixos de H . Como apoio ao que iremos discutir consideremos o diagrama de fases para $H = 0.005$ mostrado parcialmente na figura 5.3. Neste diagrama de fases a fronteira para-modulada, para baixas temperaturas, inicia-se com a linha de transição entre a fase paramagnética e a fase $1/5$ ou fase $\langle \bar{2}3 \rangle$, que chamaremos linha para- $\langle \bar{2}3 \rangle$ ou ainda mais abreviadamente linha $P-\langle \bar{2}3 \rangle$. A linha de transição $P-\langle \bar{2}3 \rangle$ acontece no intervalo

$$0 < T < T_{P-\langle \bar{2}3 \rangle}^s(H), \quad (5.1)$$

onde $T_{P-\langle \bar{2}3 \rangle}^s(H)$ é a maior temperatura em que é observado a transição $P-\langle \bar{2}3 \rangle$ para um dado valor de H , sendo uma função de H . A figura 5.2 mostra a dependência de $T_{P-\langle \bar{2}3 \rangle}^s(H)$ com H . A linha $P-\langle \bar{2}3 \rangle$ existe sempre para $H > 0$, ou seja, a fase $1/5$ é a fase que faz a transição com a fase paramagnética quando $H \neq 0$. Este resultado concorda com resultados de expansão em série a baixas temperaturas (Szpilka, 1985).

Acima de $T_{P-\langle \bar{2}3 \rangle}^s$ encontramos a linha de transições entre a fase $1/6$ e a fase paramagnética, linha $P-\langle 3 \rangle$, localizada no intervalo

$$T_{P-\langle 3 \rangle}^i < T < T_{P-\langle 3 \rangle}^s, \quad (5.2)$$

Figura 5.2: Temperaturas limites $T_{P-<23>}$, abaixo da qual temos a transição da fase 1/5 para a fase paramagnética.

onde $T_{P-<3>}^i$ e $T_{P-<3>}^s$ são a menor e a maior temperaturas para as quais é observado a transição $P-<3>$. Os índices superescritos i e s indicam este fato. Na figura 5.3, $T_{P-<23>}^s$ parece coincidir com $T_{P-<3>}^i$. De fato, para este valor de campo ($H = 0.005$) $T_{P-<23>}^s = T_{P-<3>}^i$. No entanto, observando diagramas de fases para valores mais altos de H , como por exemplo, o diagrama de fases 5.10 ($H = 0.09$) veremos que $T_{P-<23>}^s < T_{P-<3>}^i$. Assim no intervalo

$$T_{P-<23>}^s < T < T_{P-<3>}^i \quad (5.3)$$

existem outras linhas de transição de fases moduladas com a fase paramagnética, como por exemplo, da fase paramagnética para a fase $\langle 23\bar{3}3 \rangle$ (2/11), linha $P-<23\bar{3}3>$. Para valores de $H \approx 0.1$, as transições neste intervalo, parecem ser do tipo singular-contínuas, com as transições entre as fases obedecendo a seguinte hierarquia diatômica (cf. seção 4.1):

Figura 5.3: Fronteira paramagnética-modulada, mostrando a região de transição entre a fase paramagnética e as fases moduladas, formando uma seqüência de pontos triplos ($H = 0.005$).

$n = 0$	$\langle \bar{3}3 \rangle$		$\langle \bar{2}3 \rangle$
$n = 1$	$\langle \bar{3}3 \rangle$	$\langle \bar{2}3\bar{3} \rangle$	$\langle \bar{2}3 \rangle$
$n = 2$	$\langle \bar{3}3 \rangle$	$\langle \bar{2}3\bar{3}\bar{3} \rangle$	$\langle \bar{2}3\bar{3}\bar{2}3 \rangle$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

ou em termos de números de onda,

$$1/6 \dots 4/22 \dots 3/16 \dots 5/26 \dots 2/10, \quad (5.4)$$

com os pontos indicando novas possibilidades de aparecimento de fases,

levando a novas transições. Este comportamento está bem evidenciado nos diagramas de fases 5.10 e 5.11.

Prosseguindo com a análise da fronteira de primeira ordem no diagrama de fases 5.3 encontramos acima de $T_{P-\langle\bar{3}3\rangle}^s$ a linha de transição entre a fase $\langle\bar{3}4\rangle$ (1/7) e a fase paramagnética, daqui em diante chamada de linha $P-\langle\bar{3}4\rangle$. Esta linha compreende o intervalo

$$T_{P-\langle\bar{3}4\rangle}^i < T < T_{P-\langle\bar{3}4\rangle}^s. \quad (5.5)$$

Novamente como no caso anterior encontramos no intervalo

$$T_{P-\langle\bar{3}3\rangle}^s < T < T_{P-\langle\bar{3}4\rangle}^i, \quad (5.6)$$

transições entre a fase paramagnética e fases moduladas que obedecem ao processo de combinação de fases

$$\langle\bar{3}4\rangle \dots \langle\bar{3}4\bar{3}3\bar{4}\rangle \dots \langle\bar{3}3\bar{4}\rangle \dots \langle\bar{3}3\bar{3}4\rangle \dots \langle\bar{3}3\rangle, \quad (5.7)$$

ou em termos dos números de onda

$$2/14 \dots 5/34 \dots 3/20 \dots 4/26 \dots 1/6 \quad (5.8)$$

O comportamento observado nestes dois casos, parece estar presente em muitos outros lugares, para temperaturas mais altas, ao longo da fronteira de primeira ordem para-modulada.

Algumas das linhas para-modu presentes no diagrama de fases 5.3 são vistas até em diagramas de fases com $H \approx 0.25$ (figura 5.18), onde ainda é possível observar o intervalo dado pela equação (5.1), agora ocupando uma parte substancial da fronteira de primeira ordem. Observamos, no entanto,

que a linha para-modulada de primeira ordem desloca-se para valores mais altos de p à medida que H aumenta, fazendo com isso desaparecer as linhas de transição entre a fase paramagnética e as fases existentes para valores mais baixos de p . Para $H = 0.30$ (diagrama de fases 5.19) encontramos, das linhas mostradas no diagrama de fases 5.4, apenas a linha de transição $P-\langle\bar{2}3\rangle$. Para valores ainda mais altos do campo ($H \gtrsim 1.5$, diagrama de fases 5.22), a fase $1/5$ desaparecerá e com isso aparecerão linhas de transição formadas pela transição entre a fase paramagnética e a fase $3/14$, linha $P-\langle\bar{2}2\bar{3}\rangle$. A linha $P-\langle\bar{2}23\rangle$, neste caso, aconteceria no intervalo

$$0 < T < T_{P-\langle\bar{2}23\rangle}^s. \quad (5.9)$$

O valor de campo onde este intervalo aparece não foi determinado por nós. Para campos ainda mais altos esperamos o aparecimento da linha $P-\langle\bar{2}2\bar{2}3\rangle$ etc., conforme a fronteira para-moduladas desloque-se ainda mais para à direita com o aumento do campo. Finalmente, para um valor ainda mais alto do campo teremos a fronteira $P-\langle\bar{2}2\rangle$.

5.3 Linha de multifases

Dentro da precisão numérica utilizada (dupla precisão) em nossos cálculos constatamos que da linha de multifases, localizado em

$$p = (1 + H)/2, \quad (5.10)$$

nascem apenas a fase $\langle\bar{2}3\rangle$ e $\langle\bar{2}2\rangle$ para valores de campo no intervalo $H > 0$. Os nossos cálculos para a fronteira de transição com a fase $\langle\bar{2}2\rangle$ parecem indicar que existe a transição direta da fase $\langle\bar{2}3\rangle$ para a fase $\langle\bar{2}2\rangle$. Com isso as fases com estruturas de magnetização da forma

$$\langle 32^n \rangle \quad n = 2, 3, 4, \dots, \quad (5.11)$$

como a $3/14$, $2/9$, $\dots$ não saem diretamente do ponto de multifases. O resultado acima difere dos resultados encontrados a campo nulo, onde o ponto de multifases ($p = 1/2$, $T = 0$) é infinitamente degenerado, com uma infinidade de fases da forma

$$\langle 32^n \rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.12)$$

saindo deste ponto (Fisher e Selke, 1981), conforme discussão apresentada na seção 3.5. Nossos resultados, baseados na aproximação de campo médio, concordam com os resultados de expansões em séries a baixas temperaturas encontrados por Szpilka (1985). Ou seja, dos pontos sobre a linha de multifases, apenas a fase $1/5$ e $1/4$ saem diretamente enquanto as outras fases são observadas apenas a partir de um certo valor da temperatura.

Figura 5.4: Diagramas de fases para $H = 0.001$.

Figura 5.5: Diagramas de fases para $H = 0.01$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase $1/8$.

Figura 5.6: Diagramas de fases para $H = 0.02$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase 3/16. A fase 3/16 com rótulo A apresenta a estrutura de magnetização $\langle \bar{2}3\bar{3} \rangle$, enquanto a fase 3/16 com rótulo B tem estrutura $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{3} \rangle$.

Figura 5.7: Diagramas de fases para $H = 0.05$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase $2/13$. A fase $2/13$ com rótulo A apresenta a estrutura de magnetização $\langle \bar{3}4\bar{3}3 \rangle$, enquanto a fase $2/13$ com rótulo B tem estrutura $\langle \bar{2}5\bar{3}3 \rangle$.

Figura 5.8: Diagramas de fases para $H = 0.06$. No detalhe está mostrado o estrangulamento da fase $1/6$, onde a fase com rótulo A tem estrutura $\langle \bar{3}3 \rangle$ e a fase com rótulo B apresenta a estrutura $\langle \bar{2}4 \rangle$.

Figura 5.9: Diagramas de fases para $H = 0.07$. No detalhe o estrangulamento da fase $1/6$.

Figura 5.10: Diagramas de fases para $H = 0.09$. No detalhe a linha de transições entre a fase $1/5$ e a fase $1/6$, que parece ser do tipo singular-contínua.

Figura 5.11: Diagramas de fases para $H = 0.10$. No detalhe vemos o início da formação do estrangulamento das fronteiras de algumas fases como a $3/17$ e a $2/11$.

Figura 5.12: Diagramas de fases para $H = 0.11$.

Figura 5.13: Diagramas de fases para $H = 0.13$.

Figura 5.14: Diagramas de fases para $H = 0.14$.

Figura 5.15: Diagramas de fases para $H = 0.15$.

Figura 5.16: Diagramas de fases para $H = 0.16$.

Figura 5.17: Diagramas de fases para $H = 0.20$.

Figura 5.18: Diagramas de fases para $H = 0.25$.

Figura 5.19: Diagramas de fases para $H = 0.30$.

Figura 5.20: Diagramas de fases para $H = 0.50$.

Figura 5.21: Diagramas de fases para $H = 1.0$.

Figura 5.22: Diagramas de fases para $H = 1.50$.

5.4 Encolhimento das fases com períodos pares

Considerando a sequência de diagramas de fases mostrados nas figuras 5.4-5.16 para valores crescentes de H , observa-se que a fase $1/6$, de período par, tende a diminuir sua área em relação àquela ocupada pela fase $1/5$, de período ímpar. O comportamento apresentado pelas fases $1/5$ e $1/6$ é observado também quando se compara outros pares de fases de números de onda próximos. Por exemplo as fases $2/11$ e $3/16$ nos diagramas de fases 5.4 ($H = 0.001$) e 5.11 ($H = 0.10$), ou as fases $3/16$ e $3/17$ nos mesmos diagramas de fases. Qual a razão para este comportamento? As fases com períodos ímpares, como a $1/5$, apresentam a campo nulo as estruturas de magnetização mostradas na figura 5.23, que são estruturalmente diferentes mas energeticamente iguais: 5.23-b é obtido de 5.23-a ou vice-versa pela inversão global dos spins. Fases com períodos pares, como a $1/6$, apresentam estruturas como as mostradas na figura 5.24 que são estruturalmente e energeticamente equivalentes. Observamos que a fase $1/5$ sempre apresenta uma estrutura com magnetização líquida na direção do campo qualquer que seja o sinal de H : se $H > 0$ é a estrutura 5.23-b a favorecida enquanto se $H < 0$ a estrutura favorecida é a 5.23-a. Ao contrário, as estruturas de período par (5.24) apresentam magnetização líquida nula. Na presença de campo a estrutura da fase $1/5$ com magnetização líquida na direção do campo será mais favorecida que a fase $1/6$ (figura 5.24). Assim a fase $1/5$ terá a região de estabilidade aumentada, enquanto a fase $1/6$ apresentará redução de sua região de estabilidade à medida que aumentamos o campo. No entanto, as fases com períodos pares tendem a fazer transição para uma estrutura que seja mais favorecida energeticamente na presença do campo. Isto é observado para a fase $3/16$ que sofre transição da fase com estrutura $\langle 233 \rangle$ para campos mais fracos, para a fase com estrutura $\langle 232333 \rangle$. A primeira tem magnetização líquida nula enquanto a segunda apresenta uma

Figura 5.23: Estrutura de magnetização da fase 1/5

magnetização diferente de zero. Esta transição pode ser observada analisando a sequência de diagramas de fases 5.4–5.6, onde nos diagramas de fases 5.5 e 5.6 observamos claramente a transição em $T \approx 4.0$. O comportamento apresentado pela fase 3/16 é observado para outras fases. Quando o campo torna-se mais forte mesmo as fases com períodos ímpares passam a desenvolver este tipo de comportamento.

No modelo ANNNI a campo nulo é observado uma hierarquia das fases presentes no diagrama de fases $p - T$, com relação à área ocupada por elas no diagrama de fases. Fases no primeiro nível ocupam a maior área, enquanto as fases em níveis posteriores vão ocupando, individualmente, áreas cada vez menores, conforme a árvore de Farey mostrada abaixo

Figura 5.24: Estrutura de magnetização da fase $1/6$

$n = 0 \rightarrow$	$\frac{0}{2}$							$\frac{1}{4}$
$n = 1 \rightarrow$				$\frac{1}{6}$				
$n = 2 \rightarrow$			$\frac{1}{8}$			$\frac{2}{10}$		
$n = 3 \rightarrow$		$\frac{1}{10}$		$\frac{2}{14}$		$\frac{3}{16}$		$\frac{3}{14}$
$n = 4 \rightarrow$		$\frac{1}{12}$	$\frac{2}{18}$	$\frac{3}{22}$	$\frac{4}{26}$	$\frac{5}{22}$	$\frac{5}{24}$	$\frac{4}{18}$

Comparemos a posição das fases na árvore de Farey e suas áreas ocupadas no diagrama de fases 3.7. As fases $0/2$ e $1/4$ são as principais, seguidas

da fase $1/6$, e que é seguida das fases $1/8$ e $1/10$ e assim sucessivamente. A introdução do campo, conforme visto no início da seção, gradativamente altera este cenário. Conforme o aumento do campo as fases $1/6$, $1/8$, $\dots$, antes privilegiadas, vão dando lugar à fases como a $1/5$, $1/7$, $2/11$, $\dots$. Nesse caso a importância relativa das diversas fases comensuráveis pode ser descrita pela árvore de Farey construída a partir das fases $0/1$ e $1/4$ como mostrado abaixo.

$$\begin{array}{rcccccccc}
 n = 0 & \rightarrow & \frac{0}{1} & & & & & & \frac{1}{4} \\
 n = 1 & \rightarrow & & & \frac{1}{5} & & & & \\
 n = 2 & \rightarrow & & \frac{1}{6} & & & \frac{2}{9} & & \\
 n = 3 & \rightarrow & \frac{1}{7} & & \frac{2}{11} & & \frac{3}{14} & & \frac{3}{13} \\
 n = 4 & \rightarrow & \frac{1}{8} & \frac{2}{13} & \frac{3}{17} & \frac{4}{16} & \frac{5}{19} & \frac{6}{23} & \frac{7}{22} & \frac{8}{17}
 \end{array}$$

Observamos que a topologia do diagrama de fases continua sendo descrita corretamente pela árvore de Farey, apenas as fases sofreram mudanças na hierarquia. Observando os diagramas de fases para valores mais altos de H , como por exemplo o diagrama de fases 5.15 ($H = 1.5$), notamos que agora é a fase $2/9$ a fase com maior destaque depois da fase para e a fase $\langle 2 \rangle$. As fases mais à esquerda de $2/9$ tendo sumido completamente. Acreditamos que esta maneira de dispor as fases perde totalmente o sentido para campos intensos, uma vez que fases que estão mais próximas à fronteira para-modulada vão desaparecendo à medida que o campo aumenta, como é o caso das fases $1/7$,

$1/6$, que desaparecem totalmente para valores de $H \approx 0.12$.

