UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Efeitos de desordem ou aperiodicidade sobre o comportamento de sistemas magnéticos

André de Pinho Vieira

Tese de Doutorado
submetida ao Instituto de Física
da Universidade de São Paulo

Orientador: Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Eduardo Miranda (UNICAMP)
Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz (USP - São Carlos)
Prof. Dr. Francisco Castilla Becerra (USP)
Prof. Dr. Lindberg Lima Gonçalves (UFC)
Prof. Dr. Silvio Roberto de Azevedo Salinas (USP)

São Paulo
2002

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3734

ex. 1

V 657e
D
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Vieira, André de Pinho

Efeitos de Desordem ou Aperiodicidade sobre o
Comportamento de Sistemas Magnéticos.
São Paulo 2002

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

Orientador: Prof. Dr. Silvio R. de Azevedo Salinas
Área de Concentração: Física Estatística e
Termodinâmica

Unitermos: 1. Sistemas Magnéticos Desordenados;
2. Sistemas Quase-unidimensionais;
3. Interações Aperiódicas;
4. Sistemas de Spins Mistos;
5. Modelo XY Quântico.

USP/IF/SBI-060/2002

Para Adiléa Farias Lima

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao Prof. Silvio Salinas pela orientação, confiança e independência que me concedeu, e pelo muito que aprendi com seu exemplo de perseverança e otimismo; ao Prof. Lindberg Gonçalves, não apenas por ter me apresentado à física estatística, mas também pela disponibilidade e atenção constantes; ao Thomás Haddad, pelas incontáveis discussões sobre tantos assuntos, e pela paciência e determinação em me resgatar da "idiotia da vida rural"; aos professores Carlos Becerra e Armando Paduan Filho, pelos esclarecimentos essenciais à primeira parte deste trabalho; à Dra. Angsula Ghosh e aos colegas Paulo de Tarso Muzy e Masayuki Hase, companheiros de jornada, por compartilharem dúvidas e conhecimentos; aos membros do grupo de física estatística e aos demais amigos do Instituto de Física, pela agradável e frutífera convivência; à Márcia Silvani e à Rosângela Rodrigues, que tanto me auxiliaram nos meandros burocráticos; e à Fapesp, pelo apoio financeiro.

À Dani, expresso minha devoção e a gratidão por seu carinho e pelos tantos bons momentos; à minha mãe, à Bia e à Mariana, mais que o reconhecimento pela dedicação infinita, meu lamento pela atenção que lhes neguei ao longo destes últimos quatro anos; ao meu pai e à Sula, meu obrigado pelas palavras de apoio em momentos centrais. À Ivna e ao Marcelo, assim como à Lia e ao Bibi, agradeço a generosa acolhida no início desta etapa.

Resumo

Consideramos os efeitos de desordem ou aperiodicidade sobre três sistemas magnéticos distintos. Inicialmente, apresentamos um modelo fenomenológico para descrever a dependência térmica da magnetização remanente induzida por diluição numa classe de antiferromagnetos quase-unidimensionais. O modelo trata exatamente as correlações ao longo da direção dominante, levando em conta as demais interações por meio de um campo efetivo. Em seguida, utilizamos uma aproximação autoconsistente de Bethe-Peierls para avaliar os efeitos de um campo cristalino aleatório sobre os diagramas de fases de um modelo de Ising de spins mistos. Mostramos que a desordem é capaz de modificar a natureza dos pontos multicríticos existentes no limite uniforme do modelo. Finalmente, estudamos os efeitos de interações aleatórias ou aperiódicas sobre o comportamento da cadeia XX quântica em baixas temperaturas, através de cálculos numéricos baseados no mapeamento do sistema em um modelo de férmions livres. Apontamos evidências de que, em temperatura zero, existe um único ponto fixo universal, característico de uma fase de singlete aleatório, que governa o comportamento do modelo na presença de interações desordenadas. No caso de interações aperiódicas, obtemos resultados consistentes com previsões de grupo de renormalização, indicando, para uma certa classe de seqüências de substituição, um comportamento semelhante àquele associado à desordem.

Abstract

We consider effects of disorder or aperiodicity on three different magnetic systems. First, we present a phenomenological model to describe the thermal dependence of the dilution-induced remanent magnetization in a class of quasi-one-dimensional antiferromagnets. The model treats correlations along the dominant direction in an exact way, while including the remaining interactions via an effective field. Then, we use a self-consistent Bethe-Peierls approximation to gauge the effects of a random crystal field on the phase diagram of a mixed-spin Ising model. We show that disorder may have profound effects on the multicritical behavior associated with the uniform limit of the model. Finally, we study effects of random or aperiodic interactions on the behavior of the quantum XX chain at low temperatures, by performing numerical calculations based on a mapping of the system onto a free-fermion model. We present evidence that, at zero temperature, there exists a single, universal fixed-point, associated with a random-singlet phase, which governs the behavior of the model in the presence of disordered interactions. In the case of aperiodic interactions, our results are consistent with renormalization-group predictions, indicating, for a certain class of substitution sequences, a behavior similar to the one induced by disorder.

1

3

5

2

3

4

5

8

Sumário

Introdução	3
1 Modelo fenomenológico para a magnetização remanente de antiferromagnetos quase-unidimensionais diluídos	7
1.1 Introdução	7
1.2 Interações entre primeiros vizinhos	11
1.3 Aproximação da cadeia linear	13
1.4 Conclusões	18
2 Modelo de spins mistos com anisotropia aleatória	21
2.1 Introdução	21
2.2 Solução exata em uma dimensão	23
2.3 Versão de Curie–Weiss	26
2.4 Aproximação de Bethe–Peierls	28
2.5 Conclusões	34
3 Cadeia XX quântica com interações não-homogêneas: estudo comparativo de desordem e aperiodicidade	37
3.1 Introdução	37
3.2 Mapeamento da cadeia XX num sistema de férmions livres . .	40
3.3 Interações aleatórias	45
3.3.1 O grupo de renormalização no espaço real	46
3.3.2 Resultados numéricos	51
3.4 Interações aperiódicas	62
3.4.1 Sequências aperiódicas	63
3.4.2 O grupo de renormalização no espaço real	67
3.4.3 Resultados numéricos	73
3.5 Conclusões	86
A Cadeia de Ising de spin S com campos alternados	89

B Expansão de baixas temperaturas para o modelo de spins mistos aleatório	93
C Outros trabalhos	95

Introdução

Em maior ou menor grau, todos os materiais existentes na natureza exibem imperfeições ou características não-homogêneas. O sucesso da descrição dos vários materiais através de modelos uniformes depende de quão profundos são os efeitos das impurezas sobre as propriedades desses sistemas. Em muitos casos, tais efeitos são relevantes, exigindo a modificação dos modelos empregados, de modo a levar em consideração elementos de não-homogeneidade. Na maioria das situações, isso torna o tratamento matemático consideravelmente mais enredado, como demonstram os modelos para vidros de spin [Binder e Young 1986]. Em consequência, torna-se muitas vezes imprescindível a utilização de técnicas de aproximação, em associação ou não a ferramentas de simulação computacional.

A análise de modelos estatísticos com elementos aleatórios parece ter sido formalizada por Brout [1959] e Mazo [1963]. Uma distinção essencial deve ser feita entre o limite de desordem temperada, em que as impurezas são consideradas fixas, e o limite recozido, em que as impurezas atingem o equilíbrio térmico com o restante do sistema. Essa distinção tem como base a diferença entre as escalas do tempo de relaxação das impurezas, τ_i , e do tempo de relaxação das variáveis naturais do sistema uniforme subjacente, τ_s . Na grande maioria dos casos de interesse físico, esses tempos são tais que $\tau_i \gg \tau_s$; portanto, as impurezas devem ser consideradas como essencialmente fixas, e o limite temperado é mais apropriado.

No que diz respeito aos fenômenos críticos, os efeitos de desordem são aquilatados pelo critério heurístico de Harris [1974]. Segundo esse critério, sendo α o expoente crítico associado ao calor específico de um sistema uniforme, a introdução de desordem produz alteração no comportamento crítico desse sistema se $\alpha > 0$. Isso ajudou a compreender discrepâncias entre modelos que previam divergências no calor específico, associadas a transições de fase em certos materiais, e medidas experimentais que verificavam apenas máximos suaves. Posteriormente, o critério foi validado e estendido utilizando técnicas de grupo de renormalização [Lubensky 1975].

Fora da criticalidade, a presença de não-homogeneidades pode produ-

zir comportamentos inteiramente novos em certos materiais, especialmente aqueles de baixa dimensionalidade. Exemplos disso são os fenômenos de ordem por desordem [Oseroff *et al.* 1995, Wessel *et al.* 2001], em que a adição de impurezas a sistemas cujo estado fundamental é desordenado induz o aparecimento de ordem antiferromagnética em baixas temperaturas. Nesses e em outros fenômenos, como as singularidades — não-críticas! — de Griffiths exibidas pela cadeia de Ising quântica desordenada [Fisher 1995], um ingrediente essencial é o caráter eminentemente quântico das flutuações presentes.

Nos últimos anos, também ganhou interesse o estudo de sistemas não-homogêneos com características determinísticas, concretizados nos quase-cristais. Essas estruturas são *aperiódicas* e não constituem cristais genuínos, apresentando simetrias proibidas para redes de Bravais; correspondem, na realidade, a projeções irracionais de redes periódicas de dimensionalidade elevada sobre espaços de dimensão inferior. Em função da ausência de periodicidade, é natural indagar até que ponto essas estruturas produzem efeitos semelhantes àqueles induzidos por aleatoriedade.

Uma resposta a essa questão é dada, quanto ao comportamento crítico, pelo critério heurístico de Luck [1993a]. Esse critério, em si próprio uma extensão do critério de Harris, toma por base um expoente ω associado às *flutuações geométricas* induzidas pela aperiodicidade. Para um dado sistema, caso esse expoente exceda um certo valor-limite (que depende dos expoentes críticos do sistema periódico subjacente), o critério prevê que a aperiodicidade é capaz de alterar a criticalidade. Ainda segundo o critério de Luck, ingredientes aperiódicos caracterizados por flutuações geométricas tão ou mais intensas que aquelas produzidas por aleatoriedade são certamente capazes de afetar o comportamento crítico de sistemas que satisfazem o critério de Harris. Os resultados fornecidos pelos estudos comparativos já realizados (veja, por exemplo, Iglói *et al.* [1998]) indicam, entretanto, que as semelhanças entre desordem e aperiodicidade limitam-se ao próprio ponto crítico. Fora da criticalidade, os dois tipos de não-homogeneidades produzem efeitos geralmente distintos.

Neste trabalho, consideramos três problemas em que a presença de não-homogeneidades é determinante. Os problemas são discutidos em capítulos distintos; como tentamos tornar tais capítulos autocontidos, com suas próprias introduções e conclusões, traçamos aqui apenas um panorama de seu conteúdo.

No primeiro capítulo, apresentamos um modelo fenomenológico para descrever o comportamento da magnetização remanente induzida pela diluição numa classe de antiferromagnetos quase-unidimensionais, estudados no La-

boratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas do IFUSP. Discutimos algumas características dos materiais, e descrevemos os resultados experimentais e as justificativas para a formulação de nosso modelo. Mostramos que ele fornece uma descrição razoável da dependência térmica da magnetização remanente, fazendo uso de um conjunto de parâmetros compatíveis com as estimativas experimentais.

No segundo capítulo, consideramos os efeitos de desordem sobre o diagrama de fases de sistemas que exibem comportamento tricrítico. Para tanto, estudamos o modelo de Ising de spins mistos com anisotropia aleatória, empregando uma aproximação autoconsistente de Bethe–Peierls. Comparamos os resultados com aqueles obtidos a partir de um tratamento de campo médio, e apresentamos a solução do problema em uma dimensão para testar a confiabilidade da aproximação.

O terceiro capítulo é dedicado a um estudo comparativo dos efeitos de interações desordenadas e aperiódicas sobre o comportamento da cadeia XX quântica em baixas temperaturas. Existem indícios de que a presença de interações não-homogêneas nesse sistema pode induzir, em baixas temperaturas, uma fase completamente distinta daquela que caracteriza o modelo uniforme. Discutimos previsões de grupo de renormalização para as propriedades dos sistemas, e apresentamos resultados de cálculos numéricos que realizamos para verificar essas previsões, bem como para investigar grandezas sobre as quais o grupo de renormalização não fornece informações, como é o caso das correlações entre spins na cadeia com interações aperiódicas.

No final do texto, incluímos três apêndices, dois dos quais tratam de aspectos técnicos dos capítulos 1 e 2; o terceiro apêndice reproduz dois artigos, resultantes de colaborações desenvolvidas paralelamente ao nosso programa de doutoramento.

Capítulo 1

Modelo fenomenológico para a magnetização remanente de antiferromagnetos quase-unidimensionais diluídos

Neste capítulo, apresentamos um modelo fenomenológico para a magnetização remanente observada em baixas temperaturas nos antiferromagnetos quase-unidimensionais $(\text{CH}_3\text{NH}_3) \text{Mn}_{1-x} \text{Cd}_x\text{Cl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ e $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2 \text{Mn}_{1-x} \text{Cd}_x\text{Cl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Em nosso modelo, supomos a existência de momentos magnéticos desemparelhados, induzidos em segmentos de tamanho ímpar gerados ao longo das cadeias de Mn^{2+} pela diluição do íon magnético. Supomos ainda que esses momentos permaneçam correlacionados ferromagneticamente após a remoção do campo de resfriamento. Utilizando uma aproximação de cadeia linear (essencialmente de campo médio) e um conjunto de parâmetros compatíveis com estimativas experimentais, fomos capazes de reproduzir a dependência aproximadamente linear da magnetização remanente com a temperatura, observada nos compostos reais.

1.1 Introdução

Em baixas temperaturas, sistemas quase-unidimensionais exibem uma variedade de comportamentos interessantes, como cruzamento dimensional [Smith e Friedberg 1968, de Jonge *et al.* 1975, Wang 1997], paramagnetismo quântico aleatório [Nguyen *et al.* 1996], fenômenos de ordem-por-desordem [Oseroff *et al.* 1995, Azuma *et al.* 1997], e fases de Griffiths [Fisher 1995, Young e Rieger 1996], que têm motivado diversas investigações teóricas e experi-

mentais. Na maioria desses sistemas, o ordenamento tridimensional é afinal induzido por interações entre as cadeias. Tirando proveito dos diversos resultados analíticos disponíveis para modelos unidimensionais, esse ordenamento tem sido descrito de várias formas. A maioria das abordagens é baseada em aproximações de cadeia linear [Scalapino *et al.* 1975, Trudeau e Plumer 1995, Schulz 1996], que tratam as correlações ao longo das cadeias de forma exata, introduzindo ao mesmo tempo as interações entre cadeias através de campos efetivos. Essas aproximações foram aplicadas com sucesso a sistemas puros, dando ainda origem a teorias de Ginzburg-Landau generalizadas, que levam em conta flutuações [Scalapino *et al.* 1975, McKenzie 1995]. Além disso, também foram bastante utilizadas para descrever efeitos de desordem [Imry *et al.* 1975, Hone *et al.* 1975, Schouten *et al.* 1980, Korenblit e Shender 1993, Eggert *et al.* 2002], que estão entre os principais tópicos da pesquisa em sistemas quase-unidimensionais.

Tratamos aqui de uma classe de materiais quase-unidimensionais, estudados no Laboratório de Estado Sólido e Baixas Temperaturas do IFUSP [Paduan-Filho *et al.* 1998, Becerra *et al.* 2000], representada pelos compostos $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{MnCl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (ou MMC) e $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{MnCl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (ou DMMC), que constituem sistemas de spins localizados nos quais os íons Mn^{2+} (de spin $S = 5/2$) arranjam-se ao longo do eixo cristalino b , formando cadeias, e são acoplados antiferromagneticamente entre si por uma interação intracadeias J/k_B da ordem de 3 K. Medidas de suscetibilidade magnética e calor específico [Simizu *et al.* 1984] indicam o surgimento de ordem de longo alcance tridimensional em temperaturas de Néel $T_N = 4.12$ K para o MMC e $T_N = 6.36$ K para o DMMC, com o alinhamento dos momentos magnéticos ocorrendo ao longo do eixo a do cristal. Essas temperaturas são compatíveis com interações entre cadeias $|J_\perp| \sim |J| \times 10^{-2}$. O caráter dessas interações não é relatado na literatura. Entretanto, o comportamento dos materiais quando diluídos com íons não-magnéticos Cd^{2+} sugere que interações ferromagnéticas entre cadeias estejam presentes, como discutiremos mais adiante. Em temperaturas acima de $T \sim 10$ K, as medidas de suscetibilidade são bem descritas por um modelo de Heisenberg quântico de spin $S = 5/2$; no entanto, em temperaturas mais baixas, efeitos de anisotropia (com provável origem dipolar) tornam-se relevantes [Simizu *et al.* 1984], como evidenciado na figura 1.1. Cálculos baseados num modelo de Heisenberg clássico, com parâmetros derivados de experimentos com o DMMC, reforçam a importância da anisotropia [Schouten *et al.* 1980]. Em particular, mostra-se que o comportamento do comprimento de correlação ao longo das cadeias exibe um cruzamento de tipo Heisenberg para tipo Ising com a diminuição da temperatura; esse comportamento é ilustrado na figura 1.2.

A substituição de pequenas quantidades de íons Mn^{2+} por íons não-

Figura 1.1. Suscetibilidades magnéticas ao longo dos eixos do cristal para o MMC puro. Fica evidente a anisotropia acentuada em temperaturas inferiores a 10 K. Extraído de Simizu *et al.* [1984].

Figura 1.2. Inverso do comprimento de correlação ao longo das cadeias, como função da temperatura, para os compostos DMMC e CMC (de propriedades estruturais e magnéticas semelhantes às do MMC), calculado para o modelo XYZ clássico com parâmetros estimados experimentalmente. É perceptível a mudança de comportamento do tipo Heisenberg para Ising em temperaturas inferiores a $T^* \sim 0.1$. Extraído de Schouten *et al.* [1980].

magnéticos Cd^{2+} induz o aparecimento de uma magnetização remanente [Paduan-Filho *et al.* 1998, Becerra *et al.* 2000] abaixo de T_N , quando as amostras são resfriadas na presença de campos de alguns oerstedes, dirigidos ao longo do eixo fácil. Observa-se que essa magnetização remanente varia de forma aproximadamente linear com a temperatura, exceto na imediata vizinhança de T_N , onde efeitos de desmagnetização parecem relevantes [Paduan-Filho *et al.* 1998]. Além disso, mede-se um excesso de suscetibilidade paralela, geralmente associado à existência de momentos magnéticos desemparelhados nos segmentos de tamanho ímpar, produzidos ao longo das cadeias pela diluição [Dupas e Renard 1978]. Aparentemente, a dependência (quase) linear da magnetização remanente com a temperatura tem caráter universal, como sugerido a partir de medidas [Becerra *et al.* 2000] realizadas no DMMC dopado com Cd^{2+} (não-magnético) e Cu^{2+} ($S = 1/2$). Experiências realizadas nos compostos similares $\text{CsMnCl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (CMC) e $\text{CsMnBr}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (CMB) dopados com Cu^{2+} , nos quais os sinais das interações entre cadeias são bem conhecidos, revelaram [Carvalho *et al.* 2001] que uma magnetização remanente aparece no CMB, em que os acoplamentos entre cadeias são ferromagnéticos ao longo de uma das direções transversas e antiferromagnéticas ao longo da outra; por outro lado, não se observa esse efeito no CMC, em que todas as interações são antiferromagnéticas. Esses resultados experimentais, juntamente com a observação de que algum acoplamento ferromagnético efetivo é necessário para gerar uma magnetização remanente não-nula, levaram à idéia de que interações ferromagnéticas devem também estar presentes no DMMC e no MMC [Becerra *et al.* 2000]. Entretanto, na ausência de dados experimentais, até o momento não parece haver evidências conclusivas sobre esse ponto.

Neste capítulo, introduzimos e discutimos um modelo fenomenológico para o comportamento magnético de baixas temperaturas do DMMC e do MMC diluídos. Em virtude dos efeitos de anisotropia já mencionados, acreditamos que os aspectos qualitativos desse comportamento sejam captados por um modelo de Ising de spin $S = 5/2$, que no limite puro (e no caso mais simples) é descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = J \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}+\mathbf{b}} + \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\boldsymbol{\delta}} J_{\boldsymbol{\delta}}^{\perp} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}}, \quad (1.1)$$

em que $J > 0$, $\mathbf{r}$ é um vetor da rede, $\mathbf{b}$ é o vetor primitivo ao longo do eixo cristalino b , $\boldsymbol{\delta}$ é um vetor que conecta um sítio a seus vizinhos mais próximos no plano ac , $J_{\boldsymbol{\delta}}^{\perp} = J_{\perp} > 0$ se $\boldsymbol{\delta}$ for paralelo ao eixo a , e $J_{\boldsymbol{\delta}}^{\perp} = -J_{\perp}$ se $\boldsymbol{\delta}$ for paralelo ao eixo c . Nossa abordagem baseia-se numa aproximação de cadeia linear, que trata os acoplamentos intracadeia (J) exatamente, introduzindo simultaneamente as fracas interações entre cadeias ($J_{\perp} \ll J$)

via termos de Curie–Weiss conectando todos os spins (de forma a produzir um campo efetivo alternado, que combine as interações intercadeias ferro- e antiferromagnéticas, evitando efeitos de frustração). Em temperaturas suficientemente baixas, as cadeias ordenam-se antiferromagneticamente, com uma estrutura bipartite característica. Como consequência da diluição, uma cadeia muito longa divide-se em segmentos finitos, e momentos magnéticos desemparelhados aparecem nas extremidades dos segmentos de tamanho ímpar. Com base na fenomenologia dos sistemas, supomos que esses momentos correlacionem-se ferromagneticamente, sendo sua direção determinada nos experimentos pelo campo de resfriamento. Para cada segmento de spins, a função de partição pode ser calculada exatamente; a energia livre total da cadeia é obtida pela soma das energias livres dos segmentos de todos os tamanhos, com pesos apropriados. Esse processo é detalhado na seção 1.2. Em seguida, na seção 1.3, incluímos os termos de Curie–Weiss e discutimos os resultados da aproximação. Mostramos que essa abordagem reproduz satisfatoriamente a dependência da magnetização com a temperatura e a existência de um excesso de suscetibilidade. Discutimos também a contribuição dos vários segmentos à suscetibilidade.

1.2 Interações entre primeiros vizinhos

Consideramos inicialmente um segmento aberto de n spins de Ising com acoplamentos antiferromagnéticos e campos alternados, descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H}_n = J \sum_{j=1}^{n-1} S_j S_{j+1} - \sum_{j=1}^n h_j S_j - D \sum_{j=1}^n S_j^2, \quad (1.2)$$

em que $J > 0$ e $h_j = h_1$ (h_2) para j ímpar (par); introduzimos também um campo cristalino D , como parâmetro adicional de ajuste. As variáveis de spin S_j assumem os valores $\pm 1/2$, $\pm 3/2$ e $\pm 5/2$. Os campos alternados são introduzidos de modo a abrir espaço para um campo efetivo alternado, necessário à descrição de ordem de longo alcance antiferromagnética na presença de interações entre cadeias. Em consonância com a hipótese fenomenológica de que há momentos magnéticos desemparelhados apontando numa direção preferencial, determinada pelo campo de resfriamento, supomos que os spins nas extremidades dos segmentos de tamanho ímpar sofram sempre a ação de um campo h_1 . Removido o campo, os momentos permaneceriam globalmente desemparelhados devido a efeitos de *pinning* produzidos pelas impu-

rezas não-magnéticas¹. Nos segmentos de tamanho par, a escolha particular de um campo h_1 em $j = 1$ é irrelevante, já que nesses casos a função de partição é simétrica com respeito ao intercâmbio de h_1 e h_2 .

Como consideramos valores finitos de n , devemos separar os segmentos de acordo com a paridade de seus tamanhos. Utilizando a conhecida técnica da matriz de transferência, podemos escrever as funções de partição para tamanhos ímpares e pares, respectivamente, como

$$\mathcal{Z}_{n-1}^i = \left\langle \mathbf{v}_1 \left| \mathbf{T}^{\frac{n-2}{2}} \right| \mathbf{v}_1 \right\rangle \quad (1.3)$$

e

$$\mathcal{Z}_n^p = \left\langle \mathbf{v}_1 \left| \mathbf{T}^{\frac{n-2}{2}} \mathbf{T}_1 \right| \mathbf{v}_2 \right\rangle = \left\langle \mathbf{v}_2 \left| \mathbf{T}_2 \mathbf{T}^{\frac{n-2}{2}} \right| \mathbf{v}_1 \right\rangle, \quad (1.4)$$

onde n é um número par, $\mathbf{T} = \mathbf{T}_1 \mathbf{T}_2$, os elementos das matrizes $\mathbf{T}_1$ e $\mathbf{T}_2$ (de tamanho 6×6) são dados por

$$T_1(S_i, S_j) = \exp \left\{ -\beta J S_i S_j + \frac{1}{2} \beta h_1 S_i + \frac{1}{2} \beta h_2 S_j + \frac{1}{2} \beta D (S_i^2 + S_j^2) \right\}, \quad (1.5)$$

$$T_2(S_i, S_j) = T_1(S_j, S_i), \quad (1.6)$$

e as componentes dos vetores $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{v}_2$ são

$$v_\alpha(S_j) = e^{\frac{1}{2} \beta (h_\alpha S_j + D S_j^2)}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (1.7)$$

As energias livres associadas aos segmentos de tamanhos pares e ímpares são dadas por

$$F_{n-1}^i = -k_B T \ln \mathcal{Z}_{n-1}^i \quad (1.8)$$

e

$$F_n^p = -k_B T \ln \mathcal{Z}_n^p. \quad (1.9)$$

Tomamos agora uma cadeia muito longa, e supomos que cada um de seus N sítios esteja ocupado por um spin com probabilidade p . Para $0 < p < 1$, a cadeia é composta de segmentos finitos, separados por sítios vazios (i.e., ocupados por íons não-magnéticos). No limite $N \rightarrow \infty$, o número de segmentos de tamanho n é $NP(n) = N(1-p)^2 p^n$. Supondo que cada segmento seja descrito pela hamiltoniana da eq. (1.2), a energia livre total por spin será dada pela série infinita

$$f_{pv}(h_1, h_2, T) = \frac{1}{p} \sum_{n \text{ par}} [P(n-1) F_{n-1}^i + P(n) F_n^p]. \quad (1.10)$$

¹O exato mecanismo que produziria esse *pinning* não parece claro até o momento.

Para $p < 1$, uma vez que $nP(n)$ torna-se desprezível para n suficiente grande, essa série infinita pode ser truncada e calculada numericamente. Isso demanda a multiplicação explícita das matrizes envolvidas, e é factível até temperaturas bastante baixas. No caso puro ($p = 1$), precisamos recorrer a um outro tipo de cálculo, que descrevemos no apêndice A.

Denominemos de tipo 1 (tipo 2) aqueles spins sob ação de um campo h_1 (h_2). Os números N_1 e N_2 de spins de cada tipo numa cadeia podem ser determinados se notarmos que num segmento de tamanho n há $n/2$ spins do tipo 1 se n for par, e $(n+1)/2$ spins do tipo 1 se n for ímpar. Assim, as frações de spins do tipo 1 e do tipo 2 são

$$\frac{N_1}{N} = \sum_{n \text{ ímpar}} P(n) \frac{n+1}{2} + \sum_{n \text{ par}} P(n) \frac{n}{2} = \frac{p}{1+p}, \quad (1.11)$$

e

$$\frac{N_2}{N} = \sum_{n \text{ ímpar}} P(n) \frac{n-1}{2} + \sum_{n \text{ par}} P(n) \frac{n}{2} = \frac{p^2}{1+p}, \quad (1.12)$$

respectivamente. Para $p < 1$, a diferença entre essas frações dará obviamente origem a uma magnetização resultante não nula em temperatura zero, desde que h_1 e h_2 tenham sentidos opostos.

1.3 Aproximação da cadeia linear

A fim de representar o fraco acoplamento entre cadeias nos compostos reais, supomos agora que, além dos acoplamentos entre primeiros vizinhos dentro de cada segmento, todos os spins numa cadeia estejam conectados entre si por interações de Curie–Weiss (CW) ferromagnéticas. Supomos ainda que as interações CW entre dois spins do tipo 1 ou do tipo 2 tenham intensidade J_{cw}/N , mas que as interações CW entre spins de tipos distintos sejam mais fracas por um fator γ . Introduzimos esse fator para permitir um eventual acoplamento oblíquo entre cadeias (ou seja, fora do plano perpendicular à direção b); no limite puro ($p = 1$), esperamos que as cadeias exibam ordem antiferromagnética, e assim γ deve ser menor que a unidade. Na presença de diluição, esperamos que a estrutura antiferromagnética sobreviva no interior de cada segmento, o que em princípio poderia levar a uma variação de γ com a concentração p , já que o arranjo magnético nos planos perpendiculares às cadeias seria perturbado. De todo modo, nossos resultados sugerem para γ um valor muito pequeno ou nulo nos compostos aqui considerados.

