UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

ESTUDO DAS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO MODELO DE ASHKIN-TELLER NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO

LUIZ ANTÔNIO BASTOS BERNARDES

Tese apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, da Universidade de São Paulo, para obtenção do Título de Doutor em Física - Física Básica.

Orientador: Prof.Dr. Sylvio Goulart Rosa Jr.

São Carlos
1995

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 272-6222
Fax (016) 272-2218

C:\WINWORD\WLA\OFDEFD.DOC

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE LUIZ ANTONIO BASTOS BERNARDES APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 27/10/1995.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Sylvio Goulart Rosa Junior

Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira

Prof. Dr. Roberto Nicolau Onody

Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz

Prof. Dr. Nestor Felipe Caticha Alfonso

A Natureza ama esconder-se.
A mais bela harmonia cósmica
é semelhante a um monte
de coisas atiradas.
Heráclito de Éfeso

Deus existe porque a Natureza, mesmo no Caos,
age sempre de maneira ordenada e regular.
Immanuel Kant

Medido objetivamente, o que uma pessoa consegue
extrair da Verdade, através de uma luta
apaixonada, é absolutamente infinitesimal. Mas
a luta nos liberta dos grilhões do ser e nos
faz companheiros daqueles que são os
melhores e maiores.
Albert Einstein

Para
meus pais, Nilo e Tereza
minha avó Margarida (em memória)

meus irmãos e irmãs:
Carlos, Paulo, Lúcia,
Edson, Lucília, Helena

pelo amor

Sou grato

a Deus, por me dar firmeza e fé;

a meus pais, irmãos e irmãs, por me darem carinho e compreensão;

**ao prof. Sylvio, pela orientação muito competente, atenciosa e amiga;
pelo exemplo de educador agindo em benefício da comunidade;**

ao Gerson, pela amizade generosa e a excelente digitação da tese;

ao Salviano, pelo valioso auxílio nos cálculos numéricos;

aos profs. Pedro Christiano e José Vicente da UFPB, pelas sugestões na parte computacional;

**aos companheiros Miguel, Melqui, Fernando, Maurício, Virgílio, Alexandre,
Márcio, Daniela, Salviano, João Vitor, Chico, Reginaldo, Manzoli, Wanda e
Diógenes, pela ótima convivência em São Carlos;**

**aos companheiros Gerson, Facin, Jeremias, Sérgio Saab, Antônio Sérgio,
André Brinatti, Fábio, Pedro, Carlos Eugênio e Baltazar pelo
convívio muito gostoso em Ponta Grossa;**

**aos profs. Acácio, Cirineu, Marques, Camargo, Sampaio e André Vitor
pela acolhida fraterna e o apoio recebidos na UEPG;**

ao Augusto, por me ajudar na confecção das figuras.

Índice

LISTA DE FIGURAS
RESUMO
ABSTRACT

INTRODUÇÃO.
1.1 - MOTIVAÇÃO 1
1.2 - DEFINIÇÕES BÁSICAS 7
- Fases, transições de fase, e diagrama de fase 7
- Parâmetro de ordem, quebra de simetria e ordem de uma transição de fase 9
- Dimensionalidade do espaço e dimensionalidade do parâmetro de ordem 11
- Flutuações, comprimento de correlação e fenômenos críticos 12
- Medidas termodinâmicas e de correlação, função de correlação, propriedades estáticas e dinâmicas 13
- Expoentes críticos e leis de escala 14
- Universalidade 15

1.3 - SISTEMAS MAGNÉTICOS PUROS 16
- Modelo de Ising 17
- Modelo de Potts 18
- Modelo de Ashkin-Teller 19

1.4 - SISTEMAS MAGNÉTICOS NA PRESENÇA DE CAMPOS ALEATÓRIOS 22
- Modelo de Ising na presença de campo aleatório 23
- Modelo de Potts na presença de campo aleatório 26

1.6 - RESULTADOS 32
1.7 - APRESENTAÇÃO DA TESE 39

MODELO DE ISING NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO - APRESENTAÇÃO DO TRUQUE DAS RÉPLICAS.
2.1 - INTRODUÇÃO 41
2.2 - CÁLCULO DA ENERGIA LIVRE 42
2.3 - DIAGRAMA DE FASES 47

SIMETRIA DO MODELO DE POTTS NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO.
3.1 - INTRODUÇÃO 51
3.2 - CÁLCULO DA ENERGIA LIVRE PELO TRUQUE DAS RÉPLICAS 52
3.3 - CASO DE UM CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO 55
3.3.1 - SIMETRIA DA ENERGIA LIVRE 58
3.3.2 - SOLUÇÃO NA REDE DE BETHE 60

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

MODELO DE ASHKIN-TELLER NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS ALEATÓRIOS.
4.1 - INTRODUÇÃO 67
4.2 - FUNÇÕES TERMODINÂMICAS 67
4.3 - EQUIVALÊNCIA COM O MODELO DE POTTS DE 4 ESTADOS 71

MODELO DE ASHKIN-TELLER NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO NA DIREÇÃO DE $z = \langle \sigma S \rangle$.
5.1 INTRODUÇÃO 75
5.2 - ESTABILIDADE DAS SOLUÇÕES E DIAGRAMA DE FASES DO MAT REGULAR 76
5.3 - EXPANSÕES DAS MAGNETIZAÇÕES E AS COORDENADAS DOS PONTOS E e G 86
5.4 - DIAGRAMA DE FASES DO MAT NA PRESENÇA DE CAMPO NA DIREÇÃO DE $z = \langle \sigma S \rangle$ 95
5.5 - MAGNETIZAÇÕES, ENTROPIA, CALOR ESPECÍFICO E SUSCETIBILIDADE 96

MODELO DE ASHKIN-TELLER NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS ALEATÓRIOS NAS DIREÇÕES DE $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$.
6.1 - INTRODUÇÃO 115
6.2 - FUNÇÕES TERMODINÂMICAS E ESTABILIDADE DA SOLUÇÃO PARAMAGNÉTICA 116
6.3 - ORDEM DA TRANSIÇÃO ENTRE AS FASES PARAMAGNÉTICA E DE BAXTER 121

CONCLUSÃO 129

APÊNDICE A: CRITÉRIO DE ESTABILIDADE 132

APÊNDICE B: DETALHES DE CÁLCULOS ANALÍTICOS
B1 - ENERGIA LIVRE DO MODELO DE POTTS DA SEÇÃO 3.2 133
B2 - ENERGIA LIVRE DO MODELO DE POTTS DA SUB-SEÇÃO 3.3.2 141

REFERÊNCIAS 146

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1.1 - Diagrama de fases sólido-líquido-gás típico 8
FIGURA 1.2 - Diagrama de fase ferromagnética típico 9
FIGURA 1.3 - Diagrama de fase antiferromagnética típico 9
FIGURA 1.4 - Variação típica do parâmetro de ordem M com a temperatura para uma transição de fase de segunda ordem 11
FIGURA 1.5 - Diagrama de fases para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico 22
FIGURA 1.6 - Diagrama de fases do modelo de Ising na presença de campo magnético aleatório, com distribuição bimodal 24
FIGURA 1.7 - Diagrama de fases do modelo de Potts com q estados na presença de campo magnético aleatório com distribuição bimodal 28
FIGURA 1.8 - Diagrama de fases para distribuição gaussiana com q = 3 28
FIGURA 1.9 - Diagrama de fases do MAT isotrópico na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$ 31
FIGURA 1.10 - Cortes nas superfícies de instabilidade da solução de Ising e coordenadas do ponto G 33
FIGURA 1.11 - Coordenadas do ponto E 34
FIGURA 1.12 - Cortes na superfície de instabilidade da solução paramagnética 35
FIGURA 1.13 - Magnetizações em função da temperatura para $\sigma_1 = 0$ e p = 0.2, 1.0 e 2.5 36
FIGURA 1.14 - Suscetibilidade χ_{21} para p = 0.2 e $\sigma_1 = 0.2, 1.0, 3.0$; p = 1.0 e $\sigma_1 = 0.2, 1.0, 3.0$; p = 2.5 e $\sigma_1 = 1.0, 3.0$ 37

FIGURA 2.1 - Diagrama de fases do modelo de Ising na presença de campo magnético aleatório com distribuição gaussiana..... 49
FIGURA 3.1 - Diagrama de fases do modelo de Ising na presença de campo magnético aleatório com distribuição gaussiana..... 60
FIGURA 3.2 - Aglomerado gerador da rede de Bethe fechada..... 61
FIGURA 5.1 - Diagrama de estabilidade e diagrama de fases do MAT regular.... 79
FIGURA 5.2 - Funcional da energia livre do MAT regular..... 80
FIGURA 5.3 - Cortes na superfície de instabilidade da solução paramagnética.... 82
FIGURA 5.4 - Cortes nas superfícies de instabilidade da solução de Ising e coordenadas do ponto G..... 84
FIGURA 5.5 - Coordenadas do ponto E..... 89
FIGURA 5.6 - Diagrama de fases do MAT isotrópico na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$ 95
FIGURA 5.7 - Magnetizações em função da temperatura para $\sigma_1 = 0$ e p = 0.2, 1.0 e 2.5..... 97
FIGURA 5.8 - Magnetizações em função da temperatura para p = 0.2 e $\sigma_1 = 0.2$, 1.0 e 3.0..... 98
FIGURA 5.9 - Magnetizações em função da temperatura para p = 1.0 e $\sigma_1 = 0.2$, 1.0 e 3.0..... 99
FIGURA 5.10 - Magnetizações em função da temperatura para p = 2.5 e $\sigma_1 = 1.0$ e 3.0..... 100
FIGURA 5.11 - Entropia em função da temperatura para $\sigma_1 = 0$ e p = 0.2, 1.0, 2.5; p = 0.2 e $\sigma_1 = 0.2$, 1.0, 3.0..... 102
FIGURA 5.12 - Entropia em função da temperatura para p = 1.0 e $\sigma_1 = 0.2$, 1.0, 3.0; p = 2.5 e $\sigma_1 = 1.0$, 3.0..... 103
FIGURA 5.13 - Calor específico em função da temparetura para $\sigma_1 = 0$ e p = 0.2, 1.0, 2.5; p = 0.2 e $\sigma_1 = 0.2$, 1.0, 3.0..... 104
FIGURA 5.14 - Calor específico em função da temperatura para p = 1.0 e $\sigma_1 = 0.2$, 1.0, 3.0; p = 2.5 e $\sigma_1 = 1.0$, 3.0..... 105
FIGURA 5.15 - Suscetibilidades χ_{11}, χ_{31} e χ_{21} para $\sigma_1 = 0$ e p = 0.2, 1.0,2.5..... 108

FIGURA 5.16 - Suscetibilidade χ_{11} para p = 0.2 e σ_1 = 0.2, 1.0, 3.0;
p = 1.0 e σ_1 = 0.2, 1.0, 3.0; p = 2.5 e σ_1 = 1.0, 3.0..... 110
FIGURA 5.17 - Suscetibilidade χ_{31} para p = 0.2 e σ_1 = 0.2, 1.0, 3.0;
p = 1.0 e σ_1 = 0.2, 1.0, 3.0; p = 2.5 e σ_1 = 1.0, 3.0..... 111
FIGURA 5.18 - Suscetibilidade χ_{21} para p = 0.2 e σ_1 = 0.2, 1.0, 3.0;
p = 1.0 e σ_1 = 0.2, 1.0, 3.0; p = 2.5 e σ_1 = 1.0, 3.0..... 113
FIGURA 6.1 - Gráfico das magnetizações $x = \langle S \rangle$ e $z = \langle \sigma S \rangle$,
para campo magnético constante nulo, com p = 0.001 e σ = 0.2..... 118

RESUMO

A teoria de campo médio para o modelo de Ashkin-Teller com interações ferromagnéticas de longo alcance na presença de campos magnéticos aleatórios foi desenvolvida. Isso foi conseguido através do uso do truque das réplicas para a obtenção da energia livre e do estudo analítico das equações integrais acopladas dos parâmetros de ordem, da estabilidade de suas soluções e das suas expansões para $T \lesssim T_C$. Inicialmente, foram determinadas as expressões gerais das funções termodinâmicas do modelo no caso em que existem três campos magnéticos aleatórios com distribuições gaussianas. Em seguida, foi examinado o caso particular do modelo com um só campo magnético aleatório na direção de z = $\langle \sigma S \rangle$. A estratégia adotada se mostrou poderosa pois nos possibilitou a caracterização detalhada do diagrama de fases com várias superfícies de coexistência e das linhas de pontos críticos. As equações integrais das funções termodinâmicas desse caso particular foram discutidas e resolvidas numericamente para valores especiais das constantes de interação e da variância. Para o caso particular do modelo na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma \rangle$, forma determinadas e discutidas as expressões das funções termodinâmicas. Foram também obtidas as equações das superfícies de instabilidade da solução paramagnética. Foi provado que a transição entre as fases paramagnética e de Baxter é sempre de primeira ordem.