5.5 Fases distintas com o mesmo número de onda

Como mencionado anteriormente, os diagramas de fases $p - T$ para $H \neq 0$ apresentam fases onde são observados estrangulamentos de suas fronteiras. Estes estrangulamentos podem aparecer para uma dada fase a partir de certo valor do campo H . Por exemplo, consideremos a fase $1/6$. Os estrangulamentos para esta fase começaram a ser vistos a partir de $H \approx 0.06$, como mostrado no detalhe do diagrama de fases 5.7, e ficam presentes até $H \lesssim 0.14$. No diagrama de fases 5.7 ainda é bem incipiente, mas nos diagramas de fases seguintes, onde temos valores mais altos do campo, este comportamento vai se tornando cada vez mais definido. Na figura 5.25 mostramos a ampliação da região de ocorrência de estrangulamentos para o campo $H = 0.11$. Indicamos com A a região de estabilidade da fase $1/6$ que apresenta a estrutura $\langle \bar{3}3 \rangle$ (figura 5.26-a) enquanto a região de estabilidade que apresenta a estrutura $\langle \bar{2}4 \rangle$ (figura 5.26-b) foi indicada pela letra B. Essas serão rotuladas por $(1/6)A$ e $(1/6)B$, respectivamente. Estas estruturas foram confirmadas resolvendo as equações de campo médio, através do método de potenciais efetivos. Outras fases com números de ondas maiores como a $2/11$ e $3/16$, mostradas nos diagramas de fases 5.25, também apresentam estrangulamentos nas suas fronteiras de fases. A fase $3/17$ (diagrama de fases 5.25) apresenta as estruturas $\langle \bar{2}3\bar{3}3\bar{3}3 \rangle$ (fase $(3/17)A$), $\langle \bar{2}3\bar{3}3\bar{2}4 \rangle$ (fase $(3/17)B$) e $\langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle$ (fase $(3/17)C$) para temperaturas baixas, intermediárias e altas respectivamente. Para esta fase são observadas as transições da fase $(3/17)A$ para a fase $(3/17)B$ e desta para a $(3/17)C$ conforme aumentamos a temperatura. Observamos que o número de estrangulamentos das fronteiras de fases aumenta com o tamanho do período da fase. Assim na figura 5.25 observamos que a fase $1/6$ apresenta apenas

um estrangulamento, inidicando a transição entre as fases $(1/6)A$ e $(1/6)B$, enquanto para a fase $3/17$ são observados estrangulamentos marcando as transições $(3/17)A$ – $(3/17)B$ e $(3/17)B$ – $(3/17)C$. Na fase $4/23$ este número sobe para 3 marcando as transições $(4/23)A$ – $(4/23)B$ $(4/23)B$ – $(4/23)C$ e $(3/17)C$ – $(3/17)D$.

O comportamento observado para a fase $1/6$ é o mesmo apresentado pela fase $2/13$, mostrada no detalhe da figura 5.7. As fases $(2/13)A$ e $(2/13)B$ apresentam estruturas de magnetização dadas por $\langle \bar{3}3\bar{3}4 \rangle$ e $\langle \bar{2}4\bar{3}4 \rangle$ respectivamente. A fase $2/11$ a partir de $H \approx 0.09$ apresenta as regiões de estabilidade rotulada como $(2/11)A$, com estrutura de magnetização dada por $\langle \bar{2}3\bar{3}3 \rangle$ e $(2/11)B$ com estrutura dada por $\langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle$.

Os estrangulamentos das fronteiras das fases indicam regiões onde ocorrem transições entre fases de mesmo período. No entanto, transições entre fases de mesmo período foram encontradas sem que houvesse o aparecimento de estrangulamentos das fronteiras de fases. Por exemplo, a fase $1/7$ passa por uma série de transições à medida que aumentamos o campo. Inicialmente a campo nulo temos a estrutura $\langle \bar{3}4 \rangle$. Com o aumento do campo passa a existir regiões de estabilidade para as fases $1/7$ com estruturas $\langle \bar{2}5 \rangle$, $\langle \bar{1}6 \rangle$ e $\langle \bar{7} \rangle$. A fase rotulada por $\langle \bar{7} \rangle$ representa uma estrutura de magnetização onde todos os planos apresentam magnetizações positivas, com número de onda $q/2\pi = 1/7$. Esta estrutura é vista somente na região de campos altos e altas temperaturas. Comportamento semelhante ao apresentado pela fase $1/7$ é observado para a fase $2/11$. Temos as fases com estruturas $\langle \bar{2}3\bar{3}3 \rangle$, $\langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle$, $\dots$, $\langle \bar{1}1 \rangle$. Esta última como no caso da fase $1/7$ é formada por planos com magnetizações positivas como está mostrado na figura 5.27. Estas estruturas com a aparência de marolas, apresentam aspectos parecidos com ordenamentos encontrados para cristais líquidos e conhecidos como fases “ripple”.

Transições entre fases de mesmo período já foram observadas para

Figura 5.25: Ampliação da região de estrangulamentos no diagramas de fases para $H = 0.11$.

outro modelo, o modelo FK generalizado, estudado por Aubry (1985), Griffiths e Chou (1986), Yokoi (1988) e Tragtenberg (1993), conforme discutido na seção 2.2. Examinando os resultados destes autores e comparando com os nossos diagramas de fases notamos fortes semelhanças na maneira como estes estrangulamentos estão distribuídas pelo diagrama de fases. É natural que nos perguntemos se para o nosso modelo existiriam, também, seqüências de regiões de estrangulamentos e se estas seqüências de estrangulamentos apresentam eventuais pontos de acumulação, como foi determinado por Yokoi (1988) para o modelo FK generalizado. As respostas a estas perguntas só

Figura 5.26: Perfil de magnetização da fase $1/6$. (a) Estrutura $(1/6)A$ e (b) estrutura $(1/6)B$.

serão possíveis fazendo um levantamento mais detalhado com maior número de fases nos diagramas de fases. Dos poucos dados de que dispomos parece que os nossos diagramas de fases apresentam propriedades semelhantes às aquelas encontradas nos diagramas de fases FK generalizados.

A existência de transições entre fases de mesmo período sem a presença de estrangulamentos das fronteiras de fases, como observado para a fase $1/7$, apresenta algumas semelhanças com o estudo feito por Tragtenberg (1993) para o modelo FK generalizado no qual a amplitude ϵ do segundo harmônico é negativa.

O estrangulamento das fronteiras de fases parece estar disseminado por todo o diagrama de fases, indo desde a fase $1/8$ até a fase $2/9$. Apenas nas vizinhanças da fase $1/6$ estes estrangulamentos são mais acen-

Figura 5.27: Fase tipo marola. Estrutura da fase 2/11 para valores altos de campo e temperatura.

tuados e persistem para um intervalo maior do campo. Examinando regiões com valores de p mais afastados da fase 1/6, a regularidade com que são observados estes comportamentos torna-se mais espaçado. É possível que para cada valor de p exista um valor específico de campo para o qual este comportamento se torne presente.

Estrangulamentos das fronteiras de fases foram encontrados inicialmente para as fases 1/8 e 3/16 para valores de campo $H \approx 0.01$ (diagrama de fases 5.5 e 5.6). Acreditamos que este comportamento presente em diagramas de fases para valores tão baixos de H sejam observados apenas para as fases de períodos pares. Valores de campo desta ordem coincidem com o valor limite de estabilidade das estruturas de fases de períodos pares presentes a campo nulo. Para valores mais altos de H estas estruturas de

fases desaparecem completamente, conforme observado para a fase 3/16 nos diagramas de fases 5.4, 5.5 e 5.7. No diagrama de fases 5.5 observamos a existência da transição entre a fase (3/16)A com estrutura $\langle 23\bar{3} \rangle$ e a fase (3/16)B com estrutura $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{3} \rangle$, com uma magnetização maior. No diagrama de fases 5.7 observamos que a fase 3/16 já não mais apresenta qualquer estrangulamento de suas fronteiras. Esta suspeita é reforçada examinando os diagramas de fases $H - T$, para p constante, mostrados no capítulo seguinte.

Capítulo 6

Diagrama de fases H — T

Os diagramas de fases H—T do modelo ANNNI, mantendo p constante, foram construídos por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981) dentro da aproximação de campo médio. O sistema de equações de campo médio foi estudado utilizando o método de Bak e von Boehm (1980), que considera sistemas de equações de tamanho máximo Q . Os cálculos efetuados por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981) consideraram tamanhos máximos com até 20 planos de magnetização ($Q = 20$). Este limite restringe os comprimentos dos períodos das fases a terem, também, um tamanho máximo Q . Com isso todas as fases determinadas são comensuráveis e apenas algumas regiões de baixas temperaturas, onde predominam fases de períodos relativamente curtos, são bem descritas.

Neste capítulo analisamos mais detalhadamente o comportamento das fases nos diagramas de fases H — T a p constante, para os valores de $p = 0.4, 0.6$ e 4.0 já analisados por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981) e também diagramas de fases para outros valores de p . O comportamento das fases moduladas para algumas regiões dos diagramas de fases apresenta um alto grau de complexidade, com vários cenários de transições de fases e estruturas ricas até então só observados em outros modelos. Conseguimos levantar as fronteiras de fases com períodos mais longos que aqueles em Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981). A nossa análise, apesar de con-

siderar fases de períodos maiores que esses autores, ainda está restrita a fases comensuráveis. Fases com períodos curtos, presentes a temperaturas mais baixas, tiveram suas fronteiras determinadas usando potenciais efetivos em combinação com o método de busca binária. Fases com períodos mais longos, presentes na região de altas temperaturas, tiveram suas fronteiras determinadas usando o método de ramificação por combinação de estruturas de Selke e Duxbury (1984). O esquema de Selke e Duxbury foi usado para determinar as fronteiras das fases no diagramas de fases $p - T$ a H constante. Fazendo uso de um aplicativo gráfico determinamos os pontos (p, T) sobre as fronteiras das fases para cada valor de H .

Como mencionado no capítulos 3, o modelo ANNNI na presença de campo já foi estudado por Smith e Yeomans (1982, 1983), Pokrovsky e Uimin (1982), Uimin (1984) e Szpilka (1985), todos através de expansões em série de baixas temperaturas. Os nossos resultados na região de baixas temperaturas estão em boa concordância qualitativa com esses resultados. Recentemente Tragtenberg (1993) e Tragtenberg e Yokoi (1995) estudaram o modelo ANNNI numa rede de Bethe, discutindo o comportamento das fases nos diagramas de fases H — T a p constante. Alguns dos resultados para este modelo na rede de Bethe são encontrados nos nossos estudos dentro da aproximação de campo médio.

6.1 Características gerais dos diagramas de fases

Construímos os diagramas de fases H — T para vários valores do parâmetro p no intervalo $0.4 < p < 4.0$. Estes diagramas de fases estão mostrados nas figuras 6.12–6.25. Alguns com mais detalhes, como é o caso do diagrama de fases 6.19, outros nem tanto. As fronteiras para-moduladas, separando a região de fases moduladas da paramagnética, muda de forma à medida que fazemos variar o parâmetro p como ilustrado na figura 6.1. A

fronteira para-modulada, para $p < 1/2$, tem a forma de uma corcova. Para $p < 1.0$ esta fronteira tem um comportamento reentrante. Nos diagramas de fases mostrados nas figuras 6.12–6.23 vemos que a região das fases moduladas ocupa uma área cada vez maior com o aumento de p e que esta área, por sua vez, é ocupada cada vez mais pelas fases de períodos ímpares como a $1/7$, $1/5$, e para valores bem acima de $p = 1/2$ pela fase $\langle \bar{2}2 \rangle$. Os diagramas de fases com $p < 1/2$ diferem daqueles com $p > 1/2$ por não apresentarem ponto de multifases. Para $p > 1/2$ temos um ponto de multifases em $H = \pm(2p - 1)$ e $T = 0$ a partir do qual nascem fases moduladas em forma de leque sendo a fase $1/5$ o principal destaque. A região de temperaturas intermediárias, que por exemplo no diagrama de fases com $p = 0.6$ (figura 6.19) localiza-se no intervalo $3.5 \lesssim T \lesssim 5.0$, apresenta uma riqueza de comportamentos. Nesta região encontramos transições entre fases com períodos diferentes e transições entre fases com mesmo período, que são transições de primeira ordem. Encontramos transições mais complexas como transições singular-contínuas. Além disso o arranjo das fases formam estruturas que lembram aquelas encontradas nas vizinhanças de pontos ípsilon nos diagramas de fases do estado fundamental do modelo FK (Bassler e Griffiths, 1994). A região de altas temperaturas por outro lado parece apresentar transições do tipo comensurável-incomensurável.

6.2 Fronteira modulada-paramagnética

A fronteira para-modulada é constituída por dois tipos de linhas de transições de fases. A linha de transição de fases de segunda ordem na região de temperaturas mais altas seguida da linha de transição de primeira ordem para temperaturas mais baixas. Estes dois regimes de transição estão separados pelo ponto tricrítico (TCP). A figura 6.1 mostra a fronteira para-modulada para alguns valores de p lá indicados. O comportamento do ponto

Figura 6.1: Fronteira modulada-paramagnética para diversos valores de p indicados na figura. As linhas cheias são linhas críticas enquanto as linhas tracejadas são linhas de transições de primeira ordem. TCP designa o ponto tricrítico.

tricrítico foi investigado por Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas (1981). Estes autores investigaram a estabilidade da linha de pontos tricríticos, determinando $p = 2.946 \dots$ como o limite de estabilidade quando $J_0 = J_1$. Os valores críticos de campo e temperatura são dados respectivamente pelas equações (3.29) e (3.30) (Yokoi, Coutinho-Filho e Salinas, 1981).