Escrevemos a contribuição dos spins do tipo 1 para as interações de Curie–Weiss como

$$E_{\text{cw}}^{(1)} = -\frac{J_{\text{cw}}}{N} \sum_{i \in \Lambda_1} S_i \left(\sum_{j \in \Lambda_1} S_j + \gamma \sum_{j \in \Lambda_2} S_j \right), \quad (1.13)$$

em que Λ_α denota o conjunto dos spins do tipo α ($\alpha = 1, 2$). Analogamente, temos

$$E_{\text{cw}}^{(2)} = -\frac{J_{\text{cw}}}{N} \sum_{i \in \Lambda_2} S_i \left(\gamma \sum_{j \in \Lambda_1} S_j + \sum_{j \in \Lambda_2} S_j \right).$$

Decorre então que a contribuição das interações de Curie–Weiss para a energia total por spin é

$$\varepsilon_{\text{cw}} = -pJ_{\text{cw}}(m_1^2 + 2\gamma m_1 m_2 + m_2^2), \quad (1.14)$$

onde m_1 (m_2) é a magnetização por íon magnético dos spins do tipo 1 (tipo 2). Como ε_{cw} depende apenas das médias m_1 e m_2 , e não dos detalhes da configuração dos spins, é conveniente realizar uma mudança de variáveis. Assim, introduzimos o potencial de Helmholtz por spin $a_{\text{pv}}(m_1, m_2, T)$, associado às interações entre primeiros vizinhos, definido pela transformação de Legendre

$$a_{\text{pv}}(m_1, m_2, T) = f_{\text{pv}}(\tilde{h}_1, \tilde{h}_2, T) + m_1 \tilde{h}_1 + m_2 \tilde{h}_2, \quad (1.15)$$

em que $\tilde{h}_1$ e $\tilde{h}_2$ são campos efetivos e

$$m_1 = - \left(\frac{\partial f_{\text{pv}}}{\partial \tilde{h}_1} \right)_{\tilde{h}_2, T} \quad \text{e} \quad m_2 = - \left(\frac{\partial f_{\text{pv}}}{\partial \tilde{h}_2} \right)_{\tilde{h}_1, T}. \quad (1.16)$$

Para valores fixos de m_1 e m_2 , escrevemos um potencial de Helmholtz total,

$$a(m_1, m_2, T) = a_{\text{pv}}(m_1, m_2, T) + \varepsilon_{\text{cw}}, \quad (1.17)$$

a partir do qual obtemos as relações entre os campos magnéticos externos h_1 , h_2 e os campos efetivos,

$$h_1 = \left(\frac{\partial a}{\partial m_1} \right)_{m_2, T} = \tilde{h}_1 - 2pJ_{\text{cw}}(m_1 + \gamma m_2), \quad (1.18)$$

e analogamente

$$h_2 = \left(\frac{\partial a}{\partial m_2} \right)_{m_1, T} = \tilde{h}_2 - 2pJ_{\text{cw}}(\gamma m_1 + m_2). \quad (1.19)$$

Comparando esses últimos resultados (para $\gamma = 0$) com o campo local no sítio r devido a seus $q_\perp$ vizinhos mais próximos nas cadeias adjacentes, obtido a partir da hamiltoniana na eq. (1.1), podemos estimar que

$$J_{cw} \simeq \frac{1}{2} p q_\perp J_\perp, \quad (1.20)$$

para pequenas diluições ($1 - p \ll 1$).

As magnetizações estáveis termodinamicamente são aquelas que minimizam o funcional de energia livre

$$\begin{aligned} \Phi(h_1, h_2, T; m_1, m_2) &= a(m_1, m_2, T) - m_1 h_1 - m_2 h_2 \\ &= f_{pv}(\tilde{h}_1, \tilde{h}_2, T) - \varepsilon_{cw}. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Para baixas temperaturas e pequenas razões J_{cw}/J , impondo $h_1 = h_2 = 0$, os valores estáveis de m_1 e m_2 têm sinais opostos. Na presença de diluição ($p < 1$), já que temos $|m_1| \neq |m_2|$, o modelo prevê a existência de uma magnetização remanente m_r por sítio dada por

$$m_r = p(m_1 + m_2). \quad (1.22)$$

No limite $T \rightarrow 0$, m_r atinge um valor de saturação,

$$\lim_{T \rightarrow 0} m_r = \frac{N_1 - N_2}{N} S = \frac{p(1-p)}{(1+p)} S, \quad (1.23)$$

com, neste caso, $S = 5/2$.

Podemos calcular a suscetibilidade (ferromagnética) a campo nulo χ_0 impondo $h_1 = h_2 = h$ e tomando o limite $h \rightarrow 0$,

$$\chi_0 = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial m_r}{\partial h} = - \left. \frac{\partial^2 f_{pv}(\tilde{h}_1, \tilde{h}_2, T)}{\partial h^2} \right|_{h=0, m_1, m_2}. \quad (1.24)$$

Obtemos ainda a temperatura de Néel pela solução da equação

$$\left\{ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial m_1^2 \partial m_2^2} - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial m_1 \partial m_2} \right)^2 \right\}_{m_1=m_2=0} = 0, \quad (1.25)$$

na ausência de campo externo.

Na figura 1.3 mostramos os dados experimentais [Becerra *et al.* 2000] para a dependência com a temperatura da magnetização remanente no DMMC dopado com 4.5% de Cd (a concentração foi estimada a partir de ajustes

Figura 1.3. Dados experimentais (círculos) e cálculos teóricos (curva sólida) para a dependência térmica da magnetização remanente no DMMC com 4.5% de Cd. A magnetização está normalizada a seu valor na temperatura mais baixa em que há dados experimentais disponíveis.

das medidas em altas temperaturas a uma lei de Curie–Weiss). Mostramos também resultados de nossos cálculos para a magnetização remanente com diluição de 4.5%, $J_{cw}/J = 1.5 \times 10^{-2}$, $\gamma = 0$, e $D = 0$. Obtivemos o melhor ajuste para a porção linear da curva impondo uma temperatura de Néel (T_N) teórica 14% superior ao valor experimental (o que equivale a ajustar J). Acreditamos que esse seja um procedimento razoável, já que nossos cálculos têm caráter de campo médio, de modo que não esperamos obter concordância quantitativa para o valor de T_N . É claro que os aspectos qualitativos de nossos cálculos são insensíveis a pequenas variações nos parâmetros; entretanto, não nos foi possível reproduzir o comportamento universal verificado experimentalmente (ou seja, não obtivemos colapso dos dados correspondentes a diversos conjuntos de parâmetros). Destacamos que a escolha de valores positivos e grandes para o campo cristalino transforma o sistema num modelo de Ising de spin $S = 1/2$; nesse caso, a dependência linear de m_r com a temperatura não pode ser bem reproduzida. É importante notar que, em vista da eq. (1.20), o valor de J_{cw}/J utilizado no ajuste é inteiramente compatível com a estimativa experimental $J_{\perp}/J \sim 10^{-2}$ mencionada anteriormente. A razão calculada entre as temperaturas de Néel dos modelos diluído e puro é de 0.86, comparada à estimativa experimental [Becerra *et al.* 2000] de

Figura 1.4. Suscetibilidade teórica a campo nulo por íon magnético no limite puro (curva tracejada) e para diluição de 4.5% (curva sólida), utilizando os mesmos parâmetros que na figura 1.3. As setas indicam a temperatura de Néel correspondente, inferior no caso diluído. O detalhe mostra o comportamento em baixas temperaturas.

0.99 para o material real; a diferença pode ser creditada, pelo menos parcialmente, ao fato de que nosso modelo considera apenas graus de liberdade uniaxiais para os spins. O valor de saturação de m_r para diluição de 1%, obtido da eq. (1.23), corresponde a 0.497% da magnetização de sub-rede no sistema puro, em excelente concordância com a estimativa experimental [Paduan-Filho *et al.* 1998] de 0.5% para o MMC com 1% de Cd.

Na figura 1.4 utilizamos o conjunto anterior de parâmetros para calcular a dependência térmica da suscetibilidade a campo nulo χ_0 tanto no limite puro quanto para diluição de 4.5%. O máximo alargado nessas curvas reflete as correlações de curto alcance antiferromagnéticas, enquanto as cúspides (indicadas na figura pelas setas) correspondem às temperaturas de Néel. Como se evidencia no detalhe, o caso diluído apresenta características distintas em baixas temperaturas: o pequeno máximo próximo a $T = 0$ deve-se aos spins isolados, cuja única escala de energia é determinada pelos fracos acoplamentos de Curie-Weiss, enquanto a saliência vizinha é produzida pelos pequenos segmentos de tamanho ímpar, cujos spins fronteiros estão desemparelhados (segmentos de tamanho par têm contribuição desprezível para χ_0 em temperaturas tão baixas); tais detalhes são ilustrados na figura 1.5. Há um claro

Figura 1.5. Contribuições dos segmentos de tamanho l para a suscetibilidade a campo nulo mostrada na figura 1.4. As curvas sólidas correspondem a $l = 1, 3, 5$ e 7 , enquanto a curva tracejada corresponde a $l = 2$, comprimento responsável pela maior contribuição entre os segmentos de tamanho par nessa faixa de temperaturas.

contraste com o limite puro, em que a suscetibilidade anula-se exponencialmente para $T < T_N$.

Por fim, devemos mencionar que nossa abordagem é uma generalização daquela utilizada por Slotte [1985] para investigar a cadeia de Ising diluída de spin $S = 1/2$ com competição entre interações de curto e longo alcance. No entanto, em virtude da presença de competição, o modelo de Slotte não contempla a possibilidade de ordem antiferromagnética de longo alcance em temperaturas finitas, mesmo no limite puro.

1.4 Conclusões

Introduzimos um modelo fenomenológico para a magnetização remanente (m_r) observada numa classe de antiferromagnetos diluídos quase-unidimensionais, compostos de cadeias de spins fracamente interagentes. O modelo supõe a existência de spins desemparelhados nas extremidades de segmentos de tamanho ímpar, formados ao longo das cadeias pela diluição. Supõe ainda que esses spins permaneçam ferromagneticamente correlacionados após a remoção de um campo de resfriamento. Utilizando uma aproximação de cadeia linear, em que as interações entre cadeias são tratadas num nível de campo

médio, fomos capazes de reproduzir a dependência (aproximadamente) linear de m_r com a temperatura, utilizando um conjunto de parâmetros compatíveis com estimativas experimentais.

Nossa aproximação de cadeia linear é baseada na suposição de que, mesmo em presença de diluição, cada segmento experimente um campo efetivo alternado. Claramente, essa suposição, também utilizada recentemente por Eggert et al. [2002] no estudo de outra classe de antiferromagnetos diluídos, está sujeita a algumas restrições. Dependendo da concentração de impurezas $1 - p$, a existência de momentos desemparelhados apontando numa direção preferencial poderia levar à completa desestabilização do ordenamento magnético perpendicular às cadeias². Nesse caso, os spins ao longo das cadeias experimentariam o mesmo campo efetivo, independentemente de suas posições. De fato, um tratamento baseado nessa última premissa daria origem a uma transição ferromagnética (com suscetibilidade divergente), e o ordenamento antiferromagnético de longo alcance não seria recuperado mesmo no limite $p \rightarrow 1$. Efetuamos os cálculos correspondentes nas vizinhanças desse limite, e verificamos que a temperatura crítica depende linearmente de $1 - p$, sendo portanto muito pequena em comparação aos resultados experimentais. Além disso, não é possível reproduzir a dependência térmica linear de m_r . Concluimos que nossa aproximação é satisfatória, ao menos para as baixas concentrações de impurezas aqui consideradas, em que a ocorrência de dois íons não-magnéticos adjacentes na mesma cadeia é um evento raro.

Resta ainda a tarefa de identificar o exato mecanismo responsável pela persistência de correlações ferromagnéticas entre os spins desemparelhados. Sugerimos que simulações de Monte Carlo, baseadas na hamiltoniana da eq. (1.2), seriam úteis para verificar se é suficiente ou necessária a presença tanto de interações entre cadeias ferro- quanto antiferromagnéticas para dar origem a uma magnetização remanente em sistemas quase-unidimensionais. Nossas tentativas de elucidar esse ponto utilizando um modelo de spin- $1/2$, no entanto, revelaram-se infrutíferas.

²Isto pode ser visto se considerarmos o efeito, numa certa cadeia, de dois íons não-magnéticos adjacentes separando dois segmentos de tamanho ímpar, o que inverte os papéis das sub-redes alternadas.

Capítulo 2

Modelo de spins mistos com anisotropia aleatória

Neste capítulo, investigamos o diagrama de fases de um modelo de Ising de spins mistos na presença de anisotropia aleatória. Derivamos a solução exata do modelo em uma dimensão, apresentamos resultados de campo médio e realizamos cálculos autoconsistentes de Bethe–Peierls. Dependendo da concentração de impurezas, surgem linhas de transição e pontos multicríticos adicionais. Descrevemos também conexões entre o modelo e um problema de percolação.

2.1 Introdução

À parte sua relevância na descrição de materiais ferrimagnéticos, os modelos de spins mistos têm também interesse puramente teórico, estando entre os sistemas mais simples a exibir comportamento tricrítico. Desse modo, são especialmente convenientes para o estudo dos efeitos de não-homogeneidades sobre o diagrama de fases e o comportamento multicrítico de sistemas magnéticos. A partir de alguns resultados exatos [Gonçalves 1985, da Silva e Salinas 1991] e de vários cálculos aproximados [Zhang e Yang 1993, Quadros e Salinas 1994, Buendía e Novotny 1997, Tucker 1999], temos agora um bom panorama dos diagramas de fases de modelos de Ising de spin-1/2–spin-1 na presença de um campo cristalino. Nosso objetivo aqui é utilizar esse modelo para investigar os efeitos de desordem sobre a localização das linhas de transição e o ponto tricrítico.

O modelo de Ising de spins mistos é definido como um sistema bipartite, com variáveis de spin $\sigma = \pm 1$ e $S = 0, \pm 1$ sobre os sítios das sub-redes A e B , respectivamente. Incluindo apenas interações entre primeiros vizinhos

(pertencentes a sub-redes distintas) e termos de um único íon, a hamiltoniana mais geral definida no espaço par de spins pode ser escrita como

$$H = -J \sum_{\langle i \in A, j \in B \rangle} \sigma_i S_j + D \sum_{j \in B} S_j^2, \quad (2.1)$$

em que a primeira soma varre os pares de vizinhos mais próximos, a segunda soma varre os sítios da sub-rede B , e supomos que o parâmetro J seja positivo (correspondendo a acoplamentos ferromagnéticos). Para $D > 0$, o campo cristalino favorece os estados $S_j = 0$; a competição entre os termos de interação e de anisotropia leva ao aparecimento de um ponto tricrítico.

Há cálculos exatos para as funções termodinâmicas associadas ao modelo da eq. (2.1) numa cadeia simples e em algumas estruturas bidimensionais de coordenação tripla. Numa rede *honeycomb*, o problema pode ser mapeado num modelo de Ising de spin- $1/2$ numa rede triangular, que não apresenta ponto tricrítico [Domb 1980, Gonçalves 1985]. O modelo pode também ser resolvido exatamente numa rede de Bethe (a região central de uma árvore de Cayley) [da Silva e Salinas 1991], levando aos mesmos resultados de um recente cálculo variacional de aglomerados [Tucker 1999]. Os resultados na rede de Bethe de coordenação q indicam a ausência de um ponto tricrítico para $q < 5$, em conformidade com cálculos de grupo de renormalização de Migdal-Kadanoff [Quadros e Salinas 1994]. No limite de coordenação infinita da rede de Bethe, recuperam-se os resultados conhecidos da versão de Curie-Weiss (campo médio) do modelo, que apresenta um ponto tricrítico. Um cálculo aproximado de campo efetivo [Kaneyoshi 1987] previa um ponto tricrítico para $q \geq 4$, mas esse resultado tem sido posto em dúvida mais recentemente [Bobák e Jurčišin 1997, de Lima *et al.* 2001].

Para analisar os efeitos de desordem, consideramos a hamiltoniana

$$H = -J \sum_{\langle i \in A, j \in B \rangle} \sigma_i S_j + \sum_{j \in B} D_j S_j^2, \quad (2.2)$$

em que $\{D_j\}$ é um conjunto de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, associadas à distribuição binária de probabilidades

$$\wp(D_j) = p\delta(D_j) + (1-p)\delta(D_j - D). \quad (2.3)$$

Com essa escolha de desordem, e para $D > qJ$, o estado fundamental pode ser mapeado num problema de percolação no qual a diluição afeta os sítios pertencentes a apenas uma das sub-redes (correspondente aos spins $S = 1$). Tal associação é facilmente percebida se notarmos que um campo cristalino uniforme $D > qJ$ leva a $S_j = 0$ para todo j , quebrando a conectividade

entre as variáveis de spin- $1/2$. A presença de uma distribuição de campos cristalinos $D = 0$ localizados aleatoriamente recobra localmente aquela conectividade e, para valores suficientemente altos de p , leva à formação de um aglomerado percolante. No caso um tanto artificial de desordem recozida na rede *honeycomb*, há uma solução exata [Gonçalves e Gonçalves 1991] para as propriedades termodinâmicas do modelo de spins mistos descrito pelas eqs. (2.2) e (2.3)¹. Para o caso fisicamente mais relevante de desordem temperada, há cálculos aproximados, utilizando uma teoria de campo efetivo com correlações [Kaneyoshi 1988], que prevêem o (esperado) enfraquecimento do comportamento tricrítico em virtude da presença de desordem.

Nosso objetivo neste capítulo é obter as propriedades do modelo desordenado a partir de uma aproximação autoconsistente de Bethe–Peierls, que leva em consideração as correlações entre vizinhos mais próximos e, no caso uniforme correspondente, é análoga a um cálculo exato na rede de Bethe. No intuito de avaliar a confiabilidade da aproximação, estudamos dois limites que permitem um tratamento exato. Inicialmente, derivamos a solução do modelo desordenado em uma dimensão. Em seguida, apresentamos os resultados para o diagrama de fases temperatura versus anisotropia segundo a versão de Curie–Weiss (campo médio) com a distribuição de probabilidades da eq. (2.3). Finalmente, discutimos a aproximação de Bethe–Peierls.

2.2 Solução exata em uma dimensão

Numa cadeia aberta com $N + 1$ sítios (N par), e na ausência de campo externo, a hamiltoniana do modelo de Ising de spins mistos pode ser escrita como

$$H = -J \sum_{j=1}^{N/2} (\sigma_j S_j + S_j \sigma_{j+1}) + \sum_{j=1}^{N/2} D_j S_j^2. \quad (2.4)$$

Dada uma configuração de desordem $\{D\} = \{D_1, \dots, D_{N/2}\}$, efetuamos o traço parcial sobre as variáveis de spin $\{S_j\}$ para escrever

$$\begin{aligned} Z\{D\} &= \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{S\}} e^{-\beta H} \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^{N/2} \{1 + 2e^{-\Delta_j} \cosh[K(\sigma_j + \sigma_{j+1})]\}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

¹É interessante destacar que a solução do caso recozido (obtida mantendo a concentração de impurezas independente da temperatura) reproduz a concentração crítica do problema de percolação associado ao estado fundamental do modelo com desordem temperada, que é equivalente ao problema usual de percolação de sítios na rede triangular.

com $K = \beta J$ e $\Delta_j = \beta D_j$. Introduzindo um prefator A_j ,

$$A_j^2 = (1 + 2e^{-\Delta_j}) [1 + 2e^{-\Delta_j} \cosh(2K)] \quad (2.6)$$

e uma interação efetiva $\tilde{K}_j$, tal que

$$e^{2\tilde{K}_j} = \frac{1 + 2e^{-\Delta_j} \cosh(2K)}{1 + 2e^{-\Delta_j}}, \quad (2.7)$$

a função de partição pode ser escrita na forma fatorada

$$\begin{aligned} Z\{D\} &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^{N/2} A_j e^{\tilde{K}_j \sigma_j \sigma_{j+1}} \\ &= \prod_{j=1}^{N/2} 2 [1 + 2e^{-\Delta_j} \cosh^2 K]. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Da eq. (2.8), obtemos a média térmica

$$\langle S_j^2 \rangle_{\{D\}} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \Delta_j} = \frac{2e^{-\Delta_j} \cosh^2 K}{1 + 2e^{-\Delta_j} \cosh^2 K}, \quad (2.9)$$

que depende apenas do valor do campo cristalino no j -ésimo sítio. Como consideramos um modelo unidimensional com interações entre primeiros vizinhos a campo nulo, as médias térmicas $\langle S_j \rangle$ e $\langle \sigma_j \rangle$ são iguais a zero. Efetuando a média sobre a desordem, obtemos o valor esperado

$$Q = \int \langle S_j^2 \rangle_{\{D\}} \prod_{i=1}^{N/2} \wp(D_i) dD_i = \int \wp(D_j) \langle S_j^2 \rangle_{\{D\}} dD_j. \quad (2.10)$$

Para uma dada configuração de desordem, as suscetibilidades magnéticas das sub-redes σ e S são dadas por

$$\chi_\sigma\{D\} = \frac{1}{k_B T} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N+2} \sum_{j=1}^{\frac{N}{2}+1} \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}+1} \langle \sigma_j \sigma_k \rangle_{\{D\}} \quad (2.11)$$

e

$$\chi_s\{D\} = \frac{1}{k_B T} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2}{N} \sum_{j=1}^{N/2} \sum_{k=1}^{N/2} \langle S_j S_k \rangle_{\{D\}}. \quad (2.12)$$

As correlações de dois spins,

$$\langle \sigma_j \sigma_k \rangle_{\{D\}} = \frac{1}{Z\{D\}} \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{S\}} \sigma_j \sigma_k e^{-\beta H} \quad (2.13)$$

e

$$\langle S_j S_k \rangle_{\{D\}} = \frac{1}{Z\{D\}} \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\{S\}} S_j S_k e^{-\beta H}, \quad (2.14)$$

podem ser calculadas se introduzirmos a transformação

$$\tau_j = \sigma_j \sigma_{j+1} \quad \text{com} \quad \tau_0 = \sigma_1. \quad (2.15)$$

Após algumas manipulações algébricas, temos

$$\langle \sigma_j \sigma_k \rangle_{\{D\}} = \prod_{i=j}^{k-1} \frac{2 \sinh^2 K}{e^{\Delta_i} + 2 \cosh^2 K} \quad (2.16)$$

e

$$\begin{aligned} \langle S_j S_k \rangle_{\{D\}} &= \frac{\sinh 2K}{e^{\Delta_j} + 2 \cosh^2 K} \frac{\sinh 2K}{e^{\Delta_k} + 2 \cosh^2 K} \\ &\times \prod_{i=j+1}^{k-1} \frac{2 \sinh^2 K}{e^{\Delta_i} + 2 \cosh^2 K}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

com $j < k$. Obtemos então os valores esperados

$$\begin{aligned} g_\sigma(|k-j|) &= \int \langle \sigma_j \sigma_k \rangle_{\{D\}} \prod_{i=1}^{N/2} \delta(D_i) dD_i \\ &= (Q \tanh^2 K)^{|k-j|} \end{aligned} \quad (2.18)$$

e

$$\begin{aligned} g_s(|k-j|) &= \int \langle S_j S_k \rangle_{\{D\}} \prod_{i=1}^{N/2} \delta(D_i) dD_i \\ &= Q (Q \tanh^2 K)^{|k-j|}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

que dependem apenas da distância entre os sítios j e k . Representando por $[\dots]_{\text{des}}$ a média sobre a desordem, os valores esperados das suscetibilidades são dados por

$$[\chi_\sigma]_{\text{des}} = \frac{1}{k_B T} \left[1 + 2 \sum_{r=1}^{\infty} g_\sigma(r) \right] = \frac{1}{k_B T} \frac{1 + Q \tanh^2 K}{1 - Q \tanh^2 K} \quad (2.20)$$

e

$$[\chi_s]_{\text{des}} = \frac{1}{k_B T} \left[Q + 2 \sum_{r=1}^{\infty} g_s(r) \right] = \frac{Q}{k_B T} \frac{1 + Q \tanh^2 K}{1 - Q \tanh^2 K}, \quad (2.21)$$

com Q determinado pela eq. (2.10).

2.3 Versão de Curie–Weiss

Na versão de Curie–Weiss do modelo de Ising de spins mistos com anisotropia aleatória, estudada originalmente por Josué Xavier de Carvalho [1996], a hamiltoniana é dada por

$$H = -\frac{2J}{N} \sum_{i \in A} \sigma_i \sum_{j \in B} S_j + \sum_{j \in B} D_j S_j^2, \quad (2.22)$$

em que as somas estendem-se sobre todos os sítios pertencentes a cada uma das sub-redes.

Para uma dada configuração de desordem $\{D_j\}$, calculamos a função de partição efetuando o traço parcial sobre as variáveis de spin $\{S_j\}$. No limite termodinâmico, utilizamos o método de Laplace e tomamos médias sobre a desordem para obter o funcional de energia livre

$$\begin{aligned} \Psi(\sigma) &= -\frac{1}{2\beta} \left[\ln 2 - \frac{1}{2}(1+\sigma) \ln(1+\sigma) - \frac{1}{2}(1-\sigma) \ln(1-\sigma) \right] \\ &\quad - \frac{1}{2\beta} \int \wp(D_B) \ln [1 + 2e^{-\beta D_B} \cosh(\beta J \sigma)] dD_B. \end{aligned} \quad (2.23)$$

A partir da minimização de $\Psi(\sigma)$ com relação a σ , obtemos a magnetização da sub-rede A ,

$$\sigma = \tanh \left[\beta J \int \wp(D_B) \frac{2 \sinh(\beta J \sigma)}{e^{\beta D_B} + 2 \cosh(\beta J \sigma)} dD_B \right], \quad (2.24)$$

em que a variável aleatória D_B satisfaz a distribuição de probabilidades da eq. (2.3). Podemos agora calcular os diversos valores esperados. Temos, por exemplo,

$$\begin{aligned} Q &= \int \wp(D_B) \langle S_B^2 \rangle dD_B \\ &= \int \wp(D_B) \frac{2 \cosh(\beta J \sigma)}{e^{\beta D_B} + 2 \cosh(\beta J \sigma)} dD_B. \end{aligned} \quad (2.25)$$

A linha crítica é determinada pela condição

$$\left. \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \sigma^2} \right|_{\sigma=0} = 0 \implies e^\Delta = 2 \frac{(K-1) - \frac{1}{3} p K^2}{1 - \frac{2}{3} p K^2}, \quad (2.26)$$

com $\Delta = \beta D$ e $K = \beta J$. A estabilidade termodinâmica da linha crítica depende do sinal da quarta derivada de $\Psi(\sigma)$ em $\sigma = 0$. Sendo assim, é

Figura 2.1. Diagramas de fases da versão de Curie-Weiss para valores típicos da concentração de desordem p .

possível a existência de um ponto tricrítico, definido pela condição adicional

$$\left. \frac{\partial^4 \Psi}{\partial \sigma^4} \right|_{\sigma=0} = 0 \implies K^2 = \frac{3 + 9p - \sqrt{9 - 186p + 177p^2}}{8p}. \quad (2.27)$$

O ponto tricrítico é estável para

$$\left. \frac{\partial^6 \Psi}{\partial \sigma^6} \right|_{\sigma=0} \geq 0 \implies p \leq p_m = 0.04485 \dots, \quad (2.28)$$

ou seja, o comportamento tricrítico é suprimido para concentrações de desordem maiores que aproximadamente 4.5%.

Na figura 2.1, mostramos alguns diagramas de fases no plano $D \times T$ para um conjunto de valores típicos da concentração p . No caso puro ($p = 0$), há simplesmente um ponto tricrítico, P_t , separando a linha crítica da linha de transições de primeira ordem. Para $0 < p \leq p_m = 0.04485 \dots$, o ponto tricrítico persiste (veja a fig. 2.1, para $p = 0.04$). No entanto, em temperaturas baixas e valores suficientemente grandes de D , surge uma fase ferromagnética de baixa densidade (em que $Q \rightarrow p$ quando $T \rightarrow 0$), que denominamos de fase ferro-II; para valores fixos de D , o aumento da temperatura induz uma transição de segunda ordem da fase ferro-II para a fase paramagnética. Essa

transição é representada por uma linha crítica que encontra a linha de primeira ordem num ponto crítico terminal, P_{ce} , separando a linha de primeira ordem em duas regiões distintas: (i) em temperaturas mais altas, ocorrem transições entre a fase ferromagnética usual (ferro-I), de alta densidade (em que $Q \rightarrow 1$ quando $T \rightarrow 0$), e a fase paramagnética; (ii) em temperaturas mais baixas, as transições conectam as fases ferro-I e ferro-II, e a fronteira de primeira ordem termina num ponto crítico simples, P_{cs} , numa temperatura finita.

Para $p_m = 0.04485 \dots < p < 3/59 = 0.05084 \dots$, o ponto tricrítico é substituído por um ponto crítico terminal e um ponto crítico simples, separados por uma linha de primeira ordem entre as fases ferromagnéticas (veja o detalhe na fig. 2.1, para $p = 0.05$).

Para $p \geq 3/59$, a linha crítica é completamente estável (veja a fig. 2.1, para $p = 0.08$). Entretanto, para $p \lesssim 0.1$, ainda existe uma pequena região de temperaturas finitas em que ocorrem transições (de primeira ordem) entre as fases ferromagnéticas.

2.4 Aproximação de Bethe–Peierls

Para estimar os efeitos de correlações, ignorados pelos cálculos de Curie–Weiss, recorremos agora a uma aproximação autoconsistente de Bethe–Peierls. Como o modelo é definido sobre uma rede bipartite, precisamos considerar dois aglomerados distintos de coordenação q , ilustrados na figura 2.2. Num deles, que denominamos de aglomerado A , o sítio central é ocupado por um spin $\sigma = 1/2$, conectado a q spins do tipo $S = 1$. No outro aglomerado, que chamamos de B , há um spin central $S = 1$ cercado por q variáveis de spin- $1/2$. Seguindo a prescrição usual da aproximação de Bethe–Peierls, supomos que os spins periféricos no aglomerado A sofram a ação de um campo magnético efetivo $\tilde{h}_B$ e de um campo cristalino efetivo $\tilde{D}$, e que sobre os spins periféricos do aglomerado B atue um campo magnético efetivo $\tilde{h}_A$. O campo cristalino sobre o sítio central do aglomerado B é uma variável aleatória D_B . Consideramos também campos magnéticos externos, h_A e h_B , agindo sobre os sítios centrais dos aglomerados A e B , respectivamente.