Outro resultado original da tese foi a verificação da existência da simetria de dilatação e contração do modelo de Potts na presença de campos magnéticos aleatórios. Essa simetria permite que o estudo da energia livre no intervalo $q \in (1,2)$ forneça o comportamento termodinâmico do sistema para todo $q > 2$.

ABSTRACT

The meanfield theory of the long range Ashkin-Teller model in random fields was developed. This was obtained by using the replica trick and the study of the coupled integral equations for the order parameters, the stability of their solutions, and their expansions for $T \lesssim T_C$. Inicially , the expressions of the thermodynamic functions for the model in three random fields with gaussian distributions were determined. After this, it was examined the particular case of the model with only one random field in the $\langle \sigma S \rangle$ direction. The strategy revealed itself powerful by the detailed caracterization of the phase diagram with several coexistence surfaces and lines of critical points. The integral equations of the thermodynamic functions for this particular case were discussed and numerically solved for especial values of the interaction constants and field distribution variance. For the particular case of the model with random fields in the $\langle S \rangle$ and $\langle \sigma \rangle$ directions, the expressions were also determined and discussed. The equations of the instability surfaces for the paramagnetic solution were obtained, and it was proved that the para-Baxter transition line is always of first order.

Another original result of the thesis was the verification of the existence of the dilatation and contration simmetry in the Potts model with random fields. This simmetry permits that the study of the free energy in the $q \in (1,2)$ interval supplies the thermodynamic behavior of the system for $q > 2$.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 - MOTIVAÇÃO

A maior parte do aumento no conhecimento sobre fenômenos coletivos durante as últimas décadas tem origem no estudo de sistemas magnéticos. A formação de conceitos tais como universalidade, quebra de simetria e leis de escala (em regiões próximas de transições de fase contínuas), assim como o desenvolvimento das poderosas idéias do grupo de renormalização, tem sido fortemente influenciada pela pesquisa sobre magnetismo. Isto se deve em parte à existência de um grande número de sistemas magnéticos experimentais acessíveis, e em parte ao fato notável de que modelos simples do magnetismo são capazes de revelar a física essencial sobre as fases e as ordens das transições em sistemas mais complicados.

Até uma época relativamente recente, o estudo do comportamento coletivo de sistemas magnéticos e de outros sistemas com matéria condensada era concentrado largamente em materiais puros idealizados, tais como cristais perfeitos. Entretanto, a desordem do tipo "quenched" (temperada), isto é, a que ocorre quando o sistema está congelado em uma configuração com desordem estrutural, é tão freqüente que acaba afetando praticamente todos os sistemas experimentais, de algum modo. Os físicos experimentais normalmente tendiam a trabalhar com amostras numa faixa de concentração de impurezas que mascarava os efeitos provocados pela desordem. Só nos últimos vinte anos, aproximadamente, é que a comunidade de física da matéria

condensada tem se interessado em estudar os fenômenos causados pela desordem, de maneira intensiva.

Desde então, os sistemas magnéticos desordenados têm surgido com o protótipo para o estudo de fenômenos coletivos em sistemas com desordem temperada. Novamente, isto se deve à simplicidade dos modelos magnéticos e à existência de muitos sistemas experimentais que podem ser bem caracterizados por tais modelos. As idéias sobre sistemas magnéticos desordenados têm sido aplicadas, por exemplo, a transições de fase estruturais em ligas desordenadas, a supercondutores com impurezas, a fluidos e superfluidos em meios porosos, à adsorção em superfícies desordenadas e à percolação de pesticidas líquidos em solos estratificados [28 e suas referências].

Todos os materiais sólidos têm alguma desordem temperada, na forma de defeitos e impurezas ou como uma propriedade estrutural. Mesmo pequenas quantidades de desordem temperada podem influenciar muito as transições de fase através das quais os materiais se formam. É impossível eliminar todas as impurezas ou defeitos dos materiais. Assim, para que seja compreendida completamente a formação dos materiais é fundamental que se caracterizem os efeitos drásticos causados por impurezas e defeitos sobre as transições de fase.

Os três principais modelos que descrevem os efeitos da desordem temperada são os seguintes: vidro de spin [61], que são aplicadas quando as interações entre os spins são aleatórias e frustradas; o modelo com interações aleatórias [62], em que as interações são aleatórias mas não frustradas; e o modelo com campo aleatório [63-75], onde o efeito dos campos aleatórios sobre o ordenamento dos spins compete com a ordem de longo alcance.

Nesta tese enfocamos modelos do último tipo. Progressos consideráveis já foram realizados no estudo do modelo de Ising com campo aleatório [9,12] nas últimas duas décadas. Os sistemas que são mais comumente utilizados para estudar este modelo são cristais magnéticos diluídos na presença de campos magnéticos uniformes e externos. A maior parte dos trabalhos definitivos sobre o modelo com campo aleatório foram feitos no modelo de Ising, no qual o ordenamento envolve alinhamento, de spins magnéticos por exemplo, ao longo de uma única direção no

sistema. Apesar de esta condição não ser satisfeita por sistemas experimentais, materiais com anisotropia uniaxial normalmente apresentam um comportamento igual ao do modelo de Ising para temperaturas que sejam suficientemente próximas da temperatura de transição T_C (T_N para materiais antiferromagnéticos). A generalização do modelo de Ising é conseguida através do modelo de Potts com campos aleatórios [13-15]. No ítem 3.4 deste capítulo introdutório será apresentada uma revisão dos resultados básicos sobre estes dois modelos.

Os modelos de Ising e de Potts, nas suas versões sem campos aleatórios, estão diretamente ligadas ao modelo de Ashkin-Teller [1], que chamaremos abreviadamente de MAT. O MAT pode ser considerado como dois modelos de Ising superpostos, os quais, respectivamente, são descritos pelas variáveis de spin σ_i e S_i. Cada spin está localizado em um dos sítios de uma rede hipercúbica. Em cada modelo de Ising, há uma interação entre dois spins mais próximos com magnitude J_2. Por outro lado, os dois modelos de Ising estão acoplados por uma interação entre quatro spins cujo valor é J_3. Assim, o hamiltoniano é

$$\mathcal{H} = -\sum_{<ij>}[J_2\left(\sigma_i\sigma_j + S_iS_j\right) + J_3\sigma_i\sigma_jS_iS_j] \ , \tag{1.1}$$

onde a soma é sobre todos os vizinhos mais próximos numa rede. Quando $J_2 = J_3$ o MAT se torna equivalente ao modelo de Potts com quatro estados.

A estrutura do MAT em duas dimensões foi obtida através da análise de séries [76], por conexões com o modelo de 8 vértices resolvidos por Baxter [77,78], por expansões em torno do ponto $J_3 = 0$ no qual o modelo se reduz a dois modelos de Ising desacoplados, e por análise quasiestática de casos limites [79]. No caso de três dimensões, as conexões com o modelo de 8 vértices não são válidas e a expansão em torno do ponto de desacoplamento fornece bem menos informações do que no caso de duas dimensões. Para $d = 2$, J_3 é um campo marginal, isto é, um campo que é capaz de gerar uma linha de pontos críticos. Em geral J_3 tem um índice de escala no ponto de desacoplamento dado por

$$y_4 = \frac{2}{\nu} - d \ . \tag{1.2}$$

Para três dimensões [80,81] $\nu \sim 0{,}64$, e deste modelo y_4 é maior do que zero. Portanto, J_3 é um campo relevante, isto é, um campo capaz de mudar completamente a natureza do ponto crítico. Assim, em três dimensões, há a possibilidade de três comportamentos críticos completamente diferentes para valores pequenos de $x = J_3/J_2$. Estes comportamentos dependem do fato de x ser menor do que zero, maior do que zero, ou exatamente igual a zero.

Esta estrutura complicada foi indicada por expansões em ε de modelos com simetrias análogas às do MAT [82-85]. Este tipo de análise mostrou três diferentes tipos de comportamento que dependem dos direcionamentos dos pontos finais dos fluxos iniciados próximos do ponto de desacoplamento. Um fluxo se direciona a um ponto fixo que descreve dois modelos de Ising desacoplados (para x = 0); outro leva a um ponto fixo instável e, portanto, indica uma transição de fase de primeira ordem (para x < 0); e o terceiro é em direção a um ponto fixo com $n = 2$, análogo ao do modelo XY (para x > 0).

No entanto, estudos anteriores do MAT tridimensional feitos através de séries [76] pareciam mostrar que o índice crítico γ varia continuamente com x, nas proximidades de $x = 0$. Caso esta conclusão fosse válida, haveria um sério erro nas previsões obtidas através do grupo de renormalização. Motivados por este impasse, Ditizian, Banavar, Grest e Kadanoff [3], ou, abreviadamente DBGK, envidaram esforços para descrever o comportamento crítico do MAT em três dimensões, assumindo como corretas as previsões do grupo de renormalização.

DBGK procuraram estabelecer a natureza do diagrama de fases do MAT tridimensional através do uso de várias técnicas complementares. Seus resultados foram obtidos através de dados retirados das séries para altas e baixas temperaturas de energia livre, magnetizações, e suscetibilidades e da simulação pelo método de Monte Carlo. Estes resultados, quando combinados com os resultados exatos para casos limites e com as previsões da teoria de campos médio, levaram DBGK a um rico diagrama de fases com vários pontos multicríticos.

DBGK verificaram que o método de análise através de séries e a técnica de Monte Carlo complementam um ao outro. Pois, enquanto é possível determinar

precisamente os expoentes críticos e a temperatura de transição através do método de séries para as partes mais simples do diagrama, a técnica de Monte Carlo torna-se útil na determinação dos diferentes tipos de ordenamento e das temperaturas de transição mesmo nas regiões complicadas do diagrama de fases.