Ao longo da linha de transições de fases de primeira ordem observa-se que a fronteira para-modu corta linhas de transições do tipo singular-contínuas. Fazemos uma descrição detalhada desta fronteira considerando a região ampliada do diagrama de fases com $p = 0.6$ mostrada na figura 6.2. Ao longo da fronteira para este diagrama de fases no intervalo

Figura 6.2: Região da fronteira modulada-paramagnética de primeira ordem do diagrama de fases com $p = 0.6$, mostrando a interseção das seqüências de transições entre as fases $1/5$ e $2/11$, e $2/11$ e $5/28$ que são transições do tipo singular-contínua. No detalhe é mostrado a ampliação da transição entre a fase $2/11$ e $1/5$, como explicado no texto.

$$0 < T < T_{P-\langle 23 \rangle}^s \quad (6.1)$$

a transição é entre a fase paramagnética e fase $1/5$ ou fase $\langle \bar{2}3 \rangle$. Acima de $T_{P-\langle 23 \rangle}^s$ encontramos no intervalo

$$T_{P-\langle 23\bar{3}3 \rangle}^i < T < T_{P-\langle 23\bar{3}3 \rangle}^s \quad (6.2)$$

a transição entre a fase paramagnética e fase $2/11$ ou fase $\langle \bar{2}3\bar{3}3 \rangle$. No intervalo

$$T_{P-\langle 23 \rangle}^s < T < T_{P-\langle 23\bar{3}\bar{3} \rangle}^i \quad (6.3)$$

é visto a transição entre a fase paramagnética e a fase 3/16, $\langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle$, que acontece no intervalo

$$T_{P-\langle 23\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^i < T < T_{P-\langle 23\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^s. \quad (6.4)$$

No entanto, no intervalo

$$T_{P-\langle 23 \rangle}^s < T < T_{P-\langle 23\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^i \quad (6.5)$$

encontramos outras transições entre a fase paramagnética e fases moduladas, como exemplo, as transições $P-\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle$ entre a fase paramagnética e a fase 5/26. Este fato se repete para o intervalo

$$T_{P-\langle 23\bar{3}\bar{3} \rangle}^s < T < T_{P-\langle 23\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^i. \quad (6.6)$$

Assim no intervalo dado na equação (6.3) encontramos uma seqüência de transições entre as fases $\langle 2324 \rangle$ (2/11) e $\langle 23 \rangle$ (1/5) que parece obedecer uma hierarquia diatômica dada por

$$\begin{array}{lllll} \langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle & & & & \langle \bar{2}3 \rangle \\ \langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle & & \langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}3 \rangle & & \langle \bar{2}3 \rangle \\ \langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle & \langle (\bar{2}3\bar{2}4)^2\bar{2}3 \rangle & \langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}3 \rangle & \langle \bar{2}3\bar{2}4(\bar{2}3)^2 \rangle & \langle \bar{2}3 \rangle \end{array}$$

A transição $\langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle - \langle \bar{2}3 \rangle$ parece ser do tipo singular-contínua. Um pouco acima da região de transição $P-\langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle$ encontramos uma nova região onde

temos mais uma vez seqüências de fases com a aparência de uma transição singular contínua entre a fase 5/28 ($\langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle$) e a fase 2/11, localizadas no intervalo

$$T_{P-\langle \bar{2}3\bar{3}3 \rangle}^s < T < T_{P-\langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^i \quad (6.7)$$

Acima da região de transição entre a fase 5/28 e a fase paramagnética

$$T_{P-\langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^i < T < T_{P-\langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^s \quad (6.8)$$

encontramos uma região de transição entre algumas das fases moduladas que saem do intervalo (6.8) e que entram na região de fases moduladas e que voltam novamente para temperaturas superiores em direção a linha de transição para-modulada. O intervalo de temperaturas onde ocorre este fato estende-se desde $T_{P-\langle \bar{2}3\bar{2}4\bar{2}3\bar{2}4\bar{2}4 \rangle}^s$ até T_{TCP} , a temperatura do ponto tricrítico.

Este mesmo quadro é observado para outros diagramas de fases, mudando apenas as fases moduladas que formam as fronteiras de transição com a fase paramagnética. Por exemplo, na figura 6.13 para $p = 0.45$ temos inicialmente a linha de transição entre a fase paramagnética e a fase 1/6. Acima desta linha de transição encontramos a linha de transição entre a fase paramagnética e a fase 1/7. Entre estas duas linhas existem outras linhas, como a linha para-2/13. Entre as linhas para-1/6 e para-2/13 novas linhas são encontradas, da mesma forma entre as linhas para-2/13 e para-1/7. A seqüência de transições ao longo da linha entre as fases 1/6 e 1/7 parece ser também do tipo singular-contínua. O comportamento das fases ao longo da fronteira de primeira ordem para-modulada, presença de pontos tricríticos e transições singular-contínuas, já foi identificado anteriormente nos diagramas de fases $p - T$.

Os aspectos apresentados nos nossos diagramas de fases para a linha de primeira ordem, presença de pontos triplos e de transições singular-

contínuas, estão ausentes nos diagramas de fases $H - T$ a p constante nos trabalhos de Tragtenberg (1993) e Tragtenberg e Yokoi (1996) sobre o modelo ANNNI na presença de campo para uma rede de Bethe.

6.3 Fases moduladas para campos baixos

Iniciamos nossa discussão da região com fases moduladas chamando a atenção para o comportamento destas fases próximo ao eixo $H = 0$. A figura 6.3 é uma ampliação desta região no diagrama de fases com $p = 0.6$. Nesta região as fases com períodos pares diminuem suas larguras de estabilidade ao longo do eixo da temperatura à medida que H cresce, isto é, estas fases passam por um processo de afunilamento com o aumento de H . Já as fases com períodos ímpares aumentam suas larguras de estabilidade com o crescimento de H . Observemos, por exemplo, o que acontece com a fase $3/16$. Para $H = 0$ esta fase situa-se no intervalo de temperatura $3.5 \lesssim T \lesssim 3.65$, conforme mostra a figura 6.3. Com o crescimento de H observamos o afunilamento deste intervalo, até que para $H \approx 0.002$ este processo de afunilamento é interrompido. Para $H \gtrsim 0.002$ o intervalo de temperatura onde a fase $3/16$ é estável é muito estreito e, aparentemente, não sofre alterações perceptíveis com o crescimento de H . Posteriormente, quando examinarmos regiões do diagrama de fases 6.19 onde o valor do campo é maior, veremos que o intervalo de temperatura onde a fase $3/16$ é estável tornar-se-á visivelmente mais largo. Observações semelhantes àsquelas feitas para a fase $3/16$ são também válidas para a fase $5/28$ na figura 6.3. Assim para $H = 0$ a fase $5/28$ estende-se ao longo do intervalo $4.15 \lesssim T \lesssim 4.23$. Novamente, como acontece com a fase $3/16$, para valores crescentes de H este intervalo vai encolhendo até que para $H \approx 0.0005$, este processo é cessado e a partir deste valor de campo apresenta uma largura aparentemente uniforme.

Figura 6.3: Ampliação do diagrama de fases com $p = 0.6$ para a região de campos baixos, destacando os comportamentos de fases de períodos pares e ímpares, indicadas na figura, frente ao aumento do campo. Os rótulos A e B, após o número de onda, indicam os tipos de estruturas associadas às fases para valores dados de H , T ou p , conforme é explicado no texto.

Comportamento inverso ao apresentado pelas fases $3/16$ e $5/28$ é o que observamos para as fases como a $1/5$, $2/11$ e $3/17$ na figura 6.3. Estas fases tendem a aumentar suas larguras de estabilidade ao longo do eixo T à medida que o campo aumenta. No entanto, para campos baixos, estas fases não apresentam qualquer mudança brusca de comportamento no que diz respeito às suas larguras de estabilidade, ou seja, para este regime de campo apresentam sempre uma expansão em T . Entretanto, se examinarmos regiões com campos bastante altos ($H \approx 0.15$ no diagrama de fases 6.19), veremos que a fase $2/11$ passará por processo semelhante ao apresentados

pelas fases 3/16 e 5/28 que, como veremos a seguir, indicam transições entre fases de mesmo período mas com estrutura de magnetização diferente.

Ao analisarmos as fronteiras das fases 3/16 e 5/28 para campos fracos e crescentes, foram encontradas mudanças bem drásticas na região de estabilidade destas fases para $H \approx 0.002$ e $H \approx 0.0005$, respectivamente. Estas mudanças associadas a estes valores de campo marcam a existência de transições entre fases diferentes com mesmo número de onda. Assim para $H \lesssim 0.002$ a fase 3/16, rotulada como (3/16)A nesta região da figura 6.3, apresenta uma estrutura de magnetização da forma $\langle \bar{2}3\bar{3} \rangle$, com o perfil de magnetização mostrado na figura 6.4-a. Para $H \gtrsim 0.002$ a fase 3/16, agora rotulada por (3/16)B, apresenta uma estrutura de magnetização da forma $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{3}\bar{3} \rangle$ e o perfil de magnetização mostrado na figura 6.4-b. Como veremos mais adiante, esta última estrutura permanece estável até valores de campo tão altos quanto $H \approx 0.15$, no diagrama de fases 6.19. Acima deste valor de campo a fase 3/16, agora rotulada por (3/16)C, apresenta a estrutura de magnetização $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{2}4 \rangle$ com perfil de magnetização dado na figura 6.4-c. Para a fase 5/28, da mesma forma que para a fase 3/16, o valor do campo $H \approx 0.0005$ marca uma transição entre a fase (5/28)A, com estrutura $\langle \bar{2}3\bar{3}\bar{3}\bar{3} \rangle$, e a fase (5/28)B, apresentando estrutura $\langle \bar{2}3\bar{3}\bar{3}\bar{3}\bar{2}3\bar{3}\bar{3} \rangle$. As transições entre fases observadas para $H \approx 0.002$, envolvendo as fases (3/16)A e (3/16)B, e para $H \approx 0.0005$, envolvendo (5/28)A e (5/28)B são transições de primeira ordem, conforme mostra o gráfico da energia em função do campo. Para as fases (3/16)A e (3/16)B o gráfico da energia em função do campo é mostrado na figura 6.5.

Os resultados discutidos acima, envolvendo por exemplo a fase 3/16, concordam com os resultados apresentados no capítulo 5 para os diagramas de fases p — T. Lá as transições entre as fases de mesmo período, para algumas fases, estão associadas à presença de estrangulamentos ao longo das fronteiras de fases, conforme ilustrado na figura 6.6. Nesta figura

Figura 6.4: Estrutura de magnetização da fase 3/16 para três regiões do diagrama de fases com $p = 0.6$ com os valores do campo indicados. a) A estrutura $\langle \bar{2}3\bar{3} \rangle$ existe para campos fracos ($H \lesssim 0.002$). b) A estrutura $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{3}3 \rangle$ existe para campos intermediários ($0.002 \lesssim H \lesssim 0.15$). c) A estrutura $\langle \bar{2}3\bar{2}3\bar{2}4 \rangle$ é estável para campos fortes ($H \gtrsim 0.15$).

é observado o estrangulamento da fronteira da fase 3/16 para $H = 0.02$.

Os diagramas de fases 6.20 (com $p = 0.61$), 6.21 (com $p = 0.62$) e 6.22 (com $p = 0.65$) apresentam o mesmo quadro descrito acima para a fase 3/16. Nestes últimos diagramas de fases o intervalo de temperatura para $H = 0$ é bem maior que no caso discutido anteriormente para $p = 0.6$. Este mesmo comportamento apresentado para a fase 3/16 é visto para outras fases de períodos pares.

Figura 6.5: Os gráficos das energias das fases $(3/16)A$ (linha cheia) e $(3/16)B$ (linha pontilhada) em função do campo para para valores de T e p indicados na figura.

6.4 Baixas temperaturas e vizinhança do ponto de multifases

Para $H \geq 0$ o estado fundamental do diagrama de fases $H - T$ é formado somente pela fase paramagnética para $p < 1/2$. Acima deste valor de p o estado fundamental consiste da fase $\langle \bar{2}2 \rangle$ para

$$H < 2p - 1, \quad (6.9)$$

e da fase paramagnética para

Figura 6.6: Detalhe da fase 3/16 no diagrama de fases $p - T$ para os valores de H aí indicados. Os estrangulamentos das fronteiras da fase, indicam transições entre fases diferentes e de mesmo período.

$$H > 2p - 1. \quad (6.10)$$

Os pontos sobre a linha

$$H = 2p - 1, \quad (6.11)$$

são pontos de multifases de onde saem fases em forma de leque. Diferentemente do ponto de multifases nos diagramas de fases $p - T$ a campo nulo onde a fase 1/6 é a fase central e faz transição com a fase ferromagnética,

nos diagramas de fases H — T a p constante a fase central é a fase 1/5, que faz transição com a fase paramagnética. As outras fases que nascem deste ponto são as fases 2/9, 3/14, etc. Não podemos afirmar que todas as fases, com períodos pares e ímpares, são estáveis para temperaturas muito baixas (próximo de zero). Encontramos, no entanto, uma largura de estabilidade para fases com períodos pares e ímpares acima de um certo valor de temperatura. A região próximo ao ponto de multifases é dominada, até para valores de p bastante elevados ($p \approx 1$), pela fase 1/5. Para valores ainda mais altos de p a fase dominante é a 2/9.

Um comportamento observado em outros pontos dos diagramas de fases e que também são observados no ponto de multifases refere-se às mudanças nas estruturas das fases para aquelas fases de períodos pares. Para campos baixos o suficiente as estruturas das fases na vizinhança do ponto de multifases tem a mesma estrutura simétrica que as fases a campo nulo, isto é, são da forma

$$\langle 2^m 3 \rangle, \quad (6.12)$$

enquanto acima de um certo valor de campo as estruturas tornam-se mais assimétricas. A fase 3/14 a campo nulo e campos baixos apresenta a estrutura $\langle \bar{2}2\bar{3} \rangle$ enquanto para campos mais altos pode ser encontrado como sendo da forma $\langle \bar{2}3\bar{2}2\bar{2}3 \rangle$. As fases assimétricas tem a forma

$$\langle 32^m 32^n \rangle, \quad (6.13)$$

com m e n inteiros.

6.5 Temperaturas intermediárias

Nos nossos diagramas de fases, a região de temperaturas intermediárias é, em geral, onde são encontrados as conformações de fases mais interessantes. Para a análise desta região consideremos, por exemplo, o diagrama de fases 6.19 com $p = 0.6$. Neste diagrama de fases, para o intervalo de temperaturas $4.5 \lesssim T \lesssim 5.0$, encontramos quatro regiões com conformações de fases que merecem uma análise mais detalhada. As duas primeiras são as regiões envolvendo as seqüências de transições entre a fase $1/5$ e as fases $(2/11)A$ ou $(2/11)B$ e que estão indicadas na figura 6.7 pelos retângulos rotulados por 1 e 1' como seus representantes. A segunda região é a indicada pelo retângulo rotulado por 2 na mesma figura e que envolve transições entre as fases $(2/11)A$ ou $(2/11)B$ e $1/5$ e suas combinações. A terceira região, ainda na figura 6.7, é a indicada por 3. Esta parece ser uma região de onde saem fases com períodos extremamente longos.

Consideremos em detalhe o que é observado nas regiões rotuladas por 1 e 1' na figura 6.7, e que estão ampliadas na figura 6.8. As transições envolvendo as fases $1/5$ e $2/11$ obedecem, dentro da precisão numérica usada, a seguinte construção

$2/11$				$1/5$			
$2/11$				$3/16$	$1/5$		
$2/11$	$5/27$	$3/16$		$4/21$	$1/5$		
$2/11$	$7/38$	$5/27$	$8/43$	$3/16$	$7/37$	$4/21$	$5/26$ $1/5$

que, como visto na seção 2.3, parece constituir uma hierarquia diatônica. Determinamos esta fronteira da seguinte maneira. Consideramos inicial-

Figura 6.7: Região ampliada correspondente ao intervalo de temperaturas intermediárias no diagrama de fases com $p = 0.6$. As regiões 1 e 1', as regiões de transições quase-contínuas, 2, região domínio do ponto Υ e 3 é uma região de fases com períodos muito longos.

mente a configuração de fases constituída pelas fases adjacentes $1/5$ e $2/11$. Com o intuito de facilitar a nossa exposição chamaremos a estrutura de magnetização da fase $(2/11)A$ de α , e da fase $1/5$ de γ . A combinação das estruturas α e γ resulta na estrutura $\alpha\gamma$, que é a fase $3/16$. Testando a estabilidade da fronteira entre as fases α e γ com relação à fase $\alpha\gamma$ é verificado que a fronteira $\alpha - \gamma$ abre-se, formando duas novas fronteiras: $\alpha - \alpha\gamma$ e $\alpha\gamma - \gamma$. Testando novamente estas duas fronteiras frente às novas combinações, $\alpha^2\gamma$ e $\alpha\gamma^2$, verificamos que elas sofrem nova separação levando ao aparecimento de novas fronteiras. Se este processo for continuado indefinidamente obteremos uma hierarquia diatômica. Tudo o que se passa na região 1 é válido para a região 1'. Apenas a fase $(2/11)A$ é substituída pela fase

(2/11)B, que possui estrutura de magnetização diferente. Chamaremos a estrutura de magnetização desta fase de β . De fato, na região rotulada por 1 a estrutura de magnetização da fase 2/11 é a estrutura $\langle \bar{2}3\bar{3}3 \rangle$, enquanto na região 1' é a $\langle \bar{2}3\bar{2}4 \rangle$. O encontro destas duas conformações de fases resulta na conformação vista na região rotulada por 2, com a organização das fases apresentando um grau de complexidade muito maior que o apresentado pelas regiões 1 e 1', conforme descrevemos na sequência.