As funções de partição associadas aos dois aglomerados são dadas por

$$Z_A = e^{\gamma_A} \left[1 + 2e^{-\tilde{\Delta}} \cosh(\tilde{\gamma}_B + K) \right]^q + e^{-\gamma_A} \left[1 + 2e^{-\tilde{\Delta}} \cosh(\tilde{\gamma}_B - K) \right]^q \quad (2.29)$$

e

$$Z_B = [2 \cosh(\tilde{\gamma}_A)]^q + e^{-\Delta_B} \left\{ e^{\gamma_B} [2 \cosh(\tilde{\gamma}_A + K)]^q + e^{-\gamma_B} [2 \cosh(\tilde{\gamma}_A - K)]^q \right\}, \quad (2.30)$$

Figura 2.2. Aglomerados utilizados na aproximação de Bethe–Peierls.

com $\gamma = \beta h$, $\Delta = \beta D$ e $K = \beta J$. Os campos efetivos $\tilde{\gamma}_A$, $\tilde{\gamma}_B$ e $\tilde{\Delta}$ são determinados pelas equações de consistência

$$\sigma = [\langle \sigma_j \rangle]_{\text{des}} = \frac{\partial \ln Z_A}{\partial \gamma_A} = \frac{1}{q} \int \wp(D_B) \frac{\partial \ln Z_B}{\partial \tilde{\gamma}_A} dD_B, \quad (2.31)$$

$$S = [\langle S_j \rangle]_{\text{des}} = \frac{1}{q} \frac{\partial \ln Z_A}{\partial \tilde{\gamma}_B} = \int \wp(D_B) \frac{\partial \ln Z_B}{\partial \gamma_B} dD_B, \quad (2.32)$$

e

$$Q = [\langle S_j^2 \rangle]_{\text{des}} = -\frac{1}{q} \frac{\partial \ln Z_A}{\partial \tilde{\Delta}} = - \int \wp(D_B) \frac{\partial \ln Z_B}{\partial \Delta_B} dD_B, \quad (2.33)$$

em que $\langle \dots \rangle$ e $[\dots]_{\text{des}}$ indicam as médias térmica e sobre a desordem, respectivamente. Salientamos que a introdução do campo cristalino efetivo $\tilde{D}$ é essencial para alcançar a consistência entre as equações para os dois aglomerados.

Para analisar o comportamento crítico, é conveniente escolher como variáveis termodinâmicas independentes a magnetização σ , a temperatura T , e os campos externos h_B e D_B . Assim, o campo externo h_A fica escrito como função dessas variáveis.

Na ausência de campos externos ($h_A = h_B = 0$), temos

$$\left. \frac{\partial \gamma_A}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=0} = \frac{1 + [2(q-1) - q^2] V_0 + (q-1)^2 V_0^2}{1 + (q-2)V_0 - (q-1)^2 V_0^2}, \quad (2.34)$$

com $V_0 = Q_0 \tanh^2 K$, e

$$Q_0 \equiv Q|_{\sigma=0} = \int \wp(D_B) \frac{2 \cosh^q K}{e^{\Delta_B} + 2 \cosh^q K} dD_B = \frac{2 \cosh K}{e^{\tilde{\Delta}} + 2 \cosh K}. \quad (2.35)$$

Para calcular a derivada na eq. (2.34), tomamos a derivada implícita das equações de consistência com relação a σ , impondo a condição $\sigma = 0$ e eliminando as derivadas envolvendo S , Q e os campos efetivos. Lembramos ainda

que, para $\sigma = 0$, temos $S = \tilde{\gamma}_A = \tilde{\gamma}_B = 0$, já que essas variáveis são funções ímpares de σ para $h_A = h_B = 0$. Tomando $q = 2$, a eq. (2.34) reproduz a expressão exata da suscetibilidade da sub-rede A em uma dimensão, eq. (2.20). De fato, para $q = 2$, não é difícil verificar que recuperamos todos os resultados unidimensionais exatos.

As transições de segunda ordem a campo nulo ($h_A = h_B = 0$) satisfazem a condição

$$\left. \frac{\partial \gamma_A}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=0} = 0. \quad (2.36)$$

É fácil ver que, no caso puro, correspondente a $\wp(D_B) = \delta(D_B - D)$, a linha crítica é dada por

$$\Delta = \ln \{ 2 (\cosh K)^{q-2} [q(q-2) \cosh^2 K - (q-1)^2] \}, \quad (2.37)$$

em concordância com os resultados da rede de Bethe [da Silva e Salinas 1991] e com o cálculo variacional de aglomerados [Tucker 1999].

Utilizando agora a distribuição binária da eq. (2.3), obtemos

$$Q_0 = p \frac{2 \cosh^q K}{1 + 2 \cosh^q K} + (1-p) \frac{2 \cosh^q K}{e^\Delta + 2 \cosh^q K}. \quad (2.38)$$

Assim, a equação da linha crítica é

$$e^\Delta = 2 \frac{(1-p) - \phi(K)}{\phi(K)} \cosh^q K, \quad (2.39)$$

com

$$\phi(K) = \frac{1}{(q-1)^2} \frac{\cosh^2 K}{\cosh^2 K - 1} - p \frac{2 \cosh^q K}{1 + 2 \cosh^q K}. \quad (2.40)$$

No limite $T \rightarrow 0$ ($K \rightarrow \infty$), temos

$$e^\Delta \simeq \frac{e^{qK}}{2^{q-1}} \frac{(q-1)^2 - 1}{1 - p(q-1)^2}, \quad (2.41)$$

que possui uma solução real para Δ se

$$1 - p(q-1)^2 > 0 \implies p < p_{\text{cr}} = \frac{1}{(q-1)^2}. \quad (2.42)$$

Este último resultado é esperado para uma rede de Bethe, como podemos ver pelos seguintes argumentos. Consideremos uma árvore de Cayley cujos sítios localizados em camadas alternadas (correspondentes, por exemplo, a camadas de ordem ímpar) estejam ocupados com probabilidade p , enquanto

os demais sítios estejam sempre ocupados. Se q for a coordenação da árvore, o número médio de caminhos entre a raiz R_0 e a primeira camada será dado por $p(q-1)$, enquanto teremos $p(q-1)^2$ caminhos de R_0 até a segunda camada. Prosseguindo nesse raciocínio, vemos que o número médio de caminhos entre a raiz e a $2n$ -ésima camada será dado por $p^n(q-1)^{2n}$. De modo a que exista ao menos um caminho até a superfície da árvore (correspondente a $n \rightarrow \infty$), será necessário que $p(q-1)^2 \geq 1$, justamente a condição expressa pela eq. (2.42). Esse resultado, juntamente com a reprodução da solução unidimensional exata, poderia sugerir que nossa abordagem também produzisse resultados exatos na rede de Bethe, mesmo na presença de desordem. Entretanto, como apontado em tratamentos semelhantes anteriores [Bell 1975, Young 1976], isso é verdadeiro somente na fase paramagnética (e, em particular, nas linhas críticas), já que somente ali é correto supor que todos os sítios periféricos sofram a ação do mesmo campo efetivo (nulo). A existência de um aglomerado percolante, que não levamos em conta aqui, impede que nossa aproximação produza resultados precisos nas fases ordenadas.

Consideramos agora a eq. (2.39), no limite de coordenação infinita ($q \rightarrow \infty$ e $K \rightarrow 0$, com $qK = \tilde{K}$). Temos então

$$e^\Delta = 2 \frac{(\tilde{K}^2 - 1) - \frac{1}{3}p\tilde{K}^2}{1 - \frac{2}{3}p\tilde{K}^2}, \quad (2.43)$$

que concorda com a eq. (2.26) para a versão de Curie–Weiss do modelo.

Os pontos tricríticos são determinados pela eq. (2.36), suplementada pela condição

$$\left. \frac{\partial^3 \gamma_A}{\partial \sigma^3} \right|_{\sigma=0} = 0,$$

o que nos leva à equação

$$\frac{2q^2 - 10q + 6}{(q-1)^5 \tanh^2 K} + 3qW_0 \tanh^2 K = \frac{(q-2)(q-3)}{(q-1)^3}, \quad (2.44)$$

com W_0 dado por

$$W_0 = \int \wp(D_B) \left(\frac{2 \cosh^q K}{e^{\Delta_B} + 2 \cosh^q K} \right)^2 dD_B. \quad (2.45)$$

Os pontos tricríticos são estáveis se

$$\left. \frac{\partial^5 \gamma_A}{\partial \sigma^5} \right|_{\sigma=0} > 0.$$

Para calcular essa última derivada, tomamos novamente derivadas implícitas das equações de consistência (até quinta ordem) com respeito a σ , em $\sigma = 0$, e eliminamos todas as derivadas envolvendo S , Q e os campos efetivos. Em contraste com as análises anteriores, não fomos capazes de obter expressões fechadas para a condição de estabilidade dos pontos tricríticos, mas é possível recorrer a técnicas numéricas.

Para o modelo puro, temos $W_0 = Q_0^2$. Portanto, a eq. (2.44) assume a forma

$$\tanh K = \frac{1}{q-1} \sqrt{\frac{5q-3}{q-3}}, \quad (2.46)$$

novamente idêntica ao resultado da rede de Bethe [da Silva e Salinas 1991] e ao cálculo variacional de aglomerados [Tucker 1999]. Notemos que essa última equação possui soluções reais somente se $q > 4.561553\dots$. Assim, a aproximação de Bethe–Peierls não prevê um ponto tricrítico para a rede quadrada ($q = 4$).

Particularizando para a distribuição binária da eq. (2.3), temos

$$W_0 = Q_0^2 \left[1 + \frac{p}{1-p} \left(1 - \frac{1}{Q_0} \frac{2 \cosh^q K}{1 + 2 \cosh^q K} \right)^2 \right]. \quad (2.47)$$

No limite de coordenação infinita, podemos escrever

$$W_0 = \frac{1}{\tilde{K}^4} \left[1 + \frac{p}{1-p} \left(1 - \frac{2}{3} \tilde{K}^2 \right)^2 \right], \quad (2.48)$$

o que leva à equação

$$\tilde{K}^2 - 3 \left[1 + \frac{p}{1-p} \left(1 - \frac{4}{3} \tilde{K}^2 + \frac{4}{9} \tilde{K}^4 \right) \right] - 2 = 0, \quad (2.49)$$

no ponto tricrítico. De fato, uma das soluções dessa equação corresponde à eq. (2.27), válida para a versão de Curie–Weiss do modelo, enquanto a outra solução representa uma situação termodinamicamente instável.

Na tabela 2.1, para vários valores do número de coordenação q , e utilizando a distribuição binária, mostramos os valores correspondentes da concentração p_m , na qual o ponto tricrítico torna-se instável, e da concentração crítica de percolação, p_{cr} . Vemos que, para $q \leq 10$, o comportamento tricrítico é suprimido em $p_m < p_{cr}$, enquanto para $q \geq 11$ essa supressão ocorre em $p_m > p_{cr}$. Como mostrado na tabela 2.1, o valor de p_m aumenta com q , indicando que a desordem é mais efetiva para pequenos números de coordenação.

Tabela 2.1. Valores da concentração crítica de percolação p_{cr} e da concentração p_{m} na qual o ponto tricrítico torna-se instável, como funções da coordenação q , segundo a aproximação de Bethe–Peierls.

q	p_{cr}	p_{m}
5	6.2500×10^{-2}	7.4161×10^{-4}
6	4.0000×10^{-2}	2.0454×10^{-3}
10	1.2346×10^{-2}	9.8265×10^{-3}
11	1.0000×10^{-2}	1.1665×10^{-2}
20	2.7701×10^{-3}	2.3001×10^{-2}
100	1.0203×10^{-4}	3.9707×10^{-2}
∞	0	4.4850×10^{-2}

Como os efeitos da desordem binária dependem fortemente da coordenação, discutimos agora os diagramas de fases para os casos típicos.

Para $q = 3$ e 4 , não há pontos tricríticos. O diagrama $D \times T$ apresenta apenas uma linha crítica completamente estável. O principal efeito da desordem é tornar a fase paramagnética instável em $T = 0$, independentemente do valor de D , para p maior que a concentração crítica de percolação p_{cr} . Os diagramas de fases na figura 2.3, para $q = 3$, concordam qualitativamente com os resultados exatos na rede *honeycomb* (também de coordenação tripla) com desordem recozida [Gonçalves e Gonçalves 1991]. Em $T = 0$, há até mesmo concordância quantitativa acerca do valor do campo cristalino em p_{cr} , dado por $D_{\text{cr}} = 5J/3$, embora, é claro, essa concordância não se estenda ao próprio valor de p_{cr} . Nossos resultados para $q = 3$ e $q = 4$ também concordam qualitativamente com aqueles obtidos por uma abordagem de grupo de renormalização no espaço real para o modelo de Blume–Emery–Griffiths bidimensional num campo cristalino aleatório [Branco 1999].

Para $5 \leq q \leq 10$, a concentração p_{m} , acima da qual o ponto tricrítico torna-se instável, é menor que p_{cr} . Para $p < p_{\text{m}}$, a desordem reduz a temperatura tricrítica e encurta a linha de transições de primeira ordem. Para $p_{\text{m}} < p < p_{\text{cr}}$, o ponto tricrítico é substituído por um ponto crítico terminal, P_{ce} , e um ponto crítico simples, P_{cs} , como na versão de Curie–Weiss do modelo. No entanto, a fase paramagnética é estável em $T = 0$ se $D > qJ$, e a linha de primeira ordem atinge $D = qJ$ em $T = 0$. Com o aumento de p , inicialmente o ponto crítico terminal P_{ce} , e depois o ponto crítico simples P_{cs} , atingem o eixo $T = 0$, em valores de p que podem ser determinados por uma expansão de baixas temperaturas das equações de consistência (veja o apêndice B). Na figura 2.4, apresentamos o diagrama $D \times T$ para $q = 6$ e $p = 0.011$. Para determinar as linhas de primeira ordem mostradas na figura,

Figura 2.3. Diagramas de fases para coordenação $q = 3$, segundo a aproximação de Bethe-Peierls.

resolvemos numericamente as equações de consistência a fim de satisfazer as condições $h_A(\sigma_1) = h_A(\sigma_2) = 0$ e

$$\int_{\sigma_1}^{\sigma_2} h_A(\sigma) d\sigma = 0, \quad (2.50)$$

correspondentes a uma construção de Maxwell.

Para $q \geq 11$, temos $p_m > p_{cr}$, de modo que o comportamento do sistema é bastante semelhante às previsões da versão de Curie-Weiss do modelo.

2.5 Conclusões

Neste capítulo, realizamos cálculos detalhados para os diagramas de fase de um modelo de Ising de spins mistos com anisotropia aleatória, segundo uma aproximação autoconsistente de Bethe-Peierls (que se revela exata em uma dimensão) e comparamos os resultados com aqueles da versão de Curie-Weiss do modelo (em que se desprezam correlações). Para uma distribuição binária de campos cristalinos, obtivemos expressões fechadas para as linhas críticas e a localização dos pontos tricríticos. Dependendo da concentração de desordem p , os resultados de campo médio para os diagramas $D \times T$ prevêm linhas de primeira ordem e pontos multicríticos adicionais, além de uma região ferromagnética que se estende às mais baixas temperaturas, para

Figura 2.4. Diagrama de fases para coordenação $q = 6$ e concentração de desordem $p = 0.011$, segundo a aproximação de Bethe–Peierls.

qualquer valor do campo cristalino. A aproximação de Bethe–Peierls mostra que essa região ferromagnética é suprimida para concentrações abaixo de um certo valor limite. Além disso, os resultados de Bethe–Peierls apontam para a ausência de comportamento tricrítico em redes com coordenação $q \leq 4$. Todos os resultados aqui apresentados concordam com previsões gerais para os efeitos de desordem sobre transições de primeira ordem e pontos multicríticos (para uma revisão recente, veja um trabalho de Cardy [1999]).

Capítulo 3

Cadeia XX quântica com interações não-homogêneas: estudo comparativo de desordem e aperiodicidade

Neste capítulo, consideramos efeitos de interações aleatórias ou aperiódicas sobre o comportamento da cadeia quântica XX em baixas temperaturas. Revisamos análises de grupo de renormalização bastante distintas, realizadas por Fisher para o caso desordenado e por Hermisson para o caso aperiódico, e destacamos as previsões desses tratamentos para as propriedades das fases presentes nesses sistemas. Em seguida, apresentamos nossos cálculos numéricos e procuramos apontar as semelhanças e diferenças entre os efeitos dos dois tipos de não-homogeneidades.

3.1 Introdução

Em temperaturas relativamente baixas, as propriedades magnéticas de vários materiais isolantes são bem descritos pelo modelo de Heisenberg anisotrópico, ou modelo XYZ , definido pelo hamiltoniano

$$H_{XYZ} = \sum_{n,m} (J_{nm}^x S_n^x S_m^x + J_{nm}^y S_n^y S_m^y + J_{nm}^z S_n^z S_m^z), \quad (3.1)$$

em que as somas percorrem os sítios de uma rede e os S 's são operadores de spin $1/2$, que obedecem a regras de comutação características e estão sujeitos a flutuações quânticas relacionadas ao princípio de incerteza de Heisenberg.

Em uma dimensão, o espectro de energia e as autofunções do modelo XYZ podem ser obtidos através do *ansatz* de Bethe [1931] e suas generalizações (para uma revisão abrangente veja Gaudin [1983]). Entretanto, o cálculo analítico das propriedades termodinâmicas em temperaturas finitas é bastante complexo.

Um modelo essencialmente quântico e de tratamento bem mais simples é o modelo XY antiferromagnético, definido (em uma dimensão) pelo hamiltoniano

$$H_{XY} = \sum_n (J_n^x S_n^x S_{n+1}^x + J_n^y S_n^y S_{n+1}^y). \quad (3.2)$$

O modelo uniforme ($J_n^x \equiv 1 + \gamma$, $J_n^y \equiv 1 - \gamma$) foi resolvido por Lieb, Schultz e Mattis [1961] através do mapeamento num sistema de férmions livres. O modelo apresenta um *gap* entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados, e exhibe ordem de longo alcance para qualquer $\gamma \neq 0$; no ponto isotrópico ($\gamma = 0$), que define o modelo XX, o sistema é crítico (ou seja, o *gap* se anula) e as correlações de pares no estado fundamental decaem algebricamente, caracterizando uma ordem de “quase longo alcance”. As formas assintóticas dessas correlações são [McCoy 1968]

$$|\langle S_n^x S_{n+r}^x \rangle| = |\langle S_n^y S_{n+r}^y \rangle| \sim \frac{1}{r^{\eta_x}}, \quad \eta_x = \frac{1}{2}, \quad (3.3)$$

e, para r ímpar,

$$|\langle S_n^z S_{n+r}^z \rangle| \sim \frac{1}{r^{\eta_z}}, \quad \eta_z = 2. \quad (3.4)$$

As propriedades da cadeia XX são qualitativamente semelhantes àsquelas da cadeia XXZ (um modelo XYZ com $J_n^x = J_n^y \equiv J > 0$, $J_n^z \equiv J\Delta$) no regime $-1 < \Delta \leq 1$. Em particular, nesse regime, o mapeamento da cadeia XXZ num modelo de Luttinger permite o cálculo do comportamento assintótico das correlações de pares no estado fundamental, que exibem decaimento algébrico, com expoentes dependentes de Δ [Luther e Peschel 1975].

O modelo XY pode ser identificado a duas cadeias de Ising quânticas desacopladas, através da introdução das “matrizes de Pauli” [Fisher 1994]

$$\sigma_{2n+\frac{1}{2}}^x = \prod_{j=1}^{2n} (2S_j^x), \quad \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^y = 4S_{2n}^y S_{2n+1}^y, \quad (3.5)$$

$$\tau_{2n+\frac{3}{2}}^x = \prod_{j=1}^{2n+1} (2S_j^x), \quad \tau_{2n+\frac{3}{2}}^y = 4S_{2n+1}^y S_{2n+2}^y, \quad (3.6)$$

que permitem expressar o hamiltoniano na forma

$$\begin{aligned}
 H_{XY} = & \frac{1}{4} \sum_n \left(J_{2n}^x \tau_{2n-\frac{1}{2}}^x \tau_{2n+\frac{3}{2}}^x + J_{2n+1}^y \tau_{2n+\frac{3}{2}}^y \right) \\
 & + \frac{1}{4} \sum_n \left(J_{2n-1}^x \sigma_{2n-\frac{3}{2}}^x \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^x + J_{2n}^y \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^y \right). \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

A função dos campos transversos nessas cadeias de Ising quânticas é desempenhada pelas interações J_n^y . Esse mapeamento mostra que a transição de anisotropia do modelo XY uniforme, que induz a mudança na direção do ordenamento magnético quando o parâmetro γ troca de sinal, tem natureza idêntica à transição induzida pelo campo transversal na cadeia de Ising quântica¹.

A cadeia XX pode ser mapeada num modelo *tight-binding* com *hopping* entre primeiros vizinhos, cujas versões não-homogêneas foram extensamente estudadas. Para esses modelos, existem resultados tanto na presença de desordem quanto de aperiodicidade. Os efeitos de não-homogeneidades nas integrais de *hopping* (correspondentes às interações entre os spins no modelo XX) são radicalmente distintos dos efeitos de um potencial (correspondente a um campo magnético transversal) não-homogêneo, podendo produzir (e produzindo sempre, no caso desordenado) um estado estendido no centro da banda [Eggarter e Riedinger 1978], posição que corresponde ao nível de Fermi no modelo XX . Isso se reflete numa série de comportamentos anômalos das propriedades das cadeias XX no limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$). Em particular, a suscetibilidade associada a um campo infinitesimal na direção z passa a divergir em $T = 0$. Nesse limite, a desordem deve também levar o sistema a uma fase caracterizada pela existência de pares de spins que, embora separados por distâncias arbitrárias, encontram-se fortemente acoplados em estados singleto, induzindo uma diferenciação entre comportamento típico e médio das correlações no estado fundamental [Fisher 1994]. Essa “fase de singleto aleatório” é estável com respeito à introdução de uma anisotropia uniforme Δ , e parece assim governar o comportamento do modelo XXZ no regime $-1/2 < \Delta < 1$ [Fisher 1994]. Embora haja também previsões para as propriedades termodinâmicas do modelo XX na presença de interações aperiódicas [Luck e Nieuwenhuizen 1986, Hermisson 2000], desconhecemos resultados correspondentes para correlações. Um dos nossos objetivos aqui é tentar estabelecer até que ponto as fases induzidas por desordem e aperiodicidade assemelham-se, além de buscar reproduzir numericamente as diversas previsões existentes.

¹Como a cadeia de Ising quântica corresponde ao limite anisotrópico extremo do modelo de Ising clássico em duas dimensões, essas transições pertencem todas à classe de universalidade de Onsager.

Na seção 3.2, detalhamos o conhecido mapeamento da cadeia XX num modelo de férmions não-interagentes, que utilizamos em nossos cálculos numéricos, e apresentamos a forma de cálculo de diversas grandezas relacionadas à cadeia XX a partir das propriedades do sistema de férmions. Na seção 3.3, revisamos o tratamento de grupo de renormalização para o modelo XX com interações aleatórias [Fisher 1994] e as previsões decorrentes, bem como as propriedades da fase de singlete aleatório. Apresentamos ainda nossos resultados numéricos. Iniciamos a seção 3.4, referente à cadeia XX com interações aperiódicas, com uma discussão sobre seqüências aperiódicas e regras de substituição. Em seguida, revisamos o método de grupo de renormalização utilizado por Hermisson para tratar o modelo XY com interações aperiódicas, apresentando suas previsões para a criticalidade e as propriedades do sistema em baixas temperaturas. Finalizamos a seção apresentando nossos resultados numéricos.

3.2 Mapeamento da cadeia XX num sistema de férmions livres

Consideremos uma cadeia XX antiferromagnética na presença de um campo transverso, sujeita a condições periódicas de contorno e descrita pelo hamiltoniano

$$H = -h \sum_{n=1}^N S_n^z + \sum_{n=1}^N \varepsilon_n (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y), \quad (3.8)$$

em que $\varepsilon_n \geq 0$ e os operadores de spin satisfazem as regras de comutação²

$$[S_j^x, S_k^y] = i\delta_{jk} S_j^z, \quad (3.9)$$

e as regras equivalentes obtidas pela permutação cíclica dos operadores. Utilizando os operadores de abaixamento e levantamento S_n^- e S_n^+ , definidos por

$$S_n^\pm = S_n^x \pm iS_n^y, \quad (3.10)$$

o hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$H = -h \sum_{n=1}^N (S_n^+ S_n^- - \frac{1}{2}) + \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \varepsilon_n (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+). \quad (3.11)$$

²Fixamos $\hbar \equiv 1$.

Para diagonalizá-la, seguimos Lieb, Schultz e Mattis [1961], introduzindo a transformação de Jordan–Wigner

$$S_n^- = \exp \left(-i\pi \sum_{j=1}^{n-1} c_j^\dagger c_j \right) c_n, \quad (3.12)$$

$$S_n^+ = c_n^\dagger \exp \left(-i\pi \sum_{j=1}^{n-1} c_j^\dagger c_j \right), \quad (3.13)$$

em que os c 's são operadores de férmions. Desse modo, podemos reescrever o hamiltoniano como

$$\begin{aligned} H = & -h \sum_{n=1}^N (c_n^\dagger c_n - \tfrac{1}{2}) + \tfrac{1}{2} \sum_{n=1}^N \varepsilon_n (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) \\ & - \tfrac{1}{2} \varepsilon_N (c_N^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_N) (1 + e^{i\pi \mathcal{N}}). \end{aligned} \quad (3.14)$$

O termo de fronteira, proporcional a ε_N , envolve o operador número de férmions,

$$\mathcal{N} = \sum_{n=1}^N c_n^\dagger c_n = \tfrac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\tfrac{1}{2} + S_j^z) \equiv \tfrac{1}{2} + S_{\text{total}}^z. \quad (3.15)$$

A forma na eq. (3.14) corresponde a um modelo *tight-binding* num potencial uniforme. Notemos que o hamiltoniano em termos dos férmions deve satisfazer condições de contorno *periódicas* se $\mathcal{N}$ for ímpar, e condições *anti-periódicas* se $\mathcal{N}$ for par. Em virtude da simetria azimutal do modelo XX, o operador $\mathcal{N}$ comuta com o hamiltoniano; portanto, os autoestados de H separam-se em setores de $\mathcal{N}$ par e $\mathcal{N}$ ímpar³. Apesar de irrelevante para o cálculo de grandezas estáticas *no limite termodinâmico* ($N \rightarrow \infty$), o termo de fronteira não pode ser desprezado nos cálculos em cadeias finitas.

Após a aplicação da transformação

$$\eta_k = \sum_{n=1}^N \phi_{kn}^\pm c_n, \quad (3.16)$$

com

$$\sum_{k=1}^N \phi_{ik}^\pm \phi_{kj}^\pm = \delta_{ij}, \quad (3.17)$$

³No modelo XY anisotrópico, e em particular no modelo de Ising quântico, somente a paridade $\exp(i\pi \mathcal{N})$ é um bom número quântico, mas obviamente a conclusão de que os autoestados de H separam-se em setores de paridade definida com respeito a $\mathcal{N}$ permanece válida.

escrevemos finalmente o hamiltoniano na forma diagonal

$$H = \sum_{k=1}^N \Lambda_k^{\pm} \left(\eta_k^{\dagger} \eta_k - \frac{1}{2} \right), \quad (3.18)$$

em que os níveis de energia $\Lambda_k^{\pm}$ são autovalores da matriz $\mathbf{A}^{\pm}$, cujos elementos são

$$A_{ij}^{\pm}(h) = -h\delta_{ij} + \frac{1}{2}\tilde{\varepsilon}_{j-1}^{\pm}\delta_{i,j-1} + \frac{1}{2}\tilde{\varepsilon}_j^{\pm}\delta_{i,j+1}, \quad (3.19)$$

com as constantes de troca efetivas

$$\tilde{\varepsilon}_j^{\pm} = \begin{cases} \varepsilon_j & \text{para } 1 \leq j \leq N-1, \\ \pm\varepsilon_j & \text{para } j = N, \end{cases} \quad (3.20)$$

sendo o sinal positivo (negativo) correspondente a condições de contorno periódicas (antiperiódicas). Os coeficientes $\phi_{kn}^{\pm}$ são elementos do autovetor $\phi_k^{\pm}$ de $\mathbf{A}^{\pm}$ correspondente ao autovalor $\Lambda_k^{\pm}$. A transformação (3.16) conserva o número de férmions,

$$\mathcal{N} = \sum_{j=1}^N c_j^{\dagger} c_j = \sum_{k=1}^N \eta_k^{\dagger} \eta_k. \quad (3.21)$$

Na ausência de campo, o problema de autovalores de $\mathbf{A}^{\pm}$ é escrito como

$$\frac{1}{2}\phi_{k,j-1}^{\pm}\tilde{\varepsilon}_{j-1}^{\pm} + \frac{1}{2}\phi_{k,j+1}^{\pm}\tilde{\varepsilon}_j^{\pm} = \Lambda_k^{\pm}\phi_{k,j}^{\pm}, \quad (3.22)$$

de onde vemos que, se um certo Λ é autovalor de $\mathbf{A}^{\pm}$ associado ao autovetor $\phi = \{\phi_j\}$, então $\Lambda' = -\Lambda$ é também autovalor de $\mathbf{A}^{\pm}$, associado ao autovetor $\phi' = \{(-1)^j \phi_j\}$, desde que N seja par. Nesse caso, o espectro de autovalores de $\mathbf{A}^{\pm}$ é simétrico em relação a zero, possuindo $N/2$ níveis de energia positivos e $N/2$ níveis negativos. O estado fundamental do hamiltoniano corresponde à ocupação por férmions de todos os níveis de energia negativos, contendo assim $N/2$ férmions⁴. Dessa forma, o estado fundamental do modelo é descrito corretamente por um hamiltoniano de férmions com condições de contorno antiperiódicas se $N/2$ for par, e condições periódicas se $N/2$ for ímpar. A introdução de um campo simplesmente translada o espectro⁵, deslocando o nível de Fermi da posição $k_F = N/2$ e fazendo variar o número de férmions. Nesse caso, bem como nos cálculos em temperaturas finitas, que exigem

⁴É importante lembrar que o espectro de $\mathbf{A}^{\pm}$ não corresponde ao espectro do hamiltoniano, que é obtido por todas as somas possíveis envolvendo os níveis $\Lambda_k^{\pm}$ adequados a cada estado.