Deste modo, DBGK conseguiram mostrar que os dados obtidos pelos métodos das séries e de Monte Carlo nas vizinhanças do ponto de desacoplamento são consistentes com a conclusão do grupo de renormalização, a qual estabelece para o MAT tridimensional a inexistência de uma linha de expoentes que variem continuamente. Assim o diagrama de fases para $d = 3$ é bem diferente do obtido para $d = 2$. Uma nova fase, não existente em $d = 2$, é determinada. Nesta fase o sistema quebra espontaneamente a sua simetria natural entre seus dois tipos de spins de Ising. Várias transições de fase contínuas são observadas e explicadas em termos de uma análise que é inteiramente consistente com os conceitos de grupo de renormalização.

Em 1985 Christiano e Goulart Rosa [4] calcularam as funções termodinâmicas e determinaram o diagrama de fases do MAT com interações ferromagnéticas de longo alcance, fazendo um estudo analítico e numérico da energia livre a fim de caracterizarem as fases e as ordens das transições. Essa abordagem se mostrou eficiente pois levou à determinação detalhada de um diagrama de fases com várias linhas de pontos críticos, embora não tenham sido determinados com precisão os valores dos pontos críticos onde se verificam mudanças nas ordem das transições. Esse modelo é definido pelo hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = &-\tilde{J}_1 \sum_{(i,j)} S_i S_j - \tilde{J}_2 \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \tilde{J}_3 \sum_{(i,j)} \sigma_i S_i \sigma_j S_j - H_1 \sum_i S_i \\ &- H_2 \sum_i \sigma_i - H_3 \sum_i \sigma_i S_i \quad , \end{aligned} \tag{1.2}$$

onde introduzimos os campos magnéticos constantes $H_r > 0$, com (r = *1, 2, 3*). As constantes de interação ferromagnética de longo alcance $\tilde{J}_r = (J_r/N) > 0$ são escaladas pelo número de spins N para que no limite termodinâmico a energia do sistema seja bem definida. A soma é sobre todos os pares distintos (i,j).

O vidro de spins de Ashkin-Teller também tem sido investigado nos últimos dez anos. Em 1985 esse modelo foi estudado na rede de Bethe [5] e, mais

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

recentemente, suas soluções de réplicas simétricas e com quebra de simetria de réplica foram estudadas por métodos numéricos [6-8].

Entretanto, não existem estudos sobre o MAT com interações ferromagnéticas de longo alcance na presença de campos magnéticos aleatórios. Esse modelo é definido pelo hamiltoniano

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = &-\tilde{J}_1\sum_{(i,j)} S_iS_j - \tilde{J}_2\sum_{(i,j)}\sigma_i\sigma_j - \tilde{J}_3\sum_{(i,j)}\sigma_iS_i\sigma_jS_j - H_1\sum_i S_i \\ &- H_2\sum_i\sigma_i - H_3\sum_i\sigma_iS_i - \sum_i h_i^1S_i - \sum_i h_i^2\sigma_i - \sum_i h_i^3\sigma_iS_i \quad ,\end{aligned} \tag{1.3}$$

onde h_i^r designa os campos magnéticos aleatórios, que são estatisticamente independentes, e pela distribuição gaussiana com variância $\tilde{h}_r$ e valor médio $\bar{h}_r$, para todo sítio i:

$$p\left(\left\{h_i^r\right\}\right) = \prod_{r=1}^{3}\left[\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\tilde{h}_r\right]^{-1}.\exp\left[\frac{-\left(h_i^r-\bar{h}_r\right)^2}{2\tilde{h}_r^{\,2}}\right] \quad . \tag{1.4}$$

Apesar do modelo definido pelas equações (1.3) e (1.4) ser complicado, a desordem presente nas interações de um corpo torna-o mais tratável analiticamente. Por outro lado, este modelo pode ser relacionado com vários outros mais simples. Quando fazemos $\bar{h}_r = \tilde{h}_r = 0$ (com r = 1, 2, 3) na equação (1.3), as funções de distribuição gaussianas tornam-se deltas de Dirac. Dessa maneira, a solução encontrada para o MAT na presença de campo aleatório recupera a solução do modelo definido por (1.2) [4]. Para $J_3 = \tilde{h}_3 = \bar{h}_3 = 0$ obtemos dois modelos de Ising aleatórios e desacoplados. Se $J_1 = J_2 = \tilde{h}_1 = \bar{h}_1 = \tilde{h}_2 = \bar{h}_2 = 0$ temos o modelo de Ising na presença de campo aleatório [10]. Para $J_1 = J_2 = J_3$ o MAT (sem os campos H_r e h_i^r) é equivalente ao modelo de Potts com 4 estados [39,78]. Isso ocorre como uma conseqüência da simetria do hamiltoniano com relação à transformação $S_i \to S_i$ e $\sigma_i \to \sigma_iS_i$, que faz com que $\langle\sigma\rangle = \langle S\rangle = \langle\sigma\, S\rangle$. Como será mostrado no capítulo 4, mesmo quando consideramos as presenças dos campos H_r (constantes) e h_i^r (aleatórios), a equivalência entre os dois modelos permanece válida.

Pelo que foi apresentado, pode-se concluir que a motivação básica desta tese é o estudo da influência de campos aleatórios sobre uma estrutura complicada como a

do MAT, já analisada por DBGK e Christiano e Goulart Rosa. Deste modo, o objetivo principal do presente trabalho é determinar a natureza do diagrama de fases do MAT com interações ferromagnéticas de longo alcance na presença de campos aleatórios. Antes que seja descrita a metodologia usada para atingir esse objetivo, faz-se uma revisão de alguns conceitos e resultados fundamentais utilizados ao longo de toda a tese.

1.2 - DEFINIÇÕES BÁSICAS

Neste tópico fazemos uma introdução a transições de fase bem semelhante àquela apresentada nas referências [86-88].

• **Fases, transições de fase, e diagramas de fase**

Considere as fases sólida (gelo), líquida e gasosa (vapor) da água. Uma mudança na temperatura permite-nos observar transições de uma fase para outra: a condensação e a ebulição da água são tão familiares que foram utilizadas na definição da escala centígrada de temperatura. O interessante nessas transições é que uma pequena mudança na temperatura ou em outro parâmetro é suficiente para provocar uma grande alteração. Além disso, elas pertencem a uma extensa família: há transições de fase como a magnética, ferroelétrica, superfluida, supercondutora; outras correspondem à separação de fase em soluções, ou transições de uma fase ordenada para outra desordenada em ligas, por exemplo. A descoberta e a compreensão da natureza de novas fases continuam a desempenhar um papel importante na física da matéria condensada. Por isto se torna relevante a determinação de um diagrama de fase: para um dado sistema, variam-se alguns de seus parâmetros tais como temperatura, pressão, ou campo magnético externo, a fim de que sejam observadas as diferentes fases do sistema e suas regiões de existência, e depois os resultados são apresentados em um gráfico conhecido por diagrama de fase.

Para a introdução de algumas idéias, consideraremos três diagramas de fase particulares.

O primeiro (figura 1.1) é um diagrama de pressão versus temperatura, mostrando as regiões de existência das fases sólida, líquida e gasosa. Há dois pontos

especiais neste diagrama: o primeiro, chamado de ponto triplo, na junção das três regiões; o segundo, chamado de ponto crítico, é o ponto final de uma linha divisória entre as regiões líquida e gasosa. Circulando o ponto crítico (P_c,T_c), pode-se passar continuamente da fase líquida para a gasosa, sem que ocorra uma transição descontínua (na região à direita do ponto crítico).

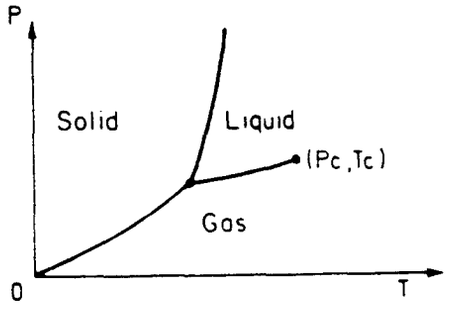


Figura 1.1 - Diagrama de fase sólido-líquido-gás típico.

O segundo exemplo (figura 1.2) é um diagrama de campo magnético versus temperatura para um material que sofre uma transição de fase do tipo ferromagnética. Neste diagrama há uma linha de fronteira ao longo do eixo horizontal, que termina num ponto crítico, como no caso precedente. Para campo nulo e alta temperatura, observa-se uma fase desordenada chamada de fase paramagnética, na qual não há magnetização; à medida que a temperatura abaixa, a transição ocorre no ponto crítico $T = T_C$, e para $T < T_C$ observa-se uma fase ordenada chamada de fase ferromagnética, que está espontaneamente magnetizada. Há uma analogia entre a figura 1.2 e a parte da figura 1.1 correspondente à transição de líquido para gás: o campo magnético e a pressão exercem funções similares. Na figura 1.2, quando se cruza a fronteira ($H = 0, 0 < T < T_C$), a magnetização muda descontinuamente; a descontinuidade decresce quando se atravessa a fronteira em pontos mais próximos do ponto crítico; no ponto crítico, a descontinuidade desaparece.

O terceiro diagrama (figura 1.3) também é um diagrama de campo magnético versus temperatura, mas agora para um material em que ocorre uma transição do tipo antiferromagnética, pois a direção da magnetização é alternada na fase ordenada. Nesse diagrama há duas regiões, separadas por uma linha contínua com uma parte sólida e outra tracejada. Nesse case ocorre o seguinte: quando a linha sólida é

cruzada, observa-se um salto descontínuo no valor da magnetização do sistema antiferromagnético; no entanto, não há essa descontinuidade quando se transpõe a linha tracejada. Diz-se que a parte tracejada dessa linha de transição é uma linha de pontos críticos (pois não há descontinuidade); a linha de pontos críticos tem um ponto final, na linha de transição, que é chamado de ponto tricrítico.

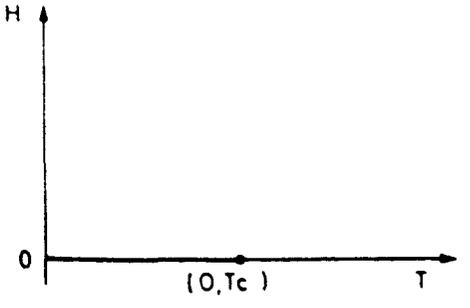


Figura 1.2 - Diagrama de fase ferromagnética típico.

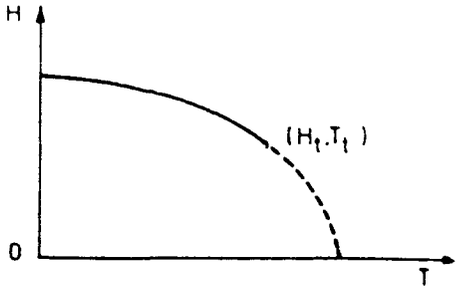


Figura 1.3 - Diagrama de fase antiferromagnética típico.

- **Parâmetros de ordem, quebra de simetria e ordem de uma transição de fase**

Por que aparecem várias fases diferentes, à medida que o valor da temperatura aumenta? Isso ocorre porque na energia livre $F = U - TS$, que é minimizada no estado de equilíbrio termodinâmico, há competição entre a energia interna U (que favorece a ordem) e a entropia S (que favorece a desordem); um aumento na temperatura acaba por favorecer a entropia e a desordem. A fim de se fazer distinção entre as duas fases, define-se um parâmetro de ordem, o qual é diferente de zero na

fase ordenada, e zero na fase desordenada (esta, em geral, é a fase que aparece em temperaturas altas, apesar de haver exceções a esta regra nos casos em que há diferentes graus de liberdade acoplados). Para uma transição ferromagnética, como na figura 1.2, o parâmetro de ordem é a magnetização homogênea; para uma transição antiferromagnética, como na figura 1.3, é a magnitude da magnetização alternada. Em geral, um valor diferente de zero para o parâmetro de ordem corresponde a uma quebra de simetria. Assim, em nossos dois exemplos magnéticos, na simetria em relação a rotações é que ocorre a quebra. Na fase de alta temperatura o sistema é invariante em relação a rotações em torno de todos os três eixos; enquanto que na fase de baixa temperatura o sistema permanece invariante somente em relação a rotações em torno de um eixo, o eixo em cuja direção há magnetização espontânea. No caso da transição de líquido para gás (figura 1.1), estritamente falando não há quebra de simetria; porém, define-se um parâmetro de ordem através da diferença de densidade entre as fases líquida e gasosa.

