UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

MODELO DE ISING DILUÍDO NA REDE DE BETHE

Ricardo Paupitz Barbosa dos Santos

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

Banca Examinadora:

Carlos Seihiti Orii Yokoi
Prof. Dr. Carlos Seihiti Orii Yokoi - IFUSP (Orientador)

Prof. Dr. Carlos C. Becerra - IFUSP

Prof. Dr. Fernando D. Nobre - UFRN

Prof. Dr. João A. Plascak - UFMG

Prof. Dr. Sílvio R. Salinas - IFUSP

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo:

3732
ex. 1

SÃO PAULO

2002

SBI-IFUSP

305M810T3732

Armando Corbani Ferraz
Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

530.15
p 333m
D
ex. 1

127 2793

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Santos, Ricardo Paupitz Barbosa dos

Modelo de Ising diluído na rede de Bethe.
São Paulo 2002.

Tese (Doutoramento) - Universidade de São Paulo
Instituto de Física – Departamento de Física Geral

Orientador: Prof. Dr. Carlos Seihiti Orie Yokoi
Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Unitermos: 1. Física Estatística; 2. Magnetismo;
3. Transições de Fase.

USP/IF/SBI-056/2002

Dedicatória

Para a pequena Júlia, que dá sentido à minha vida.

Agradecimentos

- Ao Prof. Yokoi pela orientação e por toda a física que me ensinou.
- Ao Prof. Salinas, que sempre me indica o caminho certo e salva a pátria quando necessário.
- Aos amigos Luiz Ozório e Emerson Luna, por todo o apoio e amizade, mesmo durante os momentos mais críticos.
- Ao André.
- À Lêni e à Júlia pelo companheirismo e compreensão durante minhas ausências.
- Ao Fábio, pela amizade e confiança.
- Ao Shmoo por tantas conversas construtivas.
- Daniel, Nelson e Rodolfo, bons amigos.
- À FAPESP, CNPq e CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Estudamos o modelo de Ising com diluição de sítios numa rede de Bethe. A estrutura hierárquica da rede de Bethe leva de forma natural às relações de recorrência satisfeitas pelas distribuições de probabilidade dos campos efetivos. As quantidades termodinâmicas na rede de Bethe são então expressas explicitamente em termos das distribuições limite dos campos efetivos. As distribuições dos campos efetivos em $T = 0$ são obtidas de forma numericamente exata (isto é, se desprezamos os erros de arredondamento) e também analiticamente em alguns casos selecionados. Encontramos no caso de interações ferromagnéticas um número sempre finito de campos efetivos possíveis, mas no caso de interações antiferromagnéticas esse número pode divergir para valores irracionais do campo aplicado. Esses resultados fornecem o diagrama de fases campo aplicado versus concentração, numericamente exato, para antiferromagneto diluído em $T = 0$. As distribuições dos campos efetivos são determinadas aproximadamente para $T > 0$ e utilizadas para o cálculo de diferentes grandezas termodinâmicas. Apresentamos as curvas de magnetização, energia livre, energia interna e entropia. Esses cálculos fornecem o diagrama de fases aproximado no espaço tridimensional de campo aplicado, temperatura e concentração.

Abstract

The site diluted Ising model is studied on a Bethe lattice. The hierarchical structure of the Bethe lattice leads naturally to recursion relations obeyed by the probability distributions of the effective fields. The thermodynamic quantities on the Bethe lattice are then explicitly written in terms of the limiting distributions of the effective fields. Numerically exact results (i.e. if we neglect roundoff errors) for the distributions of the effective fields for $T = 0$ are presented, together with analytic results for selected cases. It is found that the number of effective fields is always finite in the case of ferromagnetic interactions, but it might diverge for irrational values of the applied field in the case of antiferromagnetic interactions. These results yield a numerically exact applied field versus concentration phase diagram for diluted antiferromagnet at $T = 0$. The distributions of the effective fields are computed approximately for $T > 0$ and used to evaluate various thermodynamic quantities. Curves for the magnetization, free energy, internal energy and entropy are displayed. These calculations give an approximate three-dimensional phase diagram in the space of applied field, temperature and concentration.

Em todo o trabalho, os resultados numéricos e os gráficos são expressos em unidades tais que a constante de Boltzmann e o módulo da constante de troca ficam

$$k_{\text{B}} = 1, \quad |J| = 1.$$

Sumário

1	Introdução	1
2	Árvore de Cayley	12
3	Rede de Bethe	21
3.1	Caso de uma subrede	21
3.2	Caso de duas subredes	23
4	Distribuição dos campos efetivos	27
4.1	Cálculo por simulação	27
4.2	Cálculo numérico	28
4.3	Cálculo analítico	33
5	Modelo sem campo aplicado	36
5.1	Resultados para $H = 0$ e $T = 0$	36
5.2	Resultados para $H = 0$ e $T > 0$	42
5.3	Diagrama de fases T - p	52
6	Modelo ferromagnético com campo aplicado	55
6.1	Resultados para $J > 0$, $H > 0$ e $T = 0$	55
6.2	Resultados para $J > 0$, $H > 0$ e $T > 0$	63
7	Modelo antiferromagnético com campo aplicado	71
7.1	Resultados para $J < 0$, $H > 0$ e $T = 0$	71
7.2	Resultados para $J < 0$, $H > 0$ e $T > 0$	89

SUMÁRIO	vii
8 Conclusões	107
A Cálculo da energia livre	110
B Cálculo da energia interna	114
Referências Bibliográficas	119

Lista de Figuras

1.1	Diagrama de fases esquemático do modelo de Ising ferromagnético diluído.	4
1.2	Diagrama de fases esquemático do modelo de Ising antiferromagnético puro.	5
1.3	Diagrama de fases esquemático do modelo de Ising antiferromagnético diluído.	7
1.4	Uma árvore de Cayley com coordenação $z = 3$ e $n = 4$ gerações.	8
2.1	Árvore de Cayley mostrando a rotulação dos sítios.	13
2.2	Função $g(x)$ para $J > 0$ e temperaturas diferentes.	18
2.3	Função $g(x)$ para $J < 0$ e temperaturas diferentes.	18
3.1	Rede de Bethe dividida em duas subredes.	24
5.1	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 7, H = 0$ e $T = 0$ (Simulação)	37
5.2	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 7, H = 0$ e $T = 0$ (Numérico)	37
5.3	$P_1(\bar{H})$ para $z = 4, p = 0, 7, H = 0$ e $T = 0$ (Numérico)	38
5.4	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 1$ (Simulação)	43
5.5	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 1$ (Numérico)	43
5.6	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 25$ (Simulação)	44
5.7	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 25$ (Numérico)	44
5.8	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 5$ (Simulação)	45
5.9	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 5$ (Numérico)	45
5.10	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 8$ (Simulação)	46
5.11	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 0, 8$ (Numérico)	46
5.12	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 1$ (Numérico)	47
5.13	$P_1(\bar{H})$ para $z = 3, p = 0, 8, H = 0$ e $T = 1, 25$ (Simulação)	47

5.14	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 1,25$ (Numérico)	48
5.15	Magnetização versus T para $z = 3$ e $H = 0$. As linhas tracejadas correspondem à expressão assintótica dada por (5.38).	50
5.16	Energia livre versus T para $z = 3$ e $H = 0$	50
5.17	Energia interna versus T para $z = 3$ e $H = 0$	51
5.18	Entropia versus T para $z = 3$ e $H = 0$	51
5.19	Diagrama de fases temperatura versus concentração.	52
6.1	Campos efetivos possíveis para $z = 2$ e $J > 0$ em $T = 0$	56
6.2	Campos efetivos possíveis para $z = 3$ e $J > 0$ em $T = 0$	56
6.3	Campos efetivos possíveis para $z = 4$ e $J > 0$ em $T = 0$	57
6.4	Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,75$, $H = 0,3$ e $T = 0$	58
6.5	Distribuição dos campos efetivos para $z = 4$, $p = 0,75$, $H = 0,3$ e $T = 0$	58
6.6	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ (Simulação)	64
6.7	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ (Numérico)	64
6.8	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ (Simulação)	65
6.9	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ (Numérico)	65
6.10	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ (Simulação)	66
6.11	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ (Numérico)	66
6.12	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 2$ (Simulação)	67
6.13	$P_1(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 2$ (Numérico)	67
6.14	Magnetização versus T para $z = 3$ e $H = 0,1$	69
6.15	Energia livre versus T para $z = 3$ e $H = 0,1$	69
6.16	Energia interna versus T para $z = 3$ e $H = 0,1$	70
6.17	Entropia versus T para $z = 3$ e $H = 0,1$	70
7.1	Campos efetivos possíveis para $z = 2$ e $J < 0$ em $T = 0$	72
7.2	Campos efetivos possíveis para $z = 3$ e $J < 0$ em $T = 0$	74
7.3	Campos efetivos possíveis para $z = 4$ e $J < 0$ em $T = 0$	74
7.4	$P_1^A(\overline{H})$ para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ (Simulação)	75
7.5	$P_1^A(\overline{H})$ para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ (Numérico)	75

7.6	$P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ (Simulação)	76
7.7	$P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ (Numérico)	76
7.8	Processo de magnetização para $z = 2$, $J < 0$ e $p = 0,3$ em $T = 0$	80
7.9	Processo de magnetização para $z = 2$, $J < 0$ e $p = 0,7$ em $T = 0$	80
7.10	Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,6$ em $T = 0$	81
7.11	Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,7$ em $T = 0$	81
7.12	Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,8$ em $T = 0$	82
7.13	Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,9$ em $T = 0$	82
7.14	Magnetização versus p para $z = 3$, $J < 0$ e $H = 0,5$ em $T = 0$	83
7.15	Magnetização versus p para $z = 3$, $J < 0$ e $H = 1,5$ em $T = 0$	83
7.16	Diagrama de fases campo aplicado versus concentração para $z = 3$ em $T = 0$	84
7.17	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ (Simulação)	90
7.18	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ (Numérico)	90
7.19	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ (Simulação)	91
7.20	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ (Numérico)	91
7.21	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,25$ (Simulação)	92
7.22	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,25$ (Numérico)	92
7.23	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,5$ (Simulação)	93
7.24	$P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$ para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,5$ (Numérico)	93
7.25	Magnetização versus T para $z = 3$ e $H = 1$	96
7.26	Energia livre versus T para $z = 3$ e $H = 1$	96
7.27	Energia interna versus T para $z = 3$ e $H = 1$	97
7.28	Entropia versus T para $z = 3$ e $H = 1$	97
7.29	Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T	98
7.30	Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T	98
7.31	Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T	99
7.32	Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T	99
7.33	Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T	100
7.34	Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T	100

7.35	Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T	101
7.36	Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T	101
7.37	Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T	102
7.38	Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T	102
7.39	Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T	103
7.40	Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T	103
7.41	Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T	104
7.42	Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T	104
7.43	Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T	105
7.44	Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T	105
7.45	Diagrama de fases campo aplicado versus p	106
7.46	Diagrama de fases no espaço T - p - H	106
8.1	Diagrama de fases no espaço T - p - H por grupo de renormalização	108

Capítulo 1

Introdução

A investigação dos sólidos desordenados (Ziman, 1979) tem progredido muito nas últimas décadas. Em particular os sistemas magnéticos desordenados (Fisher, Grinstein, e Khurana, 1988) têm sido estudados intensamente. Isso se deve tanto à relativa simplicidade dos modelos magnéticos quanto à existência de muitas realizações experimentais de tais sistemas. Vidros de spins (Binder e Young, 1986; Mézard, Parisi, e Virasoro, 1987; Fischer e Hertz, 1991; Mydosh, 1993) e modelo de Ising no campo aleatório (Young, 1997) são talvez os modelos magnéticos desordenados mais estudados.

Na discussão de sistemas magnéticos desordenados é importante distinguir claramente a desordem nos estados de spins dos átomos e a desordem espacial entre eles (Brout, 1959). Se a distribuição de probabilidade dos átomos é independente da temperatura diz-se que o sistema é *temperado* (ou *quenched*). Tal nome tem origem na metalurgia, onde *temperar* um metal significa aquecer o sistema a altas temperaturas, onde existe total desordem espacial, e rapidamente esfriá-lo, *congelando* o sistema em um estado (talvez metaestável) onde os átomos permanecem imóveis. Se ao contrário, a distribuição de probabilidade dos átomos e dos estados de spin obedecem à distribuição de Gibbs, diz-se que o sistema é *recozido* (ou *annealed*), pois essa condição poderia ser atingida aquecendo-se o sistema a altas temperaturas e esfriando-o lentamente de forma a permitir que um equilíbrio térmico fosse alcançado entre a configuração dos átomos e os estados dos spins a cada estágio do resfriamento. Nas temperaturas em que as experiências de medidas magnéticas são em geral realizadas, o tempo de difusão atômica é muito maior que o tempo de relaxação

magnética, de forma que a desordem espacial pode ser suposta temperada.

As medidas experimentais são realizadas em uma única amostra macroscópica, que corresponde a uma única realização da desordem temperada. A energia livre de um tal sistema é

$$F_c = -k_B T \ln Z_c, \quad (1.1)$$

onde o índice c indica uma dada realização ou configuração dos átomos. As realizações de desordem diferem de amostra para amostra, mas as medidas experimentais aparentemente não variam de amostra para amostra se elas forem preparadas da mesma forma. Isso pode ser compreendido por meio do seguinte argumento (Brout, 1959). Consideremos um sistema muito grande dividido em um número muito grande de subsistemas $i = 1, 2, \dots, n$ que também contém um número muito grande de átomos. Devido a essa última condição, podemos desprezar a interação entre os subsistemas, da mesma forma como fazemos ao derivar o ensemble canônico a partir do ensemble microcanônico. Portanto, a função de partição fatora-se em um produto de funções de partição dos subsistemas, o que implica

$$F_c = -k_B T \sum_{i=1}^n \ln Z_c^{(i)} = \sum_{i=1}^n F_c^{(i)}, \quad (1.2)$$

onde o índice i indica o i -ésimo subsistema. Agora, como os subsistemas são independentes, as energias livres $F_c^{(i)}$ são variáveis aleatórias independentes. De acordo com o teorema central do limite (Kampen, 1992), para n grande F_c está distribuído normalmente em torno do seu valor esperado $\langle F_c \rangle_c$ com variância proporcional a n . No limite termodinâmico em que podemos tomar $n \rightarrow \infty$, o desvio relativo $1/\sqrt{n}$ pode ser desprezado, de forma que

$$F_c = \langle F_c \rangle_c = -k_B T \langle \ln Z_c \rangle_c. \quad (1.3)$$

Como o sistema aparentemente faz ele próprio a média sobre a desordem espacial, essa propriedade é conhecida como *auto mediação* (*self-averaging*). Embora a *auto mediação* pareça ser uma propriedade bastante geral de sistemas com desordem temperada, ela pode ser violada quando a hipótese de que os subsistemas são independentes deixa de ser válida. Isso foi observado na fase ordenada dos vidros de spins (Binder e Young, 1986), e também em ferromagnetos desordenados na criticalidade (Wiseman e Domany, 1998a,

1998b; Aharony e Harris, 1996). Realizamos os cálculos admitindo a validade da *auto mediação* em todo o trabalho.

As transições de fases e comportamentos críticos em sistemas magnéticos *diluídos* têm sido estudados há várias décadas tanto teórica quanto experimentalmente (Stinchcombe, 1983). A desordem espacial nesses sistemas pode decorrer da existência ou não de átomos magnéticos (*diluição de sítios*) ou da existência ou não de interações magnéticas (*diluição de ligações*). Essa última forma de diluição é menos comum, mas pode ser realizada num material em que os íons magnéticos interagem por *super-troca* (*superexchange*) mediante um íon não magnético substituível (Adachi, Sato, Matsuura, e Ohashi, 1970).

O modelo mais simples para um sistema magnético com diluição de sítios é o modelo de Ising com diluição de sítios (MIDS). Suponhamos que apenas uma fração p de um total de N sítios sejam ocupados por spins. Associamos a cada sítio i uma variável de ocupação c_i tal que $c_i = 1$ se o sítio estiver ocupado e $c_i = 0$ se estiver vazio. Se os sítios são ocupados de forma independente um do outro, as variáveis c_i são variáveis aleatórias independentes com a mesma densidade de probabilidade

$$P(c_i) = p\delta(1 - c_i) + (1 - p)\delta(c_i), \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (1.4)$$

Se a energia de interação entre os spins é J , e é aplicado um campo magnético H , a energia do MIDS é

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} c_i c_j \sigma_i \sigma_j - H \sum_i c_i \sigma_i, \quad (1.5)$$

onde $\langle ij \rangle$ denota as ligações dos sítios ou arestas na rede, e $\sigma_i = \pm 1$ são as variáveis de spin. O caso $J > 0$ favorece o alinhamento paralelo dos spins e corresponde ao MIDS ferromagnético (MIDSF), enquanto o caso $J < 0$ favorece o alinhamento antiparalelo e corresponde ao MIDS antiferromagnético (MIDSA).

O MIDSF tem sido estudado há muito tempo, tendo-se acumulado um substancial corpo de resultados experimentais, numéricos e analíticos (Stinchcombe, 1983). Em sistemas magnéticos diluídos os efeitos magnéticos (térmicos) ocorrem sobrepostos aos efeitos percolativos (geométricos) (Essam, 1972; Stauffer e Aharony, 1995). Abaixo de uma certa concentração crítica $p = p_c$ um spin pertence com probabilidade um a um aglomerado

Figura 1.1: Diagrama de fases esquemático do modelo de Ising ferromagnético diluído. A linha crítica $T_c(p)$ separa a fase ferromagnética F da fase paramagnética P .

finito de spins. Como tais aglomerados finitos não podem sustentar uma ordem de longo alcance, o sistema apresenta magnetização nula para qualquer temperatura positiva. Entretanto a energia livre como função do campo apresenta uma singularidade essencial para campo nulo, conhecida como *singularidade de Griffiths* (Griffiths, 1969). Essa singularidade deve-se à presença de aglomerados finitos arbitrariamente grandes, embora com baixa probabilidade (Domb, 1974; Bakri e Stauffer, 1976). Para concentrações $p > p_c$ um spin pode ainda pertencer a um aglomerado finito, mas existe uma probabilidade não nula $P(p)$ (probabilidade de percolação) de pertencer a um aglomerado infinito. Este aglomerado infinito pode desenvolver ordem de longo alcance, de forma que a magnetização será não nula para temperaturas T menores que uma certa temperatura crítica $T_c(p)$. Experiências e cálculos teóricos mostram que $T_c(p)$ cresce monotonamente a partir de $T_c(p_c) = 0$ ao valor $T_c(1) = T_c$ do sistema puro, conforme ilustrado no diagrama de fases esquemático da Fig. 1.1. O comportamento crítico (classe de universalidade) da transição em $p = p_c$ como função de p é diferente do comportamento crítico da transição em $T_c(1)$ como função de T , pois a estatística de aglomerados é diferente da estatística de spins em temperaturas finitas. O comportamento crítico sobre a linha conectando estes dois casos limites é governado pelo *critério de Harris* (Harris, 1974). Este critério afirma

Figura 1.2: Diagrama de fases esquemático do modelo de Ising antiferromagnético não diluído. A linha crítica $H_c(T)$ separa a fase antiferromagnética AF da fase paramagnética P.

que se o expoente crítico α do calor específico do sistema puro for *negativo* a diluição não altera o comportamento crítico, enquanto que se for *positivo* o comportamento crítico pode ser alterado.

Em materiais isolantes o antiferromagnetismo é mais comum que o ferromagnetismo, de modo que as experiências em sistemas descritos por MDSA são mais comuns que aqueles descritos por MDSF. Na ausência do campo aplicado, e em redes bipartíveis em duas subredes A e B, o MDSA mapeia-se no MDSF pela transformação

$$J \longrightarrow -J, \quad \sigma_i \longrightarrow -\sigma_i \quad (i \in A), \quad (1.6)$$

de modo que os dois modelos apresentam o mesmo comportamento termodinâmico. Em redes não bipartíveis, como a rede triangular, esse mapeamento não é possível, e o estado de mais baixa energia é *frustrado* (Toulouse, 1977). Notemos que os cálculos aqui apresentados não incluem este último tipo de sistema. Na presença de campo, os dois modelos se comportam de maneiras diferentes. A ordem antiferromagnética é caracterizada pelo parâmetro de ordem denominado magnetização “*staggered*”, que é a diferença entre as magnetizações das duas subredes. Esta ordem de longo alcance é destruída para campos aplicados suficientemente grandes.

No modelo de Ising antiferromagnético *não* diluído os resultados teóricos mostram que a fase ordenada persiste até um campo crítico $H_c(T)$, como ilustramos na Fig. 1.2. O campo crítico em temperatura nula é $H_c(0) = z|J|$, onde z é a coordenação da rede. Neste ponto o estado fundamental é altamente degenerado e o sistema apresenta uma entropia residual (Milošević, Stošić, e Stošić, 1989). O comportamento crítico não é afetado pelo campo aplicado, permanecendo o mesmo encontrado para $H = 0$ ao longo de toda a linha (Lipowski e Suzuki, 1992).

No caso do MDSA o diagrama de fases deve ser estudado no espaço tridimensional de variáveis T , p e H . É natural conjecturar que haja uma superfície crítica $H_c(p, T)$ unindo as linhas críticas para $H = 0$ e $p = 1$, como indicado na Fig. 1.3. Há um grande interesse em se estudar o comportamento crítico dessa superfície devido principalmente à prova, no contexto da teoria de grupo de renormalização (Fishman e Aharony, 1979; Cardy, 1984), de que o comportamento crítico do MDSA na presença de um campo externo e do modelo de Ising no campo aleatório (MICA) (Young, 1997) seriam idênticos para baixos campos aplicados. Embora este último sistema seja irrealizável na prática, o MDSA é bastante comum, e extensas investigações experimentais foram realizadas no sentido de determinar o seu comportamento crítico (Belanger, 1997).