⁵Decorre da estrutura da matriz $\mathbf{A}^{\pm}$ que $\Lambda_k^{\pm}(h) = \Lambda_k^{\pm}(0) - h$.

um conhecimento de todo o espectro do hamiltoniano, torna-se dispendioso determinar a condição de contorno apropriada para os férmions, o que nos leva a trabalhar então com cadeias de spins abertas ($\varepsilon_N \equiv 0$). Isso possui a vantagem adicional de reduzir a matriz $\mathbf{A}$ a uma forma tridiagonal, o que acelera substancialmente os cálculos numéricos. Para os cálculos de correlações, no entanto, é importante a utilização de cadeias fechadas, a fim de eliminar os efeitos de fronteira.

Utilizando o teorema de Wick, podemos demonstrar que as correlações de pares no estado fundamental,

$$C^{zz}(r) = \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N \langle S_j^z S_{j+r}^z \rangle \right|$$

e

$$C^{xx}(r) = \frac{1}{N} \left| \sum_{j=1}^N \langle S_j^x S_{j+r}^x \rangle \right|$$

são obtidas de

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{1}{4} (g_{ii} g_{jj} - g_{ij} g_{ji}) \quad (3.23)$$

e

$$\langle S_i^x S_j^x \rangle = \frac{1}{4} \begin{vmatrix} g_{i,i+1} & g_{i,i+2} & \cdots & g_{i,j} \\ \vdots & & & \vdots \\ g_{j-1,i+1} & \cdots & & g_{j-1,j} \end{vmatrix}, \quad (3.24)$$

sendo os g_{ij} 's dados por

$$g_{ij} = \sum_{k=1}^{k_F} \phi_{ki}^{\pm} \phi_{kj}^{\pm} - \sum_{k=k_F+1}^N \phi_{ki}^{\pm} \phi_{kj}^{\pm}. \quad (3.25)$$

É interessante ainda obter as correlações de corda (*string-correlation functions*)

$$O^{zz}(r) \equiv \frac{4}{N} \left| \sum_{j=1}^N \langle S_j^z \exp [i\pi (S_{j+1}^z + S_{j+2}^z + \cdots + S_{j+r-1}^z)] S_{j+r}^z \rangle \right| \quad (3.26)$$

e

$$O^{xx}(r) \equiv \frac{4}{N} \left| \sum_{j=1}^N \langle S_j^x \exp [i\pi (S_{j+1}^x + S_{j+2}^x + \cdots + S_{j+r-1}^x)] S_{j+r}^x \rangle \right|, \quad (3.27)$$

com r ímpar, introduzidas [den Nijs e Rommelse 1989] para medir a ordem topológica de longo alcance oculta em cadeias de spin inteiro, nas quais a

correlação de pares anula-se exponencialmente, em função do *gap* de Haldane. Numa cadeia XX dimerizada (ou seja, com interações que se alternam regularmente entre dois valores distintos $J_{\min}$ e $J_{\max}$), que também apresenta um *gap* de excitações, as correlações de corda tendem a um valor finito em grandes distâncias. Utilizando a identidade $S^z = -i \exp(i\pi S^z)/2$, podemos mostrar que, para r ímpar,

$$\begin{aligned} \left\langle S_j^z \left(\prod_{n=1}^{r-1} e^{i\pi S_{j+n}^z} \right) S_{j+r}^z \right\rangle &= (2i)^{r-1} \langle S_j^z S_{j+1}^z S_{j+2}^z \cdots S_{j+r-1}^z S_{j+r}^z \rangle \\ &= \frac{(-1)^r}{4} \begin{vmatrix} g_{jj} & g_{j,j+1} & \cdots & g_{j,j+r} \\ \vdots & & & \vdots \\ g_{j+r,j} & \cdots & & g_{j+r,j+r} \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

e analogamente

$$\begin{aligned} \left\langle S_j^x \left(\prod_{n=1}^{r-1} e^{i\pi S_{j+n}^x} \right) S_{j+r}^x \right\rangle &= (2i)^{r-1} \langle S_j^x S_{j+1}^x S_{j+2}^x \cdots S_{j+r-1}^x S_{j+r}^x \rangle \\ &= \frac{(-1)^r}{4} \begin{vmatrix} g_{j,j+1} & g_{j,j+3} & \cdots & g_{j,j+r} \\ \vdots & & & \vdots \\ g_{j+r-1,j+1} & \cdots & & g_{j+r-1,j+r} \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Para avaliar os efeitos de interações não-homogêneas, é útil separar as correlações de corda nas contribuições originadas em sítios pares e ímpares, ou seja,

$$O^{xx}(r) = O_i^{xx}(r) + O_p^{xx}(r),$$

com

$$O_i^{xx}(r) \equiv \frac{4}{N} \left| \sum_{j=1}^{N/2} \langle S_{2j-1}^x \exp [i\pi (S_{2j}^x + S_{2j+1}^x + \cdots + S_{2j+r-2}^x)] S_{2j+r-1}^x \rangle \right| \quad (3.30)$$

e

$$O_p^{xx}(r) \equiv \frac{4}{N} \left| \sum_{j=1}^{N/2} \langle S_{2j}^x \exp [i\pi (S_{2j+1}^x + S_{2j+2}^x + \cdots + S_{2j+r-1}^x)] S_{2j+r}^x \rangle \right|. \quad (3.31)$$

Procedemos analogamente para $O^{zz}(r)$. Numa cadeia perfeitamente dimerizada (em que $J_{\min} = 0$ e $J_{\max} = \infty$, com as ligações nulas nas posições pares), obteríamos $O_i^{xx}(r) = 1$ e $O_p^{xx}(r) = 0$, para todo r ímpar.

As propriedades termodinâmicas podem ser obtidas a partir da energia livre, dada por⁶

$$f = -\frac{T}{N} \ln (\text{Tr} e^{-\beta H}) = -\frac{T}{N} \sum_{k=1}^N \ln [2 \cosh (\frac{1}{2} \beta \Lambda_k)], \quad (3.32)$$

em que os Λ 's agora correspondem aos níveis de energia dos férmions com condições de contorno livres. Temos assim expressões para a magnetização induzida pelo campo,

$$m = -\left(\frac{\partial f}{\partial h}\right)_T = -\frac{1}{2N} \sum_{k=1}^N \tanh (\frac{1}{2} \beta \Lambda_k), \quad (3.33)$$

para a suscetibilidade correspondente,

$$\chi^{zz} = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T = \frac{\beta}{4N} \sum_{k=1}^N \text{sech}^2 (\frac{1}{2} \beta \Lambda_k), \quad (3.34)$$

e para o calor específico a campo constante,

$$c_h = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_h = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left(\frac{1}{2} \beta \Lambda_k\right)^2 \text{sech}^2 (\frac{1}{2} \beta \Lambda_k). \quad (3.35)$$

3.3 Interações aleatórias

O estudo de versões aleatórias de cadeias quânticas de spins tomou grande impulso nos últimos anos, em função do interesse em entender os efeitos de desordem sobre transições quânticas [Sachdev 1999]. Além de tratamentos de desordem fraca [Doty e Fisher 1992, McKenzie 1996, Bunder e McKenzie 1999, entre outros], existem vários estudos para desordem forte baseados num método de grupo de renormalização no espaço real proposto por Ma, Dasgupta e Hu [1979] para o modelo de Heisenberg isotrópico⁷ (ou modelo XXX). Há alguns anos, esse método foi amplamente generalizado por Daniel Fisher, que o aplicou ao modelo de Ising quântico [Fisher 1992, 1995] e ao modelo XYZ [1994]. Entre os resultados marcantes obtidos por Fisher, está a confirmação da existência das fases de Griffiths [1969] no modelo de Ising quântico com ligações e campos aleatórios, equivalente ao limite anisotrópico extremo do modelo de McCoy–Wu [McCoy e Wu 1968]. Num universo crescente, outros desenvolvimentos baseados no método de Ma, Dasgupta e Hu

⁶Fixamos $k_B \equiv 1$, de modo que $\beta = 1/T$.

⁷Veja também Dasgupta e Ma [1980].

incluem a aplicação a cadeias aleatórias dimerizadas [Hyman *et al.* 1996], ao modelo de Heisenberg $\pm J$ [Furusaki *et al.* 1994, Westenberg *et al.* 1995] e a sistemas de spin maior que $1/2$ [Saguia *et al.* 2000, Saguia *et al.* 2001], bem como a escadas de spins com interações aleatórias [Mélin *et al.* 2002].

Várias das previsões de Fisher foram confirmadas por meio de cálculos numéricos no modelo de Ising quântico [Young e Rieger 1996, Young 1997, Fisher e Young 1998] e no modelo XXZ [Haas *et al.* 1993]. Em particular, para o modelo XX , Henelius e Girvin [1998] estudaram as correlações no estado fundamental, utilizando uma distribuição de probabilidades do tipo caixa, dada por

$$\wp(J_n) = J_{\max}^{-1} \theta(J_{\max} - J_n) \theta(J_n), \quad (3.36)$$

em que $\theta(x)$ é a função degrau de Heaviside, novamente obtendo resultados compatíveis com os esperados para uma fase de singleto aleatório.

Nesta seção, procuramos verificar a existência da fase de singleto aleatório em modelos XX com interações escolhidas a partir de diversas distribuições de probabilidade, para as quais não é evidente a validade do tratamento de grupo de renormalização de Fisher (por razões que ficarão claras adiante). Entre essas distribuições, estudamos uma distribuição do tipo caixa,

$$\wp(J_n) = (J_{\max} - J_{\min})^{-1} \theta(J_{\max} - J_n) \theta(J_n - J_{\min}), \quad (3.37)$$

com $J_{\min} \neq 0$, e distribuições binárias,

$$\wp(J_n) = \frac{1}{2} \delta(J_n - J_{\min}) + \frac{1}{2} \delta(J_n - J_{\max}). \quad (3.38)$$

Na subseção 3.3.1, resumimos as previsões de Fisher para as propriedades da fase de singleto aleatório induzida pela desordem de ligações no modelo XX . Na subseção seguinte, apresentamos e discutimos nossos resultados numéricos para o problema.

3.3.1 O grupo de renormalização no espaço real

Consideremos um modelo XX antiferromagnético, na ausência de campo, descrito pelo hamiltoniano

$$H = \sum_n J_n (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y) = \sum_n \frac{1}{2} J_n (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+), \quad (3.39)$$

em que as interações $J_n \geq 0$ são variáveis independentes, obtidas da mesma distribuição de probabilidades $\wp(J_n)$. O método de Ma, Dasgupta e Hu consiste em identificar a ligação mais forte na cadeia, digamos $J_2 = \Omega_0$, e

considerar os spins por ela conectados, bem como seus primeiros vizinhos. O termo relevante do hamiltoniano é

$$H_{1-4} = H_{23} + (H_{12} + H_{34}) \equiv H_{23} + H', \quad (3.40)$$

com

$$H_{23} = \frac{1}{2}\Omega_0 (S_2^+ S_3^- + S_2^- S_3^+), \quad (3.41)$$

e

$$H' = \frac{1}{2}J_1 (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) + \frac{1}{2}J_3 (S_3^+ S_4^- + S_3^- S_4^+). \quad (3.42)$$

Tratando H' como uma perturbação a H_{23} , cujo estado fundamental é um singlete, é possível mostrar que, até segunda ordem em $J_{1,3}/\Omega_0$, o termo H_{1-4} pode ser substituído por um hamiltoniano efetivo $\tilde{H}_{14}$ cujos elementos diagonais, na base $|\Psi_{14}\rangle = |S_1^z\rangle \otimes |S_4^z\rangle$, são dados por

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{14} | \tilde{H}_{14} | \Psi_{14} \rangle &= \frac{J_1 J_3}{4\Omega_0} \langle \Psi_{14} | S_1^+ S_4^- | \Psi_{14} \rangle \sum_t \frac{\langle s | S_2^- | t \rangle \langle t | S_3^+ | s \rangle}{E_s - E_t} \\ &+ \frac{J_1 J_3}{4\Omega_0} \langle \Psi_{14} | S_1^- S_4^+ | \Psi_{14} \rangle \sum_t \frac{\langle s | S_2^+ | t \rangle \langle t | S_3^- | s \rangle}{E_s - E_t}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

em que $|s\rangle$ denota o singlete fundamental de H_{23} e $|t\rangle$, os estados excitados. A menos de uma constante, o hamiltoniano efetivo pode ser escrito como

$$\tilde{H}_{14} = \frac{1}{2}\tilde{J} (S_1^+ S_4^- + S_1^- S_4^+), \quad (3.44)$$

com

$$\tilde{J} = \frac{J_1 J_3}{\Omega_0}, \quad (3.45)$$

desde que $J_{1,3} \ll \Omega_0$. Para uma distribuição $\wp(J_n)$ contínua, tal que $\wp(J_n > J_{\max}) = 0$, e não muito concentrada em torno de $J_{\max}$, é bastante provável que a condição implícita nessa aproximação perturbativa seja satisfeita. Nesse caso, o par de spins S_2 e S_3 , bem como as ligações J_1 , J_3 e Ω_0 , podem ser eliminados do problema em baixas energias, produzindo uma interação efetiva $0 \leq \tilde{J} < J_{1,3}$ entre os spins S_1 e S_4 , que assim estarão também acoplados antiferromagneticamente, através das excitações virtuais do par S_2 - S_3 , conforme se vê da eq. (3.43). Essa operação reduz a escala de energia do sistema, e altera a distribuição de probabilidades das interações efetivas.

Obtemos assim, para o sistema como um todo, o hamiltoniano efetivo total

$$\tilde{H} = H - H_{1-4} + \tilde{H}_{14}, \quad (3.46)$$

do qual novamente identificamos a ligação (efetiva) mais forte, repetindo o procedimento anterior. Em alguma etapa desse processo iterativo, a ligação efetiva $\tilde{J}$ entre os spins S_1 e S_4 também será eliminada, produzindo um novo acoplamento efetivo entre dois outros spins separados por uma distância arbitrária. Como todas as interações efetivas continuarão sendo antiferromagnéticas, o estado fundamental de qualquer par de spins efetivamente acoplados num certo passo do processo será um singlete. Portanto, numa escala muito baixa de energia, ou seja, em baixas temperaturas, podemos dizer que o sistema encontra-se numa “fase de singlete aleatório”, em que cada spin forma um par singlete com um outro spin a uma distância arbitrária. Como cada passo do processo diminui a escala de energia do sistema, as ligações de singlete mais longas serão tipicamente mais fracas que aquelas mais curtas. É importante notar que as ligações entre os pares singletos jamais se cruzam!

Quando a escala de energia do sistema é reduzida de Ω para $\Omega - d\Omega$, a variação da distribuição de probabilidades das interações efetivas é descrita pela equação

$$-\frac{\partial P(\tilde{J}; \Omega)}{\partial \Omega} = P(\Omega; \Omega) \int_0^\Omega dJ_1 dJ_2 P(J_1; \Omega) P(J_2; \Omega) \delta\left(\tilde{J} - \frac{J_1 J_2}{\Omega}\right), \quad (3.47)$$

que define os fluxos da renormalização. Na expressão acima, $P(J; \Omega)dJ$ representa a probabilidade da ocorrência de uma interação com valor entre J e $J + dJ$ quando a maior interação presente é Ω . Como mostrado por Fisher [1994], a expressão

$$P^*(\tilde{J}; \Omega) = \frac{\alpha(\Omega)}{\Omega} \left(\frac{\tilde{J}}{\Omega}\right)^{\alpha(\Omega)-1} \theta(\Omega - \tilde{J}), \quad (3.48)$$

em que θ é a função degrau de Heaviside e $\alpha(\Omega) = 1/\ln(\Omega_0/\Omega)$, corresponde a uma solução de ponto fixo ($\Omega \ll \Omega_0$) da equação de fluxos. A forma de escala acima é singular em $\tilde{J} = 0$, fornecendo um indício de que a renormalização torna-se assintoticamente exata em baixíssimas escalas de energia, ou seja, quando $T \rightarrow 0$. A solução dada pela eq. (3.48) é conhecida como “ponto fixo de singlete aleatório” (*random-singlet fixed point*). Na verdade, esse ponto fixo deve governar o comportamento da cadeia *XXZ* com interações aleatórias para qualquer anisotropia uniforme $-1/2 < \Delta < 1$ [Fisher 1994].

Da forma da distribuição de ponto fixo $P^*(\tilde{J}, \Omega)$ seguem diversas previsões sobre o comportamento do sistema. É possível mostrar que o número de spins ativos (ou seja, que ainda não foram eliminados pela renormalização) numa escala de energia Ω é tal que

$$n_\Omega \approx \frac{1}{[\ln(\Omega_0/\Omega)]^2}, \quad (3.49)$$

de modo que a distância típica entre spins é

$$L_{\Omega} \sim \frac{1}{n_{\Omega}} \sim [\ln(\Omega_0/\Omega)]^2. \quad (3.50)$$

Já que $P^*(\tilde{J}; \Omega)$ diverge exponencialmente para $\tilde{J} \rightarrow 0$, podemos considerar que, numa certa temperatura T (que define a escala de energia Ω), os spins conectados por ligações $J_j > T$ estarão fortemente conectados, sendo portanto pouco afetados pelas flutuações térmicas; por outro lado, os spins conectados por ligações $J_j < T$ estarão essencialmente livres. Desse modo, a suscetibilidade deve se comportar como

$$\chi^{\perp} \sim \chi^{zz} \sim \frac{n_T}{T} \sim \frac{1}{T[\ln(\Omega_0/T)]^2}. \quad (3.51)$$

Uma forma de escala idêntica a essa última decorre, para χ^{zz} , de um argumento de Eggarter e Riedinger [1978] para o modelo *tight-binding* com *hopping* aleatório. Mapeando o problema na difusão de uma partícula na presença de um parede refletora e de um sumidouro, esses autores obtiveram para a densidade de estados (em torno do centro da banda) a forma assintótica

$$\rho(E) \sim \frac{1}{|E|} \left(\ln \left| \frac{E_0}{E} \right| \right)^{-3}, \quad (3.52)$$

válida, em princípio, para *qualquer* distribuição de desordem⁸. A equivalência com a eq. (3.51) segue da integração dessa última expressão até $E \sim T$; veja a eq. (3.115). De modo semelhante, a forma de escala do calor específico em baixas temperaturas deve ser dada por

$$c_h \sim \frac{1}{[\ln(\Omega_0/T)]^3}. \quad (3.53)$$

Também é possível obter informações sobre o comportamento das correlações de pares no estado fundamental. Devido à natureza da fase de singleto aleatório, as correlações médias e as correlações típicas comportam-se de modo diverso. As correlações médias são dominadas pelos (relativamente raros) pares singleto, fortemente acoplados. A probabilidade de que um certo par de spins S_i e S_j , separados por uma distância r_{ij} , forme um singleto é proporcional à probabilidade de que ambos estejam ainda ativos na escala de energia Ω_{ij} na qual $L_{\Omega_{ij}} \sim r_{ij}$. Como a probabilidade de que S_i esteja ainda ativo até uma escala de energia Ω é, grosso modo, independente da probabilidade equivalente para S_j até que $\Omega \sim \Omega_{ij}$, a probabilidade de que ambos

⁸O mesmo resultado foi obtido posteriormente, de forma mais rigorosa, por Dhar [1980].

estejam ativos na escala Ω_{ij} é aproximadamente $n_{\Omega_{ij}}^2 \sim r_{ij}^{-2}$. Estando ambos ainda ativos, existe uma boa chance de que formem um par singlete. Os raros pares singlete⁹ resultantes, fortemente acoplados, estabelecem limites inferiores para a forma de escala das correlações, e concluimos que

$$\overline{C(r)} \equiv \overline{\langle \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+r} \rangle} \sim \frac{1}{r^2}. \quad (3.54)$$

É interessante notar que essa previsão indica que a desordem induz um decaimento isotrópico das correlações, mais rápido que no caso homogêneo, mas ainda assim descrito por uma lei de potência.

Por outro lado, as correlações entre pares de spins típicos são muito fracas. Como a renormalização de um certo par de spins gera um acoplamento entre seus primeiros vizinhos muito mais fraco que aqueles previamente existentes, como se vê da eq. (3.45) e da forma de $P^*(\tilde{J}; \Omega)$, a correlação entre dois spins S_i e S_j quaisquer, separados por esse par, é tipicamente inferior à correlação dos pares singlete por um fator da ordem de $\Omega_{ij}/\Omega_0 \sim \exp(-\sqrt{r_{ij}})$. A correlação típica, que deve ser da ordem dessa escala de energia, é dada então por

$$C_{\text{tip}}(r) \equiv \exp(\overline{\ln C(r)}) \sim e^{-a\sqrt{r}}, \quad (3.55)$$

sendo a uma constante¹⁰. Segundo Fisher [1994], $\ln C_{ij}/\sqrt{r_{ij}}$ deve convergir em distribuição para uma distribuição não-trivial, quando $r_{ij} \gg 1$.

Utilizando o mapeamento definido pelas equações (3.5) e (3.6), é possível mostrar que as correlações de corda da cadeia XX relacionam-se às correlações de pares do modelo de Ising quântico. A partir daí, e utilizando os resultados obtidos para o modelo de Ising quântico aleatório por Fisher [1992, 1995], obtêm-se as formas de escala

$$O^{xx}(r) \sim O^{zz}(r) \sim r^{\tau-2}, \quad (3.56)$$

sendo $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ a razão áurea ($\tau - 2 \simeq -0.382$). As distribuições das correlações de corda típicas, reescaladas por $\sqrt{r_{ij}}$, também devem convergir para uma distribuição fixa, segundo Fisher [1992, 1995]. Por outro lado, no caso uniforme, as correlações de corda devem decair de acordo com as formas assintóticas

$$O^{xx}(r) \sim \frac{1}{r^{\eta_x^o}}, \quad \eta_x^o = \frac{1}{4}, \quad (3.57)$$

⁹Ocorre que, dos $N(N-1)/2$ pares distintos de spins existentes numa cadeia de tamanho N , o número de pares singlete está limitado a $N/2$.

¹⁰A utilização da função $\ln(x)$ na definição das correlações típicas tem por objetivo filtrar da média a influência das correlações dos pares singlete, tornando as contribuições de cada par de spins aproximadamente equivalentes.

Figura 3.1. Suscetibilidade transversa χ^{zz} a campo nulo na cadeia XX aberta com interações aleatórias obtidas a partir de distribuições do tipo caixa, para vários valores da razão $J_{\min}/J_{\max}$ e diferentes tamanhos de cadeia N . Em cada caso, os resultados correspondem a médias sobre 1000 realizações de desordem. Note que a ordenada é $(\chi^{zz}T)^{-1/2}$, e a abscissa encontra-se em escala logarítmica. Em baixas temperaturas, observamos claramente um comportamento em acordo com a forma de escala (3.51). O tamanho de cadeia necessário para reproduzir a forma de escala é cada vez maior à medida que a razão $J_{\min}/J_{\max}$ se aproxima da unidade.

e

$$O^{zz}(r) \sim \frac{1}{r^{\eta_z^o}}, \quad \eta_z^o = \frac{1}{2}. \quad (3.58)$$

3.3.2 Resultados numéricos

No intuito de verificar a universalidade da fase de singleto aleatório na presença de interações desordenadas, realizamos estudos numéricos de cadeias XX com acoplamentos aleatórios independentes escolhidos a partir de distribuições do tipo caixa,

$$\wp(J_n) = (J_{\max} - J_{\min})^{-1} \theta(J_{\max} - J_n) \theta(J_n - J_{\min}), \quad (3.59)$$

e distribuições binárias,

$$\wp(J_n) = \frac{1}{2} \delta(J_n - J_{\min}) + \frac{1}{2} \delta(J_n - J_{\max}). \quad (3.60)$$

O método de Ma, Dasgupta e Hu, quando aplicado a essas distribuições, tende a produzir um grande número de decimações “ruins” (aquelas em que

Figura 3.2. Calor específico c_h a campo nulo na cadeia XX aberta com interações aleatórias obtidas a partir de distribuições do tipo caixa. Note que a ordenada é $c_h^{-1/3}$, e a abscissa encontra-se em escala logarítmica. Em baixas temperaturas, observamos claramente um comportamento em acordo com a forma de escala (3.53).

a interação central do bloco a ser eliminado não tem intensidade bastante superior às ligações vizinhas); assim, não é evidente que o comportamento associado corresponda a uma fase de singlete aleatório.

Para cada distribuição, determinamos as propriedades termodinâmicas, as correlações de pares e de corda $C(r)$ e $O(r)$, nas direções x e z , bem como os histogramas $\ln C(r)/\sqrt{r}$ e $\ln O(r)/\sqrt{r}$. A distribuição do tipo caixa com $J_{\min} = 0$ foi estudada por Henelius e Girvin [1998], que obtiveram, para as correlações, resultados compatíveis com as previsões de Fisher.

Consideremos inicialmente as propriedades termodinâmicas, mais especificamente a suscetibilidade transversa a campo nulo e o calor específico em baixas temperaturas. Tanto para distribuições do tipo caixa como para distribuições binárias, fomos capazes de reproduzir as formas de escala (3.51) e (3.53), embora seja necessário considerar cadeias cada vez mais longas à medida que a razão $J_{\min}/J_{\max}$ se aproxima da unidade. Nas figuras 3.1 e 3.2, mostramos nossos resultados para as distribuições do tipo caixa, enquanto na figura 3.3 apresentamos comportamentos típicos para as distribuições binárias. É interessante notar que, nesse último caso, fixando uma razão $J_{\min}/J_{\max}$, as formas de escala previstas podem ser recuperadas utilizando tamanhos inferiores àqueles necessários para distribuições do tipo caixa. Esse

Figura 3.3. Suscetibilidade transversa e calor específico a campo nulo na cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de distribuições binárias. Novamente observamos a concordância do comportamento em baixas temperaturas com as previsões das formas de escala (3.51) e (3.53). Os cálculos foram realizados utilizando cadeias abertas de tamanho $N = 8192$ e médias sobre 1000 realizações de desordem.

resultado pode ser compreendido à luz do processo de decimação envolvido no tratamento de grupo de renormalização no espaço real: o número de decimações “ruins” no caso de distribuições binárias (em que as ligações vizinhas possuem valores $J_{\min}$ ou $J_{\max}$) é claramente inferior ao que se verifica no caso de distribuições contínuas (em que as ligações vizinhas possuem valores *entre* $J_{\min}$ e $J_{\max}$). Uma decimação “ruim” indica a necessidade de considerar blocos maiores do que pares de spins para que o tratamento perturbativo faça sentido, em analogia ao que ocorre no caso da cadeia de Heisenberg de spin-1 [Saguia *et al.* 2002]; dessa forma, parece plausível que um maior número de decimações “ruins” exija que se observe o sistema em escalas de comprimento mais longas para que seja recuperado o comportamento assintótico.

Para o cálculo das correlações, adotamos condições de contorno periódicas, a fim de minimizar efeitos de fronteira¹¹. Nesse cálculo, como precisamos dos autovetores associados aos níveis de energia dos férmions, o que aumenta

¹¹Restam os efeitos de tamanho finito, que se manifestam, em cadeias de tamanho N , por meio de um mínimo nas correlações na distância $N/2$, correspondente à maior separação possível entre spins numa cadeia fechada. A presença desse mínimo invariavelmente perturba o decaimento das correlações e impede que a forma assintótica se revele inequivocamente.

consideravelmente o tempo de computação, estamos limitados a trabalhar com menores tamanhos de cadeia. Uma dificuldade que se impõe é inferir o comportamento das correlações numa cadeia infinita a partir de resultados para cadeias finitas. Para tentar contornar essa dificuldade, utilizamos o seguinte método: definimos tamanhos mínimo e máximo para as cadeias, $N_{\min}$ e $N_{\max}$, e realizamos cálculos para n_c tamanhos de cadeia igualmente espaçados entre esses extremos; para cada tamanho, obtemos estimativas para as correlações em n_r distâncias com valores entre $r_{\min}$ e $r_{\max}$; finalmente, para cada distância, extrapolamos os resultados correspondentes aos vários tamanhos de cadeia, utilizando o algoritmo épsilon (veja, por exemplo, Barber [1983]). Esse método produz excelentes resultados quando aplicado a sistemas uniformes, como mostram as figuras 3.4 e 3.5. Por outro lado, o método utilizado por Henelius e Girvin [1998] consiste em tomar vários tamanhos de cadeia, efetuando médias para as correlações entre spins separados pela maior distância possível, e buscar reproduzir o comportamento assintótico pela simples junção dos resultados numa mesma curva. Com esse método, apesar de reproduzir as previsões de Fisher para a distribuição do tipo caixa com $J_{\min} = 0$, esses autores não obtiveram a mesma concordância para $J_{\min} > 0$, conjecturando que uma possível origem para a falha esteja numa convergência lenta para o regime assintótico. Nossa expectativa é de que, com o método que utilizamos, possamos acelerar essa convergência, ao mesmo tempo em que trabalhamos com menores tamanhos de cadeia, permitindo obter uma melhor estatística. Nossos resultados confirmam essa expectativa, embora parcialmente.

Quando introduzimos a aleatoriedade, o método funciona bem para algumas grandezas, desde que utilizemos tamanhos $N_{\min}$ e $N_{\max}$ suficientemente separados e produzamos uma estimativa estatisticamente confiável das médias. Por restrições de tempo computacional, realizamos majoritariamente cálculos para $N_{\min} = 64$ e $N_{\max} = 256$, tomando médias para 10^4 a 10^5 realizações de desordem (dependendo do tamanho da cadeia). Estudamos distribuições (tanto binárias quanto do tipo caixa) com $J_{\min}/J_{\max} = 1/4$ e $J_{\min}/J_{\max} = 1/2$. As estimativas para os expoentes estão mostradas na tabela 3.1. Em todos os casos, obtivemos expoentes η_z e η_z^o compatíveis com as previsões de Fisher. Entretanto, os expoentes η_x e η_x^o mostram uma maior variação, dependendo inclusive dos tamanhos mínimo e máximo da cadeia. É possível que as correlações $C^{xx}(r)$ e $O^{xx}(r)$ apresentem uma convergência lenta para o regime assintótico¹², em comparação com $C^{zz}(r)$ e $O^{zz}(r)$.