Quando o parâmetro de ordem tem uma descontinuidade na transição, segundo a classificação proposta por Landau [86, 87], tem-se uma transição de primeira ordem; quando não há esta descontinuidade, a transição é de segunda ordem. Nas figuras 1.1 e 1.2, as linhas de transição são linhas de transição de primeira ordem; nos pontos críticos as transições são de segunda ordem. Na figura 1.3, a linha de transição tem um segmento de primeira ordem e outro (a linha tracejada de pontos críticos) de segunda ordem; no ponto tricrítico, a transição ainda é de segunda ordem e, portanto, não há descontinuidade no parâmetro de ordem. O gráfico do parâmetro de ordem versus temperatura, para uma transição de segunda ordem, é uma curva como a da figura 1.4: não há descontinuidade no valor do parâmetro de ordem, porém há uma descontinuidade na inclinação da curva que mostra a sua variação com a temperatura.

Diante do que já foi exposto, qualquer pesquisa em que se propõe a investigação de transição de fase deve estar relacionada com os seguintes problemas: especificar o parâmetro de ordem, prever a ordem da transição, e descrever o comportamento das propriedades do sistema na vizinhança da transição.

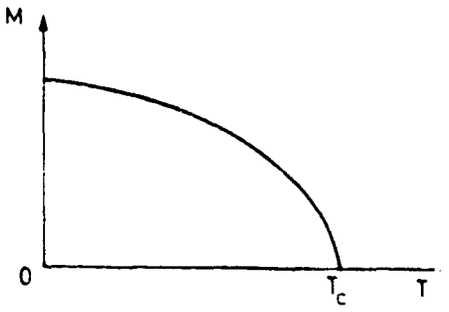


Figura 1.4 - Variação típica do parâmetro de ordem M com a temperatura para uma transição de fase de segunda ordem.

- **Dimensionalidade do espaço e dimensionalidade do parâmetro de ordem**

Como nosso mundo tem três dimensões, é natural que se inicie o estudo de fases e transições de fase através de sistemas tridimensionais. No entanto, há muitos sistemas interessantes com dimensões menores.

Assim, podemos citar os seguintes sistemas unidimensionais ou quase-unidimensionais: polímeros (macromoléculas lineares), sólidos feitos de cadeias (de átomos ou moléculas) apenas com acoplamentos fracos entre cadeias. Sistemas bidimensionais ou quase-bidimensionais: filmes, sólidos feitos de planos acoplados fracamente.

Por outro lado, em certos problemas de teoria relativística do campo, que podem ser tratados por uma formulação análoga à apressentada aqui, trabalha-se no espaço-tempo, e, portanto, em quatro dimensões. A dimensionalidade d do espaço pode ser considerada como uma variável real (positiva). Na década a discussão sobre dimensionalidade abrangeu vários valores de d, inclusive não inteiros. Entretanto, mais recentemente, pesquisadores teóricos têm se interessado pelo valor mais realista $d = 3$.

Com relação ao parâmetro de ordem, nem sempre é óbvia a sua definição, podendo ocorrer dificuldades experimentais e teóricas. Estando este parâmetro definido, uma de suas características mais interessantes é a sua dimensionalidade n. No caso da transição líquido para gás, o parâmetro de ordem é um escalar, por se tratar de uma diferença de densidade; o que faz com que sua dimensionalidade seja um. No caso da transição ferromagnética sem forças anisotrópicas, o parâmetro de

ordem, isto é, a magnetização, é um vetor com três componentes; e, portanto, sua dimensionalidade é três. Assim, a dimensionalidade n do parâmetro de ordem pode assumir vários valores com diferentes significados físicos. Novamente, é mais conveniente se considerar n como um número real e positivo; ocasionalmente, ele poderá assumir valores nulos ou negativos.

• Flutuações, comprimento de correlação e fenômenos críticos

Na vizinhança de um ponto de transição um sistema tem duas fases diferentes, e cada fase é, respectivamente, estável em cada uma das regiões adjacentes ao ponto. Isso dá origem a flutuações , que governam o comportamento do sistema nas regiões próximas da transição. Um exemplo é a opalescência crítica, característica nas transições de líquido para gás [88].

Vamos considerar, por exemplo, um material forromagnético, com um diagrama de fase como o da figura 1.2. Para $T > T_C$, a fase estável é a desordenada; entretanto, se T estiver próximo de T_C, a fase ordenada é somente um pouco menos estável, e, por causa das flutuações, aparecerão regiões localmente ordenadas, durante um certo intervalo de tempo. Assim, para a caracterização dessas flutuações, definem-se um comprimento de correlação ξ, o qual mede a extensão média dessas flutuações, e um tempo de correlação τ para medir o tempo de vida médio delas. O comprimento ξ e o tempo τ aumentam à medida que se aproxima do ponto de transição, e, deste modo, os fenômenos críticos associados às flutuações tornam-se mais importantes. A grosso modo, pode-se considerar que o comprimento ξ governa os fenômenos críticos estáticos, enquanto que o tempo τ governa os dinâmicos. Por simplicidade, vamos nos ater ao comprimento de correlação ξ. Quando todos os outros parâmetros estão fixos, ξ é uma função $\xi(T)$ da temperatura T, que aumenta se T tender ao ponto de transição ($T \rightarrow T_C$).

Nesse ponto, pode-se fazer a seguinte pergunta: o comprimetno de correlação diverge em T_C?

Se isso acontecer, isto é, se $\xi(T) \rightarrow \infty$ quando $T \rightarrow T_C$, então nas regiões próximas de T_C as flutuações são completamente dominantes; caso isso não ocorra, a influência delas é parcial e a transição de fase se dá prematuramente, por assim dizer.

Estas considerações concordam bastante com as de Landau, em relação à ordem das transições. Se na classificação de Landau a transição for de segunda ordem (não há descontinuidade no parâmetro de ordem), então o comprimento de correlação diverge em T_C, e há um regime em que as flutuações dominam. Porém, se de acordo com Landau a transição for de primeira ordem (há descontinuidade finita no parâmetro de ordem), então, via de regra, o comprimento de correlação em T_C é finito, o que corresponde a um regime em que as flutuações foram interrompidas prematuramente, em menor ou maior grau. Entretanto, há alguns casos especiais em que essas duas classificações não concordam inteiramente, mas não os comentaremos porque estes casos estão fora do escopo de revisão dado ao presente tópico. Como ao longo da tese nos concentraremos no cálculo e na análise do comportamento do parâmetro de ordem para os modelos que estudaremos, vamos utilizar apenas a classificação de Landau.

• **Medidas termodinâmicas e de correlação, função de correlação, propriedades estáticas e dinâmicas**

É conveniente fazer distinção entre dois tipos diversos de medida: de um lado, medidas termodinâmicas, de quantidades macroscópicas como calor específico, magnetização, e suscetibilidade homogênea de um material ferromagnético, ou densidade e compressibilidade em uma transição líquido para gás; e de outro lado, medidas de quantidades relacionadas com correlação microscópica entre pontos deferentes. No caso magnético, por exemplo, medidas do segundo tipo fornecem informações sobre a função de correlação (entre dois pontos) para a magnetização M:

$$\Gamma(\vec{R},t) = \langle M(\vec{R},t) M(0,0) \rangle \tag{1.5}$$

ou sobre funções de correlação de ordem mais alta. Observações do espalhamento de raios X, de neutrons e de luz, fornecem informações sobre a transformada de Fourier $\Gamma(q,w)$ de $\Gamma(\vec{R},t)$. As singularidades das grandezas termodinâmicas e das funções de correlação têm uma origem comum nas flutuações críticas, e estão ligadas teoricamente pelo teorema de flutuação-dissipação; apesar disto, do ponto de vista experimental, justifica-se a distribuição entre essas duas classes de medidas.

As propriedades críticas estáticas incluem grandezas termodinâmicas, e as funções de correlação tomadas em um mesmo instante; as propriedades críticas dinâmicas incluem a dependência das funções de correlação com o tempo ou a freqüência. Do ponto de vista teórico, faz-se esta distinção por causa das profundas diferenças entre os resultados e os métodos de estudo destes dois tipos de propriedades. Neste ponto, pode-se adiantar o conceito fundamental de "universalidade" para se indicar que existem muitas classes de sistemas fisicamente diferentes que, no entanto, mostram o mesmo comportamento crítico estático; enquanto que isto dificilmente acontece com o comportamento crítico dinâmico. Esse é o motivo pelo qual a presente tese não trata do último tipo de comportamento, apesar de grande interesse e importância de algumas propriedades.

• **Expoentes críticos e leis de escala**

Em regiões próximas de um ponto crítico (isto é, de uma transição de fase de segunda ordem), observam-se quantidades que obedecem leis de potência com expoentes que não são inteiros. Assim, logo abaixo de T_C, o parâmetro de ordem decresce proporcionalmente a $(T_C - T)^{\beta}$, ao passo que logo acima de T_C o calor específico, por exemplo, é proporcional a $(T - T_C)^{-\alpha}$, o comprimento de correlação a $(T - T_C)^{-\nu}$, e a suscetibilidade, no caso magnético, a $(T - T_C)^{-\gamma}$. Os expoentes α, β, ν, γ e outros como esses, são definidos na vizinhança de um dado ponto crítico, e são chamados de expoentes críticos; a precisão das medidas experimentais destes expoentes garantem com segurança que seus valores não são inteiros. Encontram-se singularidades porque tal comportamento implica que as quantidades termodinâmicas e as funções de correlação dependem não-analiticamante de suas variáveis, isto é, da temperatura, do campo associado ao parâmetro de ordem, da distância, etc. Em tais circunstâncias, os métodos de perturbação usuais não são eficientes. O comportamento singular requer estudo por métodos feitos sob medida.

Esse comportamento é notável porque, apesar de singular, tem algumas características simples. Os expoentes críticos não assumem quaisquer valores; sistemas diferentes, sujeitos aos mais variados tipos de transições, podem ser

agrupados em um pequeno número de "classes de universalidade", cada uma caracterizada por um conjunto de valores dos expoentes. Além disso, observam-se entre os expoentes críticos algumas relações muito simples como $\alpha+2\beta+\gamma=2$, chamadas de leis de escala, cujo grau de universalidade é ainda maior. Portanto, no meio da complexidade surge uma nova simplicidade.

• **Universalidade**

Na teoria de fenômenos críticos em transições de fase o conceito de universalidade desempenha um papel destacado. O raio de aplicação (isto é, a classe de universalidade) de cada resultado é cuidadosamente investigado, e surge então toda uma hierarquia de graus de universalidade. Na base dessa hierarquia, por exemplo, encontra-se a temperatura crítica, cujo valor depende de cada pequeno detalhe; no topo estão certos números, os expoentes críticos, que dependem apenas das propriedades mais gerais do sistema, como as dimensionalidades do espaço e do parâmetro de ordem, porém são independentes da natureza da transição, das características detalhadas da interação, etc. Assim, as propriedades de universalidade dos fenômenos críticos permitem o estabelecimento de correspondências entre sistemas, e de classes de equivalência de grande extensão; e, como já salientamos anteriormente, com estas classes estão associados conjuntos de números, os quais demonstram, da maneira mais clara possível as diferenças entre as classes.