Uma consequência da teoria de grupo de renormalização (Fishman e Aharony, 1979; Cardy, 1984) é que a depressão da temperatura crítica é dada por

$$T_c(p, H) - T_c(p, 0) \sim H^{2/\phi} \quad (1.7)$$

onde $\phi = \gamma \approx 1,5$ (Gofman, Adler, Aharony, Harris, e Schwartz, 1996) para $d = 3$ é o expoente de “crossover”. Argumentos heurísticos (Gefen, Aharony, Shapir, e Berker, 1982) desenvolvidos para MICA sugerem que perto da concentração crítica a linha de transição em $T = 0$ se comporta como

$$H_c(p, 0) \sim (p - p_c)^{(\gamma_p + \beta_p)/2}, \quad (1.8)$$

onde β_p e γ_p são expoentes críticos de percolação (Stauffer e Aharony, 1995) associados à probabilidade de percolação

$$P(p) \sim (p - p_c)^{\beta_p}, \quad (p < p_c), \quad (1.9)$$

Figura 1.3: Diagrama de fases esquemático do modelo de Ising antiferromagnético diluído.

e tamanho médio dos aglomerados,

$$S(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma_p}. \quad (1.10)$$

Como $\beta_p + \gamma_p \approx 2,7$ e $2,2$ para dimensões $d = 2$ e $d = 3$, respectivamente (Stauffer e Aharony, 1995), a linha crítica aproxima-se do eixo p tangencialmente para $T = 0$, em contraste com a aproximação com derivada infinita para $H = 0$. O esboço da Fig. 1.3 foi feito de modo que seja consistente com esses fatos. Um estudo baseado no grupo de renormalização no espaço real mostra que a linha crítica $H_c(p, 0)$ apresenta uma série de degraus (Oliveira, Oliveira, e Continentino, 1988). A origem desses degraus está relacionada com existência de classes de aglomerados que magnetizam-se diferentemente conforme o valor do campo aplicado (Morgenstern, Binder, e Hornreich, 1981; Hartmann, 1998; Bastea e Duxbury, 1998).

Dentro da teoria de campo médio onde os spins interagem igualmente com todos os demais, o MIDSA é mapeado exatamente ao MICA com distribuição bimodal de campo aleatório (Perez, Pontin, e Segundo, 1986; Matos, Segundo, e Perez, 1992), que sabemos apresentar comportamento tricrítico (Aharony, 1978; Salinas e Wreszinski, 1985). A teoria de grupo de renormalização de campo médio foi recentemente aplicada ao MIDSA e

também sugere a ocorrência de comportamento tricrítico (Reinehr e Figueiredo, 1998). Entretanto como o alcance da interação é infinito, a teoria de campo médio é irrealista por não apresentar efeito percolativo, uma característica essencial em sistemas diluídos.

Figura 1.4: Uma árvore de Cayley com coordenação $z = 3$ e $n = 4$ gerações.

Uma teoria um pouco mais realista pode ser obtida considerando-se o MIDS numa *rede de Bethe*. Na Mecânica Estatística entende-se por rede de Bethe a porção central de uma *árvore de Cayley* (Baxter, 1982) ilustrada na Fig. 1.4. Partindo de um sítio central a árvore vai se ramificando sem nunca formar ciclos. Uma árvore de Cayley de coordenação $z = 2$ reduz-se a uma cadeia unidimensional. A distinção entre a rede de Bethe e árvore de Cayley é muito importante para coordenações $z > 2$. Embora a aproximação de Bethe-Peierls para o modelo de Ising puro seja exata na rede de Bethe (Domb, 1960), o que justifica esta denominação, as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising na árvore de Cayley são bem distintas daquelas encontradas em redes usuais (Eggarter, 1974; Müller-Hartman e Zittartz, 1974). Isso ocorre porque numa árvore de Cayley com coordenação $z > 2$ o número de sítios na superfície é maior que o número de sítios no interior da árvore (Runnels, 1967).

Como as propriedades termodinâmicas na árvore de Cayley são bem diferentes daquelas encontradas em sistemas reais, estamos interessados nas propriedades do MIDS na rede de Bethe. Este problema é atraente por diversos motivos. Talvez o mais relevante seja a presença de efeito percolativo (Fisher e Essam, 1961), o que deve levar a um diagrama de fases mais realista que no caso de interações de alcance infinito (Perez et al., 1986; Matos et al., 1992). Outra motivação é a possibilidade de resolver o problema exatamente, isto é, sem utilizar aproximações não controladas. Além do mais, a estrutura hierárquica da árvore de Cayley permite que o problema seja resolvido iterativamente. Naturalmente o MIDS na rede de Bethe foi estudado anteriormente por diversos pesquisadores. Podemos mencionar o estudo das propriedades críticas (Bell, 1975; Katsura e Takizawa, 1974; Young, 1976; Heinrichs, 1978), a singularidade de Griffiths (Harris, 1975; Barata e Marchetti, 1997) e a distribuição das magnetizações (Mulder e Papatriantafillou, 1989). Aparentemente os únicos trabalhos sobre MIDSA na rede de Bethe se referem ao caso unidimensional (Matsubara, Yoshimura, e Katsura, 1973) e ao estudo de propriedades críticas em $T = 0$ perto da percolação crítica (Aharony, Harris, e Meir, 1985). Diferentemente da maioria desses trabalhos que se preocupam mais com o comportamento crítico, o nosso objetivo será o estudo das propriedades termodinâmicas e do diagrama de fases do MIDS na rede de Bethe. Contrariamente ao caso do MIDSA, existe um considerável número de trabalhos sobre o MICA na rede de Bethe (Bruinsma, 1984; Hartzstein e Entinwohlman, 1985; Bleher, Ruiz, e Zagrebnov, 1998; Nowotny, Patzlaff, e Behn, 2002). Entretanto, apesar de pertencerem à mesma classe de universalidade, o comportamento termodinâmico do MICA (Derrida, Vannimenus, e Pomeau, 1978; Bruinsma e Aeppli, 1983) difere consideravelmente daquele do MIDSA (Matsubara et al., 1973) já para uma cadeia unidimensional, e não podemos esperar que a situação seja diferente para redes de Bethe. Devemos ainda mencionar os trabalhos sobre MIDS utilizando a aproximação de Bethe-Peierls, já que esta aproximação é exata para a rede de Bethe (Oguchi e Obokata, 1969; Labarta, Marro, e Tejada, 1986), mas não encontramos essa aproximação empregada para o MIDSA.

Daqui para frente estudamos o problema do MIDS numa rede de Bethe. No capítulo 2 introduzimos o formalismo de campos efetivos para a solução do modelo numa árvore de

Cayley. No capítulo 3 obtemos as distribuições de probabilidade dos campos efetivos na região central de uma árvore de Cayley infinita, ou seja, na rede de Bethe. São obtidas expressões explícitas para a magnetização, a energia livre e energia interna em termos da distribuição dos campos efetivos. A energia livre é obtida pela integração da magnetização e a energia interna pela derivação da energia livre. Devido à extensão dos cálculos envolvidos, eles foram relegados aos apêndices A e B. Como a distribuição dos campos efetivos desempenha papel central na teoria, os diferentes métodos empregados para a sua determinação são explicados no capítulo 4. No capítulo 5 apresentamos os resultados obtidos na ausência do campo aplicado. Os campos efetivos possíveis e os pesos estatísticos correspondentes em $T = 0$ são determinados numericamente e os resultados confirmados por um cálculo analítico subsequente. Para $T > 0$ as distribuições de probabilidade dos campos efetivos são determinadas numericamente, e utilizados para o cálculo das propriedades termodinâmicas. Determinamos também o diagrama de fases temperatura versus concentração obtido anteriormente por diferentes métodos. No capítulo 6 apresentamos os resultados obtidos para o MDSF na presença do campo aplicado. Em $T = 0$ determinamos inicialmente os campos efetivos possíveis numericamente. Os campos efetivos possíveis são em número finito e dependem do campo aplicado de uma forma regular, o que permite induzir uma expressão analítica e também determinar os pesos estatísticos analiticamente. Para $T > 0$ as distribuições de probabilidades dos campos efetivos foram determinadas numericamente e utilizadas para o cálculo das propriedades termodinâmicas. Como é bem estabelecido, não há transição de fases na presença do campo aplicado. No capítulo 7 apresentamos os resultados para o MDSA na presença do campo aplicado. Em $T = 0$ determinamos os campos efetivos possíveis numericamente para valores racionais do campo aplicado, e constatamos que para campos aplicados baixos o seu número cresce com o denominador da fração irredutível do número racional, sugerindo um número infinito de campos efetivos possíveis para valores irracionais do campo aplicado. Monitorando-se o desaparecimento da magnetização “staggered” pudemos determinar o diagrama de fases campo aplicado versus concentração. Somente para campos altos, onde o número de campos efetivos possíveis é finito, pudemos determinar analiti-

camente os campos efetivos possíveis e os pesos estatísticos correspondentes. Para $T > 0$ as distribuições de probabilidade dos campos efetivos foram determinadas numericamente e utilizadas para o cálculo das propriedades termodinâmicas. Determinamos o diagrama de fases campo aplicado versus temperatura para diferentes concentrações monitorando o desaparecimento da magnetização “staggered”. Finalmente, no capítulo 8 comentamos os resultados novos obtidos no contexto de outros trabalhos existentes a respeito do MIDS.

Capítulo 2

Árvore de Cayley

A estrutura ramificada da árvore de Cayley permite que a solução do problema do MIDS seja obtida exatamente e expressa em termos de relações de recorrência. No próximo capítulo essa solução será considerada na região central da árvore, ou seja, na rede de Bethe. A notação e o método de solução que empregamos baseia-se em trabalhos anteriores no mesmo sistema na ausência de diluição (Katsura e Takizawa, 1974; Thompson, 1982).

Para construir uma árvore de Cayley de coordenação z partimos de um sítio central $i_0 = 0$ ao qual conectamos z sítios $i_1 = 1, 2, \dots, z$ que formarão a primeira camada. A cada sítio desta camada conectamos $z - 1$ sítios $i_2 = 1, 2, \dots, z - 1$ que formarão a segunda camada. Prosseguimos assim sucessivamente até a camada n que constitui a *superfície* da árvore. Uma árvore de coordenação $z = 3$ e $n = 3$ camadas está mostrada na Fig. 1.4. Um sítio arbitrário da k -ésima camada será rotulado pela lista de k números $i_1 i_2 \dots i_k = \mathbf{i}_k$. Um sítio $\mathbf{i}_k$ define também a origem de um *ramo* formado por todos os sítios $i_1 i_2 \dots i_k i_{k+1} \dots i_l = \mathbf{i}_k i_{k+1} \dots i_l$ com $l = k + 1, \dots, n$.

Usando a notação para sítios descrita acima, a expressão explícita da energia (1.5)

Figura 2.1: Árvore de Cayley com coordenação $z = 3$ e $n = 3$ camadas, mostrando a rotulação dos sítios.

numa árvore de Cayley fica

$$\begin{aligned}
 E_c = & -J \sum_{i_1=1}^z c_0 c_{i_1} \sigma_0 \sigma_{i_1} - J \sum_{i_1=1}^z \sum_{i_2=1}^{z-1} c_{i_1} c_{i_1 i_2} \sigma_{i_1} \sigma_{i_1 i_2} - \dots \\
 & - J \sum_{i_1=1}^z \sum_{i_2=1}^{z-1} \dots \sum_{i_n=1}^{z-1} c_{i_{n-1}} c_{i_n} \sigma_{i_{n-1}} \sigma_{i_n} - H_0 c_0 \sigma_0 - \sum_{i_1=1}^z H_{i_1} c_{i_1} \sigma_{i_1} \\
 & - \sum_{i_1=1}^z \sum_{i_2=1}^{z-1} H_{i_1 i_2} c_{i_1 i_2} \sigma_{i_1 i_2} - \dots - \sum_{i_1=1}^z \sum_{i_2=1}^{z-1} \dots \sum_{i_n=1}^{z-1} H_{i_n} c_{i_n} \sigma_{i_n},
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde H_{i_k} é o campo aplicado no sítio i_k . Essa generalização não acarreta dificuldades adicionais e serve para calcular os valores esperados dos spins individuais. No final, entretanto, consideraremos apenas o caso de um campo aplicado homogêneo $H_{i_k} = H$.

A função de partição para uma dada realização da ocupação dos sítios é

$$Z_c = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta E_c}, \quad \text{onde } \beta = \frac{1}{k_B T}. \tag{2.2}$$

Começando pelo sítio central escrevemos a função de partição como

$$Z_c = \sum_{\sigma_0=\pm 1} Z_0(c_0 \sigma_0), \tag{2.3}$$

onde $Z_0(c_0 \sigma_0)$ é a função de partição da árvore de Cayley para um dado valor do spin central σ_0 . Como o sítio central está conectado apenas aos sítios $i_1 = 1, 2, \dots, z$ da

primeira camada, $Z_0(c_0\sigma_0)$ fatora-se sob a forma

$$Z_0(c_0\sigma_0) = e^{\beta H_0 c_0 \sigma_0} \prod_{i_1=1}^z \sum_{\sigma_{i_1}=\pm 1} e^{\beta J c_0 \sigma_0 c_{i_1} \sigma_{i_1}} Z_{i_1}(c_{i_1} \sigma_{i_1}), \quad (2.4)$$

onde $Z_{i_1}(c_{i_1} \sigma_{i_1})$ é a função de partição do ramo i_1 da árvore para um dado valor do spin σ_{i_1} . Como o sítio i_1 está conectado apenas aos sítios $i_2 = 1, 2, \dots, z-1$ da segunda camada, $Z_{i_1}(c_{i_1} \sigma_{i_1})$ pode também ser fatorada,

$$Z_{i_1}(c_{i_1} \sigma_{i_1}) = e^{\beta H_{i_1} c_{i_1} \sigma_{i_1}} \prod_{i_2=1}^{z-1} \sum_{\sigma_{i_1 i_2}=\pm 1} e^{\beta J c_{i_1} \sigma_{i_1} c_{i_1 i_2} \sigma_{i_1 i_2}} Z_{i_1 i_2}(c_{i_1 i_2} \sigma_{i_1 i_2}), \quad (2.5)$$

onde $Z_{i_1 i_2}(c_{i_1 i_2} \sigma_{i_1 i_2})$ é a função de partição do ramo $i_1 i_2$ com um dado valor do spin $\sigma_{i_1 i_2}$. Em geral, podemos escrever a função de partição do ramo $i_1 i_2 \dots i_k = \mathbf{i}_k$ em termos das funções de partição dos ramos $i_1 i_2 \dots i_k i_{k+1} = \mathbf{i}_k i_{k+1}$,

$$Z_{\mathbf{i}_k}(c_{\mathbf{i}_k} \sigma_{\mathbf{i}_k}) = e^{\beta H_{\mathbf{i}_k} c_{\mathbf{i}_k} \sigma_{\mathbf{i}_k}} \prod_{i_{k+1}=1}^{z-1} \sum_{\sigma_{\mathbf{i}_k i_{k+1}}=\pm 1} e^{\beta J c_{\mathbf{i}_k} \sigma_{\mathbf{i}_k} c_{\mathbf{i}_k i_{k+1}} \sigma_{\mathbf{i}_k i_{k+1}}} Z_{\mathbf{i}_k i_{k+1}}(c_{\mathbf{i}_k i_{k+1}} \sigma_{\mathbf{i}_k i_{k+1}}), \quad (2.6)$$

para as camadas $k = 1, 2, \dots, n-1$. Os sítios da camada de superfície $k = n$ não possuem ramos, de modo que

$$Z_{\mathbf{i}_n}(c_{\mathbf{i}_n} \sigma_{\mathbf{i}_n}) = e^{\beta H_{\mathbf{i}_n} c_{\mathbf{i}_n} \sigma_{\mathbf{i}_n}} = Q_{\mathbf{i}_n} e^{\beta \bar{H}_{\mathbf{i}_n} c_{\mathbf{i}_n} \sigma_{\mathbf{i}_n}} \quad (2.7)$$

onde definimos

$$Q_{\mathbf{i}_n} = 1, \quad \bar{H}_{\mathbf{i}_n} = H_{\mathbf{i}_n}. \quad (2.8)$$

Podemos agora começar o cálculo da função de partição efetuando-se o traço parcial sobre os spins da superfície. A função de partição dos ramos na camada $k = n-1$ é, substituindo (2.7) em (2.6) para $k = n-1$,

$$Z_{\mathbf{i}_{n-1}}(c_{\mathbf{i}_{n-1}} \sigma_{\mathbf{i}_{n-1}}) = e^{\beta H_{\mathbf{i}_{n-1}} c_{\mathbf{i}_{n-1}} \sigma_{\mathbf{i}_{n-1}}} \prod_{i_n=1}^{z-1} Q_{\mathbf{i}_n} \sum_{\sigma_{\mathbf{i}_{n-1} i_n}=\pm 1} e^{\beta (J c_{\mathbf{i}_{n-1}} \sigma_{\mathbf{i}_{n-1}} + \bar{H}_{\mathbf{i}_n}) c_{\mathbf{i}_n} \sigma_{\mathbf{i}_n}} \quad (2.9)$$

Usando-se a identidade

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma'=\pm 1} e^{\beta (J c \sigma + \bar{H}) c' \sigma'} &= 2^{1-c'} [2 \cosh \beta (J c \sigma + \bar{H})]^{c'} \\ &= 2^{1-c'} (2 \cosh \beta \bar{H})^{(1-c)'} [4 \cosh \beta (J + \bar{H}) \cosh \beta (J - \bar{H})]^{cc'/2} \\ &\quad \times \exp [\tanh^{-1}(\tanh \beta J \tanh \beta \bar{H}) cc' \sigma], \end{aligned} \quad (2.10)$$

a função de partição (2.9) fica

$$Z_{\mathbf{i}_{n-1}}(c_{\mathbf{i}_{n-1}}\sigma_{\mathbf{i}_{n-1}}) = Q_{\mathbf{i}_{n-1}} e^{\beta \bar{H}_{\mathbf{i}_{n-1}} c_{\mathbf{i}_{n-1}} \sigma_{\mathbf{i}_{n-1}}}, \quad (2.11)$$

onde

$$Q_{\mathbf{i}_{n-1}} = \prod_{i_n=1}^{z-1} Q_{\mathbf{i}_n} 2^{1-c_{i_n}} (2 \cosh \beta \bar{H}_{\mathbf{i}_n})^{(1-c_{i_n-1})c_{i_n}} [4 \cosh \beta (J + \bar{H}_{\mathbf{i}_n}) \cosh \beta (J - \bar{H}_{\mathbf{i}_n})]^{c_{i_n-1} c_{i_n}/2}, \quad (2.12)$$

e

$$\bar{H}_{\mathbf{i}_{n-1}} = H_{\mathbf{i}_{n-1}} + \frac{1}{\beta} \sum_{i_n=1}^{z-1} c_{i_n} \tanh^{-1}(\tanh \beta J \tanh \beta \bar{H}_{\mathbf{i}_n}). \quad (2.13)$$

$\bar{H}_{\mathbf{i}_{n-1}}$ pode ser interpretado como sendo o *campo efetivo* agindo no sítio $\mathbf{i}_{n-1}$ devido aos sítios da superfície a ele conectados. Podemos agora repetir o passo acima camada por camada. Para a função de partição de um ramo da camada k obtemos a expressão

$$Z_{\mathbf{i}_k}(c_{\mathbf{i}_k}\sigma_{\mathbf{i}_k}) = Q_{\mathbf{i}_k} e^{\beta \bar{H}_{\mathbf{i}_k} c_{\mathbf{i}_k} \sigma_{\mathbf{i}_k}}, \quad (2.14)$$

onde

$$Q_{\mathbf{i}_k} = \prod_{i_{k+1}=1}^{z-1} Q_{\mathbf{i}_{k+1}} 2^{1-c_{i_{k+1}}} (2 \cosh \beta \bar{H}_{\mathbf{i}_{k+1}})^{(1-c_{i_k})c_{i_{k+1}}} \times [4 \cosh \beta (J + \bar{H}_{\mathbf{i}_{k+1}}) \cosh \beta (J - \bar{H}_{\mathbf{i}_{k+1}})]^{c_{i_k} c_{i_{k+1}}/2}, \quad (2.15)$$

e

$$\bar{H}_{\mathbf{i}_k} = H_{\mathbf{i}_k} + \frac{1}{\beta} \sum_{i_{k+1}=1}^{z-1} c_{i_{k+1}} \tanh^{-1}(\tanh \beta J \tanh \beta \bar{H}_{\mathbf{i}_{k+1}}), \quad (2.16)$$

para camadas $k = n-1, n-2, \dots, 2, 1$. Para o sítio central $k = 0$ teremos

$$Z_0(c_0\sigma_0) = Q_0 e^{\beta \bar{H}_0 c_0 \sigma_0}, \quad (2.17)$$

onde

$$Q_0 = \prod_{i_1=1}^z Q_{\mathbf{i}_1} 2^{1-c_{i_1}} (2 \cosh \beta \bar{H}_{\mathbf{i}_1})^{(1-c_0)c_{i_1}} [4 \cosh \beta (J + \bar{H}_{\mathbf{i}_1}) \cosh \beta (J - \bar{H}_{\mathbf{i}_1})]^{c_0 c_{i_1}/2}, \quad (2.18)$$

e

$$\bar{H}_0 = H_0 + \frac{1}{\beta} \sum_{i_1=1}^z c_{i_1} \tanh^{-1}(\tanh \beta J \tanh \beta \bar{H}_{\mathbf{i}_1}). \quad (2.19)$$

Substituindo o resultado (2.17) e (2.3) obtemos para a função de partição da árvore de Cayley

$$Z_c = \sum_{\sigma_0=\pm 1} Q_0 e^{\beta \bar{H}_0 c_0 \sigma_0} = Q_0 2^{1-c_0} (2 \cosh \beta \bar{H}_0)^{c_0}. \quad (2.20)$$

Da condição inicial (2.8) e relações de recorrência (2.15) e (2.18) para Q_{i_k} , obtemos

$$Q_0 = \prod_{k=1}^n T_k, \quad (2.21)$$

onde

$$T_1 = \prod_{i_1=1}^z 2^{1-c_{i_1}} (2 \cosh \beta \bar{H}_{i_1})^{(1-c_0)c_{i_1}} [4 \cosh \beta (J + \bar{H}_{i_1}) \cosh \beta (J - \bar{H}_{i_1})]^{c_0 c_{i_1}/2}, \quad (2.22)$$

e

$$T_k = \prod_{i_1=1}^z \cdots \prod_{i_k=1}^{z-1} 2^{1-c_{i_k}} (2 \cosh \beta \bar{H}_{i_k})^{(1-c_{i_{k-1}})c_{i_k}} [4 \cosh \beta (J + \bar{H}_{i_k}) \cosh \beta (J - \bar{H}_{i_k})]^{c_{i_{k-1}}c_{i_k}/2}, \quad (2.23)$$

para $k = 2, 3, \dots, n$. Finalmente, a função de partição da árvore de Cayley fica

$$Z = 2^{1-c_0} (2 \cosh \beta \bar{H}_0)^{c_0} \prod_{k=1}^n T_k. \quad (2.24)$$

A energia livre da árvore de Cayley para uma dada distribuição dos sítios ocupados é

$$\beta F_c = -\ln Z = -(1-c_0) \ln 2 - c_0 \ln 2 \cosh \beta \bar{H}_0 - \sum_{k=1}^n \ln T_k. \quad (2.25)$$

A magnetização do spin central pode ser obtida derivando-se a energia livre relativamente ao campo H_0 aplicado ao spin central,

$$m_c = -\frac{\partial F_c}{\partial H_0}. \quad (2.26)$$

Como T_k para $k \geq 1$ não dependem de H_0 , somente o segundo termo na expressão da energia livre (2.25) contribui à derivada. Assim

$$m_c = c_0 \tanh \beta \bar{H}_0 \frac{\partial \bar{H}_0}{\partial H_0} = c_0 \tanh \beta \bar{H}_0. \quad (2.27)$$

No restante deste capítulo suporemos que esteja aplicado um campo uniforme $H \geq 0$ em todos os sítios internos,

$$H_0 = H_{i_k} = H, \quad k = 1, \dots, n-1, \quad (2.28)$$

enquanto nos sítios da superfície aplicaremos um campo estritamente positivo,

$$H_{i_n} = H_n > 0. \quad (2.29)$$

Este campo da superfície serve para quebrar a simetria por inversão global dos spins no caso $H = 0$.