¹²Mesmo para a distribuição do tipo caixa com $J_{\min} = 0$, estudada por Henelius e Girvin através de um método distinto do que empregamos, obtivemos $\eta_x = 1.74(2)$ e $\eta_x^o = 0.377(7)$, utilizando $N_{\min} = 128$ e $N_{\max} = 512$, com médias sobre até 10^5 realizações

Figura 3.4. Correlações médias de pares $C^{xx}(r)$ e $C^{zz}(r)$ na cadeia XX uniforme, obtidas segundo o método de extrapolação descrito no texto. Apresentamos três conjuntos de tamanhos, com cadeias de $N_{\min} = 64$ a $N_{\max} = 128$, $N_{\min} = 128$ a $N_{\max} = 256$, e $N_{\min} = 256$ a $N_{\max} = 512$ sítios. Para cada conjunto, utilizamos $n_c = 5$ tamanhos de cadeia, calculando as correlações em $n_r = 5$ distâncias entre $r_{\min} = N_{\min}/4$ e $r_{\max} = N_{\max}/2$. Nos pontos de intersecção dos conjuntos fica evidente a consistência do método. Os expoentes obtidos a partir de ajustes concordam com os resultados exatos $\eta_x = 1/2$ e $\eta_z = 2$ com precisão relativa de 10^{-3} .

Figura 3.5. Correlações médias de corda $O^{xx}(r)$ e $O^{zz}(r)$ na cadeia XX uniforme, obtidas segundo o método de extrapolação descrito no texto. Os parâmetros são os mesmos da figura anterior. Novamente fica evidenciada a consistência do método. Os expoentes obtidos a partir de ajustes concordam com os resultados exatos $\eta_x^o = 1/4$ e $\eta_z^o = 1/2$ com precisão relativa de 10^{-2} .

Em todo caso, observamos claramente uma diferença nos expoentes de decaimento das correlações, com respeito ao caso uniforme, em concordância com as previsões [Doty e Fisher 1992] de que um ingrediente infinitesimal de desordem é suficiente para afastar o sistema da linha de pontos fixos que governa o comportamento do modelo XXZ puro no regime $-1/2 < \Delta \leq 1$.

Também nos histogramas do logaritmo das correlações observamos uma melhor concordância com as previsões do grupo de renormalização para os cálculos envolvendo a componente z dos spins. O colapso mais evidente corresponde aos histogramas de $\ln O^{zz}(r)/\sqrt{r}$, especialmente para as distribuições binárias, como se vê nas figuras 3.6 a 3.9.

Os histogramas das correlações de pares, para os tamanhos que estudamos, não exibem um colapso claro, e o máximo da distribuição migra para valores maiores da abscissa com o aumento do tamanho da cadeia. No entanto, como evidenciado nas figuras 3.10 e 3.11, a forma da distribuição permanece aproximadamente constante. Como $\ln C(r)$ está limitado a valores negativos, já que $C(r) < 1$, esperamos que ocorra realmente o colapso das distribuições para maiores tamanhos de cadeia.

de desordem. Embora a estimativa para η_x^o seja compatível com a previsão $\eta_x^o \simeq 0.382$, a estimativa para η_x ainda difere da previsão $\eta_x = 2$.

Tabela 3.1. Estimativas para os expoentes de decaimento das correlações médias na cadeia XX com interações aleatórias. As extrapolações foram realizadas a partir de cálculos para $n_c = 5$ tamanhos de cadeia entre $N_{\min} = 64$, $N_{\max} = 256$, tomando médias sobre 10^4 a 10^5 realizações de desordem. As previsões para a fase de singleto aleatório são $\eta_x = \eta_z = 2$ e $\eta_x^o = \eta_z^o \simeq 0.382$. Os números entre parênteses representam o erro no último dígito dos ajustes numéricos.

$J_{\min}/J_{\max}$	distribuição do tipo caixa		distribuição binária		fase de singleto aleatório
	$1/4$	$1/2$	$1/4$	$1/2$	
η_z	2.04(1)	2.067(2)	1.99(2)	2.061(8)	2
η_z^o	0.381(2)	0.395(3)	0.3717(9)	0.374(3)	0.382
η_x	1.00(1)	0.755(9)	1.31(2)	0.914(4)	2
η_x^o	0.303(2)	0.266(1)	0.3269(9)	0.291(2)	0.382

Figura 3.6. Histogramas de $\ln O^{zz}(r)/\sqrt{r}$ para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição do tipo caixa, com $J_{\min}/J_{\max} = 1/4$ e diferentes tamanhos de cadeia N .

Figura 3.7. Histogramas de $\ln O^{zz}(r)/\sqrt{r}$ para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição do tipo caixa, com $J_{\min}/J_{\max} = 1/2$ e diferentes tamanhos de cadeia N .

Figura 3.8. Histogramas de $\ln O^{zz}(r)/\sqrt{r}$ para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição binária, com $J_{\min}/J_{\max} = 1/4$ e diferentes tamanhos de cadeia N .

Figura 3.9. Histogramas de $\ln O^{zz}(r)/\sqrt{r}$ para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição binária, com $J_{\min}/J_{\max} = 1/2$ e diferentes tamanhos de cadeia N .

Figura 3.10. Histogramas de $\ln C^{zz}(r)/\sqrt{r}$ para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição do tipo caixa, com $J_{\min}/J_{\max} = 1/4$ e diferentes tamanhos de cadeia N .

Figura 3.11. Histogramas de $\ln C^{xx}(r)/\sqrt{r}$ para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição do tipo caixa, com $J_{\min}/J_{\max} = 1/2$ e diferentes tamanhos de cadeia N .

Figura 3.12. Gráfico de O_p^{xx} contra O_i^{xx} para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição do tipo caixa com $J_{\min}/J_{\max} = 1/4$. Os cálculos utilizaram cadeias com $N = 256$ sítios, e as correlações foram calculadas entre spins separados por distâncias correspondentes a $r = 2^n - 1$, com n entre 2 e 7.

Figura 3.13. Gráfico de O_p^{xx} contra O_i^{xx} para a cadeia XX com interações aleatórias obtidas a partir de uma distribuição binária com $J_{\min}/J_{\max} = 1/4$. Os cálculos utilizaram cadeias com $N = 256$ sítios, e as correlações foram calculadas entre spins separados por distâncias correspondentes a $r = 2^n - 1$, com n entre 2 e 7.

Uma outra evidência de que todos os tipos de desordem que estudamos levam o sistema à fase de singlete aleatório é fornecida pelo comportamento das componentes O_i^{xx} e O_p^{xx} de $O^{xx}(r)$, definidas pelas eqs. (3.30) e (3.31). Como as ligações entre pares singlete nunca se cruzam na fase de singlete aleatório, as componentes O_i^{xx} e O_p^{xx} numa dada cadeia apresentam uma tendência à *anticorrelação*: se O_i^{xx} é de ordem 1, O_p^{xx} é necessariamente pequena¹³. Esse efeito, constatado no estudo de Henelius e Girvin [1998] para a distribuição do tipo caixa com $J_{\min} = 0$, é também observado nas distribuições que estudamos, conforme mostram as figuras 3.12 e 3.13. Como é esperado na ausência de dimerização, os gráficos correspondentes são simétricos em relação ao eixo $O_i^{xx} = O_p^{xx}$. É interessante notar que a separação entre as escalas de O_i^{xx} e O_p^{xx} é mais acentuada no caso da distribuição binária (figura 3.13).

Em resumo, acreditamos que nossos resultados constituem evidências em favor da universalidade da fase de singlete aleatório em cadeias XX com interações desordenadas. Na próxima seção, consideramos cadeias XX com interações aperiódicas.

¹³Essa anticorrelação também se verifica, embora em grau atenuado, quando as demais correlações são separadas em componentes iniciadas em sítios pares e ímpares.

3.4 Interações aperiódicas

O interesse no estudo de sistemas aperiódicos foi amplificado pela descoberta dos quase-cristais [Schechtman *et al.* 1984]. Desde então, um número considerável de trabalhos científicos foi dedicado ao estudo do efeito de aperiodicidade sobre modelos teóricos. Uma característica comum a todos esses estudos é o interesse em compreender os efeitos combinados das características geométricas inerentes à aperiodicidade e das propriedades físicas dos vários sistemas. No caso de modelos magnéticos, Luck [1993a] formulou um critério heurístico, semelhante ao famoso critério de Harris [1974], para avaliar os efeitos de flutuações geométricas induzidas por aperiodicidade sobre o comportamento crítico. Desde então, esse critério tem sido verificado para um grande número de casos, a começar pelo modelo de Ising quântico [Luck 1993b, Hermisson *et al.* 1997].

Versões aperiódicas do modelo XY foram também bastante estudadas, especialmente em conexão com propriedades de localização nos modelos *tight-binding* correspondentes; veja, por exemplo, Satija [1994] e referências ali contidas. As propriedades espectrais e termodinâmicas da cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência aperiódica de Fibonacci foram estudadas por Luck e Nieuwenhuizen [1986], através de um método particular de grupo de renormalização. Recentemente, Hermisson [2000] generalizou um outro método de grupo de renormalização, introduzido para estudar o modelo de Ising quântico aperiódico [Hermisson *et al.* 1997], e chegou a uma série de previsões para as mesmas propriedades, na presença de interações aperiódicas gerais, em cadeias XY nas vizinhanças da criticalidade. Uma linha de investigação relacionada consiste em identificar as semelhanças entre os efeitos de interações aperiódicas e aleatórias. Dentre as previsões de Hermisson [2000], está a de que, nos casos em que a aperiodicidade altera o comportamento da cadeia XY , ambos os tipos de não-homogeneidade produzem efeitos similares sobre as propriedades termodinâmicas no ponto crítico.

Nosso objetivo nesta seção é duplo. Através de cálculos numéricos, pretendemos verificar as previsões de Hermisson para as propriedades espectrais e termodinâmicas de cadeias XX com interações aperiódicas. Buscamos também observar os efeitos de aperiodicidade sobre as correlações entre spins no estado fundamental, e identificar até que ponto a fase induzida em $T = 0$ por aperiodicidade relevante assemelha-se à fase de singleto aleatório, produzida no modelo XX pela introdução de interações desordenadas.

Na subseção 3.4.1, apresentamos uma discussão sobre sequências aperiódicas, sua caracterização e algumas de suas propriedades. Também introduzimos as sequências aperiódicas que utilizaremos em nossos cálculos. Em seguida, na subseção 3.4.2, revisamos o método de grupo de renormalização

de Hermisson e suas previsões. Finalmente, na subseção seguinte, expomos e discutimos nossos resultados numéricos.

3.4.1 Seqüências aperiódicas

Uma seqüência aperiódica é gerada por uma regra de substituição ρ atuando sobre um alfabeto $\mathcal{A} = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ de n letras, e atribuindo a cada uma delas uma determinada palavra w_i . Explicitamente,

$$\rho : a_i \rightarrow w_i, \quad (3.61)$$

sendo a palavra w_i uma cadeia finita de letras. Como exemplo, consideremos a famosa seqüência de Fibonacci, gerada pela regra

$$\rho^{\text{fb}} : \begin{cases} a_1 = a \rightarrow w_a = ab \\ a_2 = b \rightarrow w_b = a \end{cases}, \quad (3.62)$$

cujas iterações produzem

$$a \rightarrow ab \rightarrow aba \rightarrow abaab \rightarrow abaababa \rightarrow \dots \quad (3.63)$$

Assim como a seqüência de Fibonacci, todas as seqüências aperiódicas de que trataremos aqui serão binárias, ou seja, definidas sobre um alfabeto de duas letras.

Várias propriedades estatísticas de uma seqüência aperiódica estão contidas na sua matriz de substituição $\mathbf{M}$, definida, para uma seqüência binária, por

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \#_a(w_a) & \#_a(w_b) \\ \#_b(w_a) & \#_b(w_b) \end{pmatrix}, \quad (3.64)$$

em que $\#_\alpha(w_\beta)$ denota o número de letras α na palavra w_β ($\alpha, \beta \in \{a, b\}$). Para a seqüência de Fibonacci, temos

$$\mathbf{M}^{\text{fb}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.65)$$

É fácil ver que, partindo de uma única letra a , correspondente a um vetor $(1, 0)^t$, sua multiplicação repetida por $\mathbf{M}$ fornece um vetor cujas componentes são, respectivamente, os números $N_n^{(a)}$ e $N_n^{(b)}$ de letras a e b na seqüência produzida após n iterações da regra de substituição.

O maior autovalor da matriz de substituição, λ_+ , governa assintoticamente a forma como o comprimento N_n da seqüência varia com o número n de iterações, ou seja,

$$N_n \sim \lambda_+^n. \quad (3.66)$$

As componentes de seu autovetor correspondente, v_+ , fornecem diretamente a frequência $p_{a,b}$ de letras a, b na sequência infinita. O outro autovalor de $\mathbf{M}$, λ_- , está associado às *flutuações geométricas* geradas pela aperiodicidade. Definindo a flutuação g_n do número de letras a após n iterações, com relação ao valor esperado a partir da sequência infinita,

$$g_n = N_n^{(a)} - p_a N_n, \quad (3.67)$$

é possível mostrar que¹⁴

$$|g_n| \sim |\lambda_-|^n = N_n^\omega, \quad (3.68)$$

dando origem à definição do *expoente de flutuação geométrica* ω da sequência aperiódica,

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_-|}{\ln \lambda_+}. \quad (3.69)$$

O teorema de Perron–Frobenius garante que, se os elementos de alguma potência de $\mathbf{M}$ forem estritamente positivos (o que geralmente ocorre em sequências aperiódicas), os autovalores de $\mathbf{M}$ serão tais que $\lambda_+ > 1$ e $\lambda_+ > |\lambda_-|$. Como consequência, o expoente de flutuação é sempre menor que um. Se $|\lambda_-| < 1$, as flutuações geométricas são eliminadas ao longo das iterações, e $\omega < 0$; nesse caso, dizemos que a sequência possui flutuações limitadas. Se $|\lambda_-| > 1$, resultando em $\omega > 0$, as flutuações tornam-se ilimitadas à medida que cresce o comprimento da sequência. O caso $|\lambda_-| = 1$, que leva a $\omega = 0$, é marginal; o caráter das flutuações depende da ordem das letras na regra de substituição.

A generalização das definições da matriz de substituição e do expoente de flutuação para regras de substituição envolvendo mais de duas letras é natural e não apresenta dificuldades. Os papéis de λ_+ e λ_- passam a ser desempenhados pelos maiores autovalores (em módulo) da matriz de substituição.

O critério heurístico de Luck avalia os efeitos da presença de acoplamentos aperiódicos, caracterizados por um expoente de flutuação ω , sobre o comportamento crítico de um sistema físico [Luck 1993a]. Sendo ν o expoente do comprimento de correlação do sistema uniforme, e d o número de dimensões ao longo das quais a aperiodicidade está presente, o critério prevê que a aperiodicidade será relevante (ou seja, o comportamento crítico será modificado)

¹⁴Como $N_n^{(a)} + N_n^{(b)} = N_n$ e $p_a + p_b = 1$, a flutuação correspondente no número de letras b é simplesmente $-g_n$.

se o expoente ω exceder um certo valor crítico¹⁵

$$\omega_c = 1 - \frac{1}{d\nu}. \quad (3.70)$$

É importante ter em mente que o expoente de flutuação envolvido no critério é determinado não apenas pela sequência aperiódica, mas pela forma segundo a qual, com base na sequência, a aperiodicidade é implementada no sistema. Isso fica claro, por exemplo, no estudo de Haddad, Pinho e Salinas [2000] para o modelo de Potts aperiódico em redes hierárquicas. Outros fatores, mais sutis, podem também influir na definição apropriada de ω , como veremos adiante para o modelo XY . Em outras palavras, não existe uma relação rígida entre flutuações geométricas ilimitadas de uma sequência aperiódica e a relevância dessa aperiodicidade para o comportamento crítico de um sistema físico.

Apresentamos a seguir as sequências aperiódicas nas quais nos concentraremos neste trabalho.

- A sequência de Fibonacci, definida anteriormente, é provavelmente a mais conhecida sequência aperiódica. O comprimento da sequência, à medida que a regra é iterada, corresponde aos números de Fibonacci $\{1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, \dots\}$. Os autovalores de M^{fb} são $\lambda_+^{\text{fb}} = \tau$ e $\lambda_-^{\text{fb}} = -\tau^{-1}$, sendo $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$ a razão áurea. Segue da eq. (3.69) que $\omega^{\text{fb}} = -1$, de modo que a sequência de Fibonacci é caracterizada por flutuações geométricas limitadas.
- A sequência da razão de prata é definida pela regra de substituição

$$\rho^{\text{rp}} : \begin{cases} a \rightarrow w_a = aab \\ b \rightarrow w_b = a \end{cases} \quad (3.71)$$

e pela matriz de substituição

$$M^{\text{rp}} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

Os autovalores de M^{rp} são $\lambda_{\pm}^{\text{rp}} = 1 \pm \sqrt{2}$, levando também a $\omega^{\text{rp}} = -1$.

¹⁵É interessante notar que, no caso de acoplamentos aleatórios, caracterizados por $\omega = 1/2$ em função da lei dos grandes números, e levando em conta a relação de hiperescala $d\nu = 2 - \alpha$, o critério de Luck reproduz o célebre critério de Harris para a relevância de desordem [Harris 1974].

- A sequência de duplicação de período é definida pela regra

$$\rho^{\text{dp}} : \begin{cases} a \rightarrow w_a = ab \\ b \rightarrow w_b = aa \end{cases}, \quad (3.73)$$

cujas matriz de substituição é

$$\mathbf{M}^{\text{dp}} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.74)$$

com autovalores $\lambda_+^{\text{dp}} = 2$ e $\lambda_-^{\text{dp}} = -1$. Temos assim $\omega^{\text{dp}} = 0$, correspondendo a flutuações geométricas marginais.

- A sequência de triplicação de período é definida pela regra

$$\rho^{\text{tp}} : \begin{cases} a \rightarrow w_a = abb \\ b \rightarrow w_b = aaa \end{cases}, \quad (3.75)$$

cujas matriz de substituição é

$$\mathbf{M}^{\text{tp}} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

com autovalores $\lambda_+^{\text{tp}} = 3$ e $\lambda_-^{\text{tp}} = -2$. Portanto, $\omega^{\text{tp}} = \log_3 2 \simeq 0.631$, caracterizando flutuações geométricas ilimitadas.

- Finalmente, a sequência de Rudin–Shapiro, que envolve quatro letras, é definida por

$$\rho^{\text{rs}} : \begin{cases} a \rightarrow w_a = ac \\ b \rightarrow w_b = dc \\ c \rightarrow w_c = ab \\ d \rightarrow w_d = db \end{cases}. \quad (3.77)$$

Para obtermos uma sequência binária, aplicamos ρ^{rs} aos pares ac , dc , ab e db , e identificamos $c \equiv a$ e $d \equiv b$ para escrever a regra de substituição

$$\rho_2^{\text{rs}} : \begin{cases} aa \rightarrow w_{aa} = aaab \\ ab \rightarrow w_{ab} = aaba \\ ba \rightarrow w_{ba} = bbab \\ bb \rightarrow w_{bb} = bbba \end{cases}, \quad (3.78)$$

e a matriz

$$\mathbf{M}_2^{\text{rs}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.79)$$

cujos dois maiores autovalores são $\lambda_1^{\text{rs}} = 2$ e $\lambda_2^{\text{rs}} = \sqrt{2}$. Essa seqüência de Rudin-Shapiro “reduzida”, assim como a seqüência original, induz flutuações geométricas ilimitadas, caracterizadas pelo expoente de flutuação $\omega^{\text{rs}} = 1/2$, idêntico ao expoente de flutuação de acoplamentos aleatórios.

Na próxima subseção, apresentamos o tratamento de grupo de renormalização utilizado por Hermisson para o estudo do comportamento crítico do modelo XY .

3.4.2 O grupo de renormalização no espaço real

Consideremos o modelo XY descrito pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{j=1}^N (J_j^x S_j^x S_{j+1}^x + J_j^y S_j^y S_{j+1}^y). \quad (3.80)$$

As interações J_j^x e J_j^y são escolhidas, respectivamente, a partir de dois conjuntos de valores $\{J_{a_j}^x\}$ e $\{J_{a_j}^y\}$, em que as letras a_j satisfazem uma seqüência aperiódica. O método de grupo de renormalização utilizado por Hermisson consiste, inicialmente, em aplicar a transformação de Jordan-Wigner [Lieb *et al.* 1961] para obter as equações acopladas

$$\Lambda_k \psi_j^{(k)} = J_{j-1}^x \phi_{j-1}^{(k)} + J_j^y \phi_{j+1}^{(k)}, \quad (3.81)$$

$$\Lambda_k \phi_j^{(k)} = J_{j-1}^y \psi_{j-1}^{(k)} + J_j^x \psi_{j+1}^{(k)}, \quad (3.82)$$

em que Λ_k são os níveis de energia dos férmions. Definindo

$$\eta_{2j}^{(k)} = \phi_{2j}^{(k)}, \quad \eta_{2j-1}^{(k)} = \psi_{2j-1}^{(k)}, \quad (3.83)$$

$$\hat{\eta}_{2j}^{(k)} = \psi_{2j}^{(k)}, \quad \hat{\eta}_{2j-1}^{(k)} = \phi_{2j-1}^{(k)}, \quad (3.84)$$

as equações (3.81) e (3.82) desacoplam-se, tornando-se equivalentes àquelas obtidas de dois hamiltonianos *tight-binding* independentes,

$$H_1 = \sum_{j=1}^{N/2} (J_{2j}^x |2j\rangle \langle 2j+1| + J_{2j-1}^y |2j-1\rangle \langle 2j|) + \text{h.c.} \quad (3.85)$$

e

$$H_2 = \sum_{j=1}^{N/2} (J_{2j}^y |2j\rangle \langle 2j+1| + J_{2j-1}^x |2j-1\rangle \langle 2j|) + \text{h.c.}, \quad (3.86)$$

em que h.c. denota o hermitiano conjugado do termo anterior¹⁶. Os hamiltonianos estão relacionados pelo intercâmbio dos rótulos x e y , de modo que a análise pode se restringir, sem perda de generalidade, a H_1 .

Em seguida, com a definição das matrizes de espalhamento $\mathcal{S}_{j|j+1}$, dadas por

$$\mathcal{S}_{j|j+1} \equiv \begin{pmatrix} \Lambda/J_{2j-1}^y & -J_{2j}^x/J_{2j-1}^y \\ -J_{2j}^x/J_{2j+1}^y & \Lambda/J_{2j+1}^y \end{pmatrix}, \quad (3.87)$$

as equações (3.81) e (3.82) são reescritas na forma¹⁷

$$\begin{pmatrix} \eta_{2j-1} \\ \eta_{2j+2} \end{pmatrix} = \mathcal{S}_{j|j+1} \begin{pmatrix} \eta_{2j} \\ \eta_{2j+1} \end{pmatrix}. \quad (3.88)$$

Com um pouco de álgebra, é possível mostrar que essas equações levam à forma iterada

$$\begin{pmatrix} \eta_{2j-1} \\ \eta_{2l} \end{pmatrix} = \mathcal{S}_{j|l} \begin{pmatrix} \eta_{2j} \\ \eta_{2l-1} \end{pmatrix}, \quad (3.89)$$

para $j < l$, desde que as matrizes $\mathcal{S}_{j|l}$ transformem-se como

$$\mathcal{S}_{j|l} = \mathcal{S}_{j|j+1} * \mathcal{S}_{j+1|j+2} * \cdots * \mathcal{S}_{l-1|l}, \quad (3.90)$$

com o produto $*$ definido pela expressão

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} a_2 & b_2 \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & d_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{1 - d_1 a_2} \begin{pmatrix} b_1 c_1 a_2 & b_1 b_2 \\ c_1 c_2 & d_1 b_2 c_2 \end{pmatrix}. \quad (3.91)$$

A transformação de renormalização consiste em “desinflar” a seqüência aperiódica de ligações através de produtos $*$ dos blocos apropriados de matrizes $\mathcal{S}$. Para tanto, como a matriz $\mathcal{S}_{j|j+1}$ depende de três ligações consecutivas, é preciso modificar a regra original de substituição para considerar substituições de *pares* de letras¹⁸. Ou seja, no caso de seqüências binárias, a partir de uma regra original,

$$\rho : \alpha \rightarrow w_\alpha \quad (3.92)$$

¹⁶O mesmo resultado decorre da aplicação da transformação de Jordan–Wigner a cada um dos modelos de Ising quânticos desacoplados da eq. (3.7).

¹⁷Suprimimos os índices (k) para simplificar a notação.

¹⁸Que não seja necessário considerar uma regra para triplas de ligações é consequência do fato de que as matrizes $\mathcal{S}_{j|j+1}$ e $\mathcal{S}_{j+1|j+2}$, cujo produto $*$ fornece a matriz $\mathcal{S}_{j|j+2}$, possuem uma ligação em comum, reduzindo a dois o número de ligações “independentes” em cada matriz $\mathcal{S}$.

com $\alpha \in \{a, b\}$, define-se uma nova regra¹⁹

$$\rho_2 : (\alpha\beta) \rightarrow w_{\alpha\beta} \equiv w_\alpha w_\beta,$$

com uma matriz de substituição

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \#_{aa}(w_{aa}) & \#_{aa}(w_{ab}) & \#_{aa}(w_{ba}) & \#_{aa}(w_{bb}) \\ \#_{ab}(w_{aa}) & \#_{ab}(w_{ab}) & \#_{ab}(w_{ba}) & \#_{ab}(w_{bb}) \\ \#_{ba}(w_{aa}) & \#_{ba}(w_{ab}) & \#_{ba}(w_{ba}) & \#_{ba}(w_{bb}) \\ \#_{bb}(w_{aa}) & \#_{bb}(w_{ab}) & \#_{bb}(w_{ba}) & \#_{bb}(w_{bb}) \end{pmatrix}. \quad (3.93)$$

Denotando por $\mathbf{V}_i$ os autovetores de $\mathbf{M}_2$, e por λ_i seus autovalores, os elementos $p_{\alpha\beta}$ do autovetor $\mathbf{V}_1$, correspondente ao maior autovalor λ_1 , fornecem as frequências dos pares de letras na seqüência infinita. É importante notar que a nova regra ρ_2 envolve pares de letras que não se sobrepõem. Assim, caso algum dos possíveis pares de letras não ocorra na seqüência infinita, a ordem da matriz $\mathbf{M}_2$ deve ser reduzida. Por exemplo, na seqüência de duplicação de período, definida pela regra

$$\rho^{\text{dp}} : \begin{cases} a \rightarrow ab \\ b \rightarrow aa \end{cases}, \quad (3.94)$$

a regra dos pares é

$$\rho_2^{\text{dp}} : \begin{cases} aa \rightarrow (ab)(ab) \\ ab \rightarrow (ab)(aa) \end{cases}, \quad (3.95)$$

já que as combinações ba e bb não ocorrem. Dessa forma, a matriz $\mathbf{M}_2^{\text{dp}}$ fica reduzida a

$$\mathbf{M}_2^{\text{dp}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.96)$$

Modificando a regra de substituição original para satisfazer as condições

$$\begin{cases} a \rightarrow w_a = aw'_a \\ b \rightarrow w_b = bw'_b \end{cases},$$

o que sempre pode ser feito sem alterar a seqüência infinita (por exemplo, substituindo a regra por seu quadrado, ou aplicando operações de inversão global das palavras), Hermisson foi capaz de estabelecer relações de recorrência consistentes para as matrizes $\mathcal{S}$. Na maioria dos casos, essas relações de recorrência envolvem a obtenção de uma matriz renormalizada $\tilde{\mathcal{S}}_{\alpha\beta\gamma}$ para

¹⁹Existem seqüências aperiódicas para as quais uma regra de substituição de pares não pode ser formulada. No entanto, é possível tratá-las utilizando um conjunto de subsequências de comprimento mínimo [Hermisson 2000].

cada par de letras $(\alpha\beta)$ da sequência, por meio do produto $*$ das matrizes $\mathcal{S}$ correspondentes aos pares de letras na palavra $w_{\alpha\beta}$; para detalhes, veja Hermisson [2000]. No centro da banda ($\Lambda = 0$), onde ocorre o comportamento crítico do modelo XY , a equação de fluxos da renormalização é dada por

$$\tilde{\mu} = M_2^t \mu. \quad (3.97)$$

em que as componentes dos acoplamentos reduzidos μ são

$$\mu_{\alpha\beta} \equiv \ln \frac{J_{\alpha}^x}{J_{\beta}^y}. \quad (3.98)$$

A partir de combinações lineares dos $\mu_{\alpha\beta}$ podemos definir o parâmetro

$$r \equiv \ln \frac{J_a^x J_a^y}{J_b^x J_b^y}, \quad (3.99)$$

que mede a intensidade da aperiodicidade isotrópica, e os parâmetros associados à aperiodicidade anisotrópica

$$\Delta_a = \ln \frac{J_a^x}{J_a^y} \quad \text{e} \quad \Delta_b = \ln \frac{J_b^x}{J_b^y}. \quad (3.100)$$

O ponto fixo de Onsager corresponde à solução trivial $\mu = 0$. Fica claro que os acoplamentos reduzidos representam os desvios locais em relação à criticalidade. Os campos de escala u_i e os autovalores do grupo de renormalização y_i decorrem dos autovalores e autovetores de M_2 ,

$$u_i = \mu \cdot V_i, \quad y_i = \frac{\ln |\lambda_i|}{\ln \lambda_1}. \quad (3.101)$$

Na ausência de aperiodicidade, o anulamento do campo de escala principal, u_1 , associado ao autovalor do grupo de renormalização $y_1 = 1$, controla a criticalidade do modelo. A condição crítica é

$$u_1 = \sum_{(\alpha\beta)} p_{(\alpha\beta)} \mu_{\alpha\beta} = [\ln J_{2j}^x]_{\text{med}} - [\ln J_{2j-1}^y]_{\text{med}} = 0, \quad (3.102)$$

em que $[\dots]_{\text{med}}$ denota a média sobre todas as ligações (pares num caso, ímpares no outro). A análise do hamiltoniano H_2 leva a uma condição de criticalidade análoga²⁰, expressa por

$$[\ln J_{2j}^y]_{\text{med}} - [\ln J_{2j-1}^x]_{\text{med}} = 0. \quad (3.103)$$

²⁰Como o comportamento crítico do modelo XY está relacionado à existência de níveis de energia $\Lambda \rightarrow 0$, basta que uma das condições seja satisfeita para que se estabeleça a criticalidade.