A região 2 está mostrada de forma ampliada na figura 6.10. Desta figura é aparente que as fases combinam-se formando uma estrutura que Bassler e Griffiths chamaram de região de influência do ponto Υ . A maneira como as fronteiras entre as fases para esta região são determinadas segue, essencialmente, os passos descritos anteriormente para a transição singular-contínua entre a fase 1/5 e 2/11. Para facilitar nosso entendimento de como a região 2 é formada e para simplificar o manuseio dos rótulos das fases durante o processo de ramificação e combinação das estruturas adotaremos a seguinte estratégia: (a) faremos uma exposição quadro-a-quadro, mostrando o processo de separação dos contornos entre as fases, como no caso anterior e (b) as três fases adjacentes básicas envolvidas no processo, (2/11)A, (2/11)B e 1/5 serão abreviadas pelos rótulos α , β e γ respectivamente. Ou mais explicitamente

$$\begin{aligned} (2/11)A & \text{ com estrutura } \langle 2333 \rangle \rightarrow \alpha \\ (2/11)B & \text{ com estrutura } \langle 2324 \rangle \rightarrow \beta \\ 1/5 & \text{ com estrutura } \langle 23 \rangle \rightarrow \gamma. \end{aligned} \quad (6.14)$$

A figura 6.9-a mostra a configuração inicial de como estas fases estão dispostas. Nela são vistas as fronteiras α - β , α - γ e β - γ . Testando a consistência destas fronteiras verificamos que a fronteira α - β não se separa quando consideramos fases intervenientes resultantes da combinação das fases α e β . Já

Figura 6.8: (a) Ampliação da região rotulada por 1 na figura 1.7 onde ocorrem as transições entre a fase $1/5$ e $(2/11)A$. (b) Ampliação da região delimitada pelo retângulo em (a). (c) Ampliação da região delimitada pelo retângulo em (b).

as fronteiras α - γ e β - γ são separadas quando consideramos as estruturas $\alpha\gamma$ e $\beta\gamma$. Este fato é mostrado na figura 6.9-b. A combinação das fases adjacentes na região delimitada pelo retângulo na figura 6.9-b resulta no aparecimento da estrutura $\alpha\beta\gamma$ mostrada na figura 6.9-c. Novas combinações de estruturas, resultando em novas separações de fronteiras resultam no quadro mostrado na figura 6.9-d.

O mecanismo de como as fases vão surgindo no processo acima descrito e que resultam na figura 6.10 (ampliação da região 2 na figura 6.7) é consistente com a descrição do ponto ípsilon (Υ) dada por Bassler, Sasaki e Griffiths (1991). Pontos Υ , até agora, só haviam sido observados para diagramas de fases do estado fundamental ($T = 0$) de alguns modelos, como

Figura 6.9: (a) Fases adjacentes na configuração inicial. (b) Separação das fronteiras α - γ e β - γ devido à presença das fases $\alpha\gamma$ e $\beta\gamma$. (c) Aparecimento da fase $\alpha\beta\gamma$ resultado da combinação entre as fases $\alpha\gamma$ e β ou α e $\beta\gamma$. (d) Novos desdobramentos das fronteiras de fases. Desta figura observamos que as fronteiras $\alpha - \beta$, $\alpha\gamma - \beta\gamma$, $\alpha\gamma^2 - \beta\gamma^2$, $\dots$ não são separadas pelas combinações entre fases adjacentes. O significado no diagrama de fases $H - T$ dos rótulos α , β e γ está explicado no texto.

o modelo FK de dupla parábola estudado por Bassler e Griffiths (1994) e modelos XY (Sasaki, 1992 e Micheletti, Seno e Yeomans, 1995). Estudando um modelo unidimensional de spins de Ising que leva em conta um termo de acoplamento spin-rede e com a presença de campo, Ishimura (1985) determina o diagrama de fases no espaço de parâmetros $H - k$, onde k é o parâmetro de competição do modelo. Neste diagrama de fases estão presentes conformações de fases que lembram aquelas apresentadas acima, nos diagramas de fases $H - T$ a p constante.

Figura 6.10: Provável candidato a ponto ípsilon.

A terceira região, rotulada por 3 na figura 6.7 situa-se na parte terminal superior da linha de transição $(2/11)A - (2/11)B$. As fases de períodos mais longos são atraídas para esta região conforme se observa desta figura. É interessante observá-la para diferentes valores do parâmetro p . Assim nas figuras 6.18-6.21, para $p = 0.59$ a $p = 0.62$, respectivamente, vemos o processo de destruição da linha de transição $(2/11)A - (2/11)B$ conforme p aumenta. Em $p = 0.62$, figura 6.21 as fases $(2/11)A$ e $(2/11)B$ já estão bem separadas. Este processo iniciado antes de $p = 0.59$ e que resulta na conformação de fases mostrada em 6.21 merece uma análise mais cuidadosa pelas propriedades especiais que apresenta. Concentremos nossa atenção no diagrama de fases 6.21 na região onde parece ocorrer uma transição direta (sem fases intermediárias) entre a fase $(2/11)A$ e $(3/16)B$. Neste ponto ve-

mos que fases como a $5/27$, $7/38$, $\dots$ parecem estar entrando de um lado da linha de transição $(2/11)A - (3/16)B$ e reaparecendo do outro lado. Esta situação guarda semelhanças com uma outra, descrita em Bassler e Griffiths (1994) nos diagramas de fases $\delta - \mu$ para K constante do modelo FK com dupla parábola e chamada por eles de ponto superdegenerado (SDP).

A análise levada a cabo para temperaturas intermediárias no diagrama de fases com $p = 0.6$, (figura 6.19) e onde basicamente estão envolvidas as fases $(2/11)A$, $(2/11)B$, $1/5$ e combinações pode ser estendida para diagramas de fases com p nas vizinhanças de $p = 0.55$, (figura 6.17). Nestes diagramas de fases trocamos $(2/11)A$ por $(1/6)A$ e $(2/11)B$ por $(1/6)B$. O mesmo pode ser feito com a fase $3/17$ nesta mesma vizinhança. A fase $3/16$ no diagrama de fases 6.22 com $p = 0.65$, aparentemente, parece seguir os mesmos passos observados para a fase $2/11$ no diagrama de fases 6.19 com $p = 0.6$.

A identificação de conformações de fases como aquelas apresentadas na vizinhança de pontos Υ dependerá do valor de p escolhido. Analisando os diagramas de fases $H - T$ juntamente com os diagramas de fases $p - T$ identificaremos várias situações que são favoráveis ao surgimento das estruturas descritas acima. Nos diagramas de fases com p nas vizinhanças de $p = 0.60$ estas estruturas são vistas com mais facilidade.

6.6 Altas temperaturas

Observamos das figuras 6.13 e 6.18–6.21 que a região de altas temperaturas caracteriza-se, principalmente, pela existência de fases de períodos longos. A natureza das transições entre as fases, que nesta região parecem ser do tipo comensurável-incomensurável, é bem diferente daquela observada para temperaturas mais baixas, onde predominam transições de primeira ordem e seqüência de transições de primeira ordem. Citamos os diagramas de

fases acima como exemplos, por serem os diagramas de fases melhor trabalhados por nós e onde os detalhes que passaremos a discutir parece ser mais fáceis de visualizar. Assim nossa análise da região de altas temperaturas será feita considerando o que ocorre no diagrama de fases 6.19 para $T \gtrsim 5.0$. Esta região é mostrada na figura 6.11. A temperatura acima da qual consideramos comportamento como sendo de altas temperaturas varia de diagrama de fases para diagrama de fases.

Figura 6.11: Diagrama de fases para $p = 0.6$ mostrando a região de altas temperaturas ampliada.

Nos diagramas de fases com $p \approx 0.6$, por exemplo os diagramas 6.18 e 6.19, observamos que a região de altas temperaturas é ocupada por fases que saem, para campos altos, da vizinhança da linha de transição entre a fase (2/11)B e 5/28, sobre a linha para-modulada. Dependendo do

período da fase observa-se dois comportamentos. Existem as fases, como a 11/61 no diagrama de fases 6.19, que à medida que aumenta a temperatura se deslocam para o interior da região com fases moduladas, isto é, a região de campos mais baixos, mas que a partir de um certo valor de temperatura ($T \approx 5.2$) se voltam para a região de campos altos e fazem transição com a fase paramagnética através da linha de primeira ordem. Este é também o caso da fase 73/402, que apresentam o mesmo comportamento que a 11/61. O outro caso é o de fases como a 13/72 no diagrama 6.18, que atingem o eixo $H = 0$ num dado valor de temperatura.

A maioria das transições entre as fases moduladas, nesta região, parece ser do tipo comensurável-incomensurável. No entanto a transição das fases moduladas com a fase 2/11, acontecendo para campos moderados ($H \lesssim 0.12$ no diagrama de fases com $p = 0.6$), apresenta um caráter especial. A sequência de transição entre a fase 2/11 e a 5/28 pode ser vista

$$5/28, 7/39, 9/50, 11/61, 13/72, 21/116, \dots, 73/402, \dots, 2/11, \quad (6.15)$$

ou seja, as fases aparecendo entre a fase 5/28 e a fase 2/11 apresentam um cenário que lembram transições obedecendo a seguinte construção

$$\begin{array}{cccc}
 & & A & B \\
 & & A & AB & B \\
 & A & AB & AB^2 & B \\
 A & AB & AB^2 & AB^3B \\
 & & & \dots
 \end{array} \quad (6.16)$$

que caracteriza a existência de uma transição quase-contínua, nos moldes do que observamos no diagrama de fases $p - T$ a campo nulo ao longo da fronteira de transição das fases moduladas com a fase 1/6. O que observamos

para o diagrama de fases 6.19 na região de altas temperaturas é observado sem muitas alterações no diagrama de fases 6.18 com $p = 0.59$, apenas a conformação de fases será diferente. Já para os diagramas de fases com $p = 0.61$ e 0.62 o cenário parece diferir bastante. Isto é apenas aparente. Olhando esta região nos diagramas de fases $p - T$ a H constante, verificamos que apenas os valores de temperatura e as fases envolvidas é que sofreram alterações com a variação do parâmetro p .

Figura 6.12: diagrama de fases para $p = 0.4$

Figura 6.13: diagrama de fases para $p = 0.45$

Figura 6.14: diagrama de fases para $p = 0.5$

Figura 6.15: diagrama de fases para $p = 0.51$

Figura 6.16: diagrama de fases para $p = 0.52$

Figura 6.17: diagrama de fases para $p = 0.55$

Figura 6.18: diagrama de fases para $p = 0.59$

Figura 6.19: diagrama de fases para $p = 0.6$

Figura 6.20: diagrama de fases para $p = 0.61$

Figura 6.21: diagrama de fases para $p = 0.62$

Figura 6.22: diagrama de fases para $p = 0.65$

Figura 6.23: diagrama de fases para $p = 0.8$

Figura 6.24: diagrama de fases para $p = 1.0$

Figura 6.25: diagrama de fases para $p = 4.0$

Capítulo 7

Modelo ANNNI com spin $S \geq 1$ e campo cristalino a $T = 0$

O modelo ANNNI de spin $1/2$ consegue explicar muitas das propriedades observadas experimentalmente para diversas classes de materiais. Um exemplo típico são os resultados para o composto CeSb (Rossat-Mignod, Burlet, Bartholin, Vogt e Lagnier, 1980), que foram explicados com razoável sucesso por Pokrovski e Uimin (1982) supondo que as interações entre spins do mesmo plano eram muito mais fortes que as interações entre sítios pertencentes a planos diferentes. O aspecto do trabalho de Rossat-Mignod, Burlet, Bartholin, Vogt e Lagnier (1980) que não foi explicado pelo modelo ANNNI de spin $1/2$ é a presença de estruturas de magnetização nula, isto é, fases parcialmente desordenadas. O mesmo comportamento é observado experimentalmente para o composto PrCo_2Si_2 (Takeda, Konishi, Deguchi, Iwata e Shigeoka, 1992).

Resultados de campo médio para o modelo ANNNI de spin $1/2$, prevendo a existência de fases parcialmente desordenadas para $J_0 \ll J_1$, foram relatados por Nakanishi (1989) e Yokoi (1992). Nakanishi (1989) em seu trabalho objetivava explicar as propriedades determinadas experimentalmente para o CeSb. Tratamento de campo médio mais elaborado (Nakanishi, 1992) e simulação Monte Carlo (Rothaus e Selke, 1993) sug-

erem que o modelo ANNNI real de spin $1/2$ não deve apresentar camadas com magnetização nula. O aparecimento de camadas com magnetização nula é possivelmente uma deficiência da aproximação de campo médio para tratar situações em que $J_0 \ll J_1$.

Figura 7.1: (a) Estado fundamental do modelo BEG modificado e (b) diagrama de fases $p - T$ na aproximação de campo médio (Jensen, Penson, Bennemann, 1987).

Recentemente estudos de modelos com spins $S \geq 1$ e termos de campo cristalino ou de interações entre 3 ou mais corpos foram realizados por diversos autores. Nestes sistemas, considerando S inteiro, existe a possibilidade de fases com planos de magnetização nula. Termos quadráticos ou de interações envolvendo mais de dois spins aparecem, ou devido a efeitos de magnetostricção ou a efeitos de tratamentos perturbativos (Idogaki e Uryû, 1985). Assim ao considerarmos termos hamiltonianos do tipo S_i^2 , $S_i^2 S_j^2$, $S_i S_j^2 S_k$, etc., onde $S_i = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$, fases parcialmente desordenadas podem se tornar estáveis.

Jensen, Penson e Bennemann (1987) consideraram uma variante do modelo BEG (Blume, Emery e Griffiths, 1971) dado pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J_0 \sum_{\langle r, r' \rangle} S_r S_{r'} - \sum_r [J_1 S_r S_{r+z} + J_2 S_r S_{r+2z} - K S_r^2 (1 - S_{r+z})^2 (1 - S_r)^2 S_{r+2z}^2]. \quad (7.1)$$

Na equação acima a primeira soma é feita sobre pares de spins primeiros vizinhos nos planos perpendiculares à direção axial e z é o vetor unitário na direção axial. Este estudo foi uma tentativa de explicar alguns resultados experimentais obtidos da análise do composto $\text{Ce}_3\text{Al}_{11}$ por Chouteau, Flouquet, Keradec, Palleau, Peyrard e Tournier (1978), onde foi observado a existência de um comportamento reentrante. O estado fundamental para o modelo descrito por (7.1) está mostrado na figura 7.1-a. O diagrama de fases para este mesmo modelo na aproximação de campo médio para $K = 1.8$, está mostrado na figura 7.1-b. O comportamento reentrante observado por Chouteau, Flouquet, Keradec, Palleau, Peyrard e Tournier (1978) para o composto $\text{Ce}_3\text{Al}_{11}$ é reproduzido pela fronteira entre as fases ferromagnética e $1/6$ para um certo intervalo do parâmetro $p = -J_2/J_1$.

Muraoka, Ochiai, Idogaki e Uryû (1993), Muraoka, Ochiai e Idogaki (1994) e Muraoka, Oda, Tucker e Idogaki (1996) estudaram o sistemas de spins $S > 1/2$ descritos pelo hamiltoniano geral

$$\mathcal{H} = -J_0 \sum_{\langle r, r' \rangle} S_r S_{r'} - \sum_r (J_1 S_r S_{r+z} + J_2 S_r S_{r+2z} + J'_2 S_r^2 S_{r+2z}^2 + J_3 S_r S_{r+z}^2 S_{r+2z} + H S_r). \quad (7.2)$$

Quando $J'_2 = J_3 = 0$ o modelo é chamado por estes autores de modelo [2-2], quando $J_2 = J_3 = 0$ de modelo [2-4], e ainda quando $J_2 = J'_2 = 0$, de modelo

[3-4]. Muraoka, Ochiai, Idogaki e Uryû (1993) consideraram os modelos [2-2] e [3-4] com $S = 1$ e $H = 0$, determinando seus estados fundamentais através da técnica de matriz de transferência e esboçando algumas linhas de transições dos seus diagramas de fases $p - T$ através de simulação Monte Carlo. O parâmetro p mede a competição entre as interações, sendo definido por $-J_2/J_1$ para o modelo [2-2] e por $-J_3/J_1$ para o modelo [3-4]. O diagrama de fases para o estado fundamental para estes modelos é o mesmo que para o modelo ANNNI, isto é, apresentam a transição da fase ferromagnética para a fase $\langle 2 \rangle$ em $p = 1/2$. Posteriormente, Muraoka, Ochiai e Idogaki (1994) levantaram o diagrama de fases $p - T$ para os modelos [2-2] e [3-4] usando a aproximação de campo médio. Verificaram que o diagrama de fases para o modelo [2-2] é semelhante ao do modelo ANNNI e que para o modelo [3-4] este diagrama de fases apresenta o mesmo comportamento reentrante encontrado por Jensen, Penson e Bennemann (1987), sem a presença de fases parcialmente desordenadas. Os modelos [2-2], [2-4] e [3-4] para $H \neq 0$ foram estudados por Muraoka, Oda, Tucker e Idogaki (1996) que levantaram os diagramas de fases $p - H$ ($p = -J_2/J_1$) para $T = 0$. Os diagramas de fases do modelo [2-2] são consistentes com os diagramas de fases de Horiguchi e Morita (1972).