Os campos efetivos são variáveis aleatórias determinadas pelas equações de recorrência estocásticas (2.16) e (2.19). Como as variáveis aleatórias de ocupação c_{i_k} são independentes e identicamente distribuídas, os campos efetivos $\bar{H}_{i_k}$ são independentes e identicamente distribuídas para uma dada camada k . Denotando por $\bar{H}_k$ o campo efetivo num sítio da camada k , e por $\bar{H}_{k+1}^{(i)}$ os campos efetivos nos sítios i da camada $k+1$ vizinhos a esse sítio, as relações de recorrência estocásticas (2.16) e (2.19) ficam

$$\bar{H}_k = H + \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_{k+1}^{(i)}), \quad (2.30)$$

para $k = 1, \dots, n-1$ e

$$\bar{H}_0 = H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_1^{(i)}) \quad (2.31)$$

para o sítio central, onde definimos a função

$$g(x) = \frac{1}{\beta} \tanh^{-1}(\tanh \beta J \tanh \beta x), \quad (2.32)$$

que aparecerá repetidamente ao longo desta tese. O seu comportamento está ilustrado nas figuras 2.2 e 2.3. Observamos que no limite $T = 0$ a função é linear por intervalos

$$g(x) = \text{sgn}(J) \text{sgn}(x) \min(|J|, |x|). \quad (2.33)$$

Figura 2.2: Função $g(x)$ para $J > 0$ e temperaturas diferentes.

Figura 2.3: Função $g(x)$ para $J < 0$ e temperaturas diferentes.

Seja $P_k(\bar{H}_k)$ a densidade de probabilidade do campo efetivo da camada k . Como o campo efetivo na camada k é dada como função das variáveis aleatórias na camada $k+1$ pela relação de recorrência estocástica (2.30), as densidades de probabilidade correspondentes satisfarão a relação de recorrência (Kampen, 1992; Gillespie, 1983)

$$P_k(\bar{H}_k) = \int \delta(\bar{H}_k - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_{k+1}^{(i)})) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_{k+1}(\bar{H}_{k+1}^{(i)}) d\bar{H}_{k+1}^{(i)}, \quad (2.34)$$

para $k = 1, 2, \dots, n-1$. Para a camada da superfície $k = n$ temos de (2.8) e (2.29)

$$P_n(\bar{H}_n) = \delta(\bar{H}_n - H_n), \quad (2.35)$$

enquanto para o sítio central $k = 0$ temos da equação estocástica (2.31)

$$P_0(\bar{H}_0) = \int \delta(\bar{H}_0 - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_1^{(i)})) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_1^{(i)}) d\bar{H}_1^{(i)}. \quad (2.36)$$

O valor esperado da magnetização do spin central (2.27) é dado por

$$m = \langle m_c \rangle_c = \langle c_0 \tanh \beta \bar{H}_0 \rangle_c = p \int d\bar{H} P_0(\bar{H}) \tanh \beta \bar{H}, \quad (2.37)$$

onde $\langle \dots \rangle_c$ denota o valor esperado em relação às variáveis de ocupação c_{i_k} .

O valor esperado da energia livre (2.25) é

$$\begin{aligned} \beta F = \beta \langle F_c \rangle_c = & -\ln 2 - \langle c_0 \ln \cosh \beta \bar{H}_0 \rangle_c - \sum_{k=1}^n \sum_{i_1=1}^z \sum_{i_2=1}^{z-1} \dots \sum_{i_k=1}^{z-1} \left\langle (1 - c_{i_k}) \ln 2 + \right. \\ & \left. \times (1 - c_{i_{k-1}}) c_{i_k} \ln 2 \cosh \beta \bar{H}_{i_k} + \frac{1}{2} c_{i_{k-1}} c_{i_k} \ln [4 \cosh \beta (J + \bar{H}_{i_k}) \cosh \beta (J - \bar{H}_{i_k})] \right\rangle_c. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Como os campos efetivos $\bar{H}_{i_k}$ são independentes e identicamente distribuídos numa mesma camada k , a expressão acima reduz-se a

$$\begin{aligned} \beta F = & -\ln 2 - p \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - \sum_{k=1}^n z(z-1)^{k-1} \int \left\{ (1-p) \ln 2 \right. \\ & \left. + (1-p)p \ln 2 \cosh \beta \bar{H} + \frac{p^2}{2} \ln [4 \cosh \beta (J + \bar{H}) \cosh \beta (J - \bar{H})] \right\} P_k(\bar{H}) d\bar{H}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Observamos que a energia livre (2.39) é dominada, para $z > 2$, pela contribuição dos sítios próximos à superfície devido ao crescimento exponencial desses sítios conforme afastamos do interior da árvore de Cayley. Essa forte não homogeneidade leva a propriedades que

são remotas quando comparados aos sistemas em redes convencionais. Por isso devemos considerar a rede de Bethe, constituída pelos sítios no interior da árvore de Cayley no limite em que o número de camadas $n \rightarrow \infty$.

Capítulo 3

Rede de Bethe

Denotemos por $P_k^{(n)}(\bar{H})$ a densidade de probabilidade para o campo efetivo na camada k de uma árvore de Cayley com n camadas. Um sítio na camada k de uma árvore de Cayley com $n - 1$ camadas é equivalente a um sítio da camada $k + 1$ de uma árvore com n camadas. Como esses ramos equivalentes geram os mesmos campos efetivos estocásticos, temos a igualdade

$$P_{k+1}^{(n)}(\bar{H}) = P_k^{(n-1)}(\bar{H}). \quad (3.1)$$

As relações de recorrência (2.34) podem então ser reescritas em termos de $P_k^{(n)}(\bar{H})$ sob a forma

$$P_k^{(n)}(\bar{H}) = \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_k^{(n-1)}(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \quad (3.2)$$

No limite $n \rightarrow \infty$ de uma árvore infinita, esperamos dois tipos de comportamentos para a densidade de probabilidade $P_k^{(n)}(\bar{H})$: convergência a uma distribuição limite ou convergência a distribuições formando um ciclo limite de período 2.

3.1 Caso de uma subrede

Consideremos inicialmente o caso em que há convergência a uma distribuição limite,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_k^{(n)}(\bar{H}) = P_k(\bar{H}). \quad (3.3)$$

A distribuição limite deve satisfazer a equação de auto-consistência

$$P_k(\bar{H}) = \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_k(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \quad (3.4)$$

É claro, portanto, que os campos efetivos apresentam as mesmas distribuições em todas as camadas internas k , $1 < k < \infty$, iguais às da primeira camada

$$P_k(\bar{H}) = P_1(\bar{H}). \quad (3.5)$$

A distribuição dos campos efetivos no sítio central é, da equação (2.36),

$$P_0(\bar{H}) = \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \quad (3.6)$$

A distribuição $P_0(\bar{H})$ pode, entretanto, ser determinada de uma forma mais simples a partir da distribuição $P_1(\bar{H})$. De fato, a equação (3.6) para $P_0(\bar{H})$ pode ser reescrita

$$\begin{aligned} P_0(\bar{H}_0) = \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - c_z g(\bar{H}_z)) & \left[\int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \right. \\ & \times \left. \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \right] d\bar{H} P(c_z) dc_z P_1(\bar{H}_z) d\bar{H}_z. \end{aligned} \quad (3.7)$$

O termo entre colchetes é justamente $P_1(\bar{H})$, de modo que

$$P_0(\bar{H}_0) = \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - c g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P(c) dc P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (3.8)$$

Integrando em c ,

$$P_0(\bar{H}_0) = (1 - p) P_1(\bar{H}_0) + p \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (3.9)$$

O caso de convergência a uma distribuição limite corresponde a uma rede de Bethe onde todos os sítios são equivalentes. $P_1(\bar{H})$ pode então ser interpretado como a distribuição do campo efetivo devido a $z - 1$ ramos vizinhos ao sítio, enquanto $P_0(\bar{H})$ é a distribuição do campo efetivo total devido aos z ramos vizinhos ao sítio. A magnetização em todos os sítios é igual e dada pela equação (2.37). Uma vez que a magnetização é conhecida, podemos reconstruir a partir dela a energia livre por sítio f da rede de Bethe (Baxter, 1982; Thompson, 1982), a qual é *definida* como sendo aquela que satisfaz a relação termodinâmica

$$m = - \frac{\partial f}{\partial H}. \quad (3.10)$$

A energia livre pode, portanto, ser determinada integrando a equação

$$\frac{\partial f}{\partial H} = -p \int \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (3.11)$$

a menos de uma função independente de H . Essa função pode ser fixada observando que no limite $H \rightarrow \infty$,

$$f = -\frac{1}{2} J z p^2 - H p. \quad (3.12)$$

De fato, nesse limite todos os spins tendem a se alinhar com o campo, de modo que a entropia se anula e a energia livre coincide com a energia (1.5), de forma que

$$F = \langle E \rangle_c = \left\langle -J \sum_{\langle ij \rangle} c_i c_j - H \sum_i c_i \right\rangle_c = -\frac{1}{2} J N z p^2 - H N p, \quad (3.13)$$

o que leva ao resultado (3.12). A integração da equação (3.11) é feita no apêndice A. O resultado para a energia livre por sítio é

$$\begin{aligned} \beta f = & p(z-1) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - zp(1-p) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} \\ & - \frac{zp^2}{2} \int \ln 2 [e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \end{aligned} \quad (3.14)$$

A energia interna por sítio u pode ser determinada a partir da relação termodinâmica

$$u = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f). \quad (3.15)$$

Esse cálculo é reproduzido no apêndice B, e a expressão final é

$$\begin{aligned} u = & -\frac{zp^2 J}{2} \int \left[\frac{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') - e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')}{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')} \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ & - p H \int \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} \end{aligned} \quad (3.16)$$

3.2 Caso de duas subredes

A relação de recorrência (3.2) pode não convergir a um limite para $n \rightarrow \infty$, mas ser levada a um ciclo limite de período 2. Esta situação pode ocorrer quando a interação entre os spins é antiferromagnética. O ciclo limite é composto pelas distribuições de

probabilidade $P_k^A(\bar{H})$ e $P_k^B(\bar{H})$ satisfazendo as equações

$$\begin{aligned} P_k^A(\bar{H}) &= \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_k^B(\bar{H}_i) d\bar{H}_i, \\ P_k^B(\bar{H}) &= \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_k^A(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Os campos efetivos em todas as camadas internas k , $1 < k < \infty$, apresentam o mesmo ciclo limite para as distribuições de probabilidade de campos efetivos, igual ao da primeira camada

$$P_1^A(\bar{H}) = P_k^A(\bar{H}), \quad P_1^B(\bar{H}) = P_k^B(\bar{H}). \quad (3.18)$$

As distribuições de probabilidade no sítio central correspondentes a esse ciclo limite são

$$\begin{aligned} P_0^A(\bar{H}) &= \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1^B(\bar{H}_i) d\bar{H}_i, \\ P_0^B(\bar{H}) &= \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1^A(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Procedendo-se como no cálculo de (3.9) podemos reescrever as expressões acima como

$$\begin{aligned} P_0^A(\bar{H}_0) &= (1-p)P_1^A(\bar{H}_0) + p \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - g(\bar{H}')) P_1^A(\bar{H}) d\bar{H} P_1^B(\bar{H}') d\bar{H}', \\ P_0^B(\bar{H}_0) &= (1-p)P_1^B(\bar{H}_0) + p \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - g(\bar{H}')) P_1^B(\bar{H}) d\bar{H} P_1^A(\bar{H}') d\bar{H}'. \end{aligned} \quad (3.20)$$

A convergência a um ciclo limite de período 2 nos indica uma rede de Bethe de duas subredes como indicado na figura (3.1). $P_1^A(\bar{H})$ pode ser interpretado como sendo a

Figura 3.1: Rede de Bethe dividida em duas subredes indicadas por A e B.

distribuição do campo efetivo num sítio da subrede A devido a $z - 1$ ramos vizinhos ao

sítio pertencentes à subrede B, enquanto $P_1^B(\bar{H})$ é a distribuição do campo efetivo num sítio da subrede B devido a $z - 1$ ramos vizinhos ao sítio pertencentes à subrede A. $P_0^A(\bar{H})$ é a distribuição do campo efetivo total devido aos z ramos vizinhos ao sítio pertencente à subrede B, enquanto $P_0^B(\bar{H})$ é a distribuição do campo efetivo total devido aos z ramos vizinhos ao sítio pertencentes à subrede A.

A magnetização num sítio da subrede A é dada por

$$m_A = p \int \tanh \beta \bar{H} P_0^A(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (3.21)$$

enquanto num sítio da subrede B,

$$m_B = p \int \tanh \beta \bar{H} P_0^B(\bar{H}) d\bar{H}. \quad (3.22)$$

Em termos dessas magnetizações das subredes, são definidas as magnetizações uniforme

$$m = \frac{1}{2}(m_A + m_B), \quad (3.23)$$

e “staggered”

$$m_s = \frac{1}{2}(m_A - m_B). \quad (3.24)$$

A energia livre por sítio satisfaz a mesma relação termodinâmica (3.10) e o mesmo limite (3.12) para $H \rightarrow \infty$. A integração da equação

$$\frac{\partial f}{\partial H} = -\frac{p}{2} \int \tanh \beta \bar{H} P_0^A(\bar{H}) d\bar{H} - \frac{p}{2} \int \tanh \beta \bar{H} P_0^B(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (3.25)$$

pode ser feita adaptando-se os passos descritos no apêndice A para o caso de duas subredes.

O resultado final fica

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{p}{2}(z-1) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} [P_0^A(\bar{H}) + P_0^B(\bar{H})] d\bar{H} \\ & - \frac{zp}{2}(1-p) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} [P_1^A(\bar{H}) + P_1^B(\bar{H})] d\bar{H} \\ & - \frac{zp^2}{2} \int \ln [e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')] P_1^A(\bar{H}) d\bar{H} P_1^B(\bar{H}') d\bar{H}'. \end{aligned} \quad (3.26)$$

A energia interna é determinada pela relação termodinâmica (3.15). Os cálculos podem

ser feitos seguindo os passos do apêndice B. O resultado final fica

$$\begin{aligned}
 u = & -\frac{zJp^2}{2} \int \left[\frac{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') - e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')}{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')} \right] P_1^A(\bar{H}) d\bar{H} P_1^B(\bar{H}') d\bar{H}'. \\
 & - \frac{H}{2} \int \tanh \beta \bar{H} [P_0^A(\bar{H}) + P_0^B(\bar{H})] d\bar{H}.
 \end{aligned}
 \tag{3.27}$$

Capítulo 4

Distribuição dos campos efetivos

Vimos nas seções anteriores que as propriedades termodinâmicas do modelo de Ising diluído na rede de Bethe podem ser expressas em termos da distribuição de probabilidade limite $P_1(\overline{H})$, ou ciclo limite $P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$. Em certos casos (como em temperatura não nula), não é possível determinar essa distribuição analiticamente, o que exige abordagem computacional seja por meio de simulações seja por meios numéricos. Nesta seção discutiremos os diferentes métodos empregados para determinar essas distribuições. Os resultados específicos para diferentes valores dos parâmetros do modelo serão apresentados nos próximos capítulos.

4.1 Cálculo por simulação

Não se trata no nosso caso de simular as variáveis aleatórias de spins usando diversos algoritmos hoje disponíveis (Newman e Barkema, 1999), pois essas variáveis foram eliminadas de forma exata graças à estrutura hierárquica da árvore de Cayley. Restam, entretanto, as variáveis aleatórias de ocupação responsáveis pela aleatoriedade nos campos efetivos. Nesta abordagem precisamos gerar os campos efetivos $\overline{H}$ distribuídos de acordo com a distribuição limite $P_1(\overline{H})$, ou ciclo limite $P_1^A(\overline{H})$ e $P_1^B(\overline{H})$.

Esses campos efetivos podem ser gerados à força bruta construindo o ramo da primeira camada de uma árvore de Cayley de coordenação z e n camadas e distribuindo spins nos $(z - 1)^n$ sítios do ramo com probabilidade p . A iteração da relação de recorrência

estocástica (2.30) partindo da superfície, com campos $\bar{H}_n = H_n > 0$, gerará um campo efetivo da primeira camada $\bar{H}_1$. Repetindo o processo para N_a amostras independentes de ramos, geramos N_a valores do campo efetivo na primeira camada $\bar{H}_1$. Coletando esses campos efetivos num histograma teremos uma aproximação para a distribuição $P_1(\bar{H})$. Procedimento semelhante ao descrito acima é encontrado em (Mulder e Papatriantafillou, 1989), onde é estudado o modelo de Ising ferromagnético numa árvore de Cayley com raiz, embora ali não sejam calculadas densidades de probabilidade de campos efetivos mas sim densidades de probabilidade de magnetização.

Como o número de sítios cresce exponencialmente com o número de camadas n , a memória disponível e o tempo computacional limitam a aplicação do método a árvores com poucas camadas. Nas nossas simulações consideramos árvores com até $n = 12$ camadas. Essa limitação a árvores pequenas significa que o histograma obtido não reflete a distribuição limite ou ciclo limite no qual estamos interessados, produzindo um efeito de tamanho finito nos resultados. Apesar dessa limitação, as simulações foram realizadas para uma primeira investigação das propriedades da distribuição $P_1(\bar{H})$ bem como para uma verificação independente das outras abordagens.

Embora um método de simulação mais elaborado possa eliminar as limitações expostas acima, acreditamos que a abordagem numérica que discutiremos em seguida fornece melhores resultados relativamente ao esforço computacional envolvido.

4.2 Cálculo numérico

Esse método baseia-se na iteração da relação de recorrência (3.2), que para $P_1(\bar{H})$ podemos escrever

$$P_1^{(n)}(\bar{H}) = \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) d c_i P_1^{(n-1)}(\bar{H}_i) d \bar{H}_i. \quad (4.1)$$

Esperamos que um número suficiente de iterações nos leve a uma distribuição limite $P_1(\bar{H})$ ou a um ciclo limite $P_1^A(\bar{H})$ e $P_1^B(\bar{H})$ dentro de uma precisão numérica pré-estabelecida.

As integrações sobre as variáveis de ocupação c_i podem ser realizadas exatamente.