Combinando as duas expressões anteriores, obtemos a condição geral de criticalidade para o modelo XY , dada por

$$\delta = \min \{ |\delta_\Delta + \delta_r|, |\delta_\Delta - \delta_r| \} = 0, \quad (3.104)$$

com

$$\delta_\Delta \equiv [\ln J_j^x]_{\text{med}} - [\ln J_j^y]_{\text{med}} \quad (3.105)$$

e

$$\delta_r \equiv [\ln (J_{2j}^x J_{2j}^y)]_{\text{med}} - [\ln (J_{2j-1}^x J_{2j-1}^y)]_{\text{med}}. \quad (3.106)$$

Da equação (3.7), vemos que a condição $\delta_\Delta = 0$ é equivalente à famosa condição de criticalidade do modelo de Ising quântico,

$$[\ln J_j]_{\text{med}} - [\ln h_j]_{\text{med}} = 0, \quad (3.107)$$

obtida originalmente por Pfeuty [1979]. Por outro lado, para o modelo XX (em que $J_j^x = J_j^y \equiv J_j$), a eq. (3.106) deixa claro que a dimerização elimina a criticalidade do modelo, ao provocar a abertura de um *gap* de excitações.

Na presença de aperiodicidade, surgem contribuições não-nulas na direção dos demais campos de escala. Entretanto, para seqüências binárias, em que apenas três razões entre as interações podem ser definidas (por exemplo, J_b^x/J_a^x , J_a^y/J_a^x e J_b^y/J_a^x), os quatro campos de escala não são todos independentes, e alguns deles podem se anular juntamente com u_1 . Sendo assim, é preciso definir apropriadamente o expoente de flutuação da seqüência de acoplamentos reduzidos. Esse expoente, que denotamos por ω_μ , relaciona-se a λ_2 , o segundo maior autovalor (em módulo) da matriz $\mathbf{M}_2$, desde que o campo de escala associado u_2 não se anule para uma escolha genérica de acoplamentos críticos²¹. Explicitamente,

$$\omega_\mu = y_2 = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1}.$$

Note que, se u_2 é não-nulo quando $u_1 = 0$, ω_μ é o expoente de flutuação associado à seqüência de pares definida pela regra de substituição ρ_2 . O campo de escala u_2 (não-nulo) será relevante desde que $|\lambda_2| > 1$, o que corresponde a $\omega_\mu > 0$. Como a transição de anisotropia do modelo XY em $d = 1$ é caracterizada por $\nu = 1$, já que pertence à classe de universalidade de Onsager, o critério de Luck é satisfeito desde que as flutuações da seqüência sejam medidas com relação aos acoplamentos reduzidos. Vamos ver que, em

²¹Essa condição sobre u_2 é importante e pode levar a que uma seqüência aperiódica relevante para o comportamento crítico de um modelo XY anisotrópico revele-se irrelevante para o modelo XX , como veremos na próxima subseção.

geral, ω_μ difere de ω , o expoente de flutuação da sequência de interações original.

A análise de Hermisson para o escalamento crítico do espectro de férmions leva, nos casos de aperiodicidade irrelevante ou marginal, à forma

$$\Lambda \sim \delta^z, \quad \delta \rightarrow 0, \quad (3.108)$$

válida nas vizinhanças da criticalidade. O expoente z , dado por

$$z = \frac{\ln(\lambda_{M+} \lambda_{M-})}{2 \ln \lambda_+}, \quad (3.109)$$

relaciona-se ao maior autovalor λ_+ da matriz de substituição da sequência original, bem como aos maiores autovalores $\lambda_{M^\pm}$ das matrizes $\mathbf{M}^\pm$ definidas por

$$M_{\alpha\beta, \alpha'\beta'}^\pm = \exp(\mp 2\mu_{\alpha\beta}) \sum_{k=1}^{|w_{\alpha\beta}|/2} \delta_{w_{\alpha\beta}^{(2k-1)} w_{\alpha\beta}^{(2k)}, \alpha'\beta'} \prod_{\ell=1}^k \exp\left(\pm 2\mu_{w_{\alpha\beta}^{(2\ell-1)} w_{\alpha\beta}^{(2\ell)}}\right), \quad (3.110)$$

em que $|w_{\alpha\beta}|$ denota o número de letras da palavra $w_{\alpha\beta}$, $w_{\alpha\beta}^{(k)}$ denota a k -ésima letra da palavra $w_{\alpha\beta}$, e δ indica um delta de Kronecker. Nos casos de aperiodicidade irrelevante, é possível mostrar que $z = 1$. Os casos marginais ($\omega_\mu = 0$) levam a $1 < z < \infty$, com o expoente variando continuamente com a razão entre as interações [Hermisson 2000]. Para aperiodicidade relevante, a divergência das flutuações dos acoplamentos reduzidos leva a um escalamento exponencial dos níveis de energia mais baixos, na forma de tamanho finito

$$\Lambda_k \sim \exp\{-c(N/k)^{\omega_\mu}\}. \quad (3.111)$$

Do escalamento crítico do espectro decorrem as formas de escala (para $\Lambda \rightarrow 0^+$) da densidade integrada de estados nos casos de aperiodicidade irrelevante ou marginal,

$$H(\Lambda) \sim \Lambda^{1/z} g(\ln \Lambda / \ln \lambda_+), \quad (3.112)$$

em que g é uma função de período unitário, e nos casos de aperiodicidade relevante,

$$H(\Lambda) \sim |\ln \Lambda|^{-1/\omega_\mu}. \quad (3.113)$$

A partir dessas formas de escala e das equações (3.35) e (3.34), escritas no limite termodinâmico como

$$c_h = \frac{1}{4} \beta^2 \int dH(\Lambda) \Lambda^2 \text{sech}^2\left(\frac{1}{2} \beta \Lambda\right) \quad (3.114)$$

e

$$\chi^{zz} = \frac{1}{4}\beta \int dH(\Lambda) \operatorname{sech}^2\left(\frac{1}{2}\beta\Lambda\right), \quad (3.115)$$

podemos derivar o comportamento de baixas temperaturas do calor específico e da suscetibilidade a campo nulo. Para $\beta \gg 1$, as expressões acima são dominadas pela região de $\Lambda \ll \beta^{-1}$, de modo que obtemos

$$c_h \sim T^{1/z} G(\ln T / \ln \lambda_+), \quad (3.116)$$

$$\chi^{zz} \sim T^{1/z-1} G'(\ln T / \ln \lambda_+), \quad (3.117)$$

(sendo G novamente uma função de período unitário) para aperiodicidade irrelevante ou marginal, e

$$c_h \sim \frac{1}{|\ln T|^{1+1/\omega_\mu}}, \quad (3.118)$$

$$\chi^{zz} \sim \frac{1}{T |\ln T|^{1/\omega_\mu}}, \quad (3.119)$$

para aperiodicidade relevante. É interessante notar que, no caso em que $\omega_\mu = 1/2$, correspondente ao expoente de flutuação de desordem descorrelacionada, as expressões (3.118) e (3.119) são idênticas às previsões para a fase de singleto aleatório, eqs. (3.53) e (3.51).

A magnetização induzida por um campo transversal h em $T = 0$ é dada pela densidade integrada de estados de $\Lambda = 0$ a $\Lambda = h$, e portanto sua forma de escala para pequenos campos é

$$m(h) \sim h^{1/z} g(\ln h / \ln \lambda_+), \quad (3.120)$$

para aperiodicidade irrelevante ou marginal, e

$$m(h) \sim |\ln h|^{-1/\omega_\mu}, \quad (3.121)$$

para aperiodicidade relevante.

3.4.3 Resultados numéricos

Utilizando a técnica de férmions livres descrita na seção 3.2, realizamos cálculos numéricos para o modelo XX com interações escolhidas segundo diversas seqüências aperiódicas. Apresentamos a seguir os resultados que obtivemos, separando-os nos casos em que a aperiodicidade é irrelevante, marginal ou relevante. Como mencionamos na subseção anterior, a relevância da aperiodicidade é dada não pelas flutuações da seqüência, mas pelas flutuações dos acoplamentos reduzidos, equivalentes às flutuações de pares de letras que não se sobrepõem.

Figura 3.14. Dependência térmica do calor específico do modelo XX com interações distribuídas segundo a sequência de triplicação de período. Para ambas as razões entre os dois valores das interações, J_a e J_b , observamos um decaimento linear em baixas temperaturas, em concordância com a previsão de que a aperiodicidade é irrelevante.

Aperiodicidade irrelevante

A matriz de substituição de pares da sequência de triplicação de período, cuja regra de substituição é dada pela eq. (3.75), corresponde a

$$M_2^{\text{tp}} = \begin{pmatrix} 6 & 3 & 3 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad (3.122)$$

com autovalores $\lambda_1 = 9$, $\lambda_2 = 4$, $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$, conduzindo a um expoente de flutuação $\omega_\mu^{\text{tp}} = \log_3 2$ e a flutuações geométricas ilimitadas. Para um modelo XY anisotrópico, utilizando as definições das eqs. (3.99) e (3.100), os campos de escala são

$$\begin{cases} u_1^{\text{tp}} = 3\Delta_a + 2\Delta_b \\ u_2^{\text{tp}} = -2(\Delta_a - \Delta_b) \\ u_3^{\text{tp}} = r \\ u_4^{\text{tp}} = r \end{cases}. \quad (3.123)$$

Figura 3.15. Correlações médias de pares no estado fundamental da cadeia XX com interações $J_a/J_b = 1/4$ distribuídas segundo a sequência de triplicação de período. O cálculo foi realizado para uma cadeia com $N = 3^7 = 2187$ sítios. As correlações decaem algebricamente em longas distâncias, com expoentes compatíveis com os resultados do modelo uniforme, $\eta_x = 1/2$ e $\eta_z = 2$.

A condição de criticalidade é, portanto,

$$u_1 = 0 \Rightarrow \Delta_b = -\frac{3}{2}\Delta_a,$$

e, em geral, temos $u_2 = -5\Delta_a \neq 0$ no ponto crítico, de modo que a aperiodicidade é relevante. Entretanto, no modelo XX , como $\Delta_a = \Delta_b = 0$, o campo de escala u_2 também se anula. É necessário considerar então os demais campos de escala para verificar a relevância da aperiodicidade. Ocorre que, como $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$, o que conduz a um expoente de flutuação

$$(\omega'_\mu)^{\text{tp}} = \frac{\ln \lambda_3}{\ln \lambda_1} = -\infty, \quad (3.124)$$

a aperiodicidade isotrópica é totalmente irrelevante.

Confirmamos essa previsão calculando várias propriedades da cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de triplicação de período. Em todos os casos, obtivemos resultados qualitativamente idênticos àqueles esperados para o modelo uniforme, independentemente da razão entre as interações J_a e J_b . A suscetibilidade transversa a campo nulo tende a um valor constante em baixas temperaturas, como previsto pela eq. (3.117) com

Figura 3.16. Correlação média de pares $C^{xx}(r)$ no estado fundamental da cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de Fibonacci. O expoente do decaimento varia com a razão J_a/J_b entre as interações.

$z = 1$. Da mesma forma, o calor específico comporta-se de acordo com a eq. (3.116), variando linearmente com a temperatura para $T \rightarrow 0$, como se vê na figura 3.14. A magnetização induzida em $T = 0$ também varia linearmente com o campo. As correlações médias de pares no estado fundamental decaem algebricamente com expoentes compatíveis com aqueles da cadeia uniforme²², $\eta_x = 1/2$ e $\eta_z = 2$, como mostrado na figura 3.15.

Aperiodicidade marginal

A regra de substituição de pares da sequência de Fibonacci leva à matriz de substituição

$$\mathbf{M}_2^{\text{fb}} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 4 \\ 8 & 7 & 6 \\ 8 & 6 & 7 \end{pmatrix}, \quad (3.125)$$

já que o par (bb) não está presente. Os autovalores de $\mathbf{M}_2^{\text{fb}}$ são $\lambda_1^{\text{fb}} = 9 + 4\sqrt{5}$, $\lambda_2^{\text{fb}} = 1$ e $\lambda_3^{\text{fb}} = 9 - 4\sqrt{5}$, que levam a $\omega_\mu^{\text{fb}} = 0$. Os campos de escala para o

²²Nos cálculos das correlações nas cadeias aperiódicas, não conseguimos utilizar o método de extrapolação descrito na subseção 3.3.2, provavelmente em virtude do caráter ilimitado das flutuações geométricas induzidas pela aperiodicidade. Tentamos contornar essa dificuldade utilizando os maiores tamanhos de cadeias possíveis, levando em conta o tempo de computação associado.

Figura 3.17. Correlação típica de pares $C_{\text{tip}}^{xx}(r)$ no estado fundamental da cadeia XX com interações distribuídas segundo a seqüência de Fibonacci. Verificamos um decaimento algébrico, caracterizado por expoentes muito próximos daqueles obtidos para as correlações médias (veja a figura anterior).

modelo XX são

$$\begin{cases} u_1^{\text{fb}} = 0 \\ u_2^{\text{fb}} = 2 \ln(J_a/J_b) \\ u_3^{\text{fb}} = 0 \end{cases} ,$$

de modo que a aperiódicidade isotrópica é de fato marginal. A variação do expoente z com a razão entre as interações foi prevista por Luck e Nieuwenhuizen [1986], utilizando uma técnica de grupo de renormalização distinta daquela utilizada por Hermisson, e restrita à seqüência de Fibonacci. Verificamos numericamente a dependência do expoente η_x com a razão entre as interações, como mostra a figura 3.16. A dependência das correlações típicas $C_{\text{tip}}^{xx}(r)$ com a distância, mostrada na figura 3.17, indica que não há distinção apreciável entre comportamento típico e médio nesse caso.

A matriz de substituição de pares da seqüência da razão de prata é

$$\mathbf{M}_2^{\text{rp}} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (3.126)$$

já que aqui também o par (bb) não ocorre. Os autovalores de $\mathbf{M}_2^{\text{rp}}$ são $\lambda_1^{\text{rp}} = 3 + 2\sqrt{2}$, $\lambda_2^{\text{rp}} = 1$ e $\lambda_3^{\text{rp}} = 3 - 2\sqrt{2}$, levando novamente a aperiódicidade

Figura 3.18. Dependência térmica do calor específico do modelo XX com interações distribuídas segundo a sequência da razão de prata. Os expoentes obtidos pelo ajuste dos resultados numéricos em baixas temperaturas apresentam excelente concordância com as previsões da eq. (3.127), correspondentes a $1/z = 0.52346$ e $1/z = 0.84133$ para $J_a/J_b = 1/5$ e $J_a/J_b = 1/2$, respectivamente. Os cálculos numéricos foram realizados em cadeias abertas contendo $N = 47321$ ligações.

Figura 3.19. Dependência térmica da suscetibilidade transversa a campo nulo do modelo XX com interações distribuídas segundo a sequência da razão de prata. Novamente, os expoentes obtidos pelo ajuste dos resultados em baixas temperaturas concordam com as previsões da eq. (3.127).

isotrópica marginal. O expoente z^{rp} pode ser obtido da eq. (3.109) e é dado por [Hermisson 2000]

$$z^{\text{rp}} = \frac{\ln \Theta}{\ln(1 + \sqrt{2})}, \quad (3.127)$$

em que

$$\Theta = \frac{1}{2} \left(\zeta + \sqrt{\zeta^2 + 4} \right), \quad (3.128)$$

e

$$\zeta = \frac{J_a}{J_b} + \frac{J_b}{J_a}. \quad (3.129)$$

Nossos resultados numéricos estão inteiramente de acordo com essa previsão para z^{rp} . A partir de cálculos do calor específico e da suscetibilidade para dois valores distintos da razão J_a/J_b , mostrados nas figuras 3.18 e 3.19, obtemos valores para z^{rp} compatíveis tanto entre si quanto com a eq. (3.127). Os resultados para a magnetização induzida em $T = 0$ (figura 3.20) concordam não somente com as previsões para o expoente z , mas também com previsões obtidas utilizando técnicas de bosonização [Arlego *et al.* 2001], indicando que os valores de magnetização correspondentes aos platôs são determinados pela topologia da sequência, e independem portanto da razão entre as interações²³.

²³A existência dos platôs de magnetização e das oscilações log-periódicas nas funções

Figura 3.20. Magnetização induzida por um campo transversal em $T = 0$ para o modelo XX com interações distribuídas segundo a sequência da razão de prata, para duas razões distintas entre as interações J_a e J_b . As curvas obtidas são escadas do diabo, cuja inclinação depende de J_a/J_b , sendo dada pelo inverso do expoente z ; entretanto, os valores de magnetização correspondentes aos platôs dependem apenas da topologia da sequência.

Assim como no caso da sequência de Fibonacci, as correlações de pares C^{xx} e C_{tip}^{xx} comportam-se de forma essencialmente idêntica, com expoentes de decaimento que variam com a razão J_a/J_b .

Aperiodicidade relevante

Para a cadeia XX com interações definidas segundo a sequência de Rudin-Shapiro reduzida a duas letras, a matriz de substituição de pares, eq. (3.79), leva a autovalores e campos de escala dados por

$$\begin{cases} \lambda_1^{\text{rs}} = 2 & u_1^{\text{rs}} = 0 \\ \lambda_2^{\text{rs}} = \sqrt{2} & u_2^{\text{rs}} = 2(\sqrt{2} - 1) \ln(J_a/J_b) \\ \lambda_3^{\text{rs}} = 0 & u_1^{\text{rs}} = 0 \\ \lambda_4^{\text{rs}} = 0 & u_1^{\text{rs}} = -2(\sqrt{2} + 1) \ln(J_a/J_b) \end{cases}, \quad (3.130)$$

de modo que o expoente de flutuação é $\omega_\mu^{\text{rs}} = 1/2$ e a aperiodicidade é relevante. Destacamos que ω_μ^{rs} é igual ao expoente de flutuação correspondente a

termodinâmicas é reflexo do caráter fractal do espectro de excitações, derivado por sua vez da auto-similaridade das sequências aperiódicas.

Figura 3.21. Inverso da raiz quadrada da magnetização induzida como função do campo em $T = 0$ na cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de Rudin–Shapiro. Os extremos dos platôs de magnetização principais exibem um escalamento logarítmico com o campo, em concordância com a previsão da eq. (3.121).

acoplamentos aleatórios. Assim, a sequência de Rudin–Shapiro é apropriada para uma comparação dos efeitos induzidos por desordem e aperiodicidade.

Vejamos primeiramente as propriedades relacionadas ao espectro de férmions. O escalamento dos níveis de energia nas proximidades do centro da banda deve seguir a dependência exponencial²⁴ da eq. (3.111), com $\omega_\mu = 1/2$. Nossos resultados numéricos para a magnetização induzida em $T = 0$ concordam com essa previsão, expressa na forma da eq. (3.121), como mostra a figura 3.21. Os extremos dos platôs de magnetização principais, correspondentes aos níveis de energia imediatamente acima dos maiores *gaps*, satisfazem a forma de escala esperada. No entanto, não fomos capazes de observar claramente a dependência térmica prevista nas eqs. (3.118) e (3.119) para o calor específico e a suscetibilidade, mesmo utilizando cadeias com tamanhos da ordem de $N = 10^6$. Acreditamos que isso se deva ao escalamento exponencial do espectro fermiônico, que exigiria cadeias ainda maiores para que sua estrutura fosse corretamente captada. Entretanto, instabilidades numéricas nos algoritmos de diagonalização dificultam esses cálculos.

²⁴Isso corresponde a um expoente $z = \infty$, caracterizando o que se chama de dinâmica ativada.

Figura 3.22. Correlação média de pares $C^{xx}(r)$ no estado fundamental da cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de Rudin-Shapiro. Os ajustes para o comportamento de longas distâncias são compatíveis com um expoente de decaimento constante para as várias razões entre as interações. No caso $J_a/J_b = 3/4$, notamos um claro cruzamento entre um decaimento com expoente $\eta_x = 1/2$, característico da cadeia uniforme, e um decaimento mais rápido, com o aumento da distância entre os spins.

Figura 3.23. Distribuição do logaritmo das correlações $C^{xx}(r)$, reescaladas por $\sqrt{r}$, para a cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de Rudin–Shapiro. Os resultados obtidos para cadeias de tamanhos $N = 64$, 128 e 256, com $r = N/2$, parecem colapsar numa mesma distribuição assintótica.

As correlações de pares $C^{xx}(r)$ apresentam um comportamento claramente distinto do caso uniforme, mas que aparentemente independe da razão J_a/J_b , como vemos na figura 3.22. O expoente de decaimento situa-se em torno de $\eta_x = 5/4$, em contraste com a previsão $\eta_x = 2$ para a fase de singleto aleatório. Por outro lado, para cadeias de vários tamanhos, as distribuições do logaritmo das correlações, reescaladas por $\sqrt{r}$, parecem colapsar numa mesma distribuição assintótica, como mostrado nas figuras 3.23, 3.24 e 3.25. Nesses cálculos, para obter uma melhor estatística, recorremos a um método utilizado por Iglói, Karevski e Rieger [1998] no estudo da cadeia de Ising quântica com interações aperiódicas. O método consiste em fixar um tamanho de cadeia N e tomar médias sobre (em princípio) todas as subsequências distintas de tamanho N contidas na sequência aperiódica infinita. Para a sequência de Rudin–Shapiro, esse número de subsequências é inferior a $16N$.

Utilizando o mesmo método, calculamos também o comportamento das correlações de corda $O^{xx}(r)$, separando as contribuições O_i^{xx} e O_p^{xx} , definidas pelas eqs. (3.30) e (3.31). Como já mencionamos anteriormente, o fato de as ligações fortes na fase de singleto aleatório não se cruzarem induz uma tendência à anticorrelação entre O_i^{xx} e O_p^{xx} . Observamos essa anticorrela-

Figura 3.24. Distribuição do logaritmo das correlações $C^{zz}(r)$, reescaladas por $\sqrt{r}$, para a cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de Rudin–Shapiro. Os resultados obtidos para cadeias de tamanhos $N = 64$, 128 e 256, com $r = N/2$, parecem colapsar numa mesma distribuição assintótica.

Figura 3.25. Distribuição do logaritmo das correlações $O^{zz}(r)$, reescaladas por $\sqrt{r}$, para a cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de Rudin–Shapiro. Os resultados obtidos para cadeias de tamanhos $N = 64$, 128 e 256, com $r = N/2$, parecem colapsar numa mesma distribuição assintótica.

Figura 3.26. Gráfico de O_p^{xx} contra O_i^{xx} para a cadeia XX com interações distribuídas segundo a sequência de Rudin-Shapiro, evidenciando a anticorrelação entre as duas grandezas. Os cálculos utilizaram cadeias com $N = 256$ sítios, e as correlações foram calculadas entre spins separados por distâncias correspondentes a potências de 2 entre $r = 4$ e $r = 128$.

ção na cadeia XX com interações seguindo a sequência de Rudin-Shapiro²⁵, como evidenciado na figura 3.26. Acreditamos que esse comportamento, aliado ao aparente colapso das distribuições das correlações típicas, configuram forte evidência de que a aperiodicidade induz uma fase semelhante à fase de singleto aleatório.

Por fim, consideramos a sequência de duplicação de período, definida pela regra da eq. (3.73). Até aqui, todas as sequências aperiódicas que utilizamos possuem a propriedade de que o valor médio das ligações nas posições ímpares é igual ao valor médio nas posições pares²⁶. Como não gera pares (ba), a sequência de duplicação de período carece dessa propriedade, exibindo uma *dimerização média*. Para a cadeia XX , os campos de escala associados são

$$\begin{cases} u_1^{\text{dp}} = 2 \ln(J_a/J_b) \\ u_2^{\text{dp}} = \ln(J_a/J_b) \end{cases}, \quad (3.131)$$

²⁵Um efeito semelhante também pode ser observado para aperiodicidade marginal. No entanto, comparando as correlações correspondentes às mesmas distâncias, a razão $\min\{O_i^{xx}/O_p^{xx}, O_p^{xx}/O_i^{xx}\}$ nesse caso é tipicamente três ordens de grandeza superior àquela observada para a sequência de Rudin-Shapiro. Além disso, não se verifica o colapso das distribuições dos logaritmos das correlações, reescaladas pela raiz quadrada da distância.

²⁶Isso pode ser comprovado calculando o autovetor correspondente ao maior autovalor da matriz de substituição de pares. Em todas as sequências anteriores, obtemos $p_{ab} = p_{ba}$.

e o modelo é crítico apenas no caso uniforme ($J_a = J_b$). Na presença de aperiódicidade, abre-se um *gap* no centro da banda, e as correlações caracterizam-se por um decaimento exponencial, com um comprimento de correlação que varia com a razão J_a/J_b , divergindo no limite uniforme. Esse resultado concorda com aqueles obtidos para o modelo de Ising quântico aperiódico [Iglói *et al.* 1998] quanto à ausência de uma fase de Griffiths nas vizinhanças da criticalidade. Tal fato contrasta com a presença de uma fase de Griffiths no modelo XX aleatório dimerizado [Hyman *et al.* 1996], no qual a desordem forte induz um decaimento exponencial das correlações, mas impede a abertura de um *gap* de excitações; como consequência, embora o sistema não exiba ordem de longo alcance, a suscetibilidade diverge em toda uma fase localizada em torno do ponto crítico.

3.5 Conclusões

Neste capítulo, estudamos efeitos de interações aleatórias ou aperiódicas sobre o comportamento da cadeia XX quântica em baixas temperaturas. Através de cálculos numéricos, baseados no mapeamento do sistema num modelo de férmions livres, obtivemos resultados para várias distribuições de desordem e seqüências aperiódicas.

Para interações aleatórias, de maneira geral, nossos resultados reforçam a hipótese de universalidade da fase de singleto aleatório, prevista pelo tratamento de grupo de renormalização de Fisher. Essa fase caracteriza-se pela existência de raros pares de spins, acoplados em estados singleto, que dominam o comportamento médio das correlações. Conseguimos confirmar as previsões de grupo de renormalização para as formas de escala das funções termodinâmicas e de algumas correlações. Mesmo nos casos em que essa confirmação não foi observada, verificamos um claro desvio em relação ao comportamento do modelo uniforme.

Para interações aperiódicas, obtivemos resultados em concordância com as previsões de grupo de renormalização de Hermisson, quanto às propriedades termodinâmicas e aos expoentes críticos dinâmicos nos casos de aperiodicidade irrelevante e marginal. Observamos decaimentos das correlações com expoentes idênticos aos do modelo uniforme, para aperiodicidade irrelevante, e expoentes dependentes da razão entre as interações, para aperiodicidade marginal. No caso de aperiodicidade relevante, obtivemos comportamentos das correlações compatíveis com uma mudança na criticalidade do modelo, e propriedades assemelhadas àquelas da fase de singleto aleatório.

Pretendemos, em breve, estender os cálculos do modelo desordenado a maiores tamanhos de cadeias, para reforçar as evidências que já obtivemos.

Pretendemos também efetuar cálculos numéricos baseados no processo de decimação perturbativo de Ma, Dasgupta e Hu, adaptados à topologia das seqüências aperiódicas, para verificar, através do fluxo da distribuição das interações efetivas, até que ponto a fase induzida por aperiodicidade relevante identifica-se com a fase de singleto aleatório.

Apêndice A

Cadeia de Ising de spin S com campos alternados

Consideramos aqui o caso puro do modelo introduzido no capítulo 1. No limite termodinâmico, como se torna desnecessária a distinção entre segmentos de tamanhos pares e ímpares, a energia livre por spin do modelo com interações somente entre primeiros vizinhos é dada simplesmente por

$$f_{pv}(h_1, h_2, T) = -\frac{1}{2}k_B T \ln \lambda_{\max}, \quad (\text{A.1})$$

sendo $\lambda_{\max}$ o maior autovalor da matriz $\mathbf{T}$ definida na seção 1.2. Na presença de interações de Curie-Weiss, de acordo com os resultados da seção 1.3, as magnetizações de sub-rede, m_1 e m_2 , são aquelas que minimizam o funcional

$$\Phi(h_1, h_2, T; m_1, m_2) = f_{pv}(\tilde{h}_1, \tilde{h}_2, T) + J_{cw}(m_1^2 + 2\gamma m_1 m_2 + m_2^2), \quad (\text{A.2})$$

com os campos efetivos $\tilde{h}_1$ e $\tilde{h}_2$ dados por

$$\tilde{h}_1 = h_1 + 2J_{cw}(m_1 + \gamma m_2), \quad (\text{A.3})$$

$$\tilde{h}_2 = h_2 + 2J_{cw}(m_2 + \gamma m_1). \quad (\text{A.4})$$

A suscetibilidade ferromagnética a campo nulo é obtida impondo $h_1 = h_2 = h$ e calculando

$$\chi_0 = - \left. \frac{\partial^2 f_{pv}(\tilde{h}_1, \tilde{h}_2, T)}{\partial h^2} \right|_{h=0, m_1, m_2}, \quad (\text{A.5})$$

enquanto a temperatura de Néel, T_N , é determinada pela solução da equação

$$\left\{ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial m_1^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial m_2^2} - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial m_1 \partial m_2} \right)^2 \right\}_{m_1=m_2=0} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Tanto a obtenção das magnetizações de sub-rede quanto os cálculos de χ_0 e T_N envolvem derivadas do autovalor $\lambda_{\max}$. Num modelo de spin $S = 5/2$, em que $\mathbf{T}$ é uma matriz 6×6 , não existem soluções analíticas gerais para seus autovalores. No entanto, uma vez obtida uma solução numérica, é possível calcular suas derivadas de forma numericamente exata, dentro de certas condições.