Essas características (conjunto de números, classes e graus de universalidade) explicam o grande interesse por fenômenos críticos, principalmente a partir da década de setenta, o qual é justificado não apenas pela importância prática destes fenômenos, mas também pelo fato de que eles têm se mostrado muito úteis como campo de prova para certas técnicas teóricas, como o grupo de renormalização e o método de Monte Carlo.

1.3 - SISTEMAS MAGNÉTICOS PUROS

A seguir apresentamos os três sistemas magnéticos puros (isto é, sem desordem) cujas versões na presença de campos magnéticos aleatórios são estudadas na presente tese.

- **Modelo de Ising**

Inicialmente, focalizamos nossa atenção no mais simples modelo magnético, que consiste de spins de Ising S_i, podendo apontar apenas para cima $\left(S_i = +1\right)$ ou para baixo $\left(S_i = -1\right)$. O hamiltoniano de Ising básico consiste de interações de troca J_{ij} entre os dois pares de spins vizinhos mais próximos numa rede hipercúbica com dimensão espacial *d*:

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j \,, \tag{1.6}$$

Esse hamiltoniano possui uma simetria evidente: a energia é invariante em relação à mudança de sinal simultânea para todos os spins.

Num sistema de Ising ferromagnético puro todas as interações entre spins têm o mesmo valor $J > 0$. Tal sistema tem duas fases. Para temperaturas altas em relação ao valor de *J*, o efeito desordenador da entropia supera a ordem devida à energia, e os spins flutuam quase que independentemente [28]. Nessa fase paramagnética, a simetria existente no hamiltoniano (1.6) é preservada, e, deste modo, o número médio de spins para cima é igual ao dos spins para baixo. As correlações entre dois spins separados por uma distância *r* decaem como a exponencial $e^{-r/\xi}$, onde ξ é o comprimento de correlação. Inversamente em baixas temperaturas, o efeito ordenador da energia supera a desordem devida à entropia, e os spins ficam quase todos alinhados, para cima ou para baixo. Portanto, nessa fase ferromagnética, há dois estados de equilíbrio equivalentes - "para cima" e "para baixo" - relacionados um ao outro pela simetria que torna a energia invariante em relação à mudança de sinal simultânea para todos os spins. Ao escolher um desses estados em detrimento do outro, o sistema quebra espontaneamente essa simetria, e cada spin passa a ter um valor esperado $\langle S_i \rangle$ diferente de zero, o qual indica que no equilíbrio o spin fica mais

tempo apontando para cima, por exemplo, do que para baixo. (Aqui <...> indica uma média tomada em relação a tempos muito longos). Essa "densidade de magnetização espontânea", $m \equiv \langle S_i \rangle$, anula-se na fase de alta temperatura (que é simétrica) e, portanto, serve como um parâmetro de ordem para caracterizar a quebra de simetria que ocorre na fase ordenada. Na fase ordenada, a função de correlação entre dois spins se aproxima do valor m^2, que é diferente de zero, à medida que a distância entre eles tende para um valor infinito. Essa propriedade é conhecida por "ordem de longo alcance". A transição entre as duas fases ocorre na temperatura crítica T_C, na qual m se anula quando o sistema é aquecido a partir de temperaturas mais baixas. No modelo de Ising puro definido por (1.6), ξ diverge e m se anula em T_C, um comportamento característico da transição de fase de segunda ordem (ou contínua). A variação do parâmetro de ordem m com a temperatura é fornecida por um gráfico idêntico ao da figura 1.4.

Essa descrição simples e intuitiva das fases do modelo de Ising ferromagnético puro é correta para todas as dimensões $d > 1$. Em uma dimensão, o fato de que cada spin está conectado ao resto da rede somente por duas ligações faz com que as variações térmicas provoquem a rápida destruição de qualquer alinhamento ferromagnético. Assim, enquanto que em temperatura nula o modelo de Ising está ordenado, em qualquer temperatura positiva a entropia sempre supera a energia, para longas escalas de comprimento, e o sistema está desordenado. O princípio de que estados ordenados são mais facilmente destruídos pelas variações de temperatura à medida que d decresce é muito geral e dá origem ao conceito de "dimensão crítica mais baixa", d_l, a qual é definida como a mais baixa dimensão (não necessariamente inteira) acima da qual uma fase ordenada pode existir em temperaturas diferentes de zero. Para os sistemas de Ising ferromagnéticos, então, $d_l = 1$.

• Modelo de Potts

O modelo de Potts [39] é uma generalização do modelo de Ising. Em sua versão original, o sistema é constituído de spins clássicos localizados nos sítios de uma rede com cada spin podendo se posicionar em q direções coplanares igualmente espaçadas, especificadas pelos ângulos

$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q} \quad ; \quad n = 0, 1, \cdots, q-1. \tag{1.7}$$

Cada spin interage com seus vizinhos através de um acoplamento que depende somente do ângulo relativo entre eles. Esse modelo é mais conhecido na literatura como modelo $Z(q)$ numa alusão ao grupo de simetria ao qual o sistema pertence.

A versão mais simplificada analisada por Potts em 1952 (e sugerida por C. Domb em 1951) considera a interação de um par de spins da forma

$$J_{ij} = J\delta_{\lambda_i,\lambda_j}, \tag{1.8}$$

onde $\delta_{\lambda_i,\lambda_j}$ é o delta de Kronecker definido por

$$\delta_{\lambda_i,\lambda_j} = \begin{cases} 1 & se \quad \lambda_i = \lambda_j, \\ 0 & se \quad \lambda_i \neq \lambda_j, \end{cases} \tag{1.9}$$

e λ_i é a variável de spin que corresponde a uma das q-ésimas raízes da unidade.

O sistema é ferromagnético se $J > 0$. Nesse caso o estado fundamental consiste de q configurações em que todos os spins estão no mesmo estado. Para $J < 0$ o sistema é antiferromagnético. O estado fundamental possui $q(q-1)$ configurações em que os dois spins apontam em direções distintas. Tal versão é conhecida como modelo de Potts padrão ou simplesmente modelo de Potts.

É um resultado bem conhecido que a teoria de campo médio para o modelo de Ising [78] fornece uma descrição qualitativamente correta de sua transições de fase. Portanto, na ausência de uma solução exata, é natural que se examine o modelo de Potts com q componentes, na aproximação de campo médio. Em qualquer sistema na Mecânica Estatística, cada componente interage com o campo magnético externo e com os componentes vizinhos. No modelo de campo médio, o segundo efeito é substituído por uma média sobre todos os componentes.

Primeiramente, vamos ver como fica o hamiltoniano de campo médio para o modelo de Ising com interações entre os pares de spins vizinhos mais próximos definido pela equação (1.6). Se cada spin S_i tiver p vizinhos, então o campo total que atua sobre ele é

$$H + J\sum S_j, \tag{1.10}$$

onde a soma é sobre os p sítios vizinhos de j. No modelo de campo médio esse campo é substituído por

$$H+(N-1)^{-1}pJ\sum_{j\neq i}S_j\,, \tag{1.11}$$

onde N é o número de spins, e a soma agora é sobre os $N-1$ sítios j diferentes de i. Isto é equivalente a substituir o hamiltoniano (1.6) por

$$\mathcal{H}=-\frac{pJ}{N-1}\sum_{(i,j)}S_iS_j-H\sum_{i=1}^{N}S_i\,, \tag{1.12}$$

onde a primeira soma é sobre todos os $\frac{1}{2}N(N-1)$ pares distintos (i,j). A equação (1.12) é o hamiltoniano de campo médio para o modelo de Ising puro.

Para um sistema com N spins de Potts, o hamiltoniano de campo médio [39] é dado por

$$\mathcal{H}=-\frac{1}{N}cJ\sum_{i<j}\delta_{\lambda_i,\lambda_j}\,, \tag{1.13}$$

onde cada spin interage com os outros $N-1$ spins através de uma interação cujo valor é cJ/N, sendo c o número de coordenação da rede.

Uma teoria de campo médio para o modelo de Potts foi desenvolvida primeiramente por Kihara et al. [89] em 1954. Eles acharam uma transição de primeira ordem para $q>2$. A teoria de campo médio foi considerada novamente por Mittag e Stephen em 1974 [90]. Usando como guias os valores exatos das propriedades críticas obtidos para modelo bidimensional por Baxter [91], eles mostraram que o resultado de campo médio é exato em $d=2$ dimensões. De fato, o resultado exato em $d=2$ mostra uma transição de primeira ordem para $q>4$. De uma maneira mais geral, acabou sendo verificada a existência de uma dimensão crítica $q_c(d)$ tal que, em d dimensões, a teoria de campo médio é válida para $q>q_c(d)$ [39].

• Modelo de Ashkin-Teller

Em 1943 o modelo de Ashkin-Teller [1] foi proposto como uma generalização do modelo de Ising. Em sua versão original, representando uma liga quaternária, cada

sítio da rede é ocupado por um dentre os quatro diferentes tipos de átomos designados por A, B, C e D. Dois átomos iguais localizados em sítios distintos interagem com energia ε_0; para os pares de átomos dos tipos AB e CD a energia de interação é ε_1; para os pares AC e BD a energia é ε_2; e para os pares AD e BC a energia de interação é ε_3.

Fan [2] mostrou em 1972 como o MAT pode ser escrito em termos de variáveis de spin de Ising associando a cada sítio da rede dois spins $\sigma_i = \pm 1$ e $S_i = \pm 1$. O átomo A no sítio i é representado quando os spins do par (σ_i, S_i) têm os valores (1,1); os valores (+1,-1) representam o átomo B; os átomos C e D são representados respectivamente pelos pares (-1,+1) e (-1,-1).

Desse modo, a energia de interação de diferentes pares de átomos situados nos sítios i e j pode ser escrita em termos das variáveis de spin σ e S do seguinte modo:

$$\varepsilon_{i,j} = -J_0 - J_1 S_i S_j - J_2 \sigma_i \sigma_j - J_3 \sigma_i S_i \sigma_j S_j \quad , \tag{1.13}$$

onde

$$-4J_0 = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \quad , \tag{1.14}$$

$$-4J_1 = \varepsilon_0 + \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3 \quad , \tag{1.15}$$

$$-4J_2 = \varepsilon_0 - \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 \quad , \tag{1.16}$$

$$-4J_3 = \varepsilon_0 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_3 \quad . \tag{1.17}$$

Em 1980 DBGK [3], como já vimos no item 1.1, consideram o MAT como uma superposição de dois sistemas de Ising acoplados de forma que seu hamiltoniano é escrito como:

$$\mathcal{H} = -\sum_{<ij>} \left[J_2 \left(\sigma_i \sigma_j + S_i S_j \right) + J_3 \sigma_i \sigma_j S_i S_j \right] \quad , \tag{1.18}$$

onde a soma envolve todos os pares de vizinhos mais próximos na rede.