Para isso é conveniente considerarmos a função característica

$$\phi^{(n)}(k) = \int e^{ik\bar{H}} P_1^{(n)}(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (4.2)$$

e a relação inversa

$$P_1^{(n)}(\bar{H}) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-ik\bar{H}} \phi^{(n)}(k) dk. \quad (4.3)$$

Substituindo (4.1) em (4.2) obtemos

$$\phi^{(n)}(k) = e^{ikH} \left[(1-p) + p \int e^{ikg(\bar{H})} P_1^{(n-1)}(\bar{H}) d\bar{H} \right]^{z-1}. \quad (4.4)$$

Expandindo o lado direito resulta

$$\phi^{(n)}(k) = \sum_{l=0}^{z-1} \binom{z-1}{l} (1-p)^{z-1-l} p^l \int e^{ik[H + \sum_{j=0}^l g(\bar{H}_j)]} \prod_{j=0}^l P_1^{(n-1)}(\bar{H}_j) d\bar{H}_j. \quad (4.5)$$

Substituindo esse resultado na relação inversa (4.3) obtemos a expressão onde as variáveis de ocupação foram eliminadas,

$$\begin{aligned} P_1^{(n)}(\bar{H}) = & (1-p)^{z-1} \delta(\bar{H} - H) + \sum_{k=1}^{z-1} \binom{z-1}{k} p^k (1-p)^{(z-1)-k} \\ & \times \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^k g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^k P_1^{(n-1)}(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Examinemos inicialmente o caso mais simples em que a distribuição é discreta com um número finito N_h de campos efetivos possíveis $\bar{H}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N_h$),

$$P_1^{(n)}(\bar{H}) = \sum_{i=1}^{N_h} p_i^{(n)} \delta(\bar{H} - \bar{H}_i), \quad (4.7)$$

onde $p_i^{(n)}$ é o peso do campo efetivo $\bar{H}_i$. Substituindo-se a expressão acima na equação (4.6) obtemos

$$\begin{aligned} P_1^{(n)}(\bar{H}) = & (1-p)^{z-1} \delta(\bar{H} - H) + \sum_{k=1}^{z-1} \binom{z-1}{k} p^k (1-p)^{(z-1)-k} \\ & \times \sum_{i_1=1}^{N_h} \dots \sum_{i_k=1}^{N_h} p_{i_1}^{(n-1)} \dots p_{i_k}^{(n-1)} \delta(\bar{H} - H - \sum_{l=1}^k g(\bar{H}_{i_l})). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Como estamos supondo que existem apenas os campos efetivos $\bar{H}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N_h$), para qualquer lista $(i_1, i_2, \dots, i_k)$ existirá um índice i tal que

$$H + \sum_{l=1}^k g(\bar{H}_{i_l}) = \bar{H}_i. \quad (4.9)$$

Definindo o conjunto

$$I_k(i) = \left\{ (i_1, \dots, i_k) \text{ tal que } H + \sum_{l=1}^k g(\bar{H}_{i_l}) = \bar{H}_i \right\}, \quad (4.10)$$

e também o índice

$$i_0 = i \text{ tal que } \bar{H}_i = H, \quad (4.11)$$

podemos escrever a relação de recorrência entre os pesos sob a forma

$$p_i^{(n)} = (1-p)^{z-1} \delta_{i,i_0} + \sum_{k=1}^{z-1} \binom{z-1}{k} p^k (1-p)^{(z-1)-k} \sum_{(i_1, \dots, i_k) \in I_k(i)} p_{i_1}^{(n-1)} p_{i_2}^{(n-1)} \dots p_{i_k}^{(n-1)}. \quad (4.12)$$

Esta é uma relação de recorrência para os pesos da distribuição p_i , ($i = 1, 2, \dots, N_h$).

Para definir a distribuição de probabilidades (4.7) precisamos saber quais são os campos efetivos possíveis $\bar{H}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N_h$). Para gerar o conjunto dos possíveis campos efetivos para um dado campo aplicado H , partimos da constatação que $\bar{H} = H$ é um possível campo efetivo que age num sítio em que todos os sítios vizinhos estão desocupados. Seja $S_0 = \{H\}$ o conjunto inicial de campos efetivos possíveis. Substituindo $\bar{H} = H$ no lado esquerdo da equação (4.9) para $k = 0, 1, \dots, z-1$ geramos no lado direito novos campos efetivos possíveis que formarão o conjunto S_1 . Se $S_1 \neq S_0$, substituímos todas as combinações possíveis dos campos efetivos em S_1 no lado esquerdo da equação (4.9) para $k = 0, 1, \dots, z-1$, gerando um novo conjunto de campos efetivos S_2 . Se para algum $m \geq 0$ ocorre que $S_{m+1} = S_m$, então os campos efetivos possíveis são em número finito e dados pelo conjunto S_m . Esta situação pode ocorrer em temperatura $T = 0$, pois nesse caso a função $g(x)$ dada em (2.33) é linear por intervalos.

Em geral, entretanto, o número de campos efetivos possíveis não é finito. Nesses casos procuramos calcular aproximadamente a distribuição $P_1(\bar{H})$ representando-a como uma distribuição discreta com N_h campos efetivos igualmente espaçados de $\Delta\bar{H}$ entre os campos efetivos máximo $\bar{H}_{\max}$ e mínimo $\bar{H}_{\min}$,

$$\bar{H}_i = \bar{H}_{\min} + (i-1)\Delta\bar{H}, \quad (4.13)$$

para $i = 1, 2, \dots, N_h$, sendo

$$\Delta\bar{H} = \frac{\bar{H}_{\max} - \bar{H}_{\min}}{N_h - 1}. \quad (4.14)$$

A expressão para $P_1^{(n)}(\bar{H})$ tem a forma (4.7), que substituída em (4.6) fornece o mesmo resultado que (4.8). Agora, dentro da aproximação considerada o peso $p_i^{(n)}$ correspondente ao campo efetivo $\bar{H}_i$ incorpora a contribuição da densidade de probabilidade $P_1^{(n)}(\bar{H})$ num intervalo $\Delta\bar{H}$ em torno de $\bar{H}_i$,

$$p_i^{(n)} = \int_{\bar{H}_i - \Delta\bar{H}/2}^{\bar{H}_i + \Delta\bar{H}/2} P_1^{(n)}(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (4.15)$$

de modo que obtemos

$$\begin{aligned} p_i^{(n)} = & (1-p)^{z-1} \int_{\bar{H}_i - \Delta\bar{H}/2}^{\bar{H}_i + \Delta\bar{H}/2} \delta(\bar{H} - H) d\bar{H} + \sum_{k=1}^{z-1} \binom{z-1}{k} p^k (1-p)^{(z-1)-k} \\ & \times \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_k} p_{i_1}^{(n-1)} \cdots p_{i_k}^{(n-1)} \int_{\bar{H}_i - \Delta\bar{H}/2}^{\bar{H}_i + \Delta\bar{H}/2} \delta(\bar{H} - H - \sum_{l=1}^k g(\bar{H}_{i_l})). \end{aligned} \quad (4.16)$$

A primeira integral só contribui se

$$H \in \left[\bar{H}_i - \frac{\Delta\bar{H}}{2}, \bar{H}_i + \frac{\Delta\bar{H}}{2} \right), \quad (4.17)$$

e a segunda integral só contribui se

$$H + \sum_{l=1}^k g(\bar{H}_{i_l}) \in \left[\bar{H}_i - \frac{\Delta\bar{H}}{2}, \bar{H}_i + \frac{\Delta\bar{H}}{2} \right). \quad (4.18)$$

Definindo-se o índice

$$i_0 = i \quad \text{tal que} \quad H \in \left[\bar{H}_i - \frac{\Delta\bar{H}}{2}, \bar{H}_i + \frac{\Delta\bar{H}}{2} \right), \quad (4.19)$$

e os conjuntos

$$I_k(i) = \left\{ (i_1, \dots, i_k) \quad \text{tal que} \quad H + \sum_{l=1}^k g(\bar{H}_{i_l}) \in \left[\bar{H}_i - \frac{\Delta\bar{H}}{2}, \bar{H}_i + \frac{\Delta\bar{H}}{2} \right) \right\}, \quad (4.20)$$

a relação de recorrência (4.16) adquire a mesma forma que (4.12). Observamos que as definições acima reduzem-se a (4.11) e (4.10) para $\Delta\bar{H} = 0$. Isso permite que um mesmo programa computacional seja empregado nos dois casos. Entretanto, devido aos erros de arredondamento não podemos especificar $\Delta\bar{H} = 0$. Adotamos $\Delta\bar{H} = 10^{-14}$ já que a precisão em ponto flutuante do processador Pentium utilizado é menor que 10^{-15} .

A condição inicial para o processo iterativo (4.12) deve ser imposta de modo a buscar soluções que representem quebra de simetria. Na prática utilizamos

$$p_i^{(0)} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N_h - 1), \quad p_{N_h}^{(0)} = 1, \quad (4.21)$$

onde p_{N_h} é o peso correspondente ao maior campo efetivo possível. Observamos que a iteração da relação de recorrência (4.12) pode levar a uma distribuição limite ou a um ciclo limite composto por duas distribuições. Não observamos nenhum caso de convergência a ciclos limite de períodos maiores que dois. Portanto, para estabelecer a convergência convêm considerar a segunda iterada da relação de recorrência (4.12). O critério por nós adotado foi

$$\sum_{i=1}^{N_h} |p_i^{(n)} - p_i^{(n-2)}| < 10^{-14}. \quad (4.22)$$

No cálculo aproximado de $P_1(\bar{H})$ por meio de um número finito de deltas igualmente espaçados, precisamos antes de mais nada determinar os campos efetivos máximo $\bar{H}_{\max}$, e mínimo $\bar{H}_{\min}$. Observemos que há duas situações extremas para a relação de recorrência estocástica (2.30), a saber, todos os $c_i = 0$ quando ela se reduz a

$$\bar{H}_k = H, \quad (4.23)$$

ou todos os $c_i = 1$, quando ela se reduz a

$$\bar{H}_k = H + (z - 1)g(\bar{H}_{k+1}). \quad (4.24)$$

Note que no último caso não há desordem e os campos efetivos numa mesma camada serão os mesmos independente do sítio.

No caso $J > 0$ a relação de recorrência (4.24) admite apenas um ponto fixo $\bar{H}^*$ tal que

$$\bar{H}^* = H + (z - 1)g(\bar{H}^*). \quad (4.25)$$

Os campos máximo e mínimo são dados por

$$\bar{H}_{\min} = H, \quad \bar{H}_{\max} = \bar{H}^*. \quad (4.26)$$

No caso $J < 0$ a relação de recorrência (4.24) admite em geral um ciclo limite $\bar{H}_A$ e $\bar{H}_B$ tal que

$$\bar{H}_A = H + (z - 1)g(\bar{H}_B), \quad (4.27)$$

$$\bar{H}_B = H + (z - 1)g(\bar{H}_A). \quad (4.28)$$

Se o campo aplicado for tal que $\bar{H}_A < H < \bar{H}_B$, então

$$\bar{H}_{\min} = \bar{H}_A, \quad \bar{H}_{\max} = \bar{H}_B. \quad (4.29)$$

Se entretanto $\bar{H}_A \leq \bar{H}_B < H$,

$$\bar{H}_{\min} = H + (z - 1)g(H), \quad \bar{H}_{\max} = H. \quad (4.30)$$

4.3 Cálculo analítico

Podemos determinar analiticamente as distribuições de probabilidade nos casos em que for possível estabelecer um *Ansatz* sobre os possíveis valores dos campos efetivos $\bar{H}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N_h$). Para o caso de uma distribuição limite a distribuição de probabilidade terá a forma

$$P_1(\bar{H}) = \sum_{i=1}^{N_h} p_i \delta(\bar{H} - \bar{H}_i), \quad (4.31)$$

onde p_i são os pesos dos campos efetivos $\bar{H}_i$ que precisam ser determinados resolvendo-se a equação de auto-consistência (3.4), que para $k = 1$ é

$$P_1(\bar{H}) = \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \quad (4.32)$$

Para isso é conveniente considerar a função característica

$$\phi(k) = \int e^{ik\bar{H}} P_1(\bar{H}) d\bar{H}. \quad (4.33)$$

Substituindo (4.32) em (4.33) obtemos

$$\phi(k) = e^{ikH} [(1 - p) + p\Phi(k)]^{z-1}, \quad (4.34)$$

onde

$$\Phi(k) = \int e^{ikg(\bar{H})} P_1(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (4.35)$$

é a função característica da variável aleatória $g(\bar{H})$. Substituindo o *Ansatz* (4.31) para $P_1(\bar{H})$ nas expressões das funções características temos

$$\phi(k) = \sum_{j=1}^{N_h} e^{ik\bar{H}_j} p_j, \quad (4.36)$$

e

$$\Phi(k) = \sum_{j=1}^{N_h} e^{ikg(\bar{H}_j)} p_j. \quad (4.37)$$

Finalmente, substituindo (4.36) e (4.37) em (4.34) resulta

$$\sum_{j=1}^{N_h} e^{ik\bar{H}_j} p_j = e^{ikH} \left[(1-p) + p \sum_{j=1}^{N_h} e^{ikg(\bar{H}_j)} p_j \right]^{z-1}. \quad (4.38)$$

Expandindo o lado direito da equação acima e igualando os coeficientes dos termos $e^{ik\bar{H}_j}$ obtemos um conjunto de equações para os pesos p_j . É claro que esse procedimento somente é possível se o lado direito não gerar termos diferentes de $e^{ik\bar{H}_j}$ para $j = 1, 2, \dots, N_h$, o que somente ocorre se o *Ansatz* para os possíveis valores dos campos efetivos estiver correto.

Para o caso em que se tem um ciclo limite de período dois, as distribuições $P_1^A(\bar{H})$ e $P_1^B(\bar{H})$ terão as formas

$$P_1^A(\bar{H}) = \sum_{i=1}^{N_h} p_i^A \delta(\bar{H} - \bar{H}_i), \quad P_1^B(\bar{H}) = \sum_{i=1}^{N_h} p_i^B \delta(\bar{H} - \bar{H}_i). \quad (4.39)$$

Os pesos p_i^A e p_i^B precisam ser determinados resolvendo as equações de auto-consistência (3.17), que para $k = 1$ ficam

$$\begin{aligned} P_1^A(\bar{H}) &= \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_1^B(\bar{H}_i) d\bar{H}_i, \\ P_1^B(\bar{H}) &= \int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_1^A(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Substituindo (4.39) nas definições das funções características

$$\phi_A(k) = \int e^{ik\bar{H}} P_1^A(\bar{H}) d\bar{H}, \quad \phi_B(k) = \int e^{ik\bar{H}} P_1^B(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (4.41)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \phi_A(k) &= e^{ikH} [(1-p) + p\phi_B(k)]^{z-1}, \\ \phi_B(k) &= e^{ikH} [(1-p) + p\phi_A(k)]^{z-1}, \end{aligned} \quad (4.42)$$

onde

$$\Phi_A(k) = \int e^{ikg(\bar{H})} P_1^A(\bar{H}) d\bar{H}, \quad \Phi_B(k) = \int e^{ikg(\bar{H})} P_1^B(\bar{H}) d\bar{H}. \quad (4.43)$$

Finalmente, substituindo os *Ansätze* (4.39) nas funções características (4.41) e (4.43), as equações (4.42) ficam

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{N_h} e^{ik\bar{H}_j} p_j^A &= e^{ikH} \left[(1-p) + p \sum_{j=1}^{N_h} e^{ikg(\bar{H}_j)} p_j^B \right]^{z-1}, \\ \sum_{j=1}^{N_h} e^{ik\bar{H}_j} p_j^B &= e^{ikH} \left[(1-p) + p \sum_{j=1}^{N_h} e^{ikg(\bar{H}_j)} p_j^A \right]^{z-1}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Expandindo o lado direito das equações acima e igualando os coeficientes dos termos $e^{ik\bar{H}_j}$ obtemos um conjunto de equações para os pesos p_j^A e p_j^B . Novamente, esse procedimento somente é possível se o lado direito não gerar termos diferentes de $e^{ik\bar{H}_j}$ para $j = 1, 2, \dots, N_h$, o que somente ocorre se o *Ansatz* para os possíveis valores dos campos efetivos estiver correto.

Capítulo 5

Modelo sem campo aplicado

Para $H = 0$, a energia do MIDS (1.5) é invariante pela inversão simultânea do sinal das interações e dos spins numa das subredes,

$$J \rightarrow -J, \quad \sigma_i \rightarrow -\sigma_i \quad (i \in A). \quad (5.1)$$

Portanto as propriedades termodinâmicas do MIDSa decorrem daquelas do MIDSF fazendo-se as substituições

$$J \rightarrow -J, \quad P_A(\bar{H}) \rightarrow P(\bar{H}), \quad P_B(\bar{H}) \rightarrow P(-\bar{H}), \quad (5.2)$$

onde $P(\bar{H})$ é a distribuição dos campos efetivos do MIDSF. Por esta razão, é suficiente considerarmos neste capítulo o MIDSF.

5.1 Resultados para $H = 0$ e $T = 0$

A Fig. 5.1 mostra a distribuição de campos efetivos obtida por meio de simulação conforme o método descrito na seção 4.1. Foram geradas $N_a = 2 \times 10^5$ amostras de campos efetivos para ramos com $n = 10$ camadas.

Nas Figs. 5.2 e 5.3 mostramos exemplos de distribuições dos campos efetivos obtidas numericamente pelo método descrito na seção 4.2.

Figura 5.1: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,7$, $H = 0$ e $T = 0$ obtida por meio de simulação.

Figura 5.2: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,7$, $H = 0$ e $T = 0$ obtida numericamente.

Figura 5.3: Distribuição dos campos efetivos para $z = 4$, $p = 0,7$, $H = 0$ e $T = 0$ obtida numericamente.

Tanto as simulações quanto os cálculos numéricos sugerem que para $H = 0$ e $T = 0$ os possíveis campos efetivos sejam em número finito e da forma

$$\bar{H}_l = lJ, \quad l = 0, 1, \dots, z-1. \quad (5.3)$$

Portanto faremos o seguinte *Ansatz* para a distribuição dos campos efetivos

$$P_1(\bar{H}) = \sum_{l=0}^{z-1} p_l \delta(\bar{H} - lJ), \quad (5.4)$$

e procuraremos determinar os pesos p_l analiticamente seguindo os procedimentos descritos na seção 4.3. A função característica de $\bar{H}$ é

$$\phi(k) = \sum_{l=0}^{z-1} p_l e^{iklJ}, \quad (5.5)$$

enquanto a função característica de $g(\bar{H})$ é

$$\Phi(k) = \sum_{l=0}^{z-1} p_l e^{ikg(lJ)}. \quad (5.6)$$

Agora, com $g(x)$ dada em $T = 0$ pela equação (2.33) temos

$$g(lJ) = \begin{cases} 0 & \text{se } l = 0, \\ J & \text{se } l = 1, 2, \dots, z-1. \end{cases} \quad (5.7)$$

Logo

$$\Phi(k) = p_0 + e^{ikJ} \sum_{l=1}^{z-1} p_l = p_0 + (1 - p_0)e^{ikJ}. \quad (5.8)$$

Substituindo os resultados acima para $\phi(k)$ e $\Phi(k)$ na equação (4.34) obtemos

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{z-1} p_l e^{iklJ} &= \{[1 - p(1 - p_0)] + p(1 - p_0)e^{ikJ}\}^{z-1} \\ &= \sum_{l=0}^{z-1} \binom{z-1}{l} [1 - p(1 - p_0)]^{z-1-l} [p(1 - p_0)]^l e^{ikJl}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Igualando os coeficientes de e^{ikJl} dos dois lados obtemos

$$p_l = \binom{z-1}{l} [1 - p(1 - p_0)]^{z-1-l} [p(1 - p_0)]^l, \quad (5.10)$$

para $l = 0, 1, \dots, z-1$. Em particular para $l = 0$ temos

$$p_0 = [1 - p(1 - p_0)]^{z-1}. \quad (5.11)$$

Essa equação determina p_0 , que substituído em (5.10) permite que todos os outros pesos p_l ($l = 1, 2, \dots, z-1$) sejam determinados. Isso confirma a validade do *Ansatz* (5.4).

A equação (5.11) possui uma interpretação simples. Segundo a equação (5.4), p_0 é a probabilidade de que o campo efetivo num sítio seja nulo. Agora a equação (2.30) mostra que um sítio vizinho i não contribuirá com campo efetivo se estiver vazio ($c_i = 0$), o que ocorre com probabilidade $1 - p$, ou se estiver ocupado ($c_i = 1$) mas o campo efetivo for nulo ($\overline{H}^{(i)} = 0$), o que ocorre com probabilidade pp_0 . Portanto um sítio vizinho produzirá um campo efetivo nulo com probabilidade $(1 - p) + pp_0$. Como existem $z-1$ sítios vizinhos na camada adjacente, a probabilidade de que o campo efetivo num sítio seja nulo será dada por $[(1 - p) + pp_0]^{z-1}$, o que concorda com a equação (5.11). Como esse raciocínio independe da temperatura, concluímos que a probabilidade de que o campo efetivo seja nulo será sempre dada por p_0 determinada pela equação (5.11).

Uma análise da equação (5.11) mostra que, além da solução trivial $p_0 = 1$ sempre possível, uma solução não trivial $p_0 < 1$ torna-se possível para

$$p > \frac{1}{z-1} = p_c. \quad (5.12)$$

Se a probabilidade p_0 do campo efetivo nulo torna-se menor que 1, os campos efetivos não nulos adquirem probabilidade positiva, indicando o surgimento de uma ordem ferromagnética e portanto a formação de aglomerados infinitos capazes de sustentar uma ordem de longo alcance.

No caso da coordenação $z = 2$ a equação (5.11) é linear e a única solução possível é

$$p_0 = 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq p < 1. \quad (5.13)$$

Portanto os pesos da distribuição são dados por

$$p_l = \binom{z-1}{l} p^l, \quad (5.14)$$

para $l = 0, 1, \dots, z-1$.

No caso da coordenação $z = 3$ a equação (5.11) é quadrática, e para $p > p_c = 1/2$ além da solução trivial $p_0 = 1$ existe a solução não trivial

$$p_0 = \left(\frac{1-p}{p} \right)^2. \quad (5.15)$$

Os outros pesos podem ser calculados usando (5.10) e são

$$p_1 = 2 \left(\frac{1-p}{p} \right) \left(\frac{2p-1}{p} \right), \quad (5.16)$$

$$p_2 = \left(\frac{2p-1}{p} \right)^2. \quad (5.17)$$

Para calcular a magnetização (2.37) precisamos determinar a distribuição dos campos efetivos $P_0(\bar{H})$ dada por (3.9). Substituindo a expressão (5.4) para $P_1(\bar{H})$ em (3.9) e usando (5.7) obtemos

$$P_0(\bar{H}) = [(1-p) + pp_0] \sum_{l=0}^{z-1} p_l \delta(\bar{H} - lJ) + p(1-p_0) \sum_{l=1}^z p_{l-1} \delta(\bar{H} - lJ). \quad (5.18)$$

Substituindo esse resultado na expressão (2.37) para a magnetização para $T = 0$ vem

$$\begin{aligned} m &= p \int d\bar{H} P_0(\bar{H}) \operatorname{sgn}(\bar{H}) = p[(1-p) + pp_0] \sum_{l=1}^{z-1} p_l + p^2(1-p_0) \sum_{l=1}^z p_{l-1} \\ &= p(1-p_0)(1 + pp_0) = p(1 - p_0^{z/z-1}), \end{aligned} \quad (5.19)$$

onde na última passagem usamos a equação (5.11) para p_0 . Do resultado (5.13) para p_0 no caso $z = 2$ concluímos que $m = 0$ para $z = 2$ para qualquer valor de $p < 1$, o que

é consistente com a inexistência de aglomerados infinitos nesse caso. Já para $z = 3$ o resultado (5.15) para p_0 fornece

$$m = p \left[1 - \left(\frac{1-p}{p} \right)^3 \right] \quad (5.20)$$

para $p > p_c = 1/2$.