O estudo de sistemas com spins $S > 1/2$ e com interações competitivas já foram considerados em outras situações e por outros autores. Cadorin (1993) considerou o sistema de spins $S \geq 1$ com termo de campo cristalino $\mathcal{D} > 0$, dado pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J_0 \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - \sum_{\mathbf{r}} (J_1 S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}+\hat{z}} + J_2 S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}+2\hat{z}} - \mathcal{D} S_{\mathbf{r}}^2). \quad (7.3)$$

J_0 , J_1 e J_2 são definidos como em (3.1). Em seu trabalho Cadorin (1993) levantou o diagrama de fases do estado fundamental no espaço de parâmetros

$p - D$ exatamente (O parâmetro p é definido por $-J_2/J_1$), e os diagramas de fases $p - T$ para $D = 2.2$ e $D - T$ para $p = 0.5$ usando a aproximação de campo médio. Todos os diagramas de fases foram levantados para $S = 1$. Nestes diagramas de fases foram determinadas apenas as fronteiras das fases ferromagnética, $1/6$ e $1/4$. Foi determinado que a fase $1/6$ para temperaturas mais baixas é parcialmente desordenada. Nosso trabalho, neste capítulo, é uma extensão do trabalho de Cadorin (1993). Estaremos interessados em caracterizar o estado fundamental para este modelo quando variamos o tamanho do spin. Levantaremos o diagrama de fases $p - D$ para diversos valores de S .

Trabalhos anteriores a estes, considerando sistemas competitivos com S geral, são aqueles publicados por Katsura e Narita (1973) que consideram sistemas de spins $S = 1$ na presença de campo e interações até segundos vizinhos. Outras contribuições para a elucidação das propriedades de sistemas uni-dimensionais de spins com interações competitivas são dadas no trabalho de Stepheson (1970).

7.1 Definição do modelo

Considere o hamiltoniano (7.3), definido numa rede cúbica simples com M spins nos planos perpendiculares à direção axial e L spins na direção axial. Como as interações intraplanares são ferromagnéticas ($J_0 > 0$), a $T = 0$ todos os spins no i -ésimo plano estão num mesmo estado. A energia do sistema será, então, dada por

$$E = \sum_i -J_0 \frac{4M}{2} S_i^2 - \sum_i (J_1 S_i S_{i+1} + J_2 S_i S_{i+2} - D S_i^2) \quad (7.4)$$

$$= -MS^2 \sum_i (J_1 \frac{S_i S_{i+1}}{S^2} + J_2 \frac{S_i S_{i+2}}{S^2} - D \frac{S_i^2}{S^2}) \quad (7.5)$$

$$= -MS^2 E(S_i). \quad (7.6)$$

onde

$$D = \mathcal{D} - 2J_0M, \quad (7.7)$$

e

$$E = \sum_i (J_1 s_i s_{i+1} + J_2 s_i s_{i+2} - D s_i^2) \quad (7.8)$$

A soma $\sum_i$ é realizada sobre os L planos. Para um dado spin S as variáveis s_i assumem os valores discretos dados por

$$s_i = \frac{S_i}{S}, \quad S_i = -S, -S+1, \dots, S-1, S. \quad (7.9)$$

Da equação (7.8) para a energia, vemos que o sistema pode ser tratado como uma cadeia unidimensional com spins S interagindo entre primeiros vizinhos com interação J_1 e entre segundos vizinhos com interação J_2 na presença de um campo cristalino D , como ilustrado na figura 7.2. Definindo

$$p = -J_2/J_1 \quad (7.10)$$

como o parâmetro que mede a competição entre a interação entre primeiros e segundos vizinhos temos

$$E = \sum_i (-s_i s_{i+1} + p s_i s_{i+2} + D s_i^2), \quad (7.11)$$

Figura 7.2: Representação esquemática do modelo de spins S envolvendo interações até segundos vizinhos (Selke, 1992).

onde tomamos $J_1 = 1$. Observamos que a equação (7.11), de maneira semelhante ao que foi feito para a energia livre na aproximação de campo médio (3.17), ainda pode ser escrita na forma

$$E = \sum_i [W_1(s_{i+1} - s_i) + W_2(s_{i+2} - s_i) + V(s_i)] \quad (7.12)$$

onde

$$W_1(s_{i+1} - s_i) = \frac{1}{2}(s_{i+1} - s_i)^2 \quad (7.13)$$

$$(7.14)$$

$$W_2(s_{i+2} - s_i) = -\frac{1}{2}p(s_{i+2} - s_i)^2, \quad (7.15)$$

são equivalentes às interações entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, para partículas nos modelos FK e

$$V(s_i) = (p + D - 1)s_i^2 \quad (7.16)$$

é equivalente ao potencial externo. A vantagem, como já frisado anteriormente, de se colocar (7.11) na forma (7.12) é a possibilidade de aplicar

diretamente o formalismo dos potenciais efetivos. As configurações s_i que minimizam E formam estruturas moduladas com diferentes períodos de modulação dependendo dos valores de p e D .

7.2 Métodos numéricos

Queremos determinar os diagramas de fases $p - D$ do modelo (7.8) a $T = 0$ para diferentes valores de S . Inicialmente fizemos uso da técnica de potenciais efetivos para construir diagramas de fases aproximados. Estes diagramas de fases foram construídos fazendo uma varredura no espaço de parâmetros $p - D$. O tamanho do passo usado na discretização dos parâmetros p e D foi de 10^{-2} . Nos cálculos dos potenciais efetivos R usamos grades de tamanhos $2S + 1$ para S inteiros e $2S$ para S semi-inteiros. A precisão ϵ para o cálculo de R foi de 10^{-4} . Com isso conseguimos estabelecer de maneira aproximada a região de estabilidade das principais fases. A região de estabilidade, a que nos referimos, para uma dada fase é aquela região do diagrama de fases em que a energia desta fase é a menor dentre todas as fases presentes no diagrama de fases. As fases detectadas foram aquelas com largura de estabilidade maior que o passo usado para discretizar os parâmetros p e D . Junto com o mapeamento das fases, também, conseguimos informações sobre os seus perfis de magnetização. Estes diagramas de fases aproximados têm sua utilidade uma vez que servem de orientação para o refinamento dos diagramas de fases como será discutido na seqüência.

O refinamento dos diagramas de fases $p - D$ pode ser feita usando a técnica de potenciais efetivos em combinação com a busca binária, usando como critério de identificação da região de estabilidade de uma fase o seu período. No caso em que precisamos identificar a fronteira entre fases de mesmo período este critério deve ser revisto para levar em conta outras informações, como por exemplo, a magnetização. As fronteiras de fases

podem ser determinadas com grande precisão desde que o potencial efetivo R seja calculado com a precisão da máquina. Entretanto com o aumento do tamanho do spin este cálculo pode vir a tornar-se demorado, inviabilizando o uso deste procedimento.

Um procedimento alternativo àquele discutido acima, foi implementado observando que a energia dada pela expressão (7.8) é uma função linear dos parâmetros p e D . Além disso, a região de estabilidade da fase é determinada pelo seu perfil de magnetização, que não se altera para toda a sua região de estabilidade no diagrama de fases. Explorando estes fatos podemos determinar mais rapidamente as fronteiras entre as fases nos diagramas de fases $p - D$. A energia por spin para uma fase de período Q é dada por

$$\begin{aligned} \epsilon_Q &= \frac{1}{Q} \sum_{i=1}^Q [s_i s_{i+1} + p s_i s_{i+2} + D s_i^2] \\ &= -\frac{1}{Q} \left(\sum_{i=1}^Q s_i s_{i+1} \right) + \frac{p}{Q} \left(\sum_{i=1}^Q s_i s_{i+2} \right) + \frac{D}{Q} \left(\sum_{i=1}^Q s_i^2 \right). \end{aligned} \quad (7.17)$$

Escrevendo

$$a = \sum_{i=1}^Q s_i s_{i+1}, \quad (7.18)$$

$$b = \sum_{i=1}^Q s_i s_{i+2}, \quad (7.19)$$

$$c = \sum_{i=1}^Q s_i^2, \quad (7.20)$$

a expressão para a energia por spin (7.17) toma a forma

$$\epsilon_Q(p, D) = \frac{1}{Q}(-a + bp + cD), \quad (7.21)$$

onde a , b e c são constantes. Assim, a energia é uma função linear dos parâmetros p e D . As fronteiras entre as fases 1 e 2 são então determinadas igualando-se as energias dessas fases

$$\frac{1}{Q_1}(-a_1 + b_1p + c_1D) = \frac{1}{Q_2}(-a_2 + b_2p + c_2D), \quad (7.22)$$

ou seja

$$D = A + Bp, \quad (7.23)$$

onde

$$A = \frac{a_1 - a_2Q_1/Q_2}{c_1 - c_2Q_1/Q_2}, \quad (7.24)$$

e

$$B = \frac{b_2Q_1/Q_2 - b_1}{c_1 - c_2Q_1/Q_2}. \quad (7.25)$$

Desta forma podemos determinar todas as equações das retas separando pares de fases conhecidas do diagrama de fases. O passo seguinte consiste

em determinar os pontos de intersecção entre estas retas e assim, finalmente, obter a região de estabilidade das fases. Os diagramas de fases são assim formados por segmentos de retas, com a região de estabilidade de uma dada fase formando um polígono convexo. A presença de uma fase onde o perímetro da sua região de estabilidade é um polígono não-convexo indica a possibilidade de existência de uma nova linha de transição, conforme discutido em Sasaki (1992). A utilização do procedimento acima, explorando a linearidade da energia nos parâmetros p e D vai se tornando cada vez mais trabalhoso à medida que consideramos diagramas de fases com números de fases cada vez maiores.

Figura 7.3: Estruturas de magnetização para a fase $1/5$ do diagrama de fases com $S=5/2$.

Figura 7.4: Estruturas de magnetização para a fase 1/5 do diagrama de fases com $S = 3$.

7.3 Notação para as fases

A distinção entre fases nos capítulos anteriores foi feita através do número de onda q ou da estrutura de bandas do perfil de magnetização, como discutido na seção 3.3. Neste modelo, estas rotulações são insuficientes e devemos considerar os próprios perfis de magnetização. Tomemos por exemplo a fase 1/5. Para $S = 5/2$, a fase 1/5 pode apresentar 4 estruturas de magnetizações, mostradas na figura 7.3. Os perfis de magnetização podem ser indicados sob a forma

$$(\bar{1}, \bar{1}, 1/5, 1, 3/5)$$

$(\bar{1}, \bar{1}, 1/5, 1, 3/5)$	$\langle 23 \rangle A$ ou $(1/5)A$
$(\bar{1}, \bar{1}, 1/5, 1\ 1/5)$	$\langle 23 \rangle B$ ou $(1/5)B$
$(\bar{1}, \overline{3/5}, 3/5, 1, 1/5)$	$\langle 23 \rangle C$ ou $(1/5)C$
$(\overline{3/5}, \overline{3/5}, 1/5, 3/5, 1/5)$	$\langle 23 \rangle D$ ou $(1/5)D$

Tabela 7.1: Na primeira coluna são mostrados os perfis de magnetização da fase $1/5$ para $S = 5/2$ e na segunda coluna suas rotulações em termos de estruturas de bandas e números de onda.

$$\begin{aligned}
 &(\bar{1}, \bar{1}, 1/5, 1, 1/5) \\
 &(\bar{1}, \overline{3/5}, 3/5, 1, 1/5) \\
 &(\overline{3/5}, \overline{3/5}, 1/5, 3/5, 1/5).
 \end{aligned} \tag{7.26}$$

Os números entre parênteses fornecem as amplitudes s_i dos spins, isto é, o perfil de magnetização. As barras sobre os números indicam que estes possuem sinal contrário aos sem barra. É conveniente ainda rotular os perfis de magnetização de acordo com o esquema mostrado na tabela 7.1.

Os números 23 entre parênteses angulosos denotam a estrutura de bandas como antes, indicando que o período é formado por uma banda com 2 camadas de spins com o mesmo sinal seguido de uma banda com 3 spins com o sinal contrário aos da primeira banda. As letras A, B, C e D são atribuídos de maneira arbitrária com o propósito de distinguir os diferentes perfis de magnetização. Alternativamente podemos informar o número de onda em unidades de 2π ao invés da estrutura de bandas como na última coluna.

Para $S = 3$, a fase $1/5$ apresenta apenas as três estruturas mostradas na figura 7.4. De acordo com a notação acima elas são representadas por

$$\begin{aligned} (\bar{1}, \bar{1}, 1/3, 1, 2/3) &\longrightarrow \langle 23 \rangle A \text{ ou } (1/5)A \\ \overline{2/3}, \bar{1}, 1/3, 1, 1/3 &\longrightarrow \langle 23 \rangle B \text{ ou } (1/5)B \\ (\overline{2/3}, \bar{1}, 0, 1, 2/3) &\longrightarrow \langle 23 \rangle C \text{ ou } (1/5)C. \end{aligned} \quad (7.27)$$

As letras A, B, C, etc. são atribuídos arbitrariamente para um diagrama de fases do modelo com um dado spin S , podendo indicar perfis diferentes para diferentes S . Por exemplo, a fase $\langle 23 \rangle A$ ou $(1/5)A$ para spin $S = 5/2$ refere-se ao perfil $(\bar{1}, \bar{1}, 1/5, 1, 3/5)$ enquanto para spin $S = 3$ refere-se ao perfil $(\bar{1}, \bar{1}, 1/3, 1, 2/3)$. É difícil estabelecer uma notação válida para todos os diagramas de fases uma vez que as fases são identificadas pelos perfis de magnetização e estes mudam de diagrama de fases para diagrama de fases. Existem algumas exceções, como é o caso da fase $(1/5)A$ nos diagramas de fases com S inteiro e par, que apresentam sempre o mesmo perfil de magnetização. A multiplicidade dos perfis de magnetização observada para a fase $1/5$ é também observada para outras fases, como por exemplo a fase $2/9$ no diagrama de fases 7.9 ou a fase $3/14$ no diagrama de fases 7.11. Todas as fases, acima de um certo valor de S , característico para cada fase, passam a apresentar mais de uma estrutura.

Observa-se que as fases para S semi-inteiros não apresentam estruturas com planos de magnetização nula, enquanto algumas das estruturas de fases para S inteiros apresentam. Este fato é explicado observando que as componentes de spins são da forma

$$s_i = -1, -\frac{S-1}{S}, \dots, -\frac{1}{S}, 0, \frac{1}{S}, \dots, \frac{S-1}{S}, 1 \quad (7.28)$$

para spins inteiros, e da forma

$$s_i = -1, -\frac{S-1}{S}, \dots, -\frac{1}{2S}, \frac{1}{2S}, \dots, \frac{S-1}{S}, 1 \quad (7.29)$$

para spins semi-inteiros. Observamos que para S semi-inteiro não está previsto a existência de spins com amplitudes nula. O número de estruturas cresce rapidamente com o aumento de S .