A partir da identificação dos campos efetivos que atuam sobre os spins σ, S e σS no sítio i, dados por:

$$h_\sigma^i = \sum_j < \sigma_j > K_2 \quad , \tag{1.19a}$$

$$h_S^i = \sum_j < S_j > K_2 \quad , \tag{1.19b}$$

$$h^i_{\sigma S} = \sum_j < \sigma_j S_j > K_3 \quad , \tag{1.19c}$$

onde $K_i = \beta J_i \quad (i = 2,3)$ e a soma extende-se apenas sobre os vizinhos ao sítio i, são obtidas as equações de campo médio:

$$< \sigma_i >= \frac{\left[\tanh\left(h^i_\sigma\right) + \tanh\left(h^i_S\right)\tanh\left(h^i_{\sigma S}\right)\right]}{D} \quad , \tag{1.20a}$$

$$< S_i >= \frac{\left[\tanh\left(h^i_S\right) + \tanh\left(h^i_\sigma\right)\tanh\left(h^i_{\sigma S}\right)\right]}{D} \quad , \tag{1.20b}$$

$$< \sigma_i S_i >= \frac{\left[\tanh\left(h^i_{\sigma S}\right) + \tanh\left(h^i_\sigma\right)\tanh\left(h^i_S\right)\right]}{D} \quad , \tag{1.20c}$$

$$D = 1 + \tanh\left(h^i_\sigma\right)\tanh\left(h^i_S\right)\tanh\left(h^i_{\sigma S}\right) \quad . \tag{1.20d}$$

Nessa aproximação a energia livre é dada por:

$$F = -\sum_i \ln Z^i + K_2 \sum_{<ij>} \left(< \sigma_i >< \sigma_j > + < S_i >< S_j > \right) + K_3 \sum_{<ij>} < \sigma_i \sigma_j >< \sigma_j S_j >, \tag{1.21}$$

onde

$$Z^i = 4\left[\cosh\left(h^i_\sigma\right)\cosh\left(h^i_S\right)\cosh\left(h^i_{\sigma S}\right) + senh\left(h^i_\sigma\right)senh\left(h^i_S\right)senh\left(h^i_{\sigma S}\right)\right] \tag{1.22}$$

é a função de partição de uma única partícula sob a ação dos campos magnéticos h^i_σ, h^i_S e $h^i_{\sigma S}$.

O diagrama de fases para esse modelo, apresentado na figura 1.5, é então determinado pelo estudo numérico das soluções das equações de campo médio (1.20). Sempre que é encontrada mais de uma solução é escolhida aquela que minimiza (1.21).

Por meio desse estudo foram encontradas, além da fase paramagnética na qual $< \sigma >=< S >=< \sigma S >= 0$, as fases descritas a seguir.

(1) Fase de Baxter (Baxter) na qual todos os parâmetros de ordem são nulos.

(2) Fase de Ising Ferromagnética ($< \sigma S >$) para a qual apenas a magnetização $< \sigma S >$ não é nula.

(3) Fase de Ising Antiferromagnética ($< \sigma S >_{AF}$). Essa fase é a análoga à fase $< \sigma S >$ para valores negativos de K_3 e é obtida dividindo-se a rede em duas sub-

redes distintas. Nela apenas a magnetização $<\sigma S>$ de cada sub-rede não é nula, com as sub-redes apresentando magnetização de sentidos contrários.

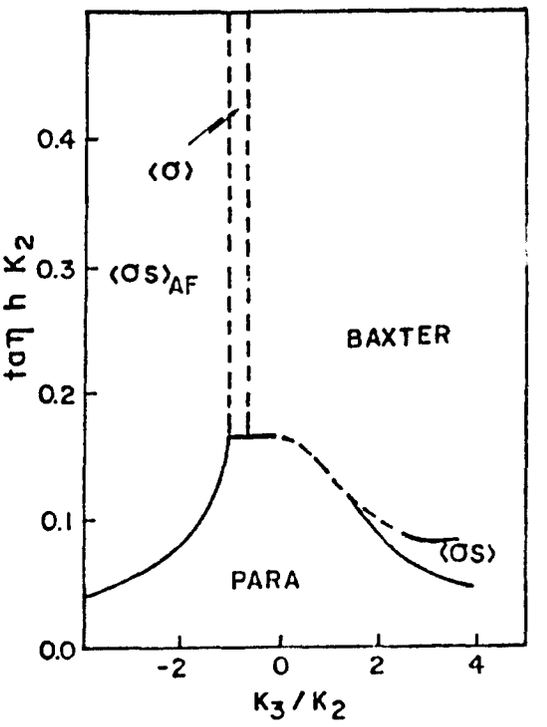


Figura 1.5 - Diagrama de fases para o modelo de Ashkin-Teller isotrópico [3]. As linhas tracejadas representam transições de fase de primeira ordem e as cheias de segunda ordem.

Esse diagrama apresenta ainda a fase indicada por $<\sigma>$ na qual apenas essa magnetização não é nula ($<S>=<\sigma S>=0$) e, na mesma região do diagrama, a sua equivalente com $<S>\neq 0$ e $<\sigma>=<\sigma S>=0$.

1.4 - SISTEMAS MAGNÉTICOS NA PRESENÇA DE CAMPOS ALEATÓRIOS

Neste ítem apresentamos as teorias de campo médio para os modelos de Ising e de Potts na presença de campos aleatórios.

• **Modelo de Ising na presença de campo aleatório.**

Esse modelo tem atraído muito interesse desde o trabalho pioneiro de Imry e Ma em 1975 [9], que foi o primeiro a discutir se poderia ocorrer ordenamento em sistemas com campo aleatório. Estes autores, através de argumentos qualitativos, chegaram à conclusão que a menor dimensão crítica d_l (isto é, a menor dimensão acima da qual uma fase ordenada pode existir para temperatura diferente de zero) para o modelo de Ising com campo aleatório é $d_l = 2$, em contraste com o valor da menor dimensão crítica para o modelo de Ising puro que é $d_l = 1$. Assim, este trabalho deu origem à busca da menor dimensão crítica para o modelo de Ising com campo aleatório e para outros modelos com campo aleatório.

O hamiltoniano de Imry e Ma é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N}\sum_{i\neq j} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad . \tag{1.23}$$

As distribuições típicas para o campo aleatório h_i usadas na teoria são a distribuição gaussiana e a distribuição bimodal

$$P(h_i) = \frac{1}{2}\left[\delta(h_i - h_0) + \delta(h_i + h_0)\right] \quad . \tag{1.24}$$

A distribuição é a mesma para todo sítio i e a desordem é temperada (ou "quenched").

Revisões recentes dos principais resultados teóricos e experimentais para esse modelo foram feitas nas referências [12] e [51]. Nos próximos parágrafos, esses resultados serão apresentados de maneira condensada.

Começamos por uma breve discussão das previsões da teoria de campo médio [10,11]. Para o caso da distribuição gaussiana, à medida que a variância do campo aleatório cresce a partir de zero, a temperatura crítica decresce até assumir o valor $T_C = 0$ para uma variância crítica σ_C dada por $\left(\frac{2\pi}{\sigma_C}\right) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}$. Se $\sigma > \sigma_C$ o sistema estará desordenado em todas as temperaturas. O diagrama de fases nesse caso será obtido no capítulo 2. No caso da distribuição bimodal (1.24), à medida que h_0 cresce

a partir de zero, a temperatura crítica decresce até assumir o valor $T_C = 0$ para um campo crítico h_0 dado por $\left(\frac{h_0}{J}\right) = 0.5$.

Para distribuições do campo aleatório, $P(h_i)$, que decrescem monotonicamente com $|h_i|$ crescente, como a distribuição gaussiana, a transição é sempre de segunda ordem [10]. Para distribuições que têm um mínimo em campo zero, como a distribuição bimodal (1.24), há um ponto tricrítico [11]. No caso da distribuição bimodal, a transição se torna de primeira ordem para valores $h_0 > h_0^C$, como mostra a figura 1.6 [11].

Agora, passaremos a apresentar resultados experimentais básicos encontrados para o modelo de Ising em campo magnético aleatório juntamente com a discussão sobre a menor dimensão crítica para este modelo.

É bastante difícil relacionar o hamiltoniano (1.23) com um sistema magnético real, no qual a magnitude do campo magnético aleatório possa ser controlada. Ao invés disto, o modelo de Ising em campo magnético aleatório é estudado em antiferromagnetos da Ising diluídos na presença de um campo uniforme, aplicado na direção em que o spin se ordena. Esta analogia entre os dois sistemas foi indicada pela

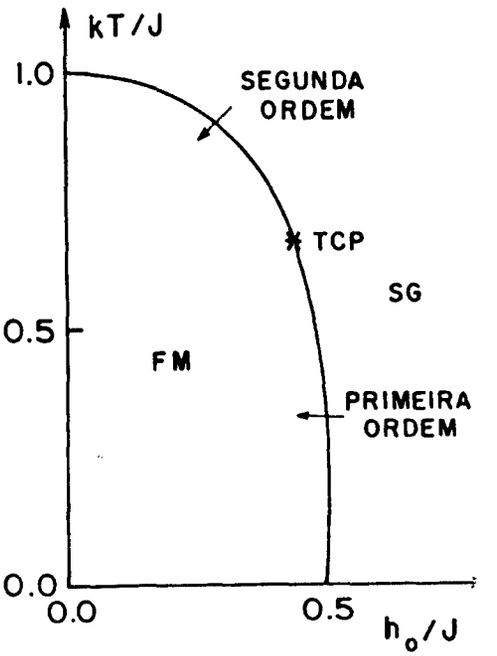


Figura 1. 6 - Diagrama de fases do modelo de Ising na presença de campo magnético aleatório, com distribuição bimodal dada por (1.24). FM é a fase ferromagnética, e SG é a fase independente (ou vidro de spin). TCP é o ponto tricrítico.

primeira vez por Fishman e Aharony [16]. No modelo ferromagnético original de Imry e Ma [9], há uma competição entre as flutuações locais no campo magnético aleatório resultante e a ordem ferromagnética de longo alcance. No antiferromagneto diluído, as flutuações locais no número de spins na sub-rede tendem a favorecer mais uma sub-rede do que a outra a se alinhar ao longo do campo uniforme, em competição direta com a ordem antiferromagnética de longo alcance. Essa analogia permitiu a Cardy [52] mostrar que o comportamento estático crítico de um ferromagneto num campo aleatório é idêntico ao de um antiferromagneto diluído na presença de um campo uniforme. O campo aleatório e o uniforme são relacionados por

$$h_r^2 = \frac{x(1-x)\left[T^{MF}/T\right]^2\left(g\mu_\beta SH/k_BT\right)^2}{\left[\dfrac{1+\Theta^{MF}(x)}{T}\right]^2} \quad , \tag{1.25}$$

onde x é a concentração, T^{MF} é a temperatura de transição (na aproximação de campo médio) para o sistema puro e Θ^{MF} o parâmetro da suscetibilidade de Curie-Weiss. O modelo de Ising na presença de campo aleatório também tem sido utilizado na modelagem dos seguintes sistemas experimentais: separação de fase de fluidos binários num meio poroso [17], ponto crítico líquido-vapor num meio poroso [18], transição de $^4H_2$ confinado em aerogel poroso de sílica [19].