Denotemos por λ_j os autovalores de uma matriz simétrica $\mathbf{T}$, e por $\mathbf{x}_j$ os autovetores correspondentes. Os elementos de $\mathbf{T}$ dependem de um conjunto de parâmetros $\{L_\alpha\}$. Temos então

$$\mathbf{T}\mathbf{x}_j = \lambda_j\mathbf{x}_j, \quad (\text{A.7})$$

$$\mathbf{x}_j^t\mathbf{T} = \mathbf{x}_j^t\lambda_j, \quad (\text{A.8})$$

em que $\mathbf{x}_j^t$ denota o transposto de $\mathbf{x}_j$. Derivando a eq. (A.7) com respeito a L_α , temos

$$\frac{\partial\mathbf{T}}{\partial L_\alpha}\mathbf{x}_j + \mathbf{T}\frac{\partial\mathbf{x}_j}{\partial L_\alpha} = \frac{\partial\lambda_j}{\partial L_\alpha}\mathbf{x}_j + \lambda_j\frac{\partial\mathbf{x}_j}{\partial L_\alpha}. \quad (\text{A.9})$$

Multiplicando à esquerda por $\mathbf{x}_i^t$ e utilizando a eq. (A.8), obtemos

$$\frac{\partial\lambda_j}{\partial L_\alpha}\delta_{ij} = \mathbf{x}_i^t\frac{\partial\mathbf{T}}{\partial L_\alpha}\mathbf{x}_j + (\lambda_i - \lambda_j)\mathbf{x}_i^t\frac{\partial\mathbf{x}_j}{\partial L_\alpha}. \quad (\text{A.10})$$

Segue dessa última equação que

$$\frac{\partial\lambda_j}{\partial L_\alpha} = \mathbf{x}_j^t\frac{\partial\mathbf{T}}{\partial L_\alpha}\mathbf{x}_j, \quad (\text{A.11})$$

e que, para $i \neq j$,

$$\mathbf{x}_i^t\frac{\partial\mathbf{x}_j}{\partial L_\alpha} = \frac{1}{(\lambda_j - \lambda_i)}\mathbf{x}_i^t\frac{\partial\mathbf{T}}{\partial L_\alpha}\mathbf{x}_j. \quad (\text{A.12})$$

É importante notar que, embora a eq. (A.11) seja sempre válida, a eq. (A.12) tem sentido apenas no caso em que os autovalores de $\mathbf{T}$ são não-degenerados¹. Normalizando os autovetores $\mathbf{x}_j$, obtemos ainda uma outra equação,

$$\mathbf{x}_j^t\frac{\partial\mathbf{x}_j}{\partial L_\alpha} = 0, \quad (\text{A.13})$$

que, juntamente com a eq. (A.12), forma um sistema cuja solução fornece as derivadas primeiras dos autovetores $\mathbf{x}_j$.

¹Felizmente, a matriz $\mathbf{T}$ definida no capítulo 1 satisfaz essa propriedade, exceto na temperatura de Néel.

Derivando agora a eq. (A.9) com respeito a L_β e multiplicando à esquerda por $\mathbf{x}_j^t$, temos

$$\frac{\partial^2 \lambda_j}{\partial L_\beta \partial L_\alpha} = \mathbf{x}_j^t \left(\frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial L_\beta \partial L_\alpha} \mathbf{x}_j + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial L_\alpha} \frac{\partial \mathbf{x}_j}{\partial L_\beta} + \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial L_\beta} \frac{\partial \mathbf{x}_j}{\partial L_\alpha} \right). \quad (\text{A.14})$$

É evidente que, procedendo de modo análogo, podemos encontrar expressões para derivadas, em qualquer ordem, dos autovalores e autovetores de $\mathbf{T}$.

Apêndice B

Expansão de baixas temperaturas para o modelo de spins mistos aleatório

Tratamos aqui da expansão de baixas temperaturas para o modelo de Ising de spins mistos com anisotropia aleatória, segundo a aproximação de Bethe-Peierls, como discutido no capítulo 2. Para a distribuição binária da eq. (2.3), no limite de baixas temperaturas ($K = \beta J \gg 1$), se desprezamos termos de ordem $\exp(-2K)$ ou superior, as equações de consistência (2.31)-(2.33) para o aglomerado A levam às expressões

$$\gamma_A = \frac{1}{2} \ln \frac{1+\sigma}{1-\sigma} + \frac{q}{2} \ln \frac{1-C_+}{1-C_-}, \quad (\text{B.1})$$

$$S = \frac{1+\sigma}{2} C_+ - \frac{1-\sigma}{2} C_-, \quad (\text{B.2})$$

e

$$Q = \frac{1+\sigma}{2} C_+ + \frac{1-\sigma}{2} C_-, \quad (\text{B.3})$$

com

$$C_{\pm} = \frac{e^{\pm \tilde{\gamma}_B}}{e^{\tilde{\Delta}-K} + e^{\pm \tilde{\gamma}_B}}. \quad (\text{B.4})$$

Para o aglomerado B , temos

$$\sigma = p \tanh(q\tilde{\gamma}_A) + (1-p) \frac{\tau(\tilde{\gamma}_A) \tanh(\tilde{\gamma}_A) + \delta \tanh(q\tilde{\gamma}_A)}{\tau(\tilde{\gamma}_A) + \delta}, \quad (\text{B.5})$$

$$S = p \tanh(q\tilde{\gamma}_A) + (1-p) \frac{\delta}{\tau(\tilde{\gamma}_A) + \delta} \tanh(\tilde{\gamma}_A), \quad (\text{B.6})$$

$$Q = p + (1 - p) \frac{\delta}{\tau(\tilde{\gamma}_A) + \delta}, \quad (\text{B.7})$$

com

$$\delta = \exp(qK - \Delta), \quad (\text{B.8})$$

e

$$\tau(x) = \frac{2^q}{(1 + \tanh x)^q + (1 - \tanh x)^q}. \quad (\text{B.9})$$

Resolvendo as eqs. (B.2) e (B.3) para $C_{\pm}$ em termos de σ , S e Q , e utilizando as eqs. (B.5)-(B.7), podemos escrever a eq. (B.1) na forma

$$\gamma_A(\sigma) = \frac{1 - q}{2} \ln \frac{1 + \sigma}{1 - \sigma} + q\tilde{\gamma}_A(\sigma), \quad (\text{B.10})$$

em que $\tilde{\gamma}_A(\sigma)$ é determinado pela solução da eq. (B.5). Notemos que, de acordo com as eqs. (B.10) e (B.5), $\gamma_A(\sigma)$ e $\tilde{\gamma}_A(\sigma)$ dependem da temperatura apenas por meio do parâmetro δ . No limite $T \rightarrow 0$, esse parâmetro vai a zero (se $D > qJ$) ou diverge (se $D < qJ$), exceto nas vizinhanças do ponto P_0 , com coordenadas $D = qJ$ e $T = 0$, onde δ pode assumir qualquer valor.

Como a equação de estado (B.10) torna-se assintoticamente exata no limite $T \rightarrow 0$, podemos utilizá-la para determinar os valores de p em que o ponto crítico terminal e o ponto crítico simples atingem P_0 , e assim desaparecem. Para tanto, impomos as condições

$$\gamma_A(\sigma_e) = \left. \frac{\partial \gamma_A}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=\sigma_e} = \left. \frac{\partial^2 \gamma_A}{\partial \sigma^2} \right|_{\sigma=\sigma_e} = 0, \quad (\text{B.11})$$

das quais obtemos os valores de σ_e , δ_e e p_e em que o ponto crítico terminal atinge P_0 , e as condições

$$\gamma_A(\sigma_s) = \left. \frac{\partial \gamma_A}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=\sigma_s} = \int_0^{\sigma_s} \gamma_A(\sigma) d\sigma = 0, \quad (\text{B.12})$$

que fornecem os valores correspondentes σ_s , δ_s e p_s para o ponto crítico simples.

Apêndice C

Outros trabalhos

Reproduzimos nas páginas seguintes dois artigos resultantes de projetos em que estivemos envolvidos, paralelamente ao nosso programa de doutoramento. O primeiro deles, em colaboração com Lindberg Lima Gonçalves e Lenilson Pereira dos Santos Coutinho, da Universidade Federal do Ceará, descreve um estudo das transições quânticas no estado fundamental de uma variante do modelo XXZ , em que as interações transversas são introduzidas via um termo de Curie-Weiss. O outro trabalho, realizado em colaboração com Paulo de Tarso Muzy e Silvio Salinas, consiste em uma abordagem analítica dos efeitos de desordem correlacionada sobre o comportamento de modelos de Potts em redes hierárquicas, correspondentes a aproximações de Migdal-Kadanoff para redes de Bravais.

The one-dimensional XXZ model with long-range interactions

L.L. Gonçalves^{a,*}, A.P. Vieira^b, L.P.S. Coutinho^a

^aDepartamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Cx. Postal 6030, 60451-970 Fortaleza CE, Brazil

^bInstituto de Física, Universidade de São Paulo, Cx. Postal 66318, 05315-970 São Paulo SP, Brazil

Abstract

The one-dimensional XXZ model ($s = \frac{1}{2}$, N sites) with uniform long-range interactions among the transverse components of the spins is considered. The Hamiltonian of the model is explicitly given by $H = J \sum_{j=1}^N (s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y) - (I/N) \sum_{j,k=1}^N s_j^z s_k^z - h \sum_{j=1}^N s_j^z$, where the $s^{\alpha,\beta}$ are half the Pauli spin matrices. The model is exactly solved by applying the Jordan–Wigner fermionization, followed by a Gaussian transformation. In the absence of the long-range interactions ($I = 0$), the model, which reduces to the isotropic XY model, is known to exhibit a second-order quantum-phase transition driven by the field at zero temperature. It is shown that in the presence of the long-range interactions ($I \neq 0$) the nature of the transition is strongly affected. For $I > 0$, which favours the ordering of the transverse components of the spins, the transition is changed from second to first order, due to the competition between transverse and xy couplings. On the other hand, for $I < 0$, which induces complete frustration of the spins, a second-order transition is still present, although the system is driven out of its usual universality class, and its critical exponents assume typical mean-field values. © 2001 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

Keywords: Quantum transitions; One-dimensional systems; Long-range interactions

The observed critical behaviour of magnetic materials, in the very low-temperature limit, has renewed the interest in the study of magnetic quantum transitions [1]. Since these transitions, which are governed by quantum fluctuations, occur at $T = 0$, one-dimensional models play an important role in their study. Therefore, we will consider the exactly soluble one-dimensional XXZ model ($s = \frac{1}{2}$), with a uniform long-range interaction among the spins along the z direction. Due to the long-range interaction, the model also presents classical critical behaviour, with transitions of first and second order, and it has already been considered by Suzuki [2]. Since his study was restricted to the analysis of the classical second-order transition of the model, and we are interested in its quantum transitions, the model will be considered again. In particular, we will be interested in the effect of the long-range interaction on its quantum critical behaviour.

The Hamiltonian of the model is given by

$$H = J \sum_{j=1}^N (s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y) - \frac{I}{N} \sum_{j,k=1}^N s_j^z s_k^z - h \sum_{j=1}^N s_j^z, \quad (1)$$

where $J > 0$, N is the number of sites on the lattice and we assume periodic boundary conditions. By applying the Jordan–Wigner fermionization [3,4], followed by a Gaussian transformation, we can write the partition function of the model as

$$Z_N = \text{Tr} e^{-\beta H} = C(\beta) \int e^{-(N/2)z^2} \text{Tr} e^{-\tilde{H}(z)} dz \quad (2)$$

with

$$\tilde{H}(z) = \frac{\beta J}{2} \sum_{j=1}^N (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) - \tilde{h}(z) \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j, \quad (3)$$

where $\tilde{h}(z) = \beta(h - I) + \sqrt{2\beta I}z$, $C(\beta)$ depends only on the temperature, a boundary term has been neglected in $\tilde{H}(z)$, and the c_j are fermion operators.

Introducing the Fourier transforms

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} \hat{c}_k \quad (4)$$

* Corresponding author. Fax: + 55-85-288-96-36.
E-mail address: lindberg@fisica.ufc.br (L.L. Gonçalves).

we can rewrite $\tilde{H}(z)$ in the diagonal form

$$\tilde{H}(z) = \sum_k \epsilon_k(z) \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k, \quad (5)$$

where $\epsilon_k(z) = \beta J \cos k - \tilde{h}(z)$ and, due to the periodic boundary conditions, $k = 2\pi n/N$ ($n = 1, \dots, N$). The partition function is then given by

$$Z_N = C(\beta) \int e^{-(N/2)\pi^2} \prod_k [1 + e^{-\tilde{h}_k(z)}] dz \quad (6)$$

which, in the thermodynamic limit ($N \rightarrow \infty$), can be evaluated by the saddle-point method. By explicit calculation, we conclude that

$$m \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_j^z \right\rangle = \frac{z_0}{\sqrt{2\beta I}} - \frac{1}{2}, \quad (7)$$

where z_0 is the value of z which makes the integrand in Eq. (6) a maximum.

Noting that $z_0/\sqrt{2\beta I}$ is just the average number of fermions per energy level, we can write the equation of state of the system,

$$m = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dk}{1 + e^{\tilde{h}_k(m)}} - \frac{1}{2}, \quad (8)$$

where $\tilde{h}_k(m) = \beta J \cos k - \beta(h + 2Im)$. In the limit $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$), for $(h + 2Im) \leq J$, Eq. (8) takes the form

$$\frac{1}{2} - m = \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{h + 2Im}{J}\right) \quad (9)$$

which, for $I = 0$, readily reduces to the well-known expression for the XX chain [5]. To analyze the behaviour of the model near the quantum critical point, assuming $h \geq 0$, we define the order parameter [6] $\sigma \equiv \frac{1}{2} - m$ and expand Eq. (9) to second order in $\sigma \rightarrow 0^+$, obtaining

$$\frac{\pi^2}{2} \sigma^2 - \frac{2I}{J} \sigma = \frac{h_c - h}{J} \geq 0, \quad (10)$$

where $h_c = J - I$. For $I = 0$ we regain the usual XX chain result

$$\sigma \sim (h_c - h)^{1/2}, \quad (11)$$

while for $I < 0$ we get the expected mean-field scaling form

$$\sigma \sim (h_c - h)^1. \quad (12)$$

Note that Eq. (10) cannot be satisfied for $I > 0$, an indication that in this case the model undergoes a first-order transition at $h = h_c$ to a state where the transverse magnetization is saturated ($m = \frac{1}{2}$). In this case, there is a hysteresis cycle associated to the transition, which is due to the presence of metastable states. These states can be identified by looking at the free energy functional which,

Fig. 1. Phase diagram of the model at $T = 0$. The solid and dashed lines indicate second- and first-order phase transitions, respectively. The diagram has of course mirror symmetry with respect to the I/J axis.

for $(h + 2Im) \leq J$ and as $T \rightarrow 0$, is given by

$$f(m) = -\frac{h}{2} - \frac{J}{\pi} (\sin \varphi - \varphi \cos \varphi) + I(m^2 - m), \quad (13)$$

where φ is defined as

$$\varphi = \arccos\left(\frac{h + 2Im}{J}\right). \quad (14)$$

Taking the limit $h \rightarrow 0$ in Eq. (13), and by imposing that $f(0) = f(\frac{1}{2})$, which are minima of the free energy, we can show that the system presents spontaneous magnetization for $I/J \geq 4/\pi$.

The previous analysis allows us to determine the phase diagram of the model at zero temperature, shown in Fig. 1. Notice that there must be a finite temperature critical line ending at the point $(h/J, I/J) = (1, 0)$, which is thus analogous to a bicritical point. The finite temperature behaviour of the model will be considered in future work.

This work was partially financed by the Brazilian agencies CNPq, FINEP and Fapesp. A. P. Vieira thanks T. A. S. Haddad and S. R. Salinas for useful discussions.

References

- [1] S.L. Sondhi, S.M. Girvin, J.P. Carini, D. Shahar, Rev. Mod. Phys. 69 (1997) 315.
- [2] M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn. 21 (1966) 2140.
- [3] P. Jordan, E. Wigner, Z. Physik 47 (1928) 631.
- [4] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, Ann. Phys. 16 (1961) 407.
- [5] Th. Niemeijer, Physica 36 (1967) 377.
- [6] J.P. de Lima, L.L. Gonçalves, Mod. Phys. Lett. B 8 (1994) 871.

Correlated disordered interactions on Potts models

P. T. Muzy,* A. P. Vieira,[†] and S. R. Salinas[‡]

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, Caixa Postal 66318, 05315-970 São Paulo, São Paulo, Brazil

(Received 1 November 2001; published 2 April 2002)

Using a weak-disorder scheme and real-space renormalization-group techniques, we obtain analytical results for the critical behavior of various q -state Potts models with correlated disordered exchange interactions along d_1 of d spatial dimensions on hierarchical (Migdal-Kadanoff) lattices. Our results indicate qualitative differences between the cases $d-d_1=1$ (for which we find nonphysical random fixed points, suggesting the existence of nonperturbative fixed distributions) and $d-d_1>1$ (for which we do find acceptable perturbative random fixed points), in agreement with previous numerical calculations by Andelman and Aharony [Phys. Rev. B 31, 4305 (1985)]. We also rederive a criterion for relevance of correlated disorder, which generalizes the usual Harris criterion.

DOI: 10.1103/PhysRevE.65.046120

PACS number(s): 05.50.+q, 05.10.Cc

I. INTRODUCTION

The effects of disorder on the critical properties of statistical models have been the subject of much work in the last decades. In the context of random interactions, Harris [1] derived a heuristic criterion to gauge the relevance of uncorrelated disorder to the critical behavior, which is predicted to remain unchanged if the specific-heat exponent α of the underlying pure system is negative. If $\alpha>0$, disorder becomes relevant and, in the language of the renormalization group (RG), one expects a flow to a new fixed point (characterized by a nonzero-width fixed distribution of the random variables).

It later became clear that the Harris criterion must be generalized in a number of situations [2–6], since α is not always identifiable with ϕ , the crossover exponent of the width of the distribution of the disorder variables. In particular, random variables correlated along d_1 of the d spatial dimensions give rise to the scaling relation [2,4]

$$\phi = \alpha + d_1 \nu, \quad (1)$$

where ν is the correlation-length exponent of the pure system. Using a real-space RG approach based on numerical calculations [7], Andelman and Aharony [4] investigated various q -state Potts models with random exchange constants, finding qualitative differences between the cases $d-d_1>1$ (which yields finite-temperature fixed distributions) and $d-d_1=1$ (which embodies the McCoy-Wu model [8] and yields an “infinite-disorder” zero-temperature fixed point). An intuitive illustration of the special role of the $d-d_1=1$ case is that, for any infinitesimal concentration of zero bonds (with a suitable assignment of the random interactions), the system would break into noninteracting $(d-1)$ -dimensional structures, and the RG flows would be redirected to the pure fixed point of the corresponding system in $d-1$ dimensions.

In the present paper, we use a (perturbative) weak-disorder [9,10] real-space RG scheme to analyze the critical behavior of q -state Potts models with correlated disordered exchange interactions on various hierarchical lattices, whose exact recursion relations are equivalent to those produced by Migdal-Kadanoff approximations for Bravais lattices. Using this weak-disorder scheme, we obtain analytical results by truncating the recursion relations for the moments of the disorder distribution (which are supposed to remain sufficiently small under the RG iterations). All calculations are performed in the vicinity of $\phi=0$, in a region where disorder is relevant. Depending on the difference between the dimensionality of the system (d) and the number of dimensions in which disorder is correlated (d_1), we distinguish two possibilities: (i) For $d-d_1=1$, the weak-disorder scheme produces a nonphysical fixed-point probability distribution, characterized by a negative variance, which suggests the existence of a nonperturbative (“infinite-disorder”) fixed point; (ii) For $d-d_1>1$, the scheme yields a physically acceptable perturbative fixed-point distribution. Although obtained by an alternative approach, the main results of this paper are in agreement with the numerical findings of Andelman and Aharony [4].

The outline of the paper is as follows. We first rederive Eq. (1), and obtain a criterion for relevance of correlated disorder involving the number of independent random variables in the unit cell of the lattice and the first derivative of the recursion relations at the pure fixed point. This is done in Sec. II. In Sec. III, we consider q -state Potts models on various hierarchical lattices with $d-d_1=1$. Using a weak-disorder scheme, we obtain a new (random) fixed point for q larger than a characteristic value q_0 , where disorder becomes relevant. As in a previous publication [10], this fixed point is located in a nonphysical region of the parameter space, suggesting that a nonperturbative fixed point must be present. In Sec. IV we study a similar problem with $d_1=1$ and $d=3$. In this case we obtain a physically acceptable, finite-disorder fixed point, for $q>q_0$, as in the fully disordered model studied by Derrida and Gardner [9] (although in our case the usual Harris criterion is not satisfied). In Sec. V, we consider an Ising model ($q=2$) on a diamond lattice with $b=2$ bonds and l branches (where l , instead of q , is the control param-

*Electronic address: ptmuzy@uol.com.br

[†]Electronic address: apvieira@if.usp.br

[‡]Electronic address: ssalinas@if.usp.br

eter), which constitutes another example of a $d-d_1=1$ system. As in Sec. III, weak disorder again predicts a nonphysical random fixed point. In the final section we give some conclusions.

II. CRITERION FOR RELEVANCE OF CORRELATED DISORDER

Following Andelman and Aharony [4], we consider a d -dimensional bond-disordered model in which the disorder variables are correlated along d_1 spatial directions. We assume that, under renormalization with a length rescaling factor b , the model satisfies a recursion relation $R(x_1, x_2, \dots, x_n)$, connecting $n=b^{d-d_1}$ independent (and identically distributed) random variables to a renormalized variable x' . (In this paper, these variables are related to reduced exchange couplings.) Defining the deviations $\varepsilon_i \equiv x_i - x_c$, where $x_c = R(x_c, x_c, \dots, x_c)$ is the critical fixed point of the pure system, we expand R in a Taylor series about x_c to write

$$\varepsilon' \equiv x' - x_c = \sum_{i=1}^n \frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j} \bigg|_{x_c} \varepsilon_i \varepsilon_j + \dots, \quad (2)$$

$$\varepsilon'^2 = \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \frac{\partial R}{\partial x_j} \bigg|_{x_c} \varepsilon_i \varepsilon_j + \sum_{i,j,k=1}^n \frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \frac{\partial^2 R}{\partial x_j \partial x_k} \bigg|_{x_c} \varepsilon_i \varepsilon_j \varepsilon_k + \dots, \quad (3)$$

and similarly for the higher powers of ε' . Averaging over the random variables we get

$$\langle \varepsilon' \rangle = \sum_{i=1}^n \frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \langle \varepsilon \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 R}{\partial x_i^2} \bigg|_{x_c} \langle \varepsilon^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_j} \bigg|_{x_c} \langle \varepsilon \rangle^2 + \dots, \quad (4)$$

$$\langle \varepsilon'^2 \rangle = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \right)^2 \langle \varepsilon^2 \rangle + \sum_{i \neq j} \frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \frac{\partial R}{\partial x_j} \bigg|_{x_c} \langle \varepsilon \rangle^2 + \dots, \quad (5)$$

and corresponding expressions for the higher moments of the deviations. Since $\langle \varepsilon \rangle$ is a measure of the distance to the fixed point, it plays the role of temperature. On the other hand, $\langle \varepsilon^2 \rangle$ is a measure of the strength of disorder.

The critical behavior of the model is related to the eigenvalues of the matrix

$$M_{rs} = \frac{\partial \langle \varepsilon'^s \rangle}{\partial \langle \varepsilon^r \rangle}, \quad (6)$$

evaluated at the fixed point. It is clear that the set of recursion relations for the moments of the deviations always has a pure fixed point $\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon^2 \rangle = \dots = 0$. At that point, it can be shown [11] that M_{rs} is a triangular matrix, and that its two largest eigenvalues are given by

$$\Lambda_1 = \frac{\partial \langle \varepsilon' \rangle}{\partial \langle \varepsilon \rangle} \bigg|_{\text{pure}} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \quad (7)$$

and

$$\Lambda_2 = \frac{\partial \langle \varepsilon'^2 \rangle}{\partial \langle \varepsilon^2 \rangle} \bigg|_{\text{pure}} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} \right)^2. \quad (8)$$

Assuming that, for all i and j ,

$$\frac{\partial R}{\partial x_i} \bigg|_{x_c} = \frac{\partial R}{\partial x_j} \bigg|_{x_c} \equiv w, \quad (9)$$

and invoking the usual scaling hypotheses

$$\Lambda_1 = b^{y_t} \quad \text{and} \quad \Lambda_2 = \Lambda_1^\phi = b^{\phi y_t}, \quad (10)$$

which define the thermal exponent y_t and the crossover exponent ϕ , we get

$$\phi y_t = 2 y_t - (d - d_1). \quad (11)$$

Then, using the hyperscaling relation

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} = 2 - \frac{d \ln b}{\ln(nw)}, \quad (12)$$

we obtain

$$\phi = \alpha + \frac{d_1}{y_t} = \frac{d-d_1}{d} \alpha + 2 \frac{d_1}{d}, \quad (13)$$

which clearly shows that the Harris criterion ($\phi = \alpha > 0$) is not satisfied in the presence of correlated disorder. As $1/y_t$ is usually identified with the correlation-length exponent ν , this last result is equivalent to Eq. (1). It also shows that, for $d_1 > 0$, the crossover exponent is larger than α , which indicates that correlated disorder induces stronger (geometrical) fluctuations than uncorrelated disorder.

The general criterion for relevance of disorder is $\phi > 0$, that is,

$$\alpha > -2 \frac{d_1}{d-d_1}. \quad (14)$$

From Eqs. (7)–(9), this is equivalent to

$$nw^2 > 1. \quad (15)$$

This last result was also derived in a different context by Mukherji and Bhattacharjee [5] and generalizes a criterion pointed out by Derrida *et al.* [3].

In the case of the fully disordered system analyzed by Derrida and Gardner [9], for which $d_1 = 0$, the requirement in Eq. (14) turns out to be equivalent to the usual form of the Harris criterion ($\alpha > 0$).

FIG. 1. (a) The diamond hierarchical lattice (with $b=2$ and $l=2$). (b) The necklace hierarchical lattice (with $b=2$ and $l=2$).

III. POTTS MODELS WITH CORRELATED DISORDER: $d-d_1=1$ CASE

The successive generations of a hierarchical lattice are obtained by replacing an existing bond in the previous generation by a unit cell of new bonds in the next generation. In Fig. 1(a), we show the first two stages of the construction of the simple diamond lattice (with $b=2$ bonds and $l=2$ branches). The necklace hierarchical lattice, with $b=2$ bonds and $l=2$ branches, is illustrated in Fig. 1(b).

We now consider a q -state Potts model, given by the Hamiltonian

$$\mathcal{H}_P = - \sum_{(i,j)} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \quad (16)$$

where the sum is over nearest-neighbor sites on a hierarchical lattice, the spin variables σ_i assume q values, δ is the Kronecker delta symbol, and $\{J_{ij} > 0\}$ is a set of independent and identically distributed random variables. Instead of considering a fully disordered arrangement of interactions, we look at correlated disorder, either along layers [see Figs. 2(a) and 2(c)] or along branches [see Figs. 2(b) and 2(d)] of the hierarchical structure.

Introducing the more convenient variable $x_i = \exp(\beta J_i)$, where β is the inverse absolute temperature, it is straightforward to decimate the internal degrees of freedom to obtain

FIG. 2. Correlated distribution of random interactions on diamond and necklace hierarchical lattices.

(Migdal-Kadanoff) recursion relations. In this section we consider the following models.

(A) Random layered diamond lattice, Fig. 2(a), whose recursion relation is

$$x' = R_A(x_1, x_2) = \left(\frac{x_1 x_2 + q - 1}{x_1 + x_2 + q - 2} \right)^2. \quad (17)$$

(B) Random branched diamond lattice, Fig. 2(b), with recursion relation

$$x' = R_B(x_1, x_2) = \left(\frac{x_1^2 + q - 1}{2x_1 + q - 2} \right) \left(\frac{x_2^2 + q - 1}{2x_2 + q - 2} \right). \quad (18)$$

(C) Random layered necklace lattice, Fig. 2(c), with recursion relation

$$x' = R_C(x_1, x_2) = \frac{x_1^2 x_2^2 + q - 1}{x_1^2 + x_2^2 + q - 2}. \quad (19)$$

(D) Random branched necklace lattice, Fig. 2(d), with recursion relation

$$x' = R_D(x_1, x_2) = \frac{x_1^2 x_2^2 + q - 1}{2x_1 x_2 + q - 2}. \quad (20)$$

Notice that in all these models disorder is correlated along only one spatial direction ($d_1=1$), while the effective dimension is $d=2$. According to Eq. (14), we then expect disorder to be relevant for $\alpha > -2$.

We now write $x' = x_c + \epsilon'$ and $x_i = x_c + \epsilon_i$, to perform Taylor series expansions about the critical point of the uniform systems, given by $x_c = R(x_c, x_c)$. For all of these models, with $n=2$ independent values of the exchange parameters (along either layers or bonds), it is straightforward to write the recursion relation

$$\epsilon' = w(\epsilon_1 + \epsilon_2) + m(\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2) + f(\epsilon_1 \epsilon_2^2 + \epsilon_2^2 \epsilon_1) + p \epsilon_1 \epsilon_2 + c \epsilon_1^2 \epsilon_2^2 + k(\epsilon_1^3 + \epsilon_2^3) + a(\epsilon_1^4 + \epsilon_2^4), \quad (21)$$

where w, m, p, f, c, k , and a are model-dependent Taylor coefficients (that depend on the topology of the particular models illustrated in Fig. 2; see Sec. II).