É interessante comparar esses resultados com aqueles que podem ser obtidos por meio da teoria de percolação. A probabilidade de percolação $P(p)$, ou seja, a probabilidade de que um sítio *ocupado* pertença a um aglomerado infinito, é dada por (Essam, 1972)

$$P(p) = 1 - Q^z, \quad (5.21)$$

onde $Q(p)$ é a probabilidade de que os aglomerados numa dada direção sejam finitos. $Q(p)$ satisfaz, numa rede de Bethe, a relação (Essam, 1972)

$$Q = (1 - p) + pQ^{z-1}. \quad (5.22)$$

Essa equação sempre admite solução trivial $Q = 1$ correspondendo a $P(p) = 0$, mas para p maiores que p_c dada pela equação (5.12) ela admite uma segunda solução $Q > 0$ correspondendo a $P(p) > 0$. Portanto p_c é a concentração crítica de percolação na rede de Bethe (Fisher e Essam, 1961), isto é, para $p > p_c$ surgem aglomerados infinitos de sítios ocupados. Esse resultado, no contexto da rede de Bethe, pode ser entendido como uma consequência da estrutura ramificada que a define. Se um aglomerado deve se estender indefinidamente, o número esperado de sítios ocupados vizinhos a um dado sítio ocupado não pode ser menor que um. Como a probabilidade de ocupação de um sítio é p e $z - 1$ sítios vizinhos ramificam-se de um dado sítio, a condição crítica é $p_c(z - 1) = 1$, em concordância com (5.12).

A probabilidade de que um sítio pertença a um aglomerado infinito é $pP(p)$. Como em $T = 0$ todos os spins pertencentes a aglomerados infinitos estão alinhados numa mesma direção, a magnetização é dada por

$$m = pP(p) = p(1 - Q^z). \quad (5.23)$$

Agora, comparando a equação (5.22) para Q com a equação (5.11) para p_0 vemos que

$$p_0 = Q^{z-1}, \quad (5.24)$$

o que mostra que as expressões (5.19) e (5.23) para as magnetizações são idênticas, como esperado.

5.2 Resultados para $H = 0$ e $T > 0$

As Figs. 5.4 a 5.14 mostram exemplos de distribuições de campos efetivos para coordenação $z = 3$ e concentração $p = 0,8$ para diferentes valores de temperatura. Nesses gráficos comparamos os resultados obtidos por meio de simulação conforme o método descrito na seção 4.1, com aqueles obtidos numericamente segundo o método descrito na seção 4.2. Nas simulações foram considerados $N_a = 10^5$ amostras de campos efetivos gerados em ramos de $n = 10$ camadas, os quais foram representados em histogramas de largura $\Delta\bar{H} = 10^{-2}$ normalizados com área unitária. Os cálculos numéricos correspondem a aproximação com $N_h = 400$ funções delta, e foram representados por meio de histogramas normalizados com área unitária.

Há uma boa concordância entre os resultados da simulação e os resultados numéricos. Essa concordância é melhor longe da temperatura crítica T_c , que será determinada na seção 5.3, devido ao efeito da superfície em simulações com $n = 10$ camadas.

Observamos que, conforme foi discutido na seção 5.1, para $p > p_c$ e temperaturas suficientemente baixas, sempre existe uma contribuição para o campo efetivo $\bar{H} = 0$ igual a p_0 dada pela solução não trivial da equação (5.11). Essa contribuição corresponde a um pico de altura $p_0/\Delta\bar{H}$ no histograma para $\bar{H} = 0$.

Para baixas temperaturas, os campos efetivos mais prováveis se concentram em torno dos valores encontrados em $T = 0$ formando picos *satélite*. Conforme aumentamos a temperatura, os picos satélite se afastam e se alargam gradualmente, e os campos efetivos se distribuem de forma mais uniforme entre os valores permitidos. Entretanto a largura da distribuição diminui com o aumento da temperatura, concentrando-se cada vez mais perto do valor $\bar{H} = 0$. Acima de uma certa temperatura crítica $T_c(p)$, somente o campo efetivo nulo é possível, indicando a ocorrência de uma fase paramagnética.

Figura 5.4: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,1$ obtida por meio de simulação.

Figura 5.5: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,1$ obtida numericamente.

Figura 5.6: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,25$, obtida por simulação.

Figura 5.7: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,25$, obtida numericamente.

Figura 5.8: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,5$ obtida por meio de simulação.

Figura 5.9: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,5$ obtida numericamente.

Figura 5.10: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,8$ obtida por meio de simulação.

Figura 5.11: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 0,8$ obtida numericamente.

Figura 5.12: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 1$ obtida numericamente.

Figura 5.13: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 1,25$ obtida por meio de simulação.

Figura 5.14: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0$ e $T = 1,25$ obtida numericamente.

A partir das distribuições de probabilidades $P_1(\bar{H})$ obtidas numericamente podemos calcular as distribuições de probabilidades $P_0(\bar{H})$ usando a equação (3.9). Essas distribuições de probabilidades permitem calcular a magnetização (2.37), a energia livre (3.14) e a energia interna (3.16). A entropia pode então ser determinada pela relação termodinâmica $s/k_B = \beta(u - f)$. As Figs. 5.15 a 5.18 mostram a magnetização, a energia livre, a energia interna e a entropia calculadas numericamente para $z = 3$ e $H = 0$ para diferentes valores de p . Nesses cálculos foi utilizada a aproximação com $N_h = 500$ deltas e as grandezas termodinâmicas foram calculadas em intervalos de $\Delta T = 10^{-2}$.

Observamos que as curvas de magnetização da Fig. 5.15 tendem ao valor dado pela equação (5.20) para $T \rightarrow 0$. A magnetização tende a zero para $T \rightarrow T_c(p)$, onde T_c é a temperatura crítica determinada pela equação (5.25), como será discutida na seção 5.3. As linhas pontilhadas representam o valor aproximado da magnetização calculada por meio da expressão assintótica (5.38).

A Fig. 5.18 mostra que o sistema apresenta entropia residual, ou seja, a entropia não se anula mesmo em $T = 0$. Isso se deve à existência de aglomerados finitos mesmo para $p > p_c$. Cada um dos aglomerados contribui com $k_B \ln 2$ à entropia, devido às duas orientações possíveis das magnetizações. Como o número desses aglomerados finitos diminui com o aumento de p , o mesmo ocorre com a entropia residual, que se anula para $p = 1$.

Figura 5.15: Magnetização versus T para $z = 3$ e $H = 0$. As linhas tracejadas correspondem à expressão assintótica dada por (5.38).

Figura 5.16: Energia livre versus T para $z = 3$ e $H = 0$

Figura 5.17: Energia interna versus T para $z = 3$ e $H = 0$ Figura 5.18: Entropia versus T para $z = 3$ e $H = 0$

5.3 Diagrama de fases T - p

A linha crítica do MDSF para $H = 0$ numa rede de Bethe é determinada pela equação (Domb, 1960)

$$p \tanh \frac{J}{k_B T_c(p)} = \frac{1}{z-1} = p_c, \quad (5.25)$$

onde $T_c(p)$ é a temperatura crítica para uma dada concentração p maior que a concentração de percolação na rede de Bethe p_c (Fisher e Essam, 1961). Essas linhas críticas estão representadas para diferentes valores da coordenação z na Fig. 5.19.

Figura 5.19: Diagrama de fases temperatura versus concentração para diferentes valores de z , onde aparecem as fases **Paramagnética (P)** e **Ferromagnética (F)**.

Vamos obter esse resultado dentro do formalismo que estamos utilizando. O parâmetro

de ordem que caracteriza o modelo com interações ferromagnéticas é a magnetização por spin (2.37). Usando a expressão (3.9) para $P_0(\bar{H})$ podemos escrevê-la sob a forma

$$m = p(1-p) \int \tanh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} + p^2 \int \tanh \beta (\bar{H} + g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) P_1(\bar{H}') d\bar{H} d\bar{H}'. \quad (5.26)$$

Expandindo a tangente hiperbólica obtemos

$$m = p\beta [\langle \bar{H} \rangle + p \langle g(\bar{H}) \rangle] - \frac{1}{3} p\beta^3 [\langle \bar{H}^3 \rangle + 3p \langle \bar{H}^2 \rangle \langle g(\bar{H}) \rangle + 3p \langle \bar{H} \rangle \langle g(\bar{H})^2 \rangle + p \langle g(\bar{H})^3 \rangle] + \dots \quad (5.27)$$

Os momentos da variável aleatória $\bar{H}$ são dados pelas derivadas da função característica (4.33),

$$\langle \bar{H}^n \rangle = \frac{1}{i^n} \frac{d^n}{dk^n} \phi(k) \Big|_{k=0} = \frac{1}{i^n} \phi^{(n)}(0), \quad (5.28)$$

enquanto os momentos da variável aleatória $g(\bar{H})$ são dados pelas derivadas da função característica (4.35),

$$\langle g(\bar{H})^n \rangle = \frac{1}{i^n} \frac{d^n}{dk^n} \Phi(k) \Big|_{k=0} = \frac{1}{i^n} \Phi^{(n)}(0). \quad (5.29)$$

Agora, da equação (4.34) que relaciona as funções características $\phi(k)$ e $\Phi(k)$, obtemos para $H = 0$,

$$\Phi(k) = \frac{1}{p} [\phi(k)]^{1/(z-1)} + 1 - \frac{1}{p}. \quad (5.30)$$

Derivando ambos os lados da equação acima até ordem 3 e tomando $k = 0$ para cada ordem de derivação, obtemos as seguintes expressões para os momentos de $g(\bar{H})$ em termos dos momentos de $\bar{H}$,

$$\begin{aligned} \langle g(\bar{H}) \rangle &= \frac{1}{p(z-1)} \langle \bar{H} \rangle, \\ \langle g(\bar{H})^2 \rangle &= \frac{1}{p(z-1)} \left[\langle \bar{H}^2 \rangle - \left(\frac{z-2}{z-1} \right) \langle \bar{H} \rangle^2 \right], \\ \langle g(\bar{H})^3 \rangle &= \frac{1}{p(z-1)} \left[\langle \bar{H}^3 \rangle - 3 \left(\frac{z-2}{z-1} \right) \langle \bar{H} \rangle \langle \bar{H}^2 \rangle + \frac{(z-2)(2z-3)}{(z-1)^2} \langle \bar{H} \rangle^3 \right]. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Substituindo esses resultados em (5.27) obtemos uma expressão para a magnetização em

termos unicamente dos momentos de $\overline{H}$,

$$m = \left(\frac{z}{z-1} \right) p\beta \left\{ \langle \overline{H} \rangle - \frac{1}{3} \beta^2 \left[\langle \overline{H}^3 \rangle + \left(\frac{3}{z-1} \right) \langle \overline{H} \rangle \langle \overline{H}^2 \rangle - \frac{z-2}{(z-1)^2} \langle \overline{H} \rangle^3 \right] + \dots \right\}. \quad (5.32)$$

Vemos que em ordem mais baixa a magnetização é proporcional ao valor esperado de $\overline{H}$.

Expandindo a função $g(\overline{H})$ dada por (2.32) obtemos

$$g(\overline{H}) = v\overline{H} - \frac{1}{3}v(1-v^2)\beta^2\overline{H}^3 + \dots, \quad (5.33)$$

onde definimos

$$v = \tanh \beta J. \quad (5.34)$$

Substituindo a expansão (5.33) nas equações (5.31) encontramos a seguinte equação para o valor esperado de $\overline{H}$,

$$\langle \overline{H} \rangle = (z-1)p\beta \langle \overline{H} \rangle - A^{-2} \langle \overline{H} \rangle^3, \quad (5.35)$$

onde

$$A^2 = \frac{3[1 - (z-1)p\beta^2][1 - (z-1)p\beta^3]}{(z-1)^2(z-2)[(z-3) + (z-1)(2z-3)p\beta^2](1-v^2)\beta^2 p^4 v^4}. \quad (5.36)$$

Para $(z-1)p\beta < 1$ a única solução possível é $\langle \overline{H} \rangle = 0$. Conseqüentemente $m = 0$ e a fase é paramagnética. Para $(z-1)p\beta > 1$, entretanto, tornam-se possíveis soluções não nulas

$$\langle \overline{H} \rangle = \pm A \sqrt{(z-1)p\beta - 1}. \quad (5.37)$$

Portanto a linha crítica é determinada pela condição $(z-1)p\beta = 1$, que é idêntica à equação (5.25). A magnetização em ordem dominante é dada por

$$m = \pm zp \left[\frac{3(1+v_c)(1-v_c^2) \tanh^{-1} v_c}{(z-1)[(z-3) + (2z-3)v_c]v_c} \right]^{1/2} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2}, \quad (5.38)$$

onde $v_c = 1/p(z-1)$. As curvas correspondentes à equação (5.38) são representadas na Fig. 5.15 pelas linhas tracejadas. Vemos que o expoente crítico $\beta = 1/2$, o que era de se esperar num cálculo de campo médio.

Capítulo 6

Modelo ferromagnético com campo aplicado

Neste capítulo estudaremos o modelo com interações ferromagnéticas na presença de um campo aplicado. Na seção 6.1 apresentaremos os resultados numéricos e analíticos para temperatura $T = 0$. Na seção 6.2 serão apresentados resultados obtidos por simulação e obtidos numericamente para temperaturas $T > 0$.

6.1 Resultados para $J > 0$, $H > 0$ e $T = 0$

No caso $J > 0$ os campos efetivos são em número finito para $H > 0$ e $T = 0$, e foram determinados numericamente conforme o procedimento descrito na seção 4.2. Nas Figs. 6.1, 6.2 e 6.3 são mostrados os campos efetivos determinados em intervalos de campo aplicado $\Delta H = 10^{-3}$. Embora pareçam formar linhas contínuas, os pontos não foram unidos.

Observamos que o número de campos efetivos possíveis cresce indefinidamente com a diminuição do campo aplicado, embora para $H = 0$ esse número seja finito e igual a z , como vimos na seção 5.1. Os campos efetivos possíveis dependem apenas do campo aplicado H independentemente da probabilidade de ocupação p ($0 < p < 1$).

Figura 6.1: Campos efetivos possíveis para $z = 2$ e $J > 0$ em $T = 0$

Figura 6.2: Campos efetivos possíveis para $z = 3$ e $J > 0$ em $T = 0$

Figura 6.3: Campos efetivos possíveis para $z = 4$ e $J > 0$ em $T = 0$

Nas Figs. 6.4 e 6.5 apresentamos exemplos de distribuições determinadas pelo método descrito na seção 4.2. Observamos que os pesos correspondentes a alguns dos campos efetivos são tão pequenos que não são perceptíveis nesses gráficos. Assim na Fig. 6.4 existem 12 campos efetivos possíveis, enquanto na Fig. 6.5 22 campos efetivos possíveis.

Figura 6.4: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,75$, $H = 0,3$ e $T = 0$.

Figura 6.5: Distribuição dos campos efetivos para $z = 4$, $p = 0,75$, $H = 0,3$ e $T = 0$.

Os cálculos numéricos sugerem que os campos efetivos possíveis em cada intervalo de campo aplicado

$$I_n = \left[\frac{J}{n}, \frac{J}{n-1} \right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (6.1)$$

são dados por

$$\overline{H}_{lm} = lJ + mH + H, \quad (6.2)$$

onde

$$l = 0, 1, \dots, z-1, \quad m = 0, 1, \dots, (n-1)(z-1-l), \quad (6.3)$$

num total de $z[1 + (z-1)(n-1)/2]$ campos efetivos distintos. Além disso, em cada intervalo I_n os pesos de cada campo efetivo se mantém constantes. Isso sugere que façamos o seguinte *Ansatz* para a distribuição de probabilidade dos campos efetivos num dado intervalo de campos I_n ,

$$P_1(\overline{H}) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^{(n-1)(z-1-l)} p_{lm} \delta(\overline{H} - \overline{H}_{lm}). \quad (6.4)$$

A função característica de $\overline{H}$ dada por (4.33) fica

$$\phi(k) = e^{ikH} \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^{(n-1)(z-1-l)} p_{lm} e^{ik(lJ+mH)}, \quad (6.5)$$

enquanto a função característica de $g(\overline{H})$ dada por (4.35) fica

$$\Phi(k) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^{(n-1)(z-1-l)} p_{lm} e^{ikg(\overline{H}_{lm})}. \quad (6.6)$$

Como $\overline{H}_{lm} > 0$ para $H > 0$ temos de (2.33),

$$g(\overline{H}_{lm}) = \min(lJ + mH + H, J). \quad (6.7)$$

Como

$$g(\overline{H}_{lm}) = \begin{cases} mH + H, & \text{se } l = 0, m = 0, 1, \dots, n-2 \\ J, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.8)$$

obtemos

$$\Phi(k) = \sum_{m=0}^{n-2} p_{0m} e^{ik(mH+H)} + \left(1 - \sum_{m=0}^{n-2} p_{0m}\right) e^{ikJ}, \quad (6.9)$$

onde usamos a condição de normalização

$$\sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^{(n-1)(z-1-l)} p_{lm} = 1. \quad (6.10)$$

Finalmente, substituindo as expressões acima para as funções características $\phi(k)$ e $\Phi(k)$ na equação (4.34) obtemos

$$\sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^{(n-1)(z-1-l)} p_{lm} e^{ik(lJ+mH)} = [P + pQe^{ikJ}]^{z-1}, \quad (6.11)$$

onde definimos

$$P = (1-p) + p \sum_{m=0}^{n-2} p_{0m} e^{ik(mH+H)}, \quad (6.12)$$

$$Q = 1 - \sum_{m=0}^{n-2} p_{0m}. \quad (6.13)$$

Expandindo o binômio do lado direito e igualando-se os coeficientes de e^{iklJ} obtemos para $l = 0, 1, \dots, z-1$

$$\sum_{m=0}^{(n-1)(z-1-l)} p_{lm} e^{ikmH} = \binom{z-1}{l} P^{z-1-l} p^l Q^l. \quad (6.14)$$

Expandimos agora P^{z-1-l} sob a forma

$$P^{z-1-l} = \sum_{j=0}^{z-1-l} \binom{z-1-l}{j} (1-p)^{z-1-l-j} p^j \sum_{m_1=0}^{n-2} \dots \sum_{m_j=0}^{n-2} p_{0m_1} \dots p_{0m_j} e^{ik(m_1+\dots+m_j+H)H}, \quad (6.15)$$

e substituímos na equação (6.14). Igualando-se os coeficientes de e^{ikmH} obtemos as equações para os pesos p_{lm} ,

$$p_{lm} = \binom{z-1}{l} p^l Q^l \sum_{j=0}^{z-1-l} \binom{z-1-l}{j} (1-p)^{z-1-l-j} p^j \sum_{m_1+\dots+m_j+j=m} p_{0m_1} \dots p_{0m_j}, \quad (6.16)$$

onde $0 \leq m_i \leq n-2$ e $m = 0, 1, \dots, (n-1)(z-1-l)$. Em particular para $l = 0$ temos

$$p_{0m} = \sum_{j=0}^{z-1} \binom{z-1}{j} (1-p)^{z-1-j} p^j \sum_{m_1+\dots+m_j+j=m} p_{0m_1} \dots p_{0m_j}. \quad (6.17)$$

Essa equação permite a determinação recursiva dos pesos p_{0m} para $m = 0, 1, \dots, (n-1)(z-1)$. Como Q definida em (6.13) é expressa em termos desses pesos, a equação (6.16)

permite que todos os pesos p_{lm} sejam determinados. Isso prova a validade do *Ansatz* (6.4) proposto inicialmente para a distribuição de probabilidades $P_1(\bar{H})$.

A equação (6.17) fornece imediatamente o valor para o peso

$$p_{00} = (1 - p)^{z-1}. \quad (6.18)$$

Esse resultado pode ser interpretado facilmente. Segundo a equação (6.2), p_{00} é a probabilidade do campo efetivo ser devido apenas ao campo aplicado. A equação (2.30) mostra que um sítio vizinho i não contribuirá com campo efetivo se estiver vazio ($c_i = 0$), o que ocorre com probabilidade $1 - p$, ou se estiver ocupado ($c_i = 1$) mas o campo efetivo for nulo ($\bar{H}^{(i)} = 0$), o que não é possível pois o menor campo efetivo é igual ao campo aplicado. Portanto um sítio vizinho produzirá um campo efetivo nulo com probabilidade $1 - p$. Como existem $z - 1$ sítios vizinhos na camada adjacente, a probabilidade de que o campo efetivo num sítio seja nulo será dada por $(1 - p)^{z-1}$, em concordância com a equação (6.18). Como esse raciocínio independe da temperatura, concluímos que a probabilidade de que o campo efetivo seja nulo será dada para qualquer temperatura por p_{00} determinado pela equação (6.18).

No caso de coordenação $z = 2$ a equação (6.17) fornece

$$p_{00} = 1 - p, \quad (6.19)$$

$$p_{0m} = pp_{0,m-1}, \quad (m = 1, 2, \dots, n-1). \quad (6.20)$$

Resolvendo as equações acima obtemos

$$p_{0m} = p^m(1 - p), \quad (m = 0, 1, \dots, n-1). \quad (6.21)$$

Portanto de (6.13) o valor de Q é

$$Q = 1 - \sum_{m=0}^{n-2} p_{0m} = p^{n-1}, \quad (6.22)$$

o que permite determinar p_{10} usando (6.16),

$$p_{10} = pQ = p^n. \quad (6.23)$$

Isso representa a solução completa para a distribuição dos campos efetivos no caso unidimensional $z = 2$ e $H > 0$.