As primeiras investigações sobre o modelo de Ising em campo aleatório foram marcadas pela controvérsia sobre a existência de transição de fase para $d = 3$. A resposta teórica para esta questão é particularmente difícil, no entanto alguns dos primeiros experimentos [53], usando a técnica de birefrigência para medir o comportamento crítico do calor específico, mostraram forte evidência em favor da transição de fase. Em contraste com esta conclusão, a observação de uma forte histerese no antiferromagneto diluído levou alguns grupos a afirmar que a transição era destruída. As teorias rigorosas de Imbrie [54] e Bricmont e Kupiainen [55] provaram a validade da conclusão das primeiras medidas com a técnica de birefrigência.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

Agora estão sendo envidados esforços para calcular [56] e medir o comportamento crítico do modelo de Ising em campo aleatório para d = 3. A partir de medidas de espalhamento de nêutrons [57], pode-se concluir que o comprimento de correlação diverge com um expoente $\upsilon \approx 1$, e o expoente para ξ é aproximadamente $\gamma = 1.75$. O valor específico parece apresentar uma divergência simétrica, logarítmica [53]. Curiosamente, todos estes valores são próximos dos encontrados para o modelo de Ising puro com d = 2. Os trabalhos teóricos iniciais de fato previam uma efetiva redução dimensional no comportamento crítico [58-60]. Entretanto, supôs-se que a redução ocorria de três para uma dimensão. Como não há transição no modelo de Ising com d = 1, a conseqüência era que não haveria transição de fase para o modelo de Ising em campo aleatório com d = 3, conclusão que se mostrou posteriormente ser incorreta.

• **Modelo de Potts na presença de campo aleatório**

Nosso próximo passo agora é mostrar como o modelo definido pelo hamiltoniano (1.23) é generalizado pelo modelo de Potts em campo aleatório [13-15]. Esse modelo é definido por

$$\mathcal{H} = -q^{-1} J \sum_{(i,j)} \sum_{r} \lambda_i^r \lambda_j^{q-r} - q^{-1} \sum_i \sum_r \lambda_i^r h_i^{(q-r)} \quad , \tag{1.26}$$

onde q é o número de estados da variável de Potts e λ_i é a variável de spin, que corresponde a uma das *q-ésimas* raízes da unidade. O campo aleatório $h_i^{(r)}$ satisfaz à relação $h_i^{(r)} = \left(h_i^{(q-r)}\right)^*$ para que (1.26) seja real. Esse modelo foi estudado por Nishimori usando a distribuição gaussiana e a distribuição discreta

$$h_i^{(r)} = h\tau_i^r \quad , \tag{1.27}$$

onde a desordem temperada está contida em τ_i, que corresponde a uma das *q-ésimas* raízes da unidade em cada sítio. Qualquer uma das *q-ésimas* raízes tem igual probabilidade q^{-1} de assumir o valor τ_i. Em termos do delta de Kronecker δ, o sistema (1.26) com a distribuição discreta (1.27) é

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \delta_{\lambda_i, \lambda_j} - h \sum_i \delta_{\lambda_i, \tau_i} \quad . \tag{1.28}$$

A equação acima deixa claro que a distribuição discreta (1.27) é uma generalização natural da distribuição bimodal (1.24) para o modelo de Ising.

Na teoria de campo médio [13], o hamiltoniano efetivo correspondente a (1.17) é

$$\mathcal{H}_{ef} = \frac{1}{2}q^{-1}(q-1)NJm^2c - q^{-1}mcJ\sum_i\sum_r \lambda_i^r - q^{-1}\sum_i\sum_r \lambda_i^r h_i^{(q-r)} \quad , \quad (1.29)$$

onde N é o número total de spins no sistema e c é o número de coordenação. Para a distribuição discreta (1.18), e se for utilizada a seguinte representação do delta de Kronecker

$$\delta_{\lambda_i,\lambda_j} = q^{-1}\sum_{r=0}^{q-1} \lambda_i^r \lambda_j^{q-r} \quad , \quad (1.30)$$

o hamiltoniano efetivo (1.20) torna-se

$$\mathcal{H}_{ef} = \frac{1}{2}q^{-1}(q-1)NJm^2c + q^{-1}mcJN + q^{-1}hN - mcJ\sum_i \delta_{\lambda_i,1} - h\sum_i \delta_{\lambda_i,\tau_i} \quad .(1.31)$$

A partir de (1.22), Nishimori obteve a energia livre mediada na desordem

$$\begin{aligned} \beta f \equiv \frac{\beta F}{N} = \frac{1}{2}(q-1)m^2cK + mcK + q^{-1}\beta h - q^{-1}\ln\left(e^{qmcK+\beta h} + q - 1\right) \\ - q^{-1}(q-1)\ln\left(e^{qmcK} + e^{\beta h} + q - 2\right) \quad , \end{aligned} \quad (1.32)$$

onde $K = \frac{\beta J}{q}$ e $\beta = \frac{1}{k_B T}$. O parâmetro de ordem m é determinado pela condição de extremo $\left(\frac{\partial f}{\partial m}\right) = 0$, e é dado por

$$m = \frac{e^{qmcK}}{e^{qmcK} + e^{\beta h} + q - 2} - \frac{1}{e^{qmcK+\beta h} + q - 1} \quad . \quad (1.33)$$

O lado direito de (1.33) corresponde à média da variável de spin λ_i, e portanto essa relação é auto-consistente. A equação (1.33) pode ser resolvida numericamente , e as soluções ferromagnética $(m > 0)$ e paramagnética $(m = 0)$ são encontradas, dependendo dos valores dos parâmetros. Os resultados são apresentados na figura 1.7 para $q = 3$ e $q = 10$, onde as duas fases são separadas por uma linha de transição de primeira ordem.

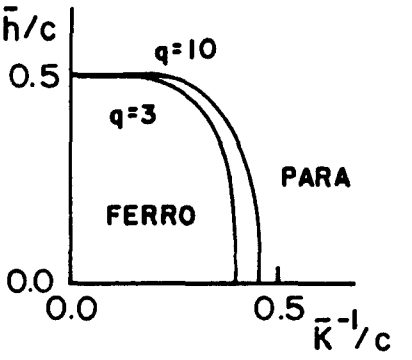


Figura 1. 7 - Diagrama de fases do modelo de Potts com q estados na presença de campo magnético aleatório, com a distribuição discreta (1.27). Esse diagrama é obtido através da solução da equação (1.33). As fases ferromagnética e paramagnética são separadas por uma linha de transição de fases de primeira ordem. As variáveis são escaladas do seguinte modo: $\bar{K} = \frac{qK}{\ln q}$ e $\bar{h} = \frac{h}{J}$.

Se for usada a distribuição gaussiana, a energia livre encontrada na teoria de campo médio é

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{1}{2}(q-1)m^2 cK \\ & -(2\pi)^{-(q-1)} \int\prod_r dh^{(r)} \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_r h^{(r)}h^{(q-r)}\right] \\ & \ln Tr \exp\left[mcK\sum_r \lambda^r + \beta\sigma q^{-1}\sum_r \lambda^r h^{(q-r)}\right] , \end{aligned} \tag{1.34}$$

onde Tr é o traço sobre todas as variáveis de spin λ_i. A solução numérica da condição de extremo para $q = 3$ é mostrada na figura 1.8.

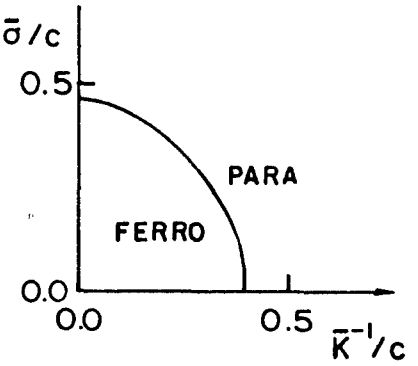


Figura 1. 8 - Diagrama de fases para a distribuição gaussiana com q = 3. Uma fronteira de primeira ordem separa as duas fases. As variáveis são escaladas do seguinte modo: $qK = \frac{\bar{K}}{\ln q}$ e $\beta\sigma = \bar{K}\bar{\sigma}\sqrt{q \ln q}$.

Definido o problema a ser estudado, passamos a apresentar a metodologia utilizada e o resumo da tese.

1.5 - METODOLOGIA

Inicialmente, o truque das réplicas [10,27] utilizado no estudo do modelo de Ising em campo aleatório foi generalizado. Isso nos permitiu o cálculo da energia livre do MAT na presença de campos magnéticos aleatórios. A partir da energia livre todas as outras funções termodinâmicas foram calculadas.

Apesar de ser difícil o cálculo da energia livre a partir do truque das réplicas, este truque foi usado por se tratar de um método padrão que já havia fornecido resultados corretos para o vidro de spin de Ising [61] e os modelos de Ising e Potts na presença de campo aleatório [10,13].

Durante o cálculo da energia livre, definimos o parâmetro de ordem como $m = \langle\langle S_i \rangle\rangle_h$, onde $\langle S_i \rangle$ é a média térmica da variável de spin S_i e $\langle \cdots \rangle_h$ é a média sobre a desordem temperada provocada pelo campo aleatório h.

A seguir, fazemos uso da estratégia que se baseia no estudo analítico das equações integrais acopladas do parâmetro de ordem e da estabilidade de suas soluções. A fim de serem complementadas as informações obtidas dessa maneira, foram feitas as expansões dessas soluções para $T \lesssim T_C$. A solução numérica das equações integrais acopladas também exerceram um papel auxiliar. Na solução numérica das integrais foi utilizado o método da quadratura de Gauss-Legendre [20,21], enquanto que os métodos de bissecção e das cordas [20] foram usados na solução numérica de equações transcendentais e implícitas.

No caso do MAT com interações de longo alcance na presença de campo magnético aleatório na direção $z = \langle \sigma S \rangle$, a abordagem utilizada nesta tese se mostrou poderosa pois nos possibilitou a caracterização de um diagrama de fases com várias superfícies de coexistência e linhas de pontos críticos. Deve ser destacado que obtivemos expressões analíticas para as coordenadas dos pontos especiais E e G, nos quais ocorrem mudanças nas ordens das transições, através das expansões dos

parâmetros de ordem para $T \lesssim T_C$. Essas expansões nos levaram à determinação analítica do coeficiente crítico β para a transição entre as fases de Baxter e paramagnética.

Deve-se lembrar que os resultados obtidos para um modelo com interações de longo alcance equivalem aos de uma teoria de campo médio, pois geralmente se diz que esta teoria representa a limite de dimensão infinita para sistemas em Mecânica Estatística [92,4]. Levando-se em conta esta informação, e considerando-se a ausência de resultados exatos, torna-se particularmente interessante o estudo do comportamento de campo médio do MAT na presença de campo aleatório na direção $z = \langle \sigma S \rangle$, pois este comportamento poderá servir como guia para futuros estudos deste modelo em duas ou três dimensões. Estes estudos poderiam ser feitos através das séries para altas e baixas temperaturas da energia livre, magnetização, e suscetibilidades e da simulação pelo método de Monte Carlo. Pois, enquanto seria possível a determinação precisa dos expoentes críticos e da temperatura de transição através do método de séries para as partes mais simples do diagrama, a técnica de Monte Carlo poderia ser útil para determinar os diferentes tipos de ordenamentos e as temperaturas de transição mesmo nas regiões complicadas do diagrama de fases (como as regiões fronteiriças da superfície EPFKE do diagrama determinado nesta tese, como mostra a figura 1.9, que será reapresentada no capítulo 5).

A abordagem utilizada neste tese se mostrou limitada quando analisamos o caso particular do MAT na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$. Devido à complexidade das equações das fases de Ising e Baxter, só conseguimos deduzir as equações das superfícies de instabilidade da solução paramagnética. Também mostramos que a transição entre as fases paramagnética e de Baxter é sempre de primeira ordem, porém não conseguimos determinar toda a estrutura do diagrama de fases. A análise do modelo de Potts na presença de campos aleatórios também foi impedida pela complexidade do estudo da estabilidade das soluções das equações integrais acopladas para os parâmetros de ordem.