The weak-disorder approximation [9,10] consists in assuming that

$$\langle \epsilon \rangle \sim \langle \epsilon^2 \rangle \sim \lambda, \quad (22)$$

$$\langle \epsilon^3 \rangle \sim \langle \epsilon^4 \rangle \sim \lambda^2, \quad (23)$$

and in general

$$\langle \epsilon^{2p-1} \rangle \sim \langle \epsilon^{2p} \rangle \sim \lambda^p, \quad (24)$$

where $\langle \dots \rangle$ is a quenched average and λ is a suitable small parameter. Within this approximation, we can use Eq. (21) to write recursion relations for the moments of the deviation, up to second order in λ ,

P. T. MUZY, A. P. VIEIRA, AND S. R. SALINAS

PHYSICAL REVIEW E 65 046120

$$\langle \varepsilon' \rangle = 2w\langle \varepsilon \rangle + p\langle \varepsilon \rangle^2 + 2m\langle \varepsilon^2 \rangle + 2f\langle \varepsilon \rangle\langle \varepsilon^2 \rangle + c\langle \varepsilon^2 \rangle^2 + 2k\langle \varepsilon^3 \rangle + 2a\langle \varepsilon^4 \rangle, \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon'^2 \rangle &= 2w^2\langle \varepsilon \rangle^2 + 2w^2\langle \varepsilon^2 \rangle + 4w(m+p)\langle \varepsilon \rangle\langle \varepsilon^2 \rangle \\ &\quad + (2m^2 + 4fw + p^2)\langle \varepsilon^2 \rangle^2 + 4wm\langle \varepsilon^3 \rangle \\ &\quad + (4wk + 2m^2)\langle \varepsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\langle \varepsilon'^3 \rangle = 3w\langle \varepsilon \rangle\langle \varepsilon^2 \rangle + 3(m+p)\langle \varepsilon^2 \rangle^2 + w\langle \varepsilon^3 \rangle + 3m\langle \varepsilon^4 \rangle, \quad (27)$$

and

$$\langle \varepsilon'^4 \rangle = 3w^2\langle \varepsilon^2 \rangle^2 + w^2\langle \varepsilon^4 \rangle. \quad (28)$$

It is easy to see that there is always a nonrandom fixed point,

$$\langle \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon^2 \rangle = \langle \varepsilon^3 \rangle = \langle \varepsilon^4 \rangle = 0, \quad (29)$$

associated with the critical behavior of the pure model. As we pointed out in the previous section, this fixed point becomes unstable with respect to disorder for $2w^2 > 1$. This can also be seen by an inspection of the asymptotic behavior of Eq. (26), which shows that, up to order λ , the renormalized second moment depends only on $\langle \varepsilon^2 \rangle$, with the coefficient $2w^2$. Thus, we expect the onset of a random fixed point at a critical value q_0 of the number of Potts states. From the expression

$$x_c = R(x_c, x_c) \quad (30)$$

for the pure fixed point, we can express q as a function of x_c and, using the condition $2w^2 = 1$, determine the critical value $x_c(q_0)$. For both diamond structures displayed in Figs. 2(a) and 2(b), we have

$$q = (\sqrt{x_c} - 1)(x_c - 1), \quad (31)$$

and $x_c(q_0) = 2.15127 \dots$, which leads to $q_0 = 0.53732 \dots$. For both necklace structures in Figs. 2(c) and 2(d), we have

$$q = (x_c - 1)(x_c^2 - 1), \quad (32)$$

with $x_c(q_0) = 1.46672 \dots$, which also leads to $q_0 = 0.53732 \dots$. Disorder is predicted to be relevant for $q > q_0$.

We now introduce the small parameter

$$\lambda = x_c(q) - x_c(q_0) = \left. \frac{dx_c}{dq} \right|_{q_0} (q - q_0) = \left. \frac{dx_c}{dq} \right|_{q_0} \Delta q, \quad (33)$$

to investigate a q -state Potts model in the immediate vicinity of the characteristic value q_0 . It should be pointed out that, as the symmetry of the order parameter is one of the factors expected to determine the universality class of the models, Δq is the appropriate parameter to consider. However, λ is more convenient for the algebraic manipulations. From inspection of Eqs. (25)–(28), we see that, up to first-order terms in λ , coefficients w and m are written as

TABLE I. Coefficients of the weak-disorder expansion for the models in Fig. 2.

Coefficient	Model (A)	Model (B)	Model (C)	Model (D)
a	−0.00926	0.00917	−0.92623	0.02894
c	0.08549	0.00016	1.38173	0.07163
k	0.04676	−0.01302	0.25648	−0.02801
f	−0.05370	0.00608	−0.33156	−0.04706
p	0.65117	0.23242	1.56929	0.53634

$$w = \frac{1}{2}\sqrt{2} + w_1\lambda \quad \text{and} \quad m = m_0 + m_1\lambda. \quad (34)$$

It is straightforward to calculate $w_1 = 0.13325 \dots$, for the diamond structures, and $w_1 = 0.39088 \dots$, for the necklace structures. Also, we have $m_0 = -0.19088 \dots$ and $m_1 = 0.19865 \dots$, for model (A); $m_0 = 0.01849 \dots$ and $m_1 = 0.00758 \dots$, for model (B); $m_0 = -0.48935 \dots$ and $m_1 = 1.22433 \dots$, for model (C); and $m_0 = 0.02711 \dots$ and $m_1 = 0.02027 \dots$, for model (D). In order to obtain the remaining coefficients, it is enough to keep the zeroth order term in λ (see the values, up to five digits, in Table I).

We are finally prepared to obtain, up to lowest order in Δq , the nonzero values of the moments at the random fixed point. By substituting the weak-disorder assumptions, Eqs. (22) and (23), into Eqs. (25)–(28), and then imposing consistency between equal powers of Δq , we obtain the leading terms for fixed values of the moments as listed in Table II.

In order to perform a linear stability analysis about the fixed points, we have to calculate the eigenvalues Λ_1 to Λ_4 of the matrix

$$M_{rs} = \frac{\partial \langle \varepsilon'^r \rangle}{\partial \langle \varepsilon^s \rangle}.$$

As it should be anticipated from universality, it turns out that the eigenvalues (and so the critical exponents) are the same for models (A) to (D). We always have two eigenvalues, Λ_3 and Λ_4 , whose absolute values are smaller than unity. About the pure fixed point, we have

$$\Lambda_1^{(p)} = \sqrt{2} + 0.31018\Delta q, \quad (35)$$

$$\Lambda_2^{(p)} = 1 + 0.43866\Delta q, \quad (36)$$

with a specific heat exponent

TABLE II. Moments of the deviations defining the random fixed points of the models in Fig. 2 according to the weak-disorder expansion.

Moment	Model (A)	Model (B)	Model (C)	Model (D)
$\langle \varepsilon \rangle / \Delta q$	−14.904	1.0208	−4.4401	0.34798
$\langle \varepsilon^2 \rangle / \Delta q$	−16.170	−11.434	−1.8791	−2.6575
$\langle \varepsilon^3 \rangle / (\Delta q)^2$	1444.5	325.73	46.390	39.946
$\langle \varepsilon^4 \rangle / (\Delta q)^2$	784.41	392.21	10.593	21.187

 FIG. 3. The hierarchical lattice with $d=3$ and $d_1=1$ considered in Sec. IV

$$\alpha_p = -2 + 2.53141\Delta q.$$

At the random fixed point we have

$$\Lambda_1^{(r)} = \sqrt{2} + 0.83670\Delta q, \quad (37)$$

$$\Lambda_2^{(r)} = 1 - 0.43866\Delta q, \quad (38)$$

which lead to the exponent

$$\alpha_r = -2 + 6.82843\Delta q. \quad (39)$$

From Eq. (36), we see that disorder becomes relevant for $\Delta q > 0$. Thus, as shown in Table II, the weak-disorder expansion gives negative (and thus nonphysical) values of the second moment at the random fixed point for models (A) to (D). This suggests that the random fixed point in these systems (for which $d-d_1=1$) is nonperturbative, in agreement with numerical calculations [4] that predict an infinite-disorder fixed point. Another odd feature of the weak-disorder results is that the predicted value of the specific-heat exponent in the presence of disorder (α_r) is *larger* than the corresponding quantity (α_p) for the pure model, in disagreement with the general belief that disorder should weaken the transition.

IV. A POTTS MODEL WITH CORRELATED DISORDER: $d-d_1>1$ CASE

In order to examine the $d-d_1>1$ case, we now consider a Potts model on a necklace hierarchical lattice [4] shown in Fig. 3, with $d=3$ and $d_1=1$. The unit cell contains $n=4$ independent random variables and, in terms of the variables $x_i = \exp(\beta J_i)$, the recursion relation is given by

$$R(x_1, x_2, x_3, x_4) = \frac{x_1 x_2 x_3 x_4 + q - 1}{x_1 x_2 + x_3 x_4 + q - 2}. \quad (40)$$

Following the same steps as in Sec. III, we have

$$q = (x_c - 1)(x_c^2 - 1), \quad (41)$$

$q_0 = 4 + 2\sqrt{2}$, and $x_c(q_0) = 1 + \sqrt{2}$. Performing again the weak-disorder expansion (and truncation), and taking the average over the disorder variables, we obtain the set of recursion relations

$$\langle \epsilon' \rangle = 4w\langle \epsilon \rangle + 2(p_1 + 2p_2)\langle \epsilon \rangle^2 + 4m\langle \epsilon^2 \rangle + 4(f_1 + 2f_2)\langle \epsilon \rangle \times \langle \epsilon^2 \rangle + 2(c_1 + 2c_2)\langle \epsilon^2 \rangle^2 + 4k\langle \epsilon^3 \rangle + 4a\langle \epsilon^4 \rangle, \quad (42)$$

$$\begin{aligned} \langle \epsilon'^2 \rangle &= 12w^2\langle \epsilon \rangle^2 + 4w^2\langle \epsilon^2 \rangle + 8w(3m + p_1 + 2p_2)\langle \epsilon \rangle\langle \epsilon^2 \rangle \\ &\quad + [12m^2 + 8w(f_1 + 2f_2) + 2(p_1^2 + 2p_2^2)]\langle \epsilon^2 \rangle^2 \\ &\quad + 8wm\langle \epsilon^3 \rangle + (8wk + 4m^2)\langle \epsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} \langle \epsilon'^3 \rangle &= 9w\langle \epsilon \rangle\langle \epsilon^2 \rangle + 3(3m + p_1 + 2p_2)\langle \epsilon^2 \rangle^2 + w\langle \epsilon^3 \rangle \\ &\quad + 3m\langle \epsilon^4 \rangle, \end{aligned} \quad (44)$$

and

$$\langle \epsilon'^4 \rangle = 9w^2\langle \epsilon^2 \rangle^2 + w^2\langle \epsilon^4 \rangle. \quad (45)$$

It should be noted that, due to the smaller symmetry of the lattice, we now have a larger set of coefficients. Also, notice that in this case q_0 is determined from the condition $4w^2 = 1$. About the critical value q_0 , and to leading order in Δq , we have

$$w = \frac{1}{2} + \frac{17\sqrt{2} - 24}{4}\Delta q \quad (46)$$

and

$$m = \frac{\sqrt{2} - 2}{8} + \frac{133 - 94\sqrt{2}}{16}\Delta q. \quad (47)$$

The values for the remaining coefficients are listed in Table III.

The moments of the deviations at the random fixed point are written as

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{1}{7}(5 - 3\sqrt{2})\Delta q,$$

$$\langle \epsilon^2 \rangle = \frac{1}{7}(4 - \sqrt{2})\Delta q,$$

$$\langle \epsilon^3 \rangle = \frac{3}{49}(95\sqrt{2} - 128)(\Delta q)^2,$$

$$\langle \epsilon^4 \rangle = \frac{6}{49}(9 - 4\sqrt{2})(\Delta q)^2. \quad (48)$$

TABLE III. Values of the weak-disorder coefficients for the model in Sec. IV.

p_1	p_2	c_1	c_2	f_1	f_2	k	a
$\frac{3\sqrt{2}}{4} - 1$	$\frac{\sqrt{2}}{2} - 1$	$\frac{109\sqrt{2} - 144}{32}$	$\frac{27\sqrt{2} - 38}{32}$	$\frac{25 - 18\sqrt{2}}{16}$	$\frac{11 - 8\sqrt{2}}{16}$	$\frac{3 - 2\sqrt{2}}{16}$	$\frac{7\sqrt{2} - 10}{64}$

FIG. 4. A diamond hierarchical lattice with $b=2$ bonds and l branches.

Performing a linear stability analysis about the pure fixed point we obtain

$$\Lambda_1^{(p)} = 2 + (17\sqrt{2} - 24)\Delta q, \quad (49)$$

$$\Lambda_2^{(p)} = 1 + (17\sqrt{2} - 24)\Delta q, \quad (50)$$

with a specific-heat exponent

$$\alpha_p = -1 + \frac{3}{2} \frac{17\sqrt{2} - 24}{\ln 2} \Delta q, \quad (51)$$

while about the random fixed point we have

$$\Lambda_1^{(r)} = 2 - \frac{1}{7}(92 - 65\sqrt{2})\Delta q, \quad (52)$$

$$\Lambda_2^{(r)} = 1 - (17\sqrt{2} - 24)\Delta q, \quad (53)$$

with

$$\alpha_r = -1 - \frac{3}{14} \frac{92 - 65\sqrt{2}}{\ln 2} \Delta q. \quad (54)$$

These results show that once more disorder becomes relevant for $\Delta q > 0$, but now we obtain a positive (and thus physically acceptable) value of the second moment of the deviations at the random fixed point. We also have $\alpha_r < \alpha_p$. So, as in the fully disordered model ($d_1 = 0$) studied by Derrida and Gardner [9], and in agreement with numerical calculations [4], the weak-disorder scheme predicts a (perturbative) finite-disorder fixed point, with values of the critical exponents continuously approaching those of the pure model as $\Delta q \rightarrow 0$.

V. AN ISING MODEL WITH CORRELATED DISORDER

The set of recursion relations given by Eqs. (25) to (28), with a suitable redefinition of parameters, can also be used to analyze an Ising model on a more general diamond structure with $b=2$ bonds and l branches, and correlated disordered ferromagnetic exchange interactions along the layers (see Fig. 4). For this structure we also have $d-d_1=1$. While in the Potts models we have a natural parameter, q , for varying α , we now change the topology of the lattice, by varying l , to obtain the same effect.

Using the standard Ising Hamiltonian,

$$\mathcal{H}_l = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j, \quad (55)$$

with $\sigma_i = \pm 1$, and introducing the more convenient transmissivity variable $t_i = \tanh \beta J_i$, the decimation of the intermediate spins leads to the recursion relation

$$t' = R_l(t_1, t_2) = \tanh\{l \tanh^{-1}(t_1 t_2)\}. \quad (56)$$

As in Sec. III, we now write $t' = t_c + \epsilon$ and $t_i = t_c + \epsilon_i$, where

$$t_c = R_l(t_c, t_c) \quad (57)$$

is the critical transmissivity of the uniform model. We then perform quenched averages, and use the weak-disorder assumption, to obtain Eqs. (25) to (28).

The critical parameters for relevance of disorder, $l_0 = 1.44976 \dots$ and $t_c(l_0) = 0.79951 \dots$, come from Eqs. (57) and (15). The small parameter λ can be chosen as

$$\lambda = t_c(l) - t_c(l_0) = \frac{dx_c}{dl} \Big|_{l_0} (l - l_0) \equiv \frac{dx_c}{dl} \Big|_{l_0} \Delta l. \quad (58)$$

Again we use λ as a convenient parameter for algebraic manipulations, although Δl is the physically relevant variable. The Taylor coefficients in Eqs. (25) to (28) are given by $w = \sqrt{2}/2 - 0.54522\lambda$, $m = -0.49698 - 0.65422\lambda$, $a = 0.11520$, $c = -1.64903$, $k = -0.12543$, $f = -1.61924$, and $p = -0.10953$. We then calculate the leading values of the moments at the random fixed point,

$$\begin{aligned} \langle \epsilon \rangle &= -0.64971 \Delta l, \\ \langle \epsilon^2 \rangle &= -0.27076 \Delta l, \\ \langle \epsilon^3 \rangle &= -0.30084 (\Delta l)^2, \\ \langle \epsilon^4 \rangle &= +0.21993 (\Delta l)^2. \end{aligned} \quad (59)$$

A linear stability analysis leads to the eigenvalues $\Lambda_1^{(p)} = \sqrt{2} + 0.71884 \Delta l$ and $\Lambda_2^{(p)} = 1 + 1.01659 \Delta l$, for the pure fixed point, and $\Lambda_1^{(r)} = \sqrt{2} + 1.20537 \Delta l$ and $\Lambda_2^{(r)} = 1 - 1.01659 \Delta l$, for the random fixed point. From these values, we see that disorder is relevant for $\Delta l > 0$, but we again have $\langle \epsilon^2 \rangle < 0$ in this case.

We then obtain the specific heat critical exponents

$$\alpha_p = -1.07163 + 2.51471 \Delta l \quad (60)$$

and

$$\alpha_r = -1.07163 + 5.56379 \Delta l. \quad (61)$$

For $\Delta l < 0$, which corresponds to $\alpha < -1.07163 \dots$, the pure fixed point is stable and the random model displays the same critical behavior as its pure counterpart. For $\Delta l > 0$, which corresponds to $\alpha > -1.0713 \dots$ (yielding again $\alpha_r > \alpha_p$), we anticipate a novel class of (random) critical be-

havior, but the fixed point must be nonperturbative, as suggested by the nonphysical character of the weak-disorder results.

VI. CONCLUSIONS

We have used a weak-disorder scheme and real-space renormalization-group techniques to look at the effects of correlated disorder on the critical behavior of some q -state Potts models with correlated disordered ferromagnetic interactions along d_1 out of d spatial dimensions. We have written exact recursion relations on diamond and necklace hierarchical structures, which are equivalent to Migdal-Kadanoff approximations for the corresponding Bravais lattices.

The weak-disorder scheme leads to analytical results by truncating the recursion relations for the moments of the distribution function. We first used scaling arguments to redetermine a general expression for the Harris criterion to gauge the relevance of disorder (and show that it is related to the number of independent random variables in the unit cell of the lattice and the first derivative of the recursion relations at the pure fixed point). We then performed a number of calculations to compare with numerical findings by Andelman and Aharony.

For q -state Potts models on various hierarchical lattices with ferromagnetic random exchange interactions correlated along $d_1 = 1$ out of $d = 2$ dimensions, we obtained a new (random) fixed point for q larger than a characteristic value q_0 , where disorder becomes relevant. This fixed point, however, is located in a nonphysical region of parameter space, which suggests that a nonperturbative (infinite-disorder) fixed point must be present (as pointed out by the calculations of Andelman and Aharony). For a q -state Potts model on a diamond lattice with $d_1 = 1$ and $d = 3$, we obtained a physically acceptable, finite-disorder fixed point, for $q > q_0$, as in the fully

disordered model analyzed by Derrida and Gardner (although in our case the usual expression of the Harris criterion is not fulfilled). Also, we considered an Ising model ($q = 2$) on a diamond lattice with $b = 2$ bonds and l branches (where l , instead of q , is the control parameter), which is another example of a $d - d_1 = 1$ system. Again, the weak-disorder expansion predicts a nonphysical random fixed point.

To summarize the results of this paper, we point out that, in the vicinity of the point where disorder becomes relevant, the weak-disorder scheme always produces a perturbative random fixed point, but there are two distinct possibilities, depending on the difference between d and d_1 . (i) If $d - d_1 = 1$, the perturbative fixed point is characterized by a negative variance, and is thus nonphysical, suggesting the existence of another, nonperturbative fixed point. (ii) If $d - d_1 > 1$, the scheme predicts a physically acceptable perturbative fixed point. It should be mentioned that this same picture holds for fairly general hierarchical lattices, in particular those with noniterating bonds, as considered by Griffiths and Kauffman [12]. Furthermore, in the case of the quantum Ising model with bond disorder, which corresponds to the extreme-anisotropy limit of the two-dimensional McCoy-Wu model ($d - d_1 = 1$), Fisher [13] was able to obtain a (presumably exact) fixed-point probability distribution with infinite variance. It is certainly interesting to investigate whether similar conclusions still hold for other models (as the problem of directed polymers in random environments [5]) on either hierarchical or Bravais lattices.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was partially financed by the Brazilian agencies CNPq and Fapesp.

- [1] A.B. Harris, J. Phys. C 7, 1671 (1974).
- [2] T.C. Lubensky, Phys. Rev. B 11, 3573 (1975).
- [3] B. Derrida, H. Dickinson, and J. Yeomans, J. Phys. A 18, L53 (1985).
- [4] D. Andelman and A. Aharony, Phys. Rev. B 31, 4305 (1985).
- [5] S. Mukherji and S.M. Bhattacharjee, Phys. Rev. E 52, 1930 (1995).
- [6] A. Efrat, Phys. Rev. E 63, 066112 (2001).
- [7] D. Andelman and A.N. Berker, Phys. Rev. B 29, 2630 (1984).
- [8] B.M. McCoy and T.T. Wu, Phys. Rev. 176, 631 (1968).
- [9] B. Derrida and E. Gardner, J. Phys. A 17, 3223 (1984).
- [10] P.T. Muzy and S.R. Salinas, Int. J. Mod. Phys. B 13, 397 (1999).
- [11] A. Efrat and M. Schwartz, Phys. Rev. E 62, 2952 (2000).
- [12] R.B. Griffiths and M. Kaufman, Phys. Rev. B 26, 5022 (1982); M. Kaufman and R.B. Griffiths, *ibid.* 24, 496 (1981).
- [13] D.S. Fisher, Phys. Rev. Lett. 69, 534 (1992); Phys. Rev. B 51, 6411 (1995).

Referências

- ARLEGO M., CABRA D. C. e GRYNBERG M. D. (2001). *Phys. Rev. B* **64**, 134419.
- AZUMA M., FUJISHIRO Y., TAKANO M., NOHARA M. e TAKAGI H. (1997). *Phys. Rev. B* **55**.
- BARBER M. N. (1983). In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Domb C. e Lebowitz J. L., editores, vol. 8, p. 145. Academic Press, New York.
- BECERRA C. C., PADUAN-FILHO A. e PALACIO F. (2000). *J. Phys. : Condens. Matter* **12**, 6207.
- BELL G. M. (1975). *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8**, 669.
- BETHE H. A. (1931). *Z. Physik* **71**, 205.
- BINDER K. e YOUNG A. P. (1986). *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801.
- BOBÁK A. e JURČIŠIN M. (1997). *Physica A* **240**, 647.
- BRANCO N. S. (1999). *Phys. Rev. B* **60**, 1033.
- BROUT R. (1959). *Phys. Rev.* **115**, 824.
- BUENDÍA G. M. e NOVOTNY M. A. (1997). *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 5951.
- BUNDER J. E. e MCKENZIE R. H. (1999). *Phys. Rev. B* **60**, 344.
- CARDY J. L. (1999). *Physica A* **263**, 215.
- CARVALHO Z. V., BECERRA C. C., PADUAN-FILHO A. e PALACIO F. (2001). *J. Magn. Magn. Mater.* **226-230**, 615.
- DA SILVA N. R. e SALINAS S. R. (1991). *Phys. Rev. B* **44**, 852.

- DASGUPTA C. e MA S.-K. (1980). *Phys. Rev. B* **22**, 1305.
- DE CARVALHO J. X. (1996). Dissertação de mestrado, Instituto de Física, Universidade de São Paulo.
- DE JONGE W. J. M., SWÜSTE C. H. W., KOPINGA K. e TAKEDA K. (1975). *Phys. Rev. B* **12**, 5858.
- DE LIMA A. L., STOŠIĆ B. D. e FITTIPALDI I. P. (2001). *J. Magn. Magn. Mater.* **226-230**, 635.
- DEN NIJS M. e ROMMELSE K. (1989). *Phys. Rev. B* **40**, 4709.
- DHAR D. (1980). *Physica A* **102**, 370.
- DOMB C. (1980). *Adv. Phys.* **9**, 149.
- DOTY C. A. e FISHER D. S. (1992). *Phys. Rev. B* **45**, 2167.
- DUPAS C. e RENARD J. P. (1978). *Phys. Rev. B* **18**, 401.
- EGGARTER T. P. e RIEDINGER R. (1978). *Phys. Rev. B* **18**, 569.
- EGGERT S., AFFLECK I. e HORTON M. D. P. (2002). *Phys. Rev. Lett.* **89**, 047202.
- FISHER D. S. (1992). *Phys. Rev. Lett.* **69**, 534.
- FISHER D. S. (1994). *Phys. Rev. B* **50**, 3799.
- FISHER D. S. (1995). *Phys. Rev. B* **51**, 6411.
- FISHER D. S. e YOUNG A. P. (1998). *Phys. Rev. B* **58**, 9131.
- FURUSAKI A., SIGRIST M., LEE P. A., TANAKA K. e NAGAOSA N. (1994). *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2622.
- GAUDIN M. (1983). *La Fonction d'Onde de Bethe*. Masson, Paris.
- GONÇALVES J. R. e GONÇALVES L. L. (1991). *J. Magn. Magn. Mater.* **104-107**, 261.
- GONÇALVES L. L. (1985). *Phys. Scr.* **32**, 248.
- GRIFFITHS R. B. (1969). *Phys. Rev. Lett.* **23**, 17.
- HAAS S., RIERA J. e DAGOTTO E. (1993). *Phys. Rev. B* **48**, 13174.

- HADDAD T. A. S., PINHO S. T. R. e SALINAS S. R. (2000). *Phys. Rev. E* **61**, 3330.
- HARRIS A. B. (1974). *J. Phys. C* **7**, 1671.
- HENELIUS P. e GIRVIN S. M. (1998). *Phys. Rev. B* **57**, 11457.
- HERMISSON J. (2000). *J. Phys. A: Math. Gen.* **33**, 57.
- HERMISSON J., GRIMM U. e BAAKE M. (1997). *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 7315.
- HONE D., MONTANO P. A., TONEGAWA T. e IMRY Y. (1975). *Phys. Rev. B* **12**, 5141.
- HYMAN R. A., YANG K., BHATT R. N. e GIRVIN S. M. (1996). *Phys. Rev. Lett.* **76**, 839.
- IGLÓI F., KAREVSKI D. e RIEGER H. (1998). *Eur. Phys. J. B* **1**, 513.
- IMRY Y., MONTANO P. A. e HONE D. (1975). *Phys. Rev. B* **12**, 253.
- KANEYOSHI T. (1987). *J. Phys. Soc. Jpn* **56**, 2675.
- KANEYOSHI T. (1988). *Physica A* **153**, 556.
- KORENBLIT I. Y. e SHENDER E. F. (1993). *Phys. Rev. B* **48**, 9478.
- LIEB E., SCHULTZ T. e MATTIS D. (1961). *Ann. Phys.* **16**, 407.
- LUBENSKY T. C. (1975). *Phys. Rev. B* **11**, 3573.
- LUCK J. M. (1993a). *Europhys. Lett.* **24**, 359.
- LUCK J. M. (1993b). *J. Stat. Phys.* **72**, 417.
- LUCK J. M. e NIEUWENHUIZEN T. (1986). *Europhys. Lett.* **2**, 257.
- LUTHER A. e PESCHEL I. (1975). *Phys. Rev. B* **12**, 3908.
- MA S.-K., DASGUPTA C. e HU C.-K. (1979). *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1434.
- MAZO R. M. (1963). *J. Chem. Phys.* **39**, 1224.
- MCCOY B. (1968). *Phys. Rev.* **173**, 531.
- MCCOY B. e WU T. T. (1968). *Phys. Rev.* **176**, 631.

- MCKENZIE R. H. (1995). *Phys. Rev. B* **51**, 6249.
- MCKENZIE R. H. (1996). *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4804.
- MÉLIN R., LIN Y., LAJKÓ P., RIEGER H. e IGLÓI F. (2002). *Phys. Rev. B* **65**, 104415.
- NGUYEN T. N., LEE P. A. e ZUR LOYE H.-C. (1996). *Science* **271**, 489.
- OSEROFF S. B., CHEONG S.-W., AKTAS B., HUNDLEY M. F., FISK Z. e RUPP JR. L. W. (1995). *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1450.
- PADUAN-FILHO A., BECERRA C. C. e PALACIO F. (1998). *Phys. Rev. B* **58**, 3197.
- PFEUTY P. (1979). *Phys. Lett. A* **72**, 245.
- QUADROS S. G. A. e SALINAS S. R. (1994). *Physica A* **206**, 479.
- SACHDEV S. (1999). *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, Cambridge.
- SAGUIA A., BOECHAT B. e CONTINENTINO M. A. (2000). *Phys. Rev. B* **62**, 5541.
- SAGUIA A., BOECHAT B. e CONTINENTINO M. A. (2002). *Phys. Rev. Lett.* **89**, 117202.
- SAGUIA A., BOECHAT B., CONTINENTINO M. A. e DE ALCÂNTARA BONFIM O. F. (2001). *Phys. Rev. B* **63**, 052414.
- SATIJA I. I. (1994). *Phys. Rev. B* **49**, 3391.
- SCALAPINO D. J., IMRY Y. e PINCUS P. (1975). *Phys. Rev. B* **11**, 2042.
- SCHECHTMAN D., BLECH I., GRATIAS D. e CAHN J. W. (1984). *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951.
- SCHOUTEN J. C., BOERSMA F., KOPINGA K. e DE JONGE W. J. M. (1980). *Phys. Rev. B* **21**, 4084.
- SCHULZ H. J. (1996). *Phys. Rev. Lett.* **77**, 2790.
- SIMIZU S., CHEN J. e FRIEDBERG S. A. (1984). *J. Appl. Phys.* **55**, 2398.
- SLOTTE P. A. (1985). *J. Phys. C: Solid State Phys.* **18**.

Referências

- SMITH T. e FRIEDBERG S. A. (1968). *Phys. Rev.* **176**, 660.
- TRUDEAU Y. e PLUMER M. L. (1995). *Phys. Rev. B* **51**, 5868.
- TUCKER J. W. (1999). *J. Magn. Magn. Mater.* **195**, 733.
- WANG Z. (1997). *Phys. Rev. Lett.* **78**, 126.
- WESSEL S., NORMAND B., SIGRIST M. e HAAS S. (2001). *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1086.
- WESTENBERG E., FURUSAKI A., SIGRIST M. e LEE P. A. (1995). *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4302.
- YOUNG A. P. (1976). *J. Phys. C: Solid State Phys.* **9**, 2103.
- YOUNG A. P. (1997). *Phys. Rev. B* **56**, 11691.
- YOUNG A. P. e RIEGER H. (1996). *Phys. Rev. B* **53**, 8486.
- ZHANG G.-M. e YANG C.-Z. (1993). *Phys. Rev. B* **48**, 9452.