7.4 Características gerais dos diagramas de fases

Podemos dividir os diagramas de fases em dois grupos distintos conforme S seja inteiro ou semi-inteiro. Nas figuras 7.5, 7.7, 7.9 e 7.11 são mostrados os diagramas de fases $p - D$ para S inteiro e nas figuras 7.6, 7.8, 7.10 e 7.12 para S semi-inteiro.

Os diagramas de fases $p - D$, qualquer que seja S , são formados por quatro regiões. São elas a região da fase ferromagnética, a região da fase $\langle 2 \rangle$, a região da fase paramagnética e a região de fases moduladas. A região de fases moduladas funciona como um compromisso entre as três primeiras regiões. As regiões das fases ferromagnética e $\langle 2 \rangle$ apresentam os perfis de magnetização (1) e $(\bar{1}, \bar{1}, 1, 1)$, não importa se S é inteiro ou semi-inteiro. A região com fases moduladas, qualitativamente, não difere muito quando consideramos S inteiro ou semi-inteiro. Um fato que distingue a região modulada em ambos os casos, S inteiro ou semi-inteiro, é a presença de fases parcialmente desordenadas apenas nos diagramas de fases com S inteiro. O número de fases moduladas aumenta rapidamente com S . Finalmente, a região da fase paramagnética apresenta também diferenças conforme S

seja inteiro ou semi-inteiro. Nos diagramas de fases com S inteiros esta região é preenchida por uma única fase com perfil de magnetização (0) . Nos diagramas de fases com S semi-inteiros esta região está preenchida para $p < 1/2$ por uma fase com perfil de magnetização $\frac{1}{2S}$ e para $p > 1/2$ por um perfil $(\frac{1}{2S}, \frac{1}{2S}, \frac{1}{2S}, \frac{1}{2S})$. É claro que esta diferença tende a desaparecer no limite $S \rightarrow \infty$. Devido a este fato chamaremos esta região, no caso de S semi-inteiro, de fase “para” (entre aspas).

As fronteiras separando estas quatro regiões apresentam algumas características interessantes. A fronteira modulada- $\langle 2 \rangle$ é formada por uma seqüência de pontos triplos separando regiões de transições entre fases moduladas e a fase $\langle 2 \rangle$. As fases que fazem transição com a fase $\langle 2 \rangle$ surgem ao longo da fronteira modulada- $\langle 2 \rangle$ obedecendo a uma hierarquia diatômica, que a cada incremento no valor de S incorpora uma nova fase. Esta fase é a combinação da $\langle 2 \rangle$ com a sua vizinha na hierarquia anterior. A fronteira ferro-moduladas apresenta, qualitativamente, os mesmos esquemas de combinação de fases que os observados para a fronteira moduladas- $\langle 2 \rangle$, com a fase ferromagnética assumindo papel equivalente àquele desempenhado pela fase $\langle 2 \rangle$. É observado uma seqüência de pontos triplos, com o último destes pontos, um ponto triplo especial, o ponto PT. O ponto PT resulta da interseção das fronteiras ferro-para, ferro-modulada e para-modulada. Este ponto para S baixos é um ponto triplo, com sua posição variando com S . Observamos no entanto que para S crescentes a localização de PT converge para $(p, D) = (1/4, 3/4)$. Não investigamos se neste limite o ponto PT passa a apresentar alguma característica especial, como por exemplo, o de ser um ponto tricrítico. As fronteiras modulada- $\langle 2 \rangle$ e ferro-moduladas apresentam algumas linhas que são fixas em diagramas de fases para diferentes valores de S . Por exemplo, as linhas $\langle 3 \rangle$ - $\langle 2 \rangle$ e ferro- $\langle 3 \rangle$ são fixas (apresentam inclinação e comprimento constantes) para valores inteiros de S . Para valores semi-inteiros de S , no entanto, mudam as suas orientações. As linhas $\langle 23 \rangle$ -

$\langle 2 \rangle$ e ferro- $\langle 4 \rangle$ apresentam a mesma inclinação para S inteiro e par. Para S semi-inteiro e inteiro ímpar estas linhas mudam suas inclinações. Em geral as linhas, seja S inteiro ou semi-inteiro, são variáveis com S . Observamos, entretanto, uma indicação de que estão convergindo para uma fronteira limite. As fronteiras para-modulada, também, parecem convergir para uma fronteira limite com o aumento de S . A natureza da linha para-modulada no limite de S contínuo não foi investigada de maneira sistemática. Encontramos apenas indícios de que será sempre de primeira ordem. Em $p = 1/2$ e $D = 3/4$ existe nos diagramas de fases com S semi-inteiros um ponto de multifases de onde saem fases da forma

$$\langle 23^n \rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (7.30)$$

se $p > 1/2$, e da forma

$$\langle 43^n \rangle, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (7.31)$$

se $p < 1/2$.

A região com fases moduladas torna-se cada vez mais rica em detalhes à medida que S aumenta. A forma como as fases vão emergindo para valores crescentes de S parece obedecer ao processo de ramificação por combinação de estruturas de Selke e Duxbury (1984). Observa-se uma certa multiplicidade de perfis associados a fases com um mesmo número de onda. A multiplicidade é tanto maior quanto maior é o valor de S considerado. Tanto nos diagramas de fases para spins inteiros como para spins semi-inteiros encontramos transições de primeira ordem entre fases de períodos diferentes e entre fases de mesmo período. Observado, também para os dois casos, é o fato da região com fases moduladas tornar-se cada vez maior com o aumento de S .

Figura 7.5: Diagrama de fases para $S = 1$.

Figura 7.6: Diagrama de fases para $S = 3/2$.

Figura 7.7: Diagrama de fases para $S = 2$.

Figura 7.8: Diagrama de fases para $S = 5/2$.

Figura 7.9: Diagrama de fases para $S = 3$.

Figura 7.10: Diagrama de fases para $S = 7/2$.

Figura 7.11: Diagrama de fases para $S = 4$.

Figura 7.12: Diagrama de fases para $S = 9/2$.

7.5 Fronteira da fase $\langle 2 \rangle$

A fronteira da fase $\langle 2 \rangle$ é formada por uma linha poligonal de transições de primeira ordem para as fases moduladas e paramagnética como mostrado na representação esquemática da figura 7.13. A fronteira para $\langle 2 \rangle$ é dada pelo

Figura 7.13: Representação esquemática da fronteira da fase $1/4$ indicando as fases moduladas adjacentes com número de onda q e os pontos triplos (ou quádruplos) indicados por $P_A(q)$.

segmento de reta que tem início em P_A com coordenadas (S, S) , onde S é o tamanho do spin, e estende-se para valores crescentes de p e D de acordo com a equação $D = p$. A fronteira de transição para a fase modulada $1/6$ sempre começa no ponto P_0 de coordenadas $(p, D) = (1/2, 0)$. Com o crescimento do tamanho do spin S vão surgindo novas fases ao longo da

$S = 1$									1/6	1/4							
$S = \frac{3}{2}$									1/6	1/5	1/4						
$S = 2$									1/6	1/5	3/14	1/4					
$S = \frac{5}{2}$									1/6	1/5	3/14	2/9	1/4				
$S = 3$									1/6	1/5	3/14	2/9	5/22	1/4			
$S = \frac{7}{2}$									1/6	1/5	3/14	2/9	5/22	3/13	1/4		
$S = 4$									1/6	1/5	3/14	2/9	5/22	3/13	7/30	1/4	
$S = \frac{9}{2}$									1/6	1/5	3/14	2/9	5/22	3/13	7/30	4/17	1/4

Tabela 7.2: Fases moduladas adjacentes à fase $\langle 2 \rangle$ para diferentes valores de S .

fronteira modu- $\langle 2 \rangle$ conforme a tabela 7.2. A localização da fronteira de transição para a fase modulada q , ou fronteira $q - \langle 2 \rangle$, pode ser obtida na tabela 7.3 onde estão catalogadas as coordenadas $\{p(q), D(q)\}$ dos extremos superiores destas fronteiras.

Os vértices da linha poligonal que consititui a fronteira da fase $\langle 2 \rangle$, indicados por $P_A(q)$ na figura 7.13, representam em geral pontos triplos onde se encontram três fases. Entretanto, em alguns diagramas de fases notamos a existência de pontos quádruplos onde se encontram quatro fases, como é o caso do diagrama de fases 7.9 para $S = 3$. Neste diagrama de fases observamos o encontro das fases $(1/5)A$, $(1/5)B$, $(3/14)A$ e $\langle 2 \rangle$ no ponto $p = 0.7941177$ e $D = 0.5394118$. Para visualizar melhor o que está ocorrendo com os pontos $P_A(1/6)$, $P_A(1/5)$, $P_A(3/14)$ e $P_A(2/9)$ ao variarmos S , apresentamos na figura 7.14 o gráfico dos parâmetros p e D , referentes a estes pontos, como função de S .

S	$P_A(1/6)$	$P_A(1/5)$	$P_A(3/14)$	$P_A(2/9)$
	$p(1/6)/D(1/6)$	$p(1/5)/D(1/5)$	$p(3/14)/D(3/14)$	$p(2/9)/D(2/9)$
1	1	-	-	-
	1	-	-	-
3/2	0.6428571	3/2	-	-
	0.3214286	3/2	-	-
2	2/3	8/9	2	-
	1/3	2/3	2	-
5/2	0.6578947	0.8928571	1.0714286	5/2
	0.3289474	0.6696429	0.8928571	5/2
3	2/3	0.7941177	1.1666666	1.3064516
	1/3	0.5394118	1.0000000	1.1612903
7/2	0.6621622	0.9074074	1.0970149	1.3764045
	0.3310811	0.6805556	0.9141791	1.2387640
4	2/3	0.8000000	1.0126582	1.4035088
	1/3	0.5333333	0.8101266	1.2631579
9/2	0.6639344	0.8402490	1.0175879	1.2656250
	0.3319672	0.5881743	0.8140704	1.1074219

Tabela 7.3: Valores de p e D dos pontos $P_A(q)$ localizando o extremo superior das linhas de transição entre as fases moduladas q e $\langle 2 \rangle$.

Dos dados apresentados na tabela 7.3 e figura 7.14 é possível tirar algumas conclusões sobre o que acontece ao longo da fronteira modu- $\langle 2 \rangle$ conforme S é aumentado. Inicialmente notamos que a linha $\langle 3 \rangle$ - $\langle 2 \rangle$ é a mesma para S inteiro, conforme pode ser visto na figura 7.15 onde é mostrado uma região ampliada enfocando as linhas $\langle 3 \rangle$ - $\langle 2 \rangle$, $\langle 3 \rangle$ - $\langle 23 \rangle$ e $\langle 23 \rangle$ - $\langle 2 \rangle$ para $S = 1, 2, 3$ e 4 . A figura 7.16 mostra esta mesma região nos diagramas de fases para S semi-inteiros onde observamos a variação da fronteira $\langle 3 \rangle$ - $\langle 2 \rangle$ com S . Estas fronteiras convergem, no entanto, para a linha $\langle 3 \rangle$ - $\langle 2 \rangle$ dos diagramas de fases com S inteiro para $S \rightarrow \infty$, conforme pode ser observado na figura 7.14. A razão porque são observados estes comportamentos distintos para

Figura 7.14: Gráfico das coordenadas dos pontos $P_A(q)$ como função de S para diferentes valores de q indicados na figura. Os círculos cheios correspondem a $p(q)$ e os círculos vazios a $D(q)$.

as linhas $\langle 3 \rangle - \langle 2 \rangle$ nos diagramas de fases com S inteiros e semi-inteiros pode ser encontrada observando que os perfis de magnetização para S inteiro são sempre da forma

$$(0, 1, 1, 0, \bar{1}, \bar{1}), \quad (7.32)$$

enquanto para S semi-inteiro tem a forma

$$\left(\frac{1}{2S}, 1, 1, \frac{\bar{1}}{2S}, \bar{1}, \bar{1}\right). \quad (7.33)$$

Observamos que o perfil para S semi-inteiro converge para aquele com S

Figura 7.15: Sobreposição dos diagramas de fases para $S = 1, 2, 3$ e 4 , mostrando que a linhas de transição $1/6-1/4$ coincidem para todos os valores inteiros de S , enquanto as outras linhas mudam suas posições.

inteiro à medida que S cresce. Como a fase $\langle 2 \rangle$ apresenta, tanto para S inteiro como para S semi-inteiro o perfil

$$(1, 1, \bar{1}, \bar{1}), \quad (7.34)$$

vemos, da equação (7.23), que para o caso S inteiro teremos sempre a mesma linha e para S semi-inteiro esta linha é variável, isto é, para cada valor de S apresenta uma nova inclinação. Comportamentos semelhantes foram observados para as linhas $\langle 23 \rangle - \langle 2 \rangle$, $\langle 223 \rangle - \langle 2 \rangle$ e $\langle 2223 \rangle - \langle 2 \rangle$. Os perfis de magnetização para a fase $\langle 23 \rangle$, a fase $(1/5)A$, possuem as formas

Figura 7.16: Sobreposição dos diagramas de fases para $S = 3/2, 5/2, 7/2$ e $9/2$, mostrando que todas as linhas de transição mudam de posição para valores crescentes e semi-inteiros de S . Observamos claramente que as linhas de transição $1/6-1/4$ e $1/5-1/4$ convergem a um limite para valores crescentes de S .

$$S = 3/2 \longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/3, 1, 1/3)$$

$$S = 2 \longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 1/2)$$

$$S = 5/2 \longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/5, 1, 3/5)$$

$$S = 3 \longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/3, 1, 2/3)$$

$$S = 7/2 \longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 3/7, 1, 3/7)$$

$$S = 4 \longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 1/2)$$

$$S = 9/2 \longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/3, 1, 5/9)$$

$$\begin{aligned}
S = 5 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 2/5, 1, 3/5) \\
S = 11/2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 5/11, 1, 5/11) \\
S = 6 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 1/2). \quad (7.35)
\end{aligned}$$

Daí vemos que a fase (23) para S inteiro par tem sempre o mesmo perfil de magnetização, enquanto é variável para outros valores de S . Notemos que os perfis para estes valores de S parecem convergir para aquele com S inteiro par no limite $S \rightarrow \infty$. Assim da equação (7.23), vemos que as linhas para S inteiro par terão as mesmas inclinações enquanto as outras linhas convergirão para estas no limite $S \rightarrow \infty$. No caso da fase (3/14)A observamos que os perfis de magnetização são os mesmos para $S = 3, 6, 9, \dots$ tendo a forma

$$(\bar{1}, \bar{1}, 2/3, 1, 0 \bar{1} \bar{2/3} 1, 1, \bar{2/3}, \bar{1}, 0 \bar{1} 2/3), \quad (7.36)$$

enquanto para os outros valores de S os perfis são dados por

$$\begin{aligned}
S = 2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 0, \bar{1}, \bar{1/2}, 1, 1, \bar{1/2}, \bar{1}, 0, 1, 1/2) \\
S = 5/2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 0, \bar{1}, \bar{1/2}, 1, 1, \bar{1/2}, \bar{1}, 0, 1, 1/2) \\
S = 7/2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 0, \bar{1}, \bar{1/2}, 1, 1, \bar{1/2}, \bar{1}, 0, 1, 1/2) \\
S = 4 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 3/4, 1, 0, \bar{1}, \bar{3/4}, 1, 1, \bar{3/4}, \bar{1}, 0, 1, 3/4) \\
S = 2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 0, \bar{1}, \bar{1/2}, 1, 1, \bar{1/2}, \bar{1}, 0, 1, 1/2) \\
S = 5 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 3/5, 1, 0, \bar{1}, \bar{3/5}, 1, 1, \bar{3/5}, \bar{1}, 0, 1, 3/5) \\
S = 11/2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 0, \bar{1}, \bar{1/2}, 1, 1, \bar{1/2}, \bar{1}, 0, 1, 1/2) \\
S = 13/2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 0, \bar{1}, \bar{1/2}, 1, 1, \bar{1/2}, \bar{1}, 0, 1, 1/2) \\
S = 7 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 5/7, 1, 0, \bar{1}, \bar{5/7}, 1, 1, \bar{5/7}, \bar{1}, 0, 1, 5/7) \\
S = 15/2 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 0, \bar{1}, \bar{1/2}, 1, 1, \bar{1/2}, \bar{1}, 0, 1, 1/2) \\
S = 8 &\longrightarrow (\bar{1}, \bar{1}, 5/8, 1, 0, \bar{1}, \bar{5/8}, 1, 1, \bar{5/8}, \bar{1}, 0, 1, 5/8).
\end{aligned}$$

(7.37)

Novamente observamos a convergência dos perfis de magnetização para aqueles com $S = 3, 6, \dots$ para $S \rightarrow \infty$. O mesmo comportamento, a existência de valores especiais de S para os quais o perfil de magnetização é o mesmo, foi observado para a fase $(2/9)A$. Os valores de S onde ocorre a repetição dos perfis são $S = 7, 14, \dots$.