No caso de coordenadas $z \geq 3$ não nos parece ser viável obter uma solução explícita para todos os intervalos de campos aplicados I_n . Nos contentaremos em mostrar como podemos resolver para valores dados de n . Para o intervalo $n = 1$ obtemos de (6.18) e (6.13) o valor $Q = 1$, e a equação (6.16) fornece para $l = 1, 2, \dots, z - 1$

$$p_{l0} = \binom{z-1}{l} p^l (1-p)^{z-1-l}. \quad (6.24)$$

Para o intervalo $n = 2$ obtemos de (6.17)

$$p_{00} = (1-p)^{z-1}, \quad (6.25)$$

$$p_{0m} = \binom{z-1}{m} (1-p)^{z-1-m} p^m p_{00}^m, \quad (6.26)$$

para $m = 1, \dots, z - 1$, e

$$Q = 1 - p_{00} = 1 - (1-p)^{z-1}. \quad (6.27)$$

Finalmente da equação (6.16) obtemos para $m = 0, 1, \dots, z - 1 - l$,

$$p_{lm} = \binom{z-1}{l} \binom{z-1-l}{m} p^{l+m} (1-p)^{(z-1)(m+1)-l-m} Q^l. \quad (6.28)$$

Claramente os cálculos ficam cada vez mais trabalhosos conforme consideramos intervalos com n crescentes.

6.2 Resultados para $J > 0$, $H > 0$ e $T > 0$

As Figs. 6.6 a 6.13 mostram exemplos de distribuições de campos efetivos para coordenação $z = 3$, concentração $p = 0,8$ e campo aplicado $H = 0,5$ para diferentes valores de temperatura. Nesses gráficos comparamos os resultados obtidos por meio de simulação segundo o procedimento descrito na seção 4.1 com aqueles obtidos numericamente conforme o método da seção 4.2. Nas simulações foram consideradas $N_a = 10^5$ amostras de campos efetivos gerados por meio de ramos com $n = 10$ camadas que foram representadas por meio de histogramas normalizados de largura $\Delta\bar{H} = 10^{-2}$. Nos cálculos numéricos usamos a aproximação com $N_h = 400$ deltas, e foram representados por meio de histogramas normalizados com área unitária. Podemos observar uma boa concordância entre os dois resultados, se descontarmos os efeitos de tamanho finito existentes nas simulações.

Lembremos que sempre existe uma contribuição para o campo efetivo $\bar{H} = H$ igual a $(1-p)^{z-1}$, conforme discutido na seção 6.1. Essa contribuição aparece representada nos histogramas como um pico de altura $(1-p)^{z-1}/\Delta\bar{H}$ centrado em $\bar{H} = H$. O comportamento com a temperatura dessas distribuições segue o mesmo padrão encontrado no capítulo 5 para o caso $H = 0$. Em baixas temperaturas surgem picos satélites que se concentram em torno dos valores encontrados em $T = 0$. Conforme aumentamos a temperatura, esses picos satélites afastam-se e se alargam, distribuindo-se mais uniformemente.

Figura 6.6: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ obtida por simulação.

Figura 6.7: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ obtida numericamente.

Figura 6.8: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ obtida por simulação.

Figura 6.9: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ obtida numericamente.

Figura 6.10: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,5$ obtida por simulação.

Figura 6.11: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,5$ obtida numericamente.

Figura 6.12: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 2$ obtida por simulação.

Figura 6.13: Distribuição dos campos efetivos para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 2$ obtida numericamente.

A partir das distribuições de probabilidade $P_1(\bar{H})$ podemos calcular as distribuições de probabilidade $P_0(\bar{H})$ usando a equação (3.9). Essas distribuições de probabilidade permitem calcular a magnetização (2.37), a energia livre (3.14) e a energia interna (3.16). A entropia pode então ser determinada pela relação termodinâmica $s/k_B = \beta(u - f)$. As Figs. 6.14 a 6.17 mostram a magnetização, a energia livre, a energia interna e a entropia calculadas numericamente para $z = 3$ e $H = 0,1$ para diferentes valores de p . Nesses cálculos foi utilizada a aproximação com $N_h = 500$ deltas e as grandezas termodinâmicas foram calculadas em intervalos de $\Delta T = 10^{-2}$.

Observamos no gráfico da magnetização da Fig. 6.14 que o campo aplicado destrói a transição em $H = 0$, visível na Fig. 5.15. Esse comportamento é diferente também do encontrado no caso $H = 0$, para $T \rightarrow 0$, onde a magnetização tende ao valor $m = p$. A razão para isso é que, para $H > 0$, aglomerados de qualquer tamanho contribuem para a magnetização.

A Fig. 6.17 mostra que para $T \rightarrow 0$ a entropia $s \rightarrow 0$, ou seja, diferente do que foi encontrado para $H = 0$, aqui não há entropia residual. Isso ocorre porque o campo $H > 0$ levanta a degenerescência dupla dos aglomerados finitos.

Figura 6.14: Magnetização versus T para $z = 3$ e $H = 0, 1$

Figura 6.15: Energia livre versus T para $z = 3$ e $H = 0, 1$

Figura 6.16: Energia interna versus T para $z = 3$ e $H = 0,1$

Figura 6.17: Entropia versus T para $z = 3$ e $H = 0,1$

Capítulo 7

Modelo antiferromagnético com campo aplicado

Neste capítulo estudaremos o modelo com interações antiferromagnéticas na presença de um campo aplicado. Na seção 7.1 apresentaremos os resultados numéricos e analíticos para temperatura $T = 0$. Na seção 7.2 serão apresentados resultados obtidos numericamente para temperaturas $T > 0$.

7.1 Resultados para $J < 0$, $H > 0$ e $T = 0$

No caso de interações antiferromagnéticas os cálculos numéricos indicam que o número de campos efetivos é infinito para valores *irracionais* de $H < -(z - 1)J$, exceto para o caso unidimensional $z = 2$. Esse comportamento é bem diferente do observado para o modelo com interações ferromagnéticas, onde o número de campos efetivos para $H > 0$ era sempre finito, embora crescesse como $1/H$ para $H \rightarrow 0$.

Na Fig. 7.1 mostramos os possíveis campos efetivos determinados numericamente para $z = 2$ a intervalos de campo aplicado $\Delta H = 10^{-3}$ segundo os métodos descritos na seção 4.2.

Para $z \geq 3$ os campos efetivos foram calculados para valores de campo aplicado da

Figura 7.1: Campos efetivos possíveis para $z = 2$ e $J < 0$ em $T = 0$

forma

$$H = \left(n + \frac{p}{q}\right) J, \quad (7.1)$$

onde n é inteiro e p/q é uma fração pertencente a uma *seqüência de Farey* de uma certa ordem. Uma seqüência de Farey de ordem n consiste de todas as frações irredutíveis cujos denominadores não ultrapassem n (Iyanaga e Kawada, 1980). Por exemplo, a seqüência de Farey de ordem 5 é formada pelas frações

$$\frac{0}{1}, \frac{1}{5}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{1}{2}, \frac{3}{5}, \frac{2}{3}, \frac{3}{4}, \frac{4}{5}, \frac{1}{1}. \quad (7.2)$$

As Figs. 7.2 e 7.3 mostram os campos efetivos possíveis determinados numericamente conforme o método exposto na seção 4.2 para o caso de coordenação $z = 3$ e $z = 4$, respectivamente. Os campos aplicados correspondem à seqüência de Farey de ordem 20, existindo um total de 129 campos efetivos desse tipo em cada intervalo unitário $p/q \in [0, 1]$ de campo aplicado.

Observamos que os campos efetivos possíveis independem da concentração dos sítios ocupados. Como as interações são antiferromagnéticas, pode haver ocorrência de ciclos

limite compostos por duas distribuições de probabilidade, cada uma associada a uma das subredes. As Figs. 7.4 e 7.7 mostram exemplos de distribuições que compõem um ciclo limite de periodicidade 2. Nesses gráficos comparamos os resultados obtidos por meio de simulações, conforme o método descrito na seção 4.1, com aqueles obtidos numericamente segundo os métodos descritos na seção 4.2. Nas simulações consideramos $N_a = 10^5$ amostras de campos efetivos gerados usando ramos com $n = 10$ camadas.

Figura 7.2: Campos efetivos possíveis para $z = 3$ e $J < 0$ em $T = 0$

Figura 7.3: Campos efetivos possíveis para $z = 4$ e $J < 0$ em $T = 0$

Figura 7.4: Distribuição dos campos efetivos na subrede A para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ obtida por simulação.

Figura 7.5: Distribuição dos campos efetivos na subrede A para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ obtida numericamente.

Figura 7.6: Distribuição dos campos efetivos na subrede B para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ obtida por simulação.

Figura 7.7: Distribuição dos campos efetivos na subrede B para $z = 3$, $J < 0$, $p = 0,75$, $H = 1$ e $T = 0$ obtida numericamente.

Nas Figs. 7.8 e 7.9 mostramos exemplos de processo de magnetização, ou seja, magnetização como função do campo aplicado para coordenação $z = 2$. Nesse caso as magnetizações nas subredes são iguais, e a magnetização cresce por meio de uma série de 3 patamares até atingir o valor de saturação $m = p$. Esse resultado concorda com aqueles obtidos anteriormente em redes unidimensionais pelo método de matriz de transferência (Matsubara et al., 1973).

É interessante analisar o motivo do surgimento desses patamares na magnetização, pois eles surgem também para coordenações $z > 3$ devido ao mesmo mecanismo. Os patamares podem ser compreendidos como sendo devido à existência de diferentes tipos de aglomerados que contribuem para a magnetização. No caso unidimensional existem somente dois tipos de aglomerados, conforme tenham um número par ou ímpar de spins. Consideremos inicialmente um aglomerado com número ímpar n de spins. As ilustrações são para o caso $n = 9$. Para campos altos são favorecidos os estados em que os spins alinham-se com o campo

$$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \quad (a)$$

sendo a energia $E_a = -(n-1)J - nH$, enquanto para campos baixos são favorecidos estados antiferromagnéticos da forma

$$\uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \quad (b)$$

com energia $E_b = (n-1)J - H$. Os estados do tipo (a) são favoráveis para campos aplicados $H > -2J$, enquanto os estados do tipo (b) para $H < -2J$. Consideremos agora um aglomerado com número par n de spins. As ilustrações são para o caso $n = 8$. Para campos altos os estados favorecidos são aqueles em que todos os spins alinham-se com o campo

$$\uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \quad (c)$$

tendo a energia $E_c = -(n-1)J - nH$. Para campos intermediários, os estados em que

existe um par vizinho de spins alinhando-se com o campo são favorecidos,

$$\left. \begin{array}{cccccccc} \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \\ \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow \\ \uparrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{array} \right\} \quad (d).$$

Todos esses estados têm a mesma energia $E_d = -(n-3)J - 2H$. Finalmente para campos baixos os estados antiferromagnéticos da forma

$$\left. \begin{array}{cccccccc} \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow \\ \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow \end{array} \right\} \quad (e)$$

são favorecidos, ambos com energia $E_e = -(n-1)J$. Os estados do tipo (c) são favoráveis para campos aplicados $H > -2J$, os do tipo (d) para $-J < H < -2J$, e os do tipo (e) para $0 < H < -J$.

Para que exista um aglomerado de n spins deve haver dois sítios não ocupados cercado n sítios contigualmente ocupados. Portanto a probabilidade de ocorrência de um aglomerado de n spins é $(1-p)^2 p^n$. Para campos aplicados $H > -2J$ os aglomerados com número ímpar de n spins estão no estado (a) com magnetização n , e aqueles com número par n de spins estão no estado (e) com magnetização n . Portanto a magnetização por sítio para $H > -2J$ é dada por

$$m = (1-p)^2 \sum_{n=1}^{\infty} n p^n = p. \quad (7.3)$$

Para campos aplicados $-J < H < -2J$ os aglomerados com número ímpar de spins estão no estado (b) com magnetização 1, e aqueles com número par de spins estão no estado (d) com magnetização 2. Portanto a magnetização por sítio para $-J < H < -2J$ é dada por

$$m = (1-p)^2 \left(\sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ ímpar}}}^{\infty} p^n + 2 \sum_{\substack{n=2 \\ n \text{ par}}}^{\infty} p^n \right) = \frac{p(1-p)(1+2p)}{(1+p)}. \quad (7.4)$$

Para campos aplicados $0 < H < -J$ os aglomerados com número ímpar n de spins estão no estado (b) com magnetização 1, e aqueles com número par de spins estão no estado

(e) com magnetização 0. Portanto a magnetização por sítio para $0 < H < -J$ é dada por

$$m = (1 - p)^2 \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ ímpar}}} p^n = \frac{p(1 - p)}{1 + p}. \quad (7.5)$$

Recentemente esses patamares foram observados experimentalmente no antiferromagneto unidimensional $\text{CsCo}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Cl}_3$ para $x = 0,1$ e $x = 0,05$ em temperaturas na faixa de 1,5 a 4,2 K (Inami, Asano, Ajiro, e Goto, 1994).

Nas Figs. 7.10 a 7.13 mostramos exemplos de processos de magnetização para coordenação $z = 3$, que acreditamos serem típicos para os casos $z > 2$. As magnetizações foram calculadas para os mesmos valores de campos aplicados da Fig. 7.2, ou seja, seqüência de Farey de ordem 20. De maneira semelhante ao que ocorre no caso $z = 2$, podemos observar a existência de patamares de magnetização. Por outro lado, para concentrações $p > p_c$ observamos também a existência de fases antiferromagnéticas para baixo campo aplicado, caracterizadas por magnetizações distintas nas duas subredes A e B.

Para determinar a transição entre as fases paramagnética e antiferromagnética, é mais interessante considerar a magnetização como função da concentração para valores fixos do campo aplicado, como mostramos nas Figs. 7.14 e 7.15 para o caso de coordenação $z = 3$. Como o número de campos efetivos é finito e é o mesmo para um dado valor racional do campo aplicado para qualquer concentração p , é possível determinar precisamente o valor de p em que ocorre a transição entre a fase antiferromagnética e a fase paramagnética. A Fig. 7.16 mostra o diagrama de fases em $T = 0$ no plano campo aplicado versus concentração, que obtivemos determinando o valor de transição de p para campos aplicados dados pela seqüência de Farey de ordem 20 entre $H = 0$ e $H = 4$.

Figura 7.8: Processo de magnetização para $z = 2$, $J < 0$ e $p = 0,3$ em $T = 0$. Figura 7.9: Processo de magnetização para $z = 2$, $J < 0$ e $p = 0,7$ em $T = 0$.

Figura 7.10: Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,6$ em $T = 0$.

Figura 7.11: Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,7$ em $T = 0$.

Figura 7.12: Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,8$ em $T = 0$.

Figura 7.13: Processo de magnetização para $z = 3$, $J < 0$ e $p = 0,9$ em $T = 0$.

Figura 7.14: Magnetização versus p para $z = 3$, $J < 0$ e $H = 0,5$ em $T = 0$.

Figura 7.15: Magnetização versus p para $z = 3$, $J < 0$ e $H = 1,5$ em $T = 0$.

Figura 7.16: Diagrama de fases campo aplicado versus concentração para $z = 3$ em $T = 0$.

Para campos aplicados $H \geq -zJ$ os cálculos numéricos sugerem o seguinte *Ansatz* para os possíveis campos efetivos,

$$\bar{H}_l = [H + (z - 1)J] - lJ, \quad l = 0, 1, \dots, z - 1. \quad (7.6)$$

Numericamente encontramos para esses valores do campo aplicado apenas distribuições limite, de modo que suporemos que a distribuição tenha a forma

$$P_1(\bar{H}) = \sum_{l=0}^{z-1} p_l \delta(\bar{H} - \bar{H}_l). \quad (7.7)$$

A função característica (4.33) será dada por

$$\phi(k) = \sum_{l=0}^{z-1} p_l e^{ik\bar{H}_l}, \quad (7.8)$$

enquanto a função característica (4.35) por

$$\Phi(k) = \sum_{l=0}^{z-1} p_l e^{ikg(\bar{H}_l)}. \quad (7.9)$$

Agora, para $H \geq -zJ$ temos $\bar{H}_l \geq -J$ para $l = 0, 1, \dots, z - 1$, o que implica

$$g(\bar{H}_l) = J, \quad l = 0, 1, \dots, z - 1, \quad (7.10)$$

e a função característica $\Phi(k)$ fica simplesmente

$$\Phi(k) = \sum_{l=0}^{z-1} p_l e^{ikJ} = e^{ikJ}. \quad (7.11)$$

Substituindo $\phi(k)$ e $\Phi(k)$ obtidos acima na equação (4.34) obtemos

$$\sum_{l=0}^{z-1} p_l e^{ik\bar{H}_l} = e^{ikH} [(1-p) + pe^{ikJ}]^{z-1} = \sum_{l=0}^{z-1} \binom{z-1}{l} (1-p)^l p^{(z-1)-l} e^{ik\bar{H}_l}. \quad (7.12)$$

Igualando os coeficientes do termo $e^{ik\bar{H}_l}$ resulta

$$p_l = \binom{z-1}{l} (1-p)^l p^{(z-1)-l}, \quad (7.13)$$

o que mostra a validade do *Ansatz* (7.7).

Para determinar a magnetização usando a distribuição $P_1(\bar{H})$ dada por (7.7) precisamos determinar a distribuição dos campos efetivos $P_0(\bar{H})$ correspondente por meio de (3.9). Substituindo (7.7) em (3.9) obtemos

$$P_0(\bar{H}) = (1-p) \sum_{l=0}^{z-1} p_l \delta(\bar{H} - \bar{H}_l) + p \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{l'=0}^{z-1} p_l p_{l'} \delta(\bar{H} - \bar{H}_l - g(\bar{H}_{l'})). \quad (7.14)$$

Usando o resultado (7.10) para $g(\bar{H})$ vem

$$P_0(\bar{H}) = \sum_{l=0}^{z-1} \left[(1-p) \delta(\bar{H} - \bar{H}_l) + p \delta(\bar{H} - \bar{H}_{l-1}) \right] p_l. \quad (7.15)$$

A magnetização é portanto dada por

$$m = p \sum_{l=0}^{z-1} \left[(1-p) \operatorname{sgn}(\bar{H}_l) + p \operatorname{sgn}(\bar{H}_{l-1}) \right] p_l. \quad (7.16)$$

Para $H > -zJ$ todos os campos efetivos $\bar{H}_l$, $l = -1, 0, 1, \dots, z-1$, são estritamente positivos e obtemos

$$m = p. \quad (7.17)$$

Para $H = -zJ$ o campo efetivo $\bar{H}_{-1}$ é nulo, o que diminui a magnetização para

$$m = p(1 - pp_0) = p(1 - p^z). \quad (7.18)$$

Para campos aplicados no intervalo $-(z-1)J \leq H < -zJ$ os cálculos numéricos sugerem o seguinte *Ansatz* para os campos efetivos possíveis

$$\bar{H}_{lm} = (1-m)[H + (z-1)J] - lJ, \quad (7.19)$$

onde $l = 0, 1, \dots, z-1$ e $m = 0, 1, \dots, l$. Os cálculos numéricos também mostram que, nesse intervalo de campos aplicados, distribuições limite de ciclo 2 são possíveis. Portanto vamos considerar distribuições dos campos efetivos diferentes para cada uma das subredes

$$P_1^A(\bar{H}) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A \delta(\bar{H} - \bar{H}_{lm}), \quad (7.20)$$

$$P_1^B(\bar{H}) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^B \delta(\bar{H} - \bar{H}_{lm}). \quad (7.21)$$

As funções características (4.41) serão dadas por

$$\phi_A(k) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A e^{ik\bar{H}_{lm}}, \quad \phi_B(k) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^B e^{ik\bar{H}_{lm}}. \quad (7.22)$$

enquanto a funções características (4.43) por

$$\Phi_A(k) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A e^{ikg(\bar{H}_{lm})}, \quad \Phi_B(k) = \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^B e^{ikg(\bar{H}_{lm})}. \quad (7.23)$$

Observando que, de (2.33),

$$\begin{aligned} g(\bar{H}_{00}) &= -\bar{H}_{00} = -H - (z-1)J, \\ g(\bar{H}_{lm}) &= J, \quad l \geq 1, \end{aligned} \quad (7.24)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \Phi_A(k) &= p_{00}^A e^{-ik[H+(z-1)J]} + \sum_{l=1}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A e^{ikJ} \\ &= p_{00}^A e^{-ik[H+(z-1)J]} + (1 - p_{00}^A) e^{ikJ}. \end{aligned} \quad (7.25)$$

e analogamente,

$$\Phi_B(k) = p_{00}^B e^{-ik[H+(z-1)J]} + (1 - p_{00}^B) e^{ikJ}. \quad (7.26)$$

Substituindo as expressões acima para $\phi_A(k)$ e $\phi_B(k)$, e $\Phi_A(k)$ e $\Phi_B(k)$ nas equações (4.42)

obtemos

$$\sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A e^{ik\bar{H}_{lm}} = e^{ikH} [(1-p) + pp_{00}^B e^{-ik[H+(z-1)J]} + p(1-p_{00}^B) e^{ikJ}]^{z-1}, \quad (7.27)$$

$$\sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^B e^{ik\bar{H}_{lm}} = e^{ikH} [(1-p) + pp_{00}^A e^{-ik[H+(z-1)J]} + p(1-p_{00}^A) e^{ikJ}]^{z-1}. \quad (7.28)$$

Expandindo o lado direito das equações acima e igualando os coeficientes dos termos $e^{ik\bar{H}_{lm}}$ encontramos

$$p_{lm}^A = \frac{(z-1)!}{(l-m)!m![(z-1)-l]!} (1-p)^{l-m} p^{(z-1)+m-l} (p_{00}^B)^m (1-p_{00}^B)^{(z-1)-l}, \quad (7.29)$$

$$p_{lm}^B = \frac{(z-1)!}{(l-m)!m![(z-1)-l]!} (1-p)^{l-m} p^{(z-1)+m-l} (p_{00}^A)^m (1-p_{00}^A)^{(z-1)-l}. \quad (7.30)$$