7.6 Fronteira da fase ferromagnética

A fronteira da fase ferromagnética é constituída por uma linha poligonal de transições de primeira ordem para as fases modulada e paramagnética, conforme ilustrado esquematicamente na figura 7.17. A linha para-ferro é dada pela equação

$$D = 1 - p, \quad (7.38)$$

sendo a mesma para todos os valores de S . Esta linha termina num ponto PT que sofre mudança na sua posição (p, D) conforme S varia. O comportamento do ponto PT será discutido mais à frente, na seção 7.7. A linha de transição da fase ferromagnética para $1/6$ começa no ponto $(p, D) = (1/2, 0)$. Para $S = 1$ a fase $1/6$ é a única fase modulada, mas conforme S aumenta surgem mais fases moduladas conforme listada na tabela 7.4. A localização da fronteira de transição para a fase modulada q , ou fronteira ferro- q , pode ser obtida na tabela 7.5 onde estão catalogados as coordenadas $(p(q), D(q))$ dos extremos superiores destas fronteiras.

Os vértices da linha poligonal que constitui a fronteira da fase ferro, indicados por $P_F(q)$ na figura 7.17, representam pontos triplos onde coexistem três fases distintas. Em nenhum dos diagramas de fases 7.5–7.12 foi observado pontos onde coexistem mais que três fases, como ocorre na

Figura 7.17: Representação esquemática da fronteira da fase ferromagnética indicando as fases moduladas adjacentes com números de onda q e os pontos triplos $P_F(q)$

fronteira modu- $\langle 2 \rangle$. As localizações dos pontos triplos $P_F(q)$ são dadas na tabela 7.5. Na figura 7.18 são mostradas as coordenadas $p(q)$ e $D(q)$ para alguns dos pontos $P_F(q)$ em função do tamanho do spin. Na figura 7.19 estão sobrepostos os diagramas de fases para $S = 1, 2, 3$ e 4 . Observamos que as fronteira ferro- $1/6$ coincidem para todos os valores de S inteiros maiores que 1, estendendo-se do ponto $P_0 = (1/2, 0)$ até $(0.375, 0.5)$. No caso de spin $S = 1$ a fronteira coincide com as demais nesse trecho, mas estende-se até o ponto $(1/3, 2/3)$. Já a figura 7.20 mostra a sobreposição dos diagramas de fases para valores semi-inteiros de spin $S = 3/2, 5/2, 7/2$ e $9/2$. Claramente a fronteira ferro- $1/6$ não permanece fixa, mas aparentemente converge para

$S = 1$	0/2	1/6			
$S = \frac{3}{2}$	0/2	1/8	1/6		
$S = 2$	0/2	1/10	1/8	1/6	
$S = \frac{5}{2}$	0/2	1/12	1/10	1/8	1/6

Tabela 7.4: Fases moduladas adjacentes à fase ferromagnética para diferentes valores de S .

S	$P_F(1/6)$	$P_F(1/8)$	$P_F(1/10)$	$P_F(1/12)$
	$p(1/6)/D(1/6)$	$p(1/8)/D(1/8)$	$p(1/10)/D(1/10)$	$p(1/12)/D(1/12)$
1	0.3333333	—	—	—
	0.6666666	—	—	—
3/2	0.3888888	0.3000000	—	—
	0.5000000	0.7000000	—	—
2	0.3750000	0.3103448	0.2857142	—
	0.5000000	0.6724137	0.7142857	—
5/2	0.3800000	0.3111111	1.3070175	0.2777777
	0.5000000	0.6722222	0.67982460	0.7222222

Tabela 7.5: Valores de p e D localizando os pontos $P_F(q)$ do extremo superior das linhas de transição para a fase modulada com número de onda q .

um limite conforme $S \rightarrow \infty$. Essa fronteira limite parece coincidir com a fronteira ferro-1/6 dos casos de spins inteiros e maiores que 1, conforme pode ser comprovada na figura 7.18.

Consideremos agora a fronteira ferro-1/8. De acordo com as figuras 7.19 e 7.18, essas fronteiras variam conforme o valor de S para todos os valores de S estudados. Isso fica também evidenciado no gráfico da figura 7.18. Embora as coordenadas dos pontos $P_F(1/8)$ para $S = 3$ e 4 pareçam coincidentes nesse gráfico, elas são na realidade diferentes, conforme pode ser verificado na tabela 7.5. Entretanto, é possível que, em

analogia com o que ocorre na fronteira ferro-1/6, existam valores especiais de S para os quais as fronteiras ferro-1/8 sejam coincidentes, e para as quais as outras fronteiras ferro-1/8 convirjam conforme $S \rightarrow \infty$.

Figura 7.18: Gráfico dos parâmetros $p(q)$ e $D(q)$ (referentes aos pontos $P_F(q)$ da fronteira ferro-moduladas) como função de S . Os valores de q estão indicados na figura.

O perfil de magnetização é um outra fonte de informação sobre os comportamentos das linhas que compõem a fronteira modulada-ferro. Observemos o perfil de magnetização da fase $\langle 4 \rangle$ para vários valores de S , mostrados abaixo.

$$S = 3/2 \rightarrow (\overline{1/3}, \overline{1}, \overline{1}, \overline{1/3}, 1/3, 1, 1, 1/3)$$

$$S = 2 \rightarrow (\overline{1/2}, \overline{1}, \overline{1}, \overline{1/2}, 1/2, 1, 1, 1/2)$$

$$S = 5/2 \rightarrow (\overline{3/5}, \overline{1}, \overline{1}, \overline{1/5}, 3/5, 1, 1, 1/5)$$

$$\begin{aligned}
S = 3 &\longrightarrow (\overline{2/3}, \overline{1}, \overline{1}, \overline{1/3}, 2/3, 1, 1, 1/3) \\
S = 7/2 &\longrightarrow (\overline{3/7}, \overline{1}, \overline{1}, \overline{3/7}, 3/7, 1, 1, 3/7) \\
S = 4 &\longrightarrow (\overline{1/2}, \overline{1}, \overline{1}, \overline{1/2}, 1/2, 1, 1, 1/2) \\
S = 9/2 &\longrightarrow (\overline{5/9}, \overline{1}, \overline{1}, \overline{5/9}, 5/9, 1, 1, 5/9) \quad (7.39)
\end{aligned}$$

Vemos que os perfis se repetem para S inteiros e pares e para outros valores de S parecem convergir para aqueles com S inteiro e par. As linhas acima da linha ferro-(3) sofrem variações. Aquelas com $S = 2$ e 4 apresentam a mesma inclinação, concordando com os dados apresentados em (7.39), enquanto apresenta inclinação diferente para $S = 3$. Na figura 7.20 não existe nenhuma coincidência de linhas, mas as linhas parecem convergir para uma fronteira limite, como já salientado acima.

7.7 Fronteiras para-modulada e suas vizinhanças

As fronteiras para-moduladas apresentam aspectos bem distintos se o diagrama de fases em consideração é para S inteiro ou para S semi-inteiro. Consideremos o que ocorre ao longo desta fronteira e nas suas vizinhanças ao variarmos o valor de S .

A fronteira da fase paramagnética no caso de S inteiro é mais simples que para S semi-inteiro. Assim começaremos nossa análise da fronteira paramagnética considerando os diagramas de fases $p - D$ para S inteiro. Com a finalidade de ilustrar o que ocorre ao longo desta fronteira, no caso de S inteiro, consideremos o diagrama de fases 7.11 com $S = 4$. Neste diagrama de fases a fase paramagnética, para valores baixos de p , faz transição com a fase ferromagnética. A linha ferro-para vai desde o ponto $(p, D) = (0, 1)$ até o ponto PT. Acima do ponto PT, para valores crescentes de p , encontramos a região de transição com as fases moduladas. A linha para-modulada vai desde o ponto PT até o início da fronteira de transição

Figura 7.19: Sobreposição dos diagramas de fases para os valores de S inteiros, mostrando que F_1 permanece fixo, enquanto os outros pontos mudam suas posições com o aumento de S .

da fase paramagnética com a fase $1/6$. A fronteira para- $\langle 3 \rangle$ é uma linha que apresenta a mesma inclinação qualquer que seja o valor de S e passa através do ponto $(p, D) = (1/2, 3/4)$. Acima da linha para- $\langle 3 \rangle$, ainda para valores crescentes de p , continua a fronteira para-modulada, a qual se estende até o início da linha para- $\langle 2 \rangle$. Na verdade, deveríamos ter dividido a fronteira da fase paramagnética apenas em três linhas: linha para-ferro, para-modulada e para- $\langle 2 \rangle$. Dividimos nas cinco linhas citadas acima, para-ferro, para-modulada com $p < 1/2$, para- $\langle 3 \rangle$, para-modulada com $p > 1/2$ e para- $\langle 2 \rangle$, a fim de ressaltar o caráter especial da linha para- $\langle 3 \rangle$. As duas fronteiras para-moduladas variam com S , enquanto as inclinações das linhas para-ferro, para- $\langle 3 \rangle$ e para- $\langle 2 \rangle$ permanecem as mesmas com S .

Figura 7.20: Sobreposição dos diagramas de fases para os valores de S semi-inteiros, mostrando que F_1' permanece fixo, enquanto os outros pontos mudam suas posições com o aumento de S .

A fase paramagnética para S semi-inteiro, é ligeiramente diferente do caso com S inteiro. Consideremos o diagrama de fases 7.12 para $S = 9/2$ a fim de discutirmos o que ocorre ao longo da fronteira paramagnética, que nesse caso denominaremos de fronteira “para” entre aspas. A razão para esta notação diferente se deve ao fato das amplitudes dos spins nesta região, para estes diagramas de fases, serem não nulas. Observamos, no entanto, que elas se tornam cada vez menores conforme aumentamos S . Assim no diagrama de fases 7.12 temos a região que denotaremos por “para”-I de período 1 e amplitude $1/(2S)$, para $p < 1/2$, e a região “para”-II de período 4 e perfil de magnetização $(-1/2S, -1/2S, 1/2S, 1/2S)$, para $p > 1/2$. Assim as linhas de transição formando a fronteira “para”-modulada, nos

diagramas de fases com S semi-inteiros, são a linha “para”-I-ferro, que vai do ponto $(p, D) = (0, 1)$ até o ponto PT, a linha “para”-I-modulada, que vai de PT até o ponto PM e a linha “para”-II-modulada, que vai do ponto PM até o início da linha “para”-II- $\langle 2 \rangle$. Todas estas linhas, exceto a “para”-I-ferro e “para”-II- $\langle 2 \rangle$, sofrem mudanças conforme variamos o tamanho do spin S . Comentaremos a seguir sobre as vizinhanças desta fronteira.

Analiseemos a evolução do ponto PT com o aumento de S . O ponto PT resulta da interseção das linhas para (“para”-I)-ferro, para(“para”-I)-modulada e ferro-modulada nos diagramas de fases $p - D$ para S inteiro (semi-inteiro). A localização do ponto PT varia conforme variamos S . As curvas (a) e (b) na figura 7.21 mostram as dependências dos parâmetros D e p com o inverso do tamanho do spin ($1/S$). Desta figura é possível vermos que $D \rightarrow 0.75$ e $p \rightarrow 0.25$ quando S se torna muito grande.

Figura 7.21: Dependência em S dos parâmetros (a) D e (b) p para o ponto PT.

Figura 7.22: Dependência com S do ponto de multifases. Os gráficos mostrados são para de $S = 1/2, 3/2, 5/2, 7/2$

7.8 Degenerescência das fronteiras de fases

Consideremos inicialmente o diagrama de fases com $S = 1$ mostrado na figura 7.5. A linha $D = 2p - 1$, fronteira entre a fase $1/4$ e a fase $1/6$, é infinitamente degenerada. Por exemplo, fases do tipo

$$\langle (20)^m 2^l \rangle \quad (7.42)$$

são degeneradas com as fases $\langle 20 \rangle$ ($q/2\pi = 1/6$) e $\langle 2 \rangle$ ($q/2\pi = 1/4$) sobre a linha $D = 2p - 1$. Tomando a fase com número de onda $1/5$ e estrutura de magnetização $\langle 202 \rangle$ sua energia por spin é dada pela expressão

$$\epsilon_{1/5} = \frac{1}{5}(-1 - 3p + 4D). \quad (7.43)$$

Figura 7.23: Sobreposição dos diagramas de fases para os valores de S inteiro, mostrando a evolução da fronteira para- $\langle 3 \rangle$ com o aumento de S .

Já as fases $1/6$ ($\langle 20 \rangle$) e $1/4$ ($\langle 2 \rangle$) possuem energias

$$\epsilon_{1/6} = \frac{1}{3}(-1 - p + 2D), \quad (7.44)$$

$$\epsilon_{1/4} = -p + D. \quad (7.45)$$

$$(7.46)$$

respectivamente. Outra fase que pode ser testada é $3/14$ com estrutura $\langle 2022 \rangle$ com energia

$$\epsilon_{3/14} = \frac{1}{7}(-1 - 5p + 6D). \quad (7.47)$$

$$(7.48)$$

Por outro lado fases do tipo

$$\langle (30)^m (20)^j \rangle \quad (7.49)$$

são degeneradas ao longo da fronteira ferro-1/6, $D = 2(1 - 2p)$, com as fases ferromagnética e fases $q/2\pi = 1/6$. Nos diagramas de fases que se seguem, para S maiores, não encontramos indícios de que estas fases ganhem largura de estabilidade. Por exemplo, a fase 1/5 que aparece acima do ponto $P_A(1/6)$ nos diagramas de fases $p - D$ apresenta um perfil de magnetização diferente do perfil da fase 1/5 obtido fazendo $m = 1$ e $j = 1$ na expressão (7.42). Na verdade as duas fases 1/5, citadas acima, possuem apenas o ponto $P_A(q)$ como elemento comum. Por exemplo a fase $\langle 23 \rangle$ no diagrama de fases 7.7 de perfil de magnetização $(\bar{1}, \bar{1}, 1/2, 1, 1/2)$ é a fase estável nesta região (acima de $P_A(1/6)$).

Consideremos agora um diagrama de fases em que S é semi-inteiro, por exemplo, o mais simples, o diagrama de fases 7.6 com $S = 3/2$. Começamos examinando a degenerescência das fases, também, ao longo da fronteira $\langle 3 \rangle - \langle 2 \rangle$. Nesta fronteira as fases com perfis de magnetização

$$(1 \ 1 \ 1/3)^m (1 \ 1)^j, \quad (7.50)$$

formadas da combinação da fase $\langle 3 \rangle (\bar{1} \ \bar{1} \ \bar{1}/3, 1 \ 1 \ 1/3)$ com a fase $\langle 2 \rangle (\bar{1} \ \bar{1} \ 1 \ 1)$, são degeneradas com as fases $\langle 3 \rangle$ e $\langle 2 \rangle$. Por exemplo, fazendo $m = 1$ e $n = 1$ obtemos a fase $q/2\pi = 1/5$ cuja estrutura de magnetização tem a forma

$$(1 \ 1 \ 1/3, 1 \ 1), \quad (7.51)$$

e energia por spin

$$\epsilon_{1/5} = -\frac{1}{5} - \frac{3}{5}p + \frac{37}{45}D, \quad (7.52)$$

que é degenerada com as energias (por spin) das fases 1/6 e 1/4 dadas por

$$\epsilon_{1/4} = -p + D, \quad (7.53)$$

(7.54)

$$\epsilon_{1/6} = -\frac{1}{3} - 2p + \frac{19}{27}D,$$

respectivamente, sobre a linha de transição dada por

$$D = -\frac{3^2}{2} \left(-\frac{1}{2} + p\right). \quad (7.55)$$

Da mesma forma constata-se que na fronteira entre a fase $1/5$ (estrutura dada por $\langle \frac{1}{3} \ 1 \frac{1}{3} \ \bar{1} \ \bar{1} \rangle$), acima do ponto A'_1 , e a fase $1/4$ deste mesmo diagrama de fases. Nesta fronteira, dada por

$$D = -\frac{3}{2} + \frac{11}{8}p, \quad (7.56)$$

as fases que apresentam perfis de magnetização do tipo

$$\left(\frac{1}{3} \ 1 \ \frac{1}{3}\right)^m (1 \ 1)^j \quad (7.57)$$

possuem a mesma energia que as fases $1/5$ e $1/4$. Se examinarmos a fronteira ferro- $\langle 3 \rangle$ verificaremos que as fases ferromagnética, $\langle 3 \rangle$ e fases formadas pelas combinações destas fases são infinitamente degeneradas.

Esta regra de combinação de fases, resultando em fases degeneradas, parece ser válida para todas as linhas nos diagramas de fases deste modelo, tanto para S inteiro quanto para S semi-inteiro. No diagrama de fases com $S = 2$ a estrutura de fase com número de onda $q/2\pi = 1/5$ que se torna estável tem estrutura diferente daquelas na equação (7.49). É provável que esta degenerescência neste modelo seja levantada, como no modelo ANNNI, ou pela presença de um campo magnético ou temperaturas $T > 0$.

7.9 Interior da região com fases moduladas: alguns comentários

Como já mencionamos na seção 6.4, estamos fazendo a distinção entre as fases citando a amplitude do spin para fases com mesmo número de

onda q e mesma estrutura de bandas. Assim já no diagrama de fases 7.7, com $S = 2$, a fase $1/5$ já apresenta as estruturas rotuladas por nós como

$$(1/5) A \longrightarrow \langle 1/2 \ 1 \ 1/2 \ \bar{1} \ \bar{1} \rangle \quad (7.58)$$

$$(1/5) B \longrightarrow \langle 1/2 \ 1 \ 0 \ \bar{1} \ 1\bar{2} \rangle. \quad (7.59)$$

No diagrama de fases 7.8, com $S = 5/2$, temos as estruturas mostradas na figura 7.3 com número de onda $q/2\pi = 1/5$ e notadas por

$$(1/5) A \longrightarrow \langle 1/5 \ 1 \ 1/5 \ \bar{1} \ \bar{1} \rangle \quad (7.60)$$

$$(1/5) B \longrightarrow \langle 3/5 \ 1 \ 1/5 \ \bar{1} \ 3\bar{5} \rangle \quad (7.61)$$

$$(1/5) C \longrightarrow \langle 1/5 \ 1 \ 3/5 \ \bar{1} \ \bar{1} \rangle \quad (7.62)$$

$$(1/5) D \longrightarrow \langle 1/5 \ 3/5 \ 1 \ 3\bar{5} \ 3\bar{5} \rangle. \quad (7.63)$$

A figura 7.24 mostra a região de estabilidade das fases 7.60–7.63 no diagrama de fases 7.8, bem como as transições destas fases entre si e com outras fases vizinhas. Observemos que o número de fases com mesmo número de onda parece aumentar com o aumento de S .

O comportamento observado para a fase $1/5$ é o mesmo observado para outras fases. Fases como a $2/9$ apresentam para um mesmo diagrama de fases diversas estruturas de fases. A partir do diagrama de fases 7.9, com $S = 3$, este comportamento já é observado para a fase $2/9$. A fase $3/14$, por exemplo, já apresenta tal comportamento no diagrama de fases 7.8, com $S = 5/2$. A fase $1/6$ parece ser a única a apresentar apenas uma estrutura por diagrama de fases.

Figura 7.24: Transição entre fases de mesmo período ($q/2\pi = 1/5$). Região ampliada do diagrama de fases com $S = 5/2$.

Observamos que os diagramas de fases com S inteiro apresentam fases com perfis de magnetização onde estão presentes sítios onde $s_i = 0$, enquanto os diagramas de fases com S semi-inteiro não apresentam em nenhuma ocasião tais fases. Por exemplo, a fase $1/6$, que para todos os diagramas de fases com S inteiro apresenta a estrutura mostrada na figura 7.25. Outras fases, como a $(1/5)B$ e as $3/14$ no diagrama de fases 7.9 com $S = 3$, são exemplos de fases com planos (no modelo tridimensional original) de magnetização nula. O aparecimento destes sítios com momento nulo é devido a presença do termo quadrático em D que prefere os termos com a menor amplitude de spin possível quando se trata da minimização da energia.

Figura 7.25: Estruturas de magnetizações da fase $1/6$ nos diagramas de fases com a) e b) S inteiro e c) e d) S semi-inteiro.

Capítulo 8

Considerações Finais

Nesta parte final procuraremos enfatizar de uma forma sucinta os resultados originais obtidos e que consideramos de maior interesse.

Nos capítulos 5 e 6 estudamos a teoria de campo médio do modelo ANNNI de spin $1/2$ na presença de um campo magnético H . No capítulo 5 levantamos diagramas de fases no plano $p-T$ para diversos valores do campo H . Nestes diagramas algumas fases, para um dado intervalo de campo, apresentam estrangulamentos nas suas fronteiras de fases. Os estrangulamentos marcam transições entre fases diferentes mas com mesmo número de onda. Embora estrangulamentos desse tipo tenham sido observados na teoria de campo médio do modelo ANNNI a campo nulo para $J_0 \ll J_1$, acredita-se que nessas condições a teoria de campo médio seja deficiente, restrição que não se aplica ao nosso trabalho feito para $J_0 = J_1$. No capítulo 6 levantamos diagramas de fases no plano $H-T$ para diversos valores de p . O nosso achado mais interessante foi termos encontrado indícios da existência de pontos ípsilon (Υ) no modelo. Esse resultado é importante pois pontos Υ não tinham sido até então observados no modelo ANNNI.

No capítulo 7 estudamos o estado fundamental de um modelo ANNNI de spin geral S na presença de um campo cristalino D . Construímos diagramas de fases $p-D$ para valores de $S = 1, 3/2, 2, \dots, 9/2$. É interessante observar que a diferença que existe entre diagramas com S inteiros e

aqueles com S semi-inteiros tende a desaparecer para valores crescentes de S . O número de fases moduladas cresce rapidamente com o spin S , e tudo leva a crer que o modelo apresente, a $T = 0$ e no limite do contínuo $S \rightarrow \infty$, uma estrutura de fases tão complexa quanto o modelo ANNNI usual para temperaturas $T > 0$.

Referências

Aubry, S. (1978) em *Soliton and Condensed Matter Physics*, eds. A. R. Bishop e T. Schneider (Springer, Berlin) p. 264.

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

Aubry, S. (1986) em *Structures et Instabilités*, ed. C. Godreche (Editions de Physique, Les Ulis, France).

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

Bak, P. (1982) *Rep. Prog. Phys.* **45**, 587.

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

Bak, P. e V. J. Emery (1976) *Phys. Rev. Lett.* **36**, 978

Bassler, K. E., K. Sasaki e R. B. Griffiths (1991) *J. Stat. Phys.* **62**, 45.

Bassler, K. E. e R. B. Griffiths (1994) *Phys. Rev. B* **49**, 904.

Blume, M., V. J. Emery e R. B. Griffiths (1971) *Phys. Rev. A* **3**, 1071.

Broddin, D., G. van Tendeloo, J. van Landuyt, S. Amelinckx, R. Poltier, M. Guymont e A. Loiseau (1986) *Philos. Mag. A* **54**, 395.

- Cadorin, J. L. (1993) Tese de doutoramento, IFUSP.
- Chaikin, P. M., T. C. Lubensky (1995) *Principles of Condensed Matter of Physics* (Cambridge, Cambridge University Press).
- Chou, W. e R. B. Griffiths (1986) *Phys. Rev. B* **34**, 6219.
- Chouteau, G., J. Flouquet, J. P. Keradec, J. Palleau, J. Peyrard e R. Tournier (1978) *J. Phys. (Paris) Lett.* **39**, L461.
- Cummins, H. Z. (1990) *Phys. Rept.* **185**, 212.
- Dehlinger, U. (1929) *Annalen der Physik* **2**, 749.
- Duxbury, P. M. e W. Selke (1983) *J. Phys. A* **16**, L741.
- DeSimone, T. e R. M. Stratt (1985) *Phys. Rev. B* **32**, 1537, 1549
- Elliott, R. J. (1961) *Phys. Rev.* **124**, 346.
- Fisher, M. E. e A. M. Szpilka (1987a) *Phys. Rev. B* **36**, 644.
- Fisher, M. E. e A. M. Szpilka (1987b) *Phys. Rev. B* **36**, 5343.
- Fisher, M. E. e W. Selke (1980) *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1502.
- Fisher, M. E. e W. Selke (1981) *Philos. Trans. R. Soc. London* **302**, 1.
- Floria, L. M. e R. B. Griffiths (1989) *Numer. Math.* **55**, 565.
- Frank, F. C. e J. H. van der Merwe (1949a) *Proc. Roy. Soc. A* **198**, 205.
- Frank, F. C. e J. H. van der Merwe (1949b) *Proc. Roy. Soc. A* **198**, 216.

- Frenkel, J. e T. Kontorova (1938) *Phys. Z. Sowjetunion* **13**, 1.
- Golitschek, M. v. (1982) *Nmer. Math.* **39**, 65.
- Gratias, D. (1987) *Contemp. Phys.* **28**, 219.
- Griffiths, R. B. (1990) em *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VII* ed. H. Van Beijeren (North-Holland, Amsterdam).
- Griffiths, R. B. e W. Chou (1986) *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1929.
- Hardy, G. H. e E. M. Wright (1979) *An Introduction to the Theory of Numbers*, 5th ed. Oxford University Press, Oxford.
- Hood, K. (1990) *J. Comp. Phys.* **89**, 187.
- Hornreich, R. M. (1980) *J. Magn. Magn. Mat.* **15-18**, 387.
- Hornreich, R. M., M. Luban, e S. Shtrikamn (1975) *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1678.
- Idogaki T. e N. Uryû (1985) *Phys. Lett.* **110A**, 467.
- Izyumov, Y. A. (1984) *Sov. Phys. Usp.* **27**, 845.
- Jensen, M. H. e P. Bak (1983), *Phys. Rev. B* **27**, 6853.
- Jensen, P.J., K. A. Penson e K. H. Bennemann (1987) *Phys. Rev. B* **35**, 7306.
- Karp, R. M. (1978) *Discrete Mathematics* **23**, 309.
- Katsura e Narita (1973) *Prog. Theor. Phys.* **50**, 1426.

- Kincaid, J. M. e E. G. D. Cohen, Phys Rep. **22**, 57.
- Loiseau, A., G. van Tendeloo, R. Portier e F. Ducastelle (1985) J. Physique **46**, 595
- Mandelbrot, B. (1977) *"Fractals: Form, Chance and Dimension"* (Freeman, San Francisco).
- Marchand, M., K. Hood e A. Calilé (1987), Phys. Rev. Lett., **58**, 1660.
- Marchand, M., K. Hood e A. Calilé (1988), Phys. Rev. **B 37**, 1898.
- Micheletti, C., F. Seno e J. M. Yeomans (1995), Phys. Rev. **B 52**, 4353.
- Morita, T. e T. Horiguchi (1972) Phys. Lett. **38 A**, 223.
- Muraoka, Y., M. Ochiai, T. Idogaki e N. Uryû (1993) J. Phys **A 26**, 1811.
- Muraoka, Y., M. Ochiai e T. Idogaki (1994) J. Phys **A 27**, 2675.
- Muraoka, Y., K. Oda, J. W. Tucker e T. Idogaki (1996) J. Phys **A 29**, 949.
- Nagamiya, T. (1967) Sol. St. Phys., **20**, 305.
- Nagamiya, T., K. Nagata e Y. Kitano (1962) Progr. Theoret. Phys., **27**, 1253.
- Nakanishi, K. (1989) J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 1296.
- Nakanishi, K. (1992) J. Phys. Soc. Jpn. **61**, 2901.
- Oitmaa, J. (1985), J. Phys **A 18**, 365.

- Öttinger, H. C. (1983), J. Phys A **16**, 1483.
- Pynn, R. (1979) Nature **281**, 433.
- Pokrovsky, V. L. e G. V. Uimin (1982) Sov. Phys.-JETP **82**, 1640.
- Randa, (1985) Phys. Rev **B32**, 413.
- Redner, S. (1982) J. Stat. Phys. **25**, 15.
- Redner, S. e H. E. Stanley (1977) J. Phys C **10**, 4765.
- Rossat-Mignod, J., P. Burlet, H. Bartholin, O. Vogt e R. Lagnier (1980) J. Phys C **13**, 6381.
- Rossat-Mignod, J., J. M. Effantin, C. Vettier e O. Vogt (1985) Physica **130B**, 555.
- Rotthaus, F. e W. Selke (1993) J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 378.
- Sasaki, K. (1992) J. Stat. Phys. **68**, 1013.
- Sasaki, K. e L. M. Floria (1989) J. Phys. Condensed Matter **1**, 2179.
- Selke, W. (1988) Phys. Repts. **170**, 213.
- Selke, W. (1992) em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, eds. C. Domb e J. L. Lebowitz, vol. **15**, p. 1 (Academic Press, New York).
- Selke W., M. Barreto e J. Yeomans (1985) J. Phys C **18**, L393.
- Selke, W. e P. M. Duxbury (1984) Z. Phys. B **57**, 49.

- Selke, W. e M. Fisher (1979) Phys. Rev. B 20, 257.
- Seno, F. e J. M. Yeomans (1995) Phys. Rev. B 52, 9550.
- Shechtman, D., I. Blech, D. Gratias, e J. W. Cahn (1984) Phys. Rev. Lett. 53, 1951.
- Smith, J. e J. M. Yeomans (1982) J. Phys 15, L1053.
- Smith, J. e J. M. Yeomans (1983) J. Phys 16, 5305.
- Stephenson, J. (1970) Can. J. Phys. 48, 1724.
- Szpilka, A. M. (1985) J. Phys C 18, 569.
- Szpilka, A. M. e M. E. Fisher (1986) Phys. Rev. Lett. 57, 1044.
- Szpilka, A. M. e M. E. Fisher (1987) Phys. Rev. B 36, 5363.
- Takeda, T., K. Konishi, H. Deguchi, N. Iwata e T. Shigeoka (1992) J. Magn. Magn. Matter. 104-107, 901.
- Tragtenberg, M. H. R., 1993 Tese de doutoramento, IFUSP.
- Tragtenberg, M. H. R. e C. S. O. Yokoi, 1995, Phys. Rev. E52, 5004.
- Uimin, G. (1984) J. Stat. Phys. 34, 1.
- Villain, J. (1983) La Recherche 149, 1498.
- Villain, J. e M. B. Gordon (1980) J. Phys. C 13 3117.
- Yeomans, J. M. (1988) em *Solid State Physics*, Vol. 41, eds. H. Ehrenreich

e D. Turnbull (Academic Press, Orlando).

Ying, S. C. (1971) Phys. Rev. **B 3**, 4160.

Yokoi, C. S. O. (1988) Phys. Rev. **B 38**, 634.

Yokoi, C. S. O. (1992) Phys. Rev. **B 43**, 8487.

Yokoi, C. S. O., M. D. Coutinho-Filho e S. R. Salinas (1981) Phys. Rev. **B 24**, 4047.

Yokoi, C. S. O., M. J. de Oliveira e S. R. Salinas (1985) Phys. Rev. Lett. **54**, 163.

Yokoi, C. S. O., L-H. Tang e W. Chou (1988) Phys. Rev. **B 37**, 2173.