Em particular p_{00}^A e p_{00}^B são determinadas pelas equações

$$p_{00}^A = [p(1-p_{00}^B)]^{z-1}, \quad (7.31)$$

$$p_{00}^B = [p(1-p_{00}^A)]^{z-1}. \quad (7.32)$$

Todos os outros pesos p_{lm}^A e p_{lm}^B podem ser expressos em termos desses pesos. Por exemplo,

$$p_{10}^A = (z-1)(1-p)p^{z-2}(1-p_{00}^B)^{z-2}, \quad (7.33)$$

$$p_{10}^B = (z-1)(1-p)p^{z-2}(1-p_{00}^A)^{z-2},$$

e

$$p_{11}^A = (z-1)p^{z-1}p_{00}^B(1-p_{00}^B)^{z-2}, \quad (7.34)$$

$$p_{11}^B = (z-1)p^{z-1}p_{00}^A(1-p_{00}^A)^{z-2}.$$

Para determinar as magnetizações das subredes precisamos calcular as distribuições de probabilidade dos campos efetivos centrais $P_0^A(\bar{H})$ e $P_0^B(\bar{H})$. Substituindo (7.21) em (3.20) obtemos

$$\begin{aligned} P_0^A(\bar{H}) &= (1-p) \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A \delta(\bar{H} - \bar{H}_{lm}) \\ &+ \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l \sum_{l'=0}^{z-1} \sum_{m'=0}^{l'} p_{lm}^A p_{l'm'}^B \delta(\bar{H} - \bar{H}_{lm} - g(\bar{H}_{l'm'})). \end{aligned} \quad (7.35)$$

Usando o resultado (7.24) para $g(\bar{H})$ a equação acima pode ser escrita

$$\begin{aligned} P_0^A(\bar{H}) &= (1-p) \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A \delta(\bar{H} - \bar{H}_{lm}) + pp_{00}^B \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A \delta(\bar{H} - \bar{H}_{l,m+1}) \\ &+ p(1-p_{00}^B) \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l p_{lm}^A \delta(\bar{H} - \bar{H}_{l-1,m}). \end{aligned} \quad (7.36)$$

A magnetização da subrede A dada por (3.21) fica

$$m_A = p \sum_{l=0}^{z-1} \sum_{m=0}^l \left[(1-p) \text{sgn}(\bar{H}_{lm}) + pp_{00}^B \text{sgn}(\bar{H}_{l,m+1}) + p(1-p_{00}^B) \text{sgn}(\bar{H}_{l-1,m}) \right] p_{lm}^A. \quad (7.37)$$

No intervalo de campos considerado $-(z-1)J \leq H < -zJ$ os campos efetivos $\bar{H}_{lm}$ dados por (7.19) são todos positivos exceto nos seguintes casos:

$$\bar{H}_{00} \geq 0. \quad \bar{H}_{00} = 0 \quad \text{somente se} \quad H = -(z-1)J, \quad (7.38)$$

$$\bar{H}_{01} = 0, \quad (7.39)$$

$$\bar{H}_{-1,0} < 0. \quad (7.40)$$

Portanto para $-(z-1)J < H < -zJ$ a magnetização da subrede A será dada por

$$m_A = p[(1-p) + p(1-p_{00}^A) - p(1-p_{00}^B)(p_{00}^A + p_{11}^A)], \quad (7.41)$$

e analogamente na subrede B,

$$m_B = p[(1-p) + p(1-p_{00}^B) - p(1-p_{00}^A)(p_{00}^B + p_{11}^B)]. \quad (7.42)$$

Por outro lado, para $H = -(z-1)J$ a magnetização da subrede A será

$$m_A = p[(1-p_{00}^A) - p(1-p_{00}^B)(p_{00}^A + p_{10}^A + p_{11}^A)], \quad (7.43)$$

e na subrede B,

$$m_B = p[(1-p_{00}^B) - p(1-p_{00}^A)(p_{00}^B + p_{10}^B + p_{11}^B)]. \quad (7.44)$$

Numa solução paramagnética não há distinção entre subredes. Fazendo $p_{00}^A = p_{00}^B = p_{00}$ na equação (7.32) obtemos

$$p_{00} = [p(1-p_{00})]^{z-1}. \quad (7.45)$$

Essa equação pode ser vista como uma equação determinando o ponto fixo do mapeamento

$$p_{00}^{(n)} = [p(1-p_{00}^{(n-1)})]^{z-1} = f(p_{00}^{(n-1)}). \quad (7.46)$$

Para que o ponto fixo seja estável por mapeamento é preciso que o módulo da derivada de f calculado no ponto fixo seja menor que 1,

$$|f'(p_{00})| = (z-1)p^{z-1}(1-p_{00})^{z-2} < 1. \quad (7.47)$$

Essa condição somente é satisfeita para

$$p < \frac{z^{(z-2)/(z-1)}}{z-1} = p^*. \quad (7.48)$$

Portanto identificamos p^* como sendo a concentração acima da qual surgem fases antiferromagnéticas para $H \geq -(z-1)J$. Para $z = 2$ obtemos

$$p^* = 1, \quad (7.49)$$

consistente com a não existência de fase ordenada exceto para $p = 1$. Para $z = 3$

$$p^* = \frac{\sqrt{3}}{2} = 0,86602 \dots, \quad (7.50)$$

em concordância com a localização do patamar na Fig. 7.16.

7.2 Resultados para $J < 0$, $H > 0$ e $T > 0$

As figuras 7.17 a 7.24 mostram exemplos de distribuições de campos efetivos nas duas subredes obtidas para coordenação $z = 3$, concentração $p = 0,8$ e campo aplicado $H = 0,5$ para valores crescentes de temperatura. Nesses gráficos comparamos os resultados obtidos por meio de simulação conforme os procedimentos descritos na seção 4.1, e os resultados numéricos segundo os métodos expostos na seção 4.2. Nas simulações coletamos $N_a = 10^5$ amostras de campos efetivos gerados por meio de ramos com $n = 10$ camadas, e foram representados por meio de histogramas com largura $\Delta\bar{H} = 10^{-2}$ normalizados com área unitária. Nos cálculos numéricos utilizamos uma aproximação com $N_h = 400$ deltas, neste caso também apresentamos os resultados por meio de histogramas normalizados com área unitária. Observamos que existe uma boa concordância entre os resultados numéricos e de simulação, descontados os efeitos de superfície presentes nas simulações.

Em baixas temperaturas as distribuições nas subredes A e B são diferentes, resultado diferente do encontrado no caso ferromagnético. Em temperaturas baixas os histogramas apresentam picos satélite em torno dos campos efetivos encontrados em $T = 0$. Conforme aumentamos a temperatura, esses picos se afastam e se alargam, e as distribuições dos campos efetivos tendem a se tornar mais uniformes. Acima de uma certa temperatura $T_c(H, p)$ as distribuições de probabilidade nas duas subredes tornam-se idênticas, como mostrado na Fig. 7.24, indicando a ocorrência de uma fase paramagnética. Entretanto, na Fig. 7.23 obtida por simulação, as duas distribuições ainda não coincidem devido ao efeito imposto pelos sítios da superfície.

Figura 7.17: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B em (tonalidades diferentes) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ obtidas por simulação.

Figura 7.18: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B (tonalidades diferentes) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 0,5$ obtidas numericamente.

Figura 7.19: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B (tonalidades diferentes) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ obtidas por simulação.

Figura 7.20: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B (tonalidades diferentes) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1$ obtidas numericamente.

Figura 7.21: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B (tonalidades diferentes) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,25$ obtidas por simulação.

Figura 7.22: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B (tonalidades diferentes) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,25$ obtidas numericamente.

Figura 7.23: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B (tonalidades diferentes) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,5$ obtidas por simulação.

Figura 7.24: Distribuições dos campos efetivos das duas subredes A e B (superpostas) para $z = 3$, $p = 0,8$, $H = 0,5$ e $T = 1,5$ obtidas numericamente.

A partir das distribuições de probabilidade das subredes $P_1^A(\bar{H})$ e $P_1^B(\bar{H})$ podemos calcular $P_0^A(\bar{H})$ e $P_0^B(\bar{H})$ usando a equação (3.20). Essas distribuições permitem calcular as magnetizações das subredes (3.21) e (3.22), a energia livre (3.26) e a energia interna (3.27). A entropia pode então ser determinada pela relação termodinâmica $s/k_B = \beta(u - f)$.

As Figs. 7.25 a 7.28 mostram as magnetizações, a energia livre, a energia interna e a entropia calculadas numericamente para $z = 3$ e $H = 1$ para diferentes valores da concentração como função da temperatura. Esses gráficos devem ser comparados com aqueles das Figs. 6.14 a 6.17 para o caso ferromagnético. Notemos que há uma diferença em relação àquele caso, pois vemos na Fig. 7.25 que o campo aplicado $H = 1$ não destrói transições para $p \geq 0,7$, embora o faça para $p = 0,6$. Observamos também na Fig. 7.28 a existência de entropia residual para $T \rightarrow 0$.

Talvez mais interessantes sejam os gráficos das grandezas termodinâmicas como funções do campo aplicado. As Figs. 7.29 a 7.32 mostram as magnetizações, a energia livre, a energia interna e a entropia calculadas numericamente para $z = 3$ e $p = 0,6$ para diferentes valores da temperatura como função do campo aplicado. Analogamente, o conjunto das Figs. 7.33 a 7.44 correspondem aos valores de $p = 0,7, 0,8$ e $0,9$. Nesses cálculos foi utilizada a aproximação com $N_h = 500$ deltas e as grandezas termodinâmicas foram calculadas em intervalos de $\Delta H = 10^{-2}$.

Com relação aos gráficos da entropia versus campo aplicado (7.32, 7.36, 7.40 e 7.44) notamos que, para baixas temperaturas, surgem picos de entropia em torno dos valores $H = 1$, $H = 2$ e $H = 3$. Notemos que tais regiões, nos gráficos *mxT*, mostram maior variação das magnetizações e estão sempre entre dois *degraus de magnetização*. Portanto, o surgimento de tais picos é devido, provavelmente, ao fato de que nessas regiões temos mais de um tipo de aglomerado sendo magnetizado, o que provoca um crescimento no número de estados acessíveis ao sistema.

A fronteira entre as fases paramagnética e antiferromagnética pode ser determinada monitorando-se o valor da magnetização “staggered”. A Fig. 7.45 mostra o diagrama de fases campo aplicado versus concentração determinado numericamente para $z = 3$ e para

diferentes valores de temperatura.

Figura 7.25: Magnetização versus T para $z = 3$ e $H = 1$

Figura 7.26: Energia livre versus T para $z = 3$ e $H = 1$

Figura 7.27: Energia interna versus T para $z = 3$ e $H = 1$ Figura 7.28: Entropia versus T para $z = 3$ e $H = 1$

Figura 7.29: Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T .

Figura 7.30: Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T

Figura 7.31: Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T

Figura 7.32: Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,6$ e diferentes T

Figura 7.33: Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T .

Figura 7.34: Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3732

Figura 7.35: Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T

Figura 7.36: Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,7$ e diferentes T

Figura 7.37: Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T .

Figura 7.38: Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T .

Figura 7.39: Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T

Figura 7.40: Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,8$ e diferentes T

Figura 7.41: Magnetização versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T .

Figura 7.42: Energia livre versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T

Figura 7.43: Energia interna versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T

Figura 7.44: Entropia versus H para $z = 3$, $p = 0,9$ e diferentes T

Figura 7.45: Diagrama de fases campo aplicado versus concentração para diferentes temperaturas.

Figura 7.46: Diagrama de fases no espaço T - p - H .

Capítulo 8

Conclusões

Procuramos desenvolver o estudo do MIDS numa rede de Bethe de uma forma suficientemente completa pelo método da distribuição dos campos efetivos. Por essa razão, foram incluídos alguns resultados que já tinham sido obtidos anteriormente por outros métodos. São eles os resultados correspondentes ao diagrama de fases temperatura versus concentração (Domb, 1960; Young, 1976), e os resultados correspondentes à rede com coordenação $z = 2$, que coincide com o caso unidimensional (Matsubara et al., 1973).

A determinação numérica exata em $T = 0$ dos campos efetivos possíveis e os pesos estatísticos correspondentes, e o cálculo analítico em alguns casos selecionados parecem ser resultados inéditos. Em particular mencionamos a determinação numérica exata do diagrama de fases campo aplicado versus concentração do MIDSA, mostrado na Fig. 7.16. Numa rede de Bethe os valores dos expoentes críticos de percolação são $\beta_p = 1$ e $\gamma_p = 1$ (Fisher e Essam, 1961), de modo que o resultado heurístico (1.8) prevê comportamento linear próximo a p_c , o que é confirmado no diagrama de fases da Fig. 7.16.

No estudo por meio do grupo de renormalização no espaço real (Oliveira et al., 1988) foram encontrados um número finito de degraus, como reproduzido na Fig. 8.1, o que claramente difere de nossos resultados. Os degraus começam no valor de concentração igual à percolação crítica p_c em violação ao comportamento (1.8). Acreditamos que tal discordância se deve à limitação do método de grupo de renormalização no espaço real, que usa redes pequenas para implementar a transformação de renormalização. Entretanto, nossos cálculos comprovam analiticamente a existência de um grande degrau no valor da

Figura 8.1: Diagrama de fases tridimensional no espaço de temperatura, concentração e campo aplicado obtido por meio de grupo de renormalização no espaço real (Oliveira et al., 1988)

concentração p^* dada por (7.48). Para concentrações $p_c < p < p^*$ a fronteira de fases poderia consistir de uma densa seqüência de degraus, mas um estudo mais aprofundado seria necessário para esclarecer esta questão.

A determinação numérica das distribuições dos campos efetivos para $T > 0$, e o cálculo das grandezas termodinâmicas mediante o seu emprego, parecem ser também resultados inéditos. Mencionamos apenas a existência de um trabalho anterior em que a distribuição de magnetização local é determinada por meio de simulações (Mulder e Papatriantafyllou, 1989) e utilizada para calcular a magnetização, mas nenhuma outra grandeza termodinâmica. Por meio desses cálculos, determinamos numericamente o diagrama de fases no espaço tridimensional de campo aplicado, temperatura e concentração, como mostrado na Fig. 7.46. Como o comportamento crítico do modelo de Ising na rede de Bethe é do tipo campo médio, a depressão da temperatura crítica (1.7) prevista pela teoria de grupo de renormalização é obedecida com expoente $\phi = \gamma = 1$. A teoria de grupo de renormalização de campo médio sugere a ocorrência de comportamento tricrítico (Reinehr e Figueiredo, 1998) para campos altos, mas os nossos cálculos numéricos sugerem o contrário. De fato, as diversas curvas de processo de magnetização mostradas nas Figs. 7.29,

7.33, 7.37 e 7.41, não apresentam nenhuma evidência de transição de primeira ordem mesmo a temperaturas baixas.

Apêndice A

Cálculo da energia livre

A energia livre na rede de Bethe é determinada, a menos de uma função independente de H , pela equação (3.11), ou

$$\frac{\partial}{\partial H}(\beta f) = -p\beta \int \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H}. \quad (\text{A.1})$$

Substituindo a expressão (2.36) para $P_0(\bar{H})$ obtemos

$$\frac{\partial}{\partial H}(\beta f) = -p\beta \int \tanh \beta \left(H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i) \right) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \quad (\text{A.2})$$

Agora, como

$$\frac{\partial}{\partial H} \ln \cosh \beta \left(H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i) \right) = \beta \tanh \beta \left(H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i) \right), \quad (\text{A.3})$$

podemos escrever

$$\frac{\partial}{\partial H}(\beta f) = -p \int \frac{\partial}{\partial H} \ln \cosh \beta \left(H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i) \right) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i. \quad (\text{A.4})$$

Integrando por partes lembrando que $P_1(\bar{H}_i)$ dependem de H obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H}(\beta f) = & -p \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \cosh \beta \left(H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i) \right) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \\ & + p \int \ln \cosh \beta \left(H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i) \right) \sum_{j=1}^z \left[\prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \right] \\ & \times P(c_j) dc_j \frac{\partial P_1(\bar{H}_j)}{\partial H} d\bar{H}_j. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Introduzindo funções delta nessas integrais podemos reescrevê-las sob a forma

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \bar{H}}(\beta f) = & -p \frac{\partial}{\partial \bar{H}} \int \ln \cosh \beta \bar{H} \left[\int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i \right. \\
 & \times P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \Big] d\bar{H} + p \sum_{j=1}^z \int \ln \cosh \beta (\bar{H} + c_j g(\bar{H}_j)) \\
 & \times \left[\int \delta(\bar{H} - H - \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \right] d\bar{H} \\
 & \times P(c_j) dc_j \frac{\partial P_1(\bar{H}_j)}{\partial H} d\bar{H}_j.
 \end{aligned} \tag{A.6}$$

De acordo com (2.36) o termo entre colchetes na primeira integral é $P_0(\bar{H})$, enquanto de acordo com (3.4) o termo entre colchetes na segunda integral é $P_1(\bar{H})$. Assim ficamos com

$$\frac{\partial}{\partial \bar{H}}(\beta f) = -p \frac{\partial}{\partial \bar{H}} \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} + pz I_1. \tag{A.7}$$

onde

$$I_1 = \int \ln \cosh \beta (\bar{H} + cg(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P(c) dc \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial H} d\bar{H}'. \tag{A.8}$$

Integrando por partes obtemos

$$\begin{aligned}
 I_1 = & \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \cosh \beta (\bar{H} + cg(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P(c) dc P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\
 & - \int \ln \cosh \beta (\bar{H} + cg(\bar{H}')) \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial H} d\bar{H} P(c) dc P_1(\bar{H}') d\bar{H}',
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

Usando (3.8) na primeira integral e efetuando a integração em c na última integral resulta

$$I_1 = \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - (1-p) \int \ln \cosh \beta \bar{H} \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial H} d\bar{H} - p I_2, \tag{A.10}$$

onde

$$I_2 = \int \ln \cosh \beta (\bar{H} + g(\bar{H}')) \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial H} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \tag{A.11}$$

Agora, segue da definição (2.32) da função $g(x)$ que

$$\cosh \beta (\bar{H} + g(\bar{H}')) = \frac{e^{\beta J} \cosh \beta (\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta (\bar{H} - \bar{H}')}{\sqrt{4 \cosh \beta (J + \bar{H}') \cosh \beta (J - \bar{H}')}}. \tag{A.12}$$

Substituindo na integral I_2 obtemos

$$I_2 = \int \ln \left[e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}') \right] \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial H} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' - \frac{1}{2} \int \ln \left[4 \cosh \beta(J + \bar{H}') \cosh \beta(J - \bar{H}') \right] \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial H} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (\text{A.13})$$

A segunda integral se anula pois

$$\frac{\partial}{\partial H} \int P_1(\bar{H}) d\bar{H} = 0. \quad (\text{A.14})$$

Como a primeira integral é simétrica em $\bar{H}$ e $\bar{H}'$ podemos escrever

$$I_2 = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \left[e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}') \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (\text{A.15})$$

Substituindo esse resultado para I_2 na expressão para I_1 obtemos

$$I_1 = \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - (1-p) \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} - \frac{p}{2} \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \left[e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}') \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (\text{A.16})$$

Finalmente, substituindo I_1 acima em (A.7) resulta

$$\frac{\partial}{\partial H}(\beta f) = p(z-1) \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - zp(1-p) \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} - \frac{zp^2}{2} \frac{\partial}{\partial H} \int \ln \left[e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}') \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (\text{A.17})$$

Integrando em H obtemos

$$\beta f = p(z-1) \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - zp(1-p) \int \ln \cosh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} - \frac{zp^2}{2} \int \ln \left[e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}') \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' + \phi, \quad (\text{A.18})$$

onde ϕ independe de H . Para determinar ϕ vamos considerar o limite $H \rightarrow \infty$. Nesse limite os próprios campos efetivos tendem a infinito, de modo que a função (2.32) é dada por $g(\bar{H}) = J$, e a função característica (4.33) fica

$$\phi(k) = e^{ikH} [(1-p) + pe^{ikJ}]^{z-1} = \sum_{l=0}^{z-1} \binom{z-1}{l} p^l (1-p)^{z-1-l} e^{ik(H+lJ)}. \quad (\text{A.19})$$

Logo,

$$P_1(\bar{H}) = \sum_{l=0}^{z-1} \binom{z-1}{l} p^l (1-p)^{z-1-l} \delta(\bar{H} - H - lJ). \quad (\text{A.20})$$

A segunda integral em (A.18) fica, portanto,

$$\int \ln \cosh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} = \sum_{l=0}^{z-1} \binom{z-1}{l} p^l (1-p)^{z-1-l} \ln \cosh \beta(H + lJ). \quad (\text{A.21})$$

No limite considerado

$$\ln \cosh \beta(H + lJ) = \beta(H + lJ) - \ln 2, \quad (\text{A.22})$$

de modo que

$$\int \ln \cosh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} = \beta[H + (z-1)pJ] - \ln 2. \quad (\text{A.23})$$

As outras integrais podem ser calculadas de forma semelhante, de forma que nesse limite (A.18) é dada por

$$\beta f = -\frac{1}{2} \beta z p^2 J - \beta p H - \ln 2 \left[(z-1)p - zp(1-p) - \frac{1}{2} z p^2 \right] + \phi. \quad (\text{A.24})$$

Comparando esse resultado com o valor (3.12) que a energia livre deve assumir nesse mesmo limite determinamos o valor de ϕ ,

$$\phi = \ln 2 \left[(z-1)p - zp(1-p) - \frac{1}{2} z p^2 \right]. \quad (\text{A.25})$$

Portanto a expressão para a energia livre fica

$$\begin{aligned} \beta f = & p(z-1) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - zp(1-p) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} \\ & - \frac{zp^2}{2} \int \ln 2 \left[e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}') \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Apêndice B

Cálculo da energia interna

A energia interna por sítio é dada pela relação termodinâmica (3.15). Partindo da expressão da energia livre f dada por (3.14) obtemos

$$u = p(z-1) \int \bar{H} \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} - zp(1-p) \int \bar{H} \tanh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} \\ - \frac{zp^2}{2} \int \left[J \frac{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') - e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')}{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')} \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \quad (\text{B.1}) \\ - \frac{zp^2}{2} I_3 + R_1 + R_2,$$

onde,

$$I_3 = \int \left[\frac{(\bar{H} + \bar{H}') e^{\beta J} \sinh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + (\bar{H} - \bar{H}') e^{-\beta J} \sinh \beta(\bar{H} - \bar{H}')}{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')} \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}', \quad (\text{B.2})$$

e R_1 e R_2 são termos contendo derivadas das distribuições,

$$R_1 = p(z-1) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} \frac{\partial P_0(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H}, \quad (\text{B.3})$$

$$R_2 = -zp(1-p) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} - \frac{zp^2}{2} \int \ln 2 [e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') \quad (\text{B.4})$$

$$+ e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')] \left[\frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' + P_1(\bar{H}) d\bar{H} \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial \beta} d\bar{H}' \right]. \quad (\text{B.5})$$

Vamos mostrar inicialmente que $R_1 + R_2 = 0$. Usando a expressão (3.6) para $P_0(\bar{H})$ obtemos

$$\frac{\partial}{\partial \beta} P_0(\bar{H}_0) = I_1 + I_2, \quad (\text{B.6})$$

onde

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \int \delta'(\bar{H}_0 - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \left[- \sum_{i=1}^z c_i \frac{\partial g(\bar{H}_i)}{\partial \beta} \right] \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \\
 &= - \sum_{i=1}^z \int \delta'(\bar{H}_0 - \bar{H} - c_j g(\bar{H}_j)) \left[\int \delta(\bar{H} - H - \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z c_i g(\bar{H}_i)) \right. \\
 &\quad \times \left. \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \right] d\bar{H} P(c_j) dc_j P_1(\bar{H}_j) d\bar{H}_j c_j \frac{\partial g(\bar{H}_j)}{\partial \beta} \\
 &= -z \int \delta'(\bar{H}_0 - \bar{H} - c g(\bar{H}')) c P(c) dc P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \frac{\partial g(\bar{H}')}{\partial \beta} \\
 &= -zp \int \delta'(\bar{H}_0 - \bar{H} - g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \frac{\partial g(\bar{H}')}{\partial \beta},
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

e

$$\begin{aligned}
 I_2 &= \int \delta(\bar{H}_0 - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \sum_{j=1}^z \left[\prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \right] P(c_j) dc_j \frac{\partial P_1(\bar{H}_j)}{\partial \beta} d\bar{H}_j \\
 &= \sum_{j=1}^z \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - c_j g(\bar{H}_j)) \left[\delta(\bar{H} - H - \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z c_i g(\bar{H}_i)) \right. \\
 &\quad \times \left. \prod_{\substack{i=1 \\ (i \neq j)}}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \right] d\bar{H} P(c_j) dc_j \frac{\partial P_1(\bar{H}_j)}{\partial \beta} d\bar{H}_j \\
 &= z \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - c g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P(c) dc \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial \beta} d\bar{H}'.
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

Substituindo esses resultados em (B.6) resulta

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial \beta} P_0(\bar{H}_0) &= -zp \int \delta'(\bar{H}_0 - \bar{H} - g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \frac{\partial g(\bar{H}')}{\partial \beta} \\
 &\quad + z \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - c g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P(c) dc \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial \beta} d\bar{H}'.
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

Agora, se ao invés da expressão (3.6) para $P_0(\bar{H})$ usarmos a expressão (3.8) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} P_0(\bar{H}_0) &= \int \delta'(\bar{H}_0 - H - cg(\bar{H}')) \left[-c \frac{\partial g(\bar{H}')}{\partial \beta} \right] P(c) dc P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ &\quad + \int \delta(\bar{H}_0 - H - cg(\bar{H}')) P(c) dc \left[\frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} P_1(\bar{H}') + P_1(\bar{H}) \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial \beta} \right] d\bar{H} d\bar{H}' \\ &= -p \int \delta'(\bar{H}_0 - H - g(\bar{H}')) \frac{\partial g(\bar{H}')}{\partial \beta} P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ &\quad + \int \delta(\bar{H}_0 - H - cg(\bar{H}')) P(c) dc \left[\frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} P_1(\bar{H}') + P_1(\bar{H}) \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial \beta} \right] d\bar{H} d\bar{H}'. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Igualando (B.9) e (B.10) obtemos para a integral envolvendo a derivada de função delta o resultado,

$$\begin{aligned} p \int \delta'(\bar{H}_0 - H - g(\bar{H}')) \frac{\partial g(\bar{H}')}{\partial \beta} P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ = \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - cg(\bar{H}')) P(c) dc P_1(\bar{H}) d\bar{H} \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial \beta} d\bar{H}' \\ - \left(\frac{1}{z-1} \right) \int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - cg(\bar{H}')) P(c) dc \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Substituindo o resultado acima em (B.9) resulta

$$\frac{\partial}{\partial \beta} P_0(\bar{H}_0) = \left(\frac{z}{z-1} \right) \int \delta(\bar{H}_0 - H - cg(\bar{H}')) P(c) dc \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} P_1(\bar{H}') d\bar{H} d\bar{H}'. \quad (\text{B.12})$$

Substituindo esse resultado na expressão (B.4) para R_1 obtemos

$$\begin{aligned} R_1 &= pz \int \ln 2 \cosh \beta(\bar{H} + cg(\bar{H}')) P(c) dc \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ &= zp(1-p) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} \\ &\quad + zp^2 \int \ln 2 \cosh \beta(\bar{H} + g(\bar{H}')) \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Agora, usando a identidade (A.12) a segunda integral fica

$$\begin{aligned} &\int \ln 2 [e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')] \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ &\quad - \frac{1}{2} \int \ln [4 \cosh \beta(J + \bar{H}') \cosh \beta(J - \bar{H}')] P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \frac{\partial}{\partial \beta} \int P_1(\bar{H}) d\bar{H}. \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

A última integral se anula devido à normalização de $P_1(\bar{H})$. Portanto obtemos para R_1 o

resultado

$$R_1 = zp(1-p) \int \ln 2 \cosh \beta \bar{H} \frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} d\bar{H} + \frac{zp^2}{2} \int \ln 2 [e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')] \left[\frac{\partial P_1(\bar{H})}{\partial \beta} P_1(\bar{H}') + P_1(\bar{H}) \frac{\partial P_1(\bar{H}')}{\partial \beta} \right] d\bar{H} d\bar{H}', \quad (\text{B.15})$$

onde usamos o fato de que o argumento do logaritmo na última integral é simétrica em $\bar{H}$ e $\bar{H}'$. Comparando o resultado acima com a expressão (B.5) para R_2 vemos que

$$R_1 + R_2 = 0. \quad (\text{B.16})$$

Vamos agora procurar simplificar o restante dos termos na expressão (B.1) para a energia interna. Segue da definição (2.32) da função $g(x)$ que

$$\tanh \beta(H + g(\bar{H}')) = \frac{e^{\beta J} \sinh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \sinh \beta(\bar{H} - \bar{H}')}{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')}. \quad (\text{B.17})$$

Usando essa identidade podemos reescrever a integral I_3 dada por (B.2) sob a forma

$$I_3 = \int [\bar{H} \tanh \beta(\bar{H} + g(\bar{H}')) + \bar{H}' \tanh \beta(\bar{H}' + g(\bar{H}))] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ = 2 \int \bar{H} \tanh \beta(\bar{H} + g(\bar{H}')) P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (\text{B.18})$$

Agora, introduzindo a distribuição $P(c) = p\delta(1-c) + (1-p)\delta(c)$, vamos reescrever o resultado como

$$I_3 = \frac{2}{p} \int \bar{H} \tanh \beta(\bar{H} + cg(\bar{H}')) P(c) dc P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\ - \frac{2(1-p)}{p} \int \bar{H} \tanh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H} = \frac{2}{p} (I_4 - I_5) - \frac{2(1-p)}{p} \int \bar{H} \tanh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H}, \quad (\text{B.19})$$

onde

$$I_4 = \int (\bar{H} + cg(\bar{H}')) \tanh \beta(\bar{H} + cg(\bar{H}')) P(c) dc P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}', \quad (\text{B.20})$$

$$I_5 = \int cg(\bar{H}') \tanh \beta(\bar{H} + cg(\bar{H}')) P(c) dc P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}'. \quad (\text{B.21})$$

Usando a relação (3.8) para $P_0(\bar{H})$ vemos que a integral (B.20) é

$$I_4 = \int \bar{H}_0 \tanh \beta \bar{H}_0 \left[\int \delta(\bar{H}_0 - \bar{H} - cg(\bar{H}')) P(c) dc P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \right] d\bar{H}_0 \\ = \int \bar{H} \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H}. \quad (\text{B.22})$$

Usando a relação (3.4) para $P_1(\bar{H})$ vamos reescrever a integral (B.21) sob a forma

$$\begin{aligned}
 I_5 &= \int cg(\bar{H}') \tanh \beta(\bar{H} + cg(\bar{H}')) P(c) dc \left[\int \delta(\bar{H} - H - \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \right. \\
 &\quad \times \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \left. \right] d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\
 &= \int cg(\bar{H}') \tanh \beta(H + cg(\bar{H}')) + \sum_{i=1}^{z-1} c_i g(\bar{H}_i) P(c) dc P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \prod_{i=1}^{z-1} P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i \\
 &= \frac{1}{z} \int \left(\sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i) \right) \tanh \beta(H + \sum_{i=1}^z c_i g(\bar{H}_i)) \prod_{i=1}^z P(c_i) dc_i P_1(\bar{H}_i) d\bar{H}_i.
 \end{aligned} \tag{B.23}$$

Comparando com a relação (3.6) para $P_0(\bar{H})$ concluímos que

$$I_5 = \frac{1}{z} \int (\bar{H} - H) \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H}. \tag{B.24}$$

Substituindo os resultados (B.22) e (B.24) para I_4 e I_5 em (B.19) obtemos

$$\begin{aligned}
 I_3 &= \frac{2(z-1)}{zp} \int \bar{H} \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} + \frac{2H}{zp} \int \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H} \\
 &\quad - \frac{2(1-p)}{p} \int \bar{H} \tanh \beta \bar{H} P_1(\bar{H}) d\bar{H}.
 \end{aligned} \tag{B.25}$$

Finalmente, substituindo esse resultado em (B.1) obtemos para a energia livre por sítio

$$\begin{aligned}
 u &= -\frac{zJ}{2} p^2 \int \left[\frac{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') - e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')}{e^{\beta J} \cosh \beta(\bar{H} + \bar{H}') + e^{-\beta J} \cosh \beta(\bar{H} - \bar{H}')} \right] P_1(\bar{H}) d\bar{H} P_1(\bar{H}') d\bar{H}' \\
 &\quad - pH \int \tanh \beta \bar{H} P_0(\bar{H}) d\bar{H}
 \end{aligned} \tag{B.26}$$

Referências Bibliográficas

- Adachi, K., Sato, K., Matsuura, M., e Ohashi, M. (1970). "New type metamagnetism in $\text{Co}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_2$ - exchange-compensated paramagnetism". *J. Phys. Soc. Jpn.*, **29**(2), 323-332.
- Aharony, A. (1978). "Tricritical points in systems with random fields". *Phys. Rev. B*, **18**(7), 3318-3327.
- Aharony, A., e Harris, A. B. (1996). "Absence of self-averaging and universal fluctuations in random systems near critical points". *Phys. Rev. Lett.*, **77**(18), 3700-3703.
- Aharony, A., Harris, A. B., e Meir, Y. (1985). "Dilute random-field Ising-models and uniform-field antiferromagnets". *Phys. Rev. B*, **32**(5), 3203-3213.
- Bakri, M. M., e Stauffer, D. (1976). "Essential singularities in dilute magnets". *Phys. Rev. B*, **14**(9), 4215-4218.
- Barata, J. C. A., e Marchetti, D. H. U. (1997). "Griffiths' singularities in diluted Ising models on the Cayley tree". *J. Stat. Phys.*, **88**(1-2), 231-268.
- Bastea, S., e Duxbury, P. M. (1998). "Ground state structure of random magnets". *Phys. Rev. E*, **58**(4), 4261-4265.
- Baxter, R. J. (1982). *Exactly solved models in statistical mechanics*. London: Academic Press.
- Belanger, D. P. (1997). "Experiments on random field Ising model". In A. P. Young (Ed.), *Spin glasses and random fields* (pp. 251-275). Singapore: World Scientific.

- Bell, G. M. (1975). "Diluted Ising-model on linear and Bethe lattices". *J. Phys. C*, **8**(5), 669–682.
- Binder, K., e Young, A. P. (1986). "Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions". *Rev. Mod. Phys.*, **58**(4), 801–976.
- Bleher, P. M., Ruiz, J., e Zagrebnov, V. A. (1998). "On the phase diagram of the random field Ising model on the Bethe lattice". *J. Stat. Phys.*, **93**(1-2), 33–78.
- Brout, R. (1959). "Statistical mechanical theory of a random ferromagnetic system". *Phys. Rev.*, **115**(4), 824–835.
- Bruinsma, R. (1984). "Random-field Ising-model on a Bethe lattice". *Phys. Rev. B*, **30**(1), 289–299.
- Bruinsma, R., e Aeppli, G. (1983). "One-dimensional Ising-model in a random field". *Phys. Rev. Lett.*, **50**(19), 1494–1497.
- Cardy, J. L. (1984). "Random-field effects in site-disordered Ising antiferromagnets". *Phys. Rev. B*, **29**(1), 505–507.
- Derrida, B., Vannimenus, J., e Pomeau, Y. (1978). "Simple frustrated systems - chains, strips and squares". *J. Phys. C*, **11**(23), 4749–4765.
- Domb, C. (1960). "On the theory of cooperative phenomena in crystals". *Adv. Phys.*, **9**(34), 149–361.
- Domb, C. (1974). "Singularities of dilute Ising ferromagnet". *J. Phys. C - Cond. Matter*, **7**(15), 2677–2680.
- Eggarter, T. P. (1974). "Cayley trees, Ising problem, and thermodynamic limit". *Phys. Rev. B*, **9**(7), 2989–2992.
- Essam, J. W. (1972). "Percolation and cluster size". In C. Domb e M. S. Green (Eds.), *Phase transitions and critical phenomena* (Vol. 2, pp. 197–270). New York: Academic Press.

- Fischer, K. H., e Hertz, J. H. (1991). *Spin glasses*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Fisher, D. S., Grinstein, G. M., e Khurana, A. (1988). "Theory of random magnets". *Phys. Today*, **41**(12), 56–67.
- Fisher, M. E., e Essam, J. W. (1961). "Some cluster size and percolation problems". *J. Math. Phys.*, **2**(4), 609–619.
- Fishman, S., e Aharony, A. (1979). "Random field effects in disordered anisotropic anti-ferromagnets". *J. Phys. C*, **12**(18), L729–L733.
- Gefen, Y., Aharony, A., Shapir, Y., e Berker, A. N. (1982). "Hyperscaling and crossover exponents near the percolation- threshold". *J. Phys. C*, **15**(24), L801–L805.
- Gillespie, D. T. (1983). "A theorem for physicists in the theory of random-variables". *Am. J. Phys.*, **51**(6), 520–533.
- Gofman, M., Adler, J., Aharony, A., Harris, A. B., e Schwartz, M. (1996). "Critical behaviour of the random-field ising model". *Phys. Rev. B*, **53**(10), 6362–6384.
- Griffiths, R. B. (1969). "Nonanalytic behavior above critical point in a random Ising ferromagnet". *Phys. Rev. Lett.*, **23**(1), 17–19.
- Harris, A. B. (1974). "Effect of random defects on critical behavior of Ising models". *J. Phys. C*, **7**(9), 1671–1692.
- Harris, A. B. (1975). "Nature of Griffiths singularity in dilute magnets". *Phys. Rev. B*, **12**(1), 203–207.
- Hartmann, A. K. (1998). "Ground-state structure of diluted antiferromagnets and random field systems". *Physica A*, **248**(1-2), 1–20.
- Hartstein, C., e Entinwohlman, O. (1985). "Random-field Ising-model on a Bethe lattice - comment". *Phys. Rev. B*, **32**(1), 491–494.
- Heinrichs, J. (1978). "Critical properties of a dilute Ising-model in percolation limit". *Phys. Rev. B*, **18**(3), 1294–1299.

- Inami, T., Asano, T., Ajiro, Y., e Goto, T. (1994). "Magnetization process of the one-dimensional Ising-like antiferromagnet with nonmagnetic impurity, $\text{CsCo}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Cl}_3$ ". *Physica B*, **201**, 204–207.
- Iyanaga, S., e Kawada, Y. (Eds.). (1980). *Encyclopedic dictionary of mathematics* (Vol. 1). Cambridge: The MIT Press.
- Kampen, N. G. van. (1992). *Stochastic processes in physics and chemistry*. Amsterdam: Elsevier Science Publishers B. V.
- Katsura, S., e Takizawa, M. (1974). "Bethe lattice and Bethe approximation". *Prog. Theor. Phys.*, **51**(1), 82–98.
- Labarta, A., Marro, J., e Tejada, J. (1986). "Effective-field theory for the magnetic and thermal- properties of site-impure and bond-impure systems". *J. Phys. C*, **19**(10), 1567–1580.
- Lipowski, A., e Suzuki, M. (1992). "Study on phase-transitions of antiferromagnetic Ising-models using the coherent-anomaly method". *J. Phys. Soc. Jpn.*, **61**(7), 2484–2490.
- Matos, J. M. G. A. de, Segundo, J. A. B., e Perez, J. F. (1992). "Fluctuations in dilute antiferromagnets - Curie-Weiss models". *J. Phys. A-Math. Gen.*, **25**(10), 2819–2830.
- Matsubara, F., Yoshimura, K., e Katsura, S. (1973). "Magnetic properties of one-dimensional dilute Ising systems . I". *Can. J. Phys.*, **51**(10), 1053–1063.
- Mézard, M., Parisi, G., e Virasoro, M. A. (1987). *Spin glass theory and beyond*. Singapore: World Scientific.
- Milošević, S., Stošić, B., e Stošić, T. (1989). "Towards finding exact residual entropies of the Ising antiferromagnets". *Physica A*, **157**(2), 899–906.
- Morgenstern, I., Binder, K., e Hornreich, R. M. (1981). "Two-dimensional Ising-model in random magnetic-fields". *Phys. Rev. B*, **23**(1), 287–297.
- Mulder, B. M., e Papatriantafillou, C. (1989). "Origin magnetization distribution of the site-diluted Ising- model on a rooted Cayley tree". *J. Phys. A-Math. Gen.*, **22**(18), L913–L918.

- Müller-Hartman, E., e Zittartz, J. (1974). "New type of phase-transition". *Phys. Rev. Lett.*, **33**(15), 893–897.
- Mydosh, J. A. (1993). *Spin glasses: An experimental introduction*. London: Taylor & Francis.
- Newman, M. E. J., e Barkema, G. T. (1999). *Monte Carlo methods in statistical physics*. Oxford: Clarendon Press.
- Nowotny, T., Patzlaff, H., e Behn, U. (2002). "Phase diagram of the random field Ising model on the Bethe lattice - art. no. 016127". *Phys. Rev. E*, **65**01(1), 6127–+.
- Oguchi, T., e Obokata, T. (1969). "Theory of magnetically dilute systems". *J. Phys. Soc. Jpn.*, **27**(5), 1111–1116.
- Oliveira, S. M., Oliveira, P. M., e Continentino, M. A. (1988). "Site-diluted antiferromagnet in a uniform-field". *Physica A*, **152**(3), 477–493.
- Perez, J. F., Pontin, L. F., e Segundo, J. A. B. (1986). "On the equivalence of dilute antiferromagnets and ferromagnets in random external fields - Curie-Weiss models". *Phys. Lett. A*, **116**(6), 287–291.
- Reinehr, E. E., e Figueiredo, W. (1998). "Phase diagram of the dilute antiferromagnetic Ising model". *Phys. Lett. A*, **244**(1-3), 165–168.
- Runnels, L. K. (1967). "Phase transition of Bethe lattice gas of hard molecules". *J. Math. Phys.*, **8**(10), 2081–2087.
- Salinas, S. R., e Wreszinski, W. F. (1985). "On the mean-field Ising-model in a random external-field". *J. Stat. Phys.*, **41**(1-2), 299–313.
- Stauffer, D., e Aharony, A. (1995). *Introduction to percolation theory* (Second ed. ed.). Taylor and Francis.
- Stinchcombe, R. B. (1983). "Dilute magnetism". In C. Domb e J. L. Lebowitz (Eds.), *Phase transitions and critical phenomena* (Vol. 7, pp. 151–280). New York: Academic Press.

- Thompson, C. J. (1982). "Local properties of an Ising-model on a Cayley tree". *J. Stat. Phys.*, **27**(3), 441–456.
- Toulouse, G. (1977). "Theory of frustration effect in spin-glasses .1.". *Comm. Phys.*, **2**(4), 115–119.
- Wiseman, S., e Domany, E. (1998a). "Finite-size scaling lack self-averaging critical disordered systems". *Phys. Rev. Lett.*, **81**(1), 22–25.
- Wiseman, S., e Domany, E. (1998b). "Self-averaging, distribution of pseudocritical temperatures, and finite size scaling in critical disordered systems". *Phys. Rev. E*, **58**(3), 2938–2951.
- Young, A. P. (1976). "Critical behavior of disordered magnetic systems - exactly solvable model". *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **9**(11), 2103–2120.
- Young, A. P. (Ed.). (1997). *Spin glasses and random fields*. Singapore: World Scientific.
- Ziman, J. M. (1979). *Models of disorder*. Oxford: Cambridge University Press.