Entretanto, mesmo para esses modelos mais complicados, conseguimos determinar expressões analíticas para grandezas termodinâmicas como magnetizações, calores específicos e suscetibilidades. E, no caso do MAT na presença de campos

aleatórios, o comportamento crítico obtido para estas grandezas conseguiu recuperar, na ausência de campos aleatórios, o comportamento crítico do MAT puro, que já havia sido determinado nas referências [3,4].

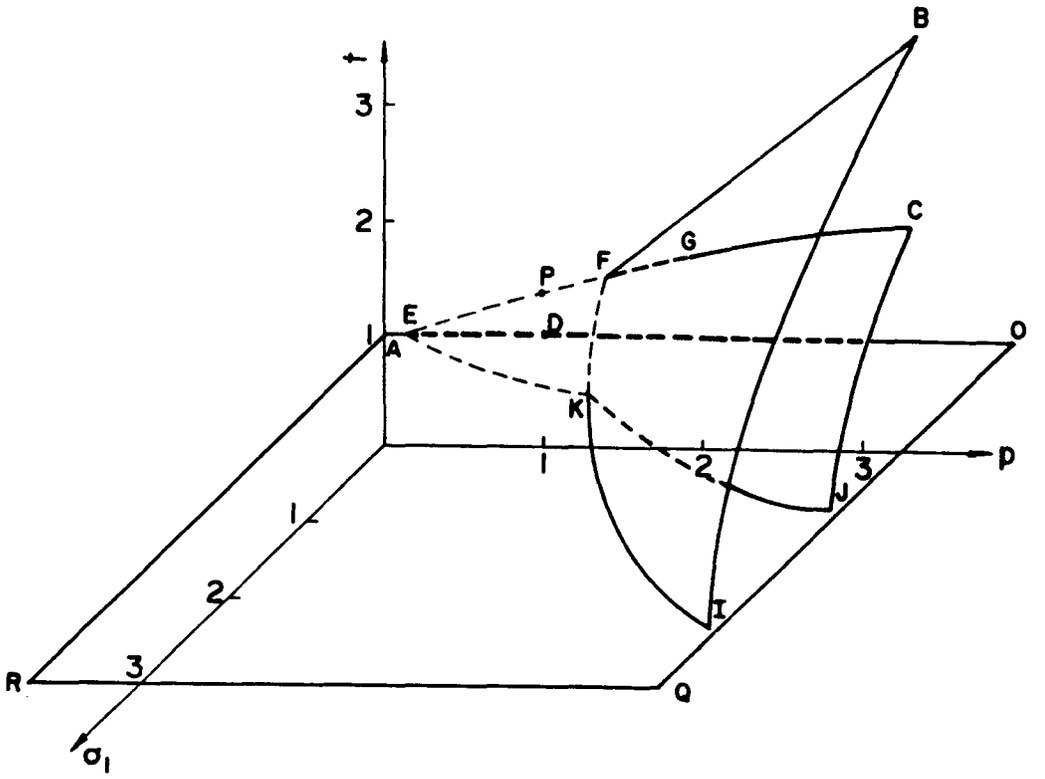
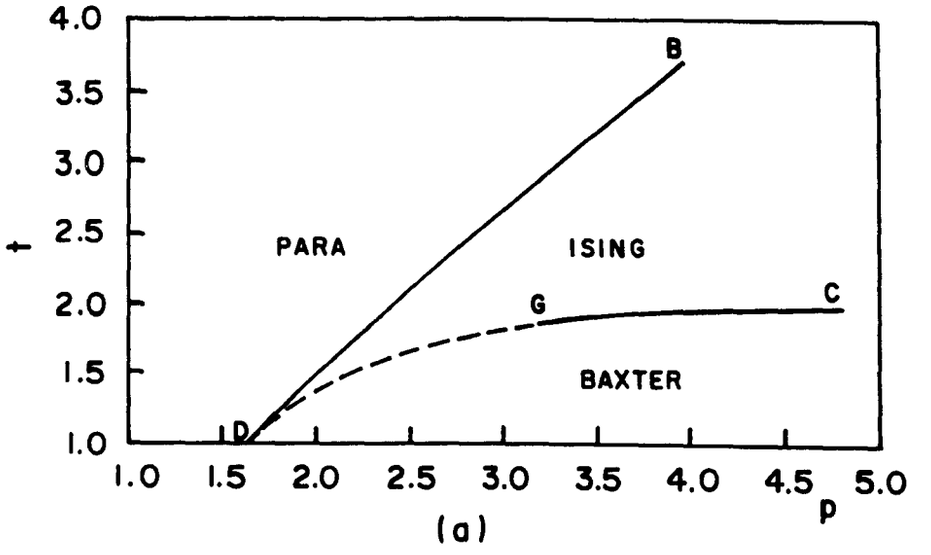


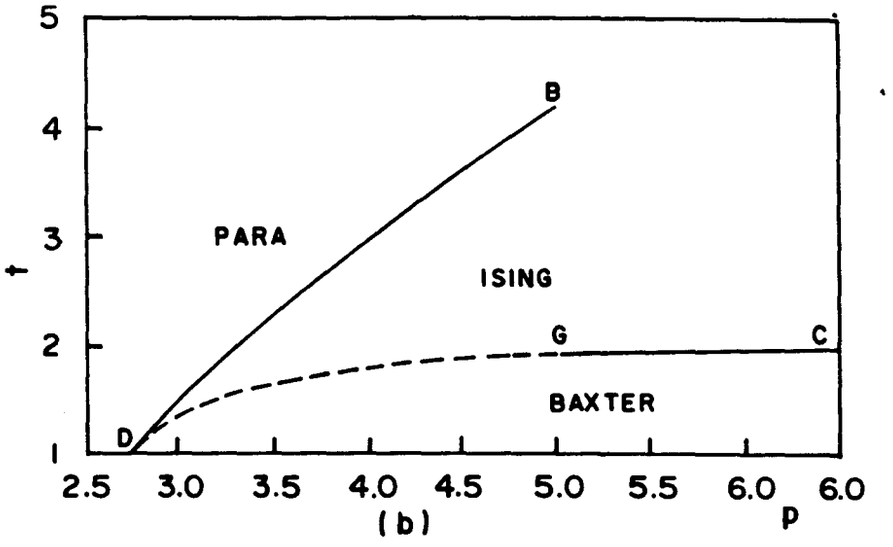
Figura 1.9 - Diagrama de fases do MAT isotrópico com interações ferromagnéticas de alcance infinito, na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$. A fase paramagnética ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$) é limitada por baixo pelas seguintes superfícies: EPFKE (superfície de transição de primeira ordem), FBIKF (superfície de transição de segunda ordem), e AEKIQRA (superfície de transição de segunda ordem). A fase de Ising ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0, \langle \sigma S \rangle \neq 0$) é limitada por cima pela superfície FBIKF, e por baixo pela superfície FGCJKF. A ordem da transição de fase nessa última superfície depende da posição do ponto crítico G. Os vários cortes realizados nas superfícies FBIKF e FGCJKF (veja figura 1.10) mostram como a posição de G muda no espaço de parâmetros $pt\sigma_1$. A fase de Baxter ($\langle \sigma \rangle \neq 0$, $\langle S \rangle \neq 0$, $\langle \sigma S \rangle \neq 0$)só existe abaixo dos seguintes planos: EPFKE, AEKIQRA e FGCJKF. O plano AOQR é a superfície de instabilidade da fase paramagnética. As coordenadas dos pontos críticos E e G foram determinadas analiticamente e são mostradas nas figuras 1.10 e 1.11, para valores especiais de p e σ_1.

1.6 - Resultados

Os resultados mais relevantes obtidos nesta tese são os seguintes:

1. Diagrama de fases do MAT isotrópico na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$ (veja figura 1.9). A fase paramagnética ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$) é limitada por baixo pelas seguintes superfícies: EPFKE (superfície de transição de primeira ordem), FBIKF (superfície de transição de segunda ordem), e AEKIQRA (superfície de transição de segunda ordem). A fase de Ising ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0$, $\langle \sigma S \rangle \neq 0$) é limitada por cima pela superfície FBIKF, e por baixo pela superfície FGCJKF. Os vários cortes realizados nas superfícies FBIKF e FGCJKF (figura 1.10) mostram como a posição de G muda no espaço de parâmetros $p - t - \sigma_1$. A fase de Baxter ($\langle \sigma \rangle \neq 0$, $\langle S \rangle \neq 0$, $\langle \sigma S \rangle \neq 0$) só existe abaixo dos seguintes planos: EPFKE, AEKIQRA e FGCJKF.
2. Deve ser destacado que obtivemos expressões analíticas para as coordenadas dos pontos especiais E e G desse diagrama de fases (veja figuras 1.10 e 1.11), nos quais ocorrem mudanças nas ordens das transições. As expansões das equações de autoconsistência para os parâmetros de ordem nos levaram à determinação analítica do coeficiente crítico β para a transição entre as fases de Baxter e paramagnética.
3. No caso do MAT isotrópico na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$, as equações das funções termodinâmicas foram discutidas e resolvidas numericamente para valores especiais das constantes de interação e da variância (figura 1.12, 1.13 e 1.14).





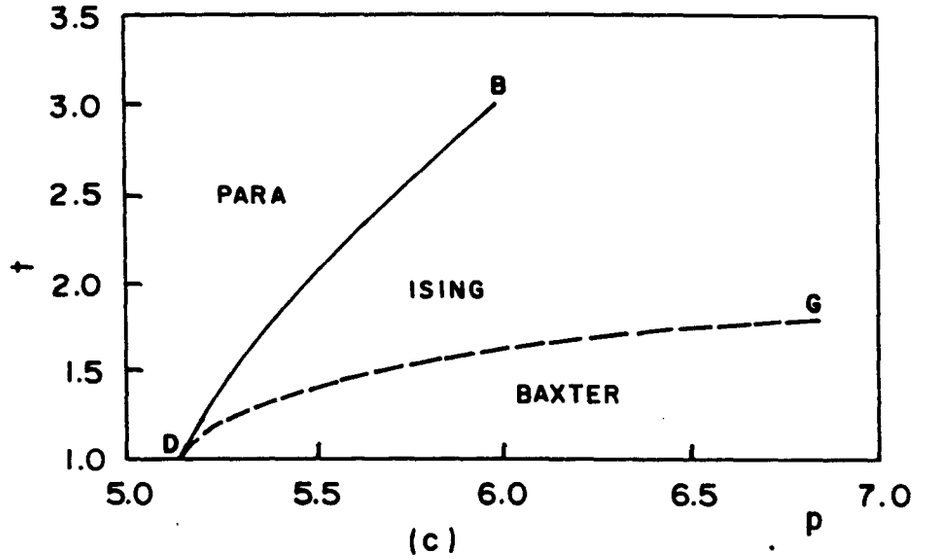


Figura 1.10 - Em (a) mostramos as intersecções das superfícies de istabilidade da fase paramagnética (linha DB) e da fase de Ising (linha DGC), que delimitam a região em que a fase de Ising é estável, no plano p-t para $\sigma_1 = 1.0$. A curva tracejada indica transição de primeira ordem e a sólida de segunda ordem. Em (b) e (c) mostramos as projeções para $\sigma_1 = 2.0$ e $\sigma_1 = 4.0$, respectivamente. Nota-se claramente que os pontos D, G, B e C deslocam-se para a direita à medida que σ_1 aumenta, no entanto a linha DGC permanece sempre tendendo assintoticamente por valores inferiores para $t = 2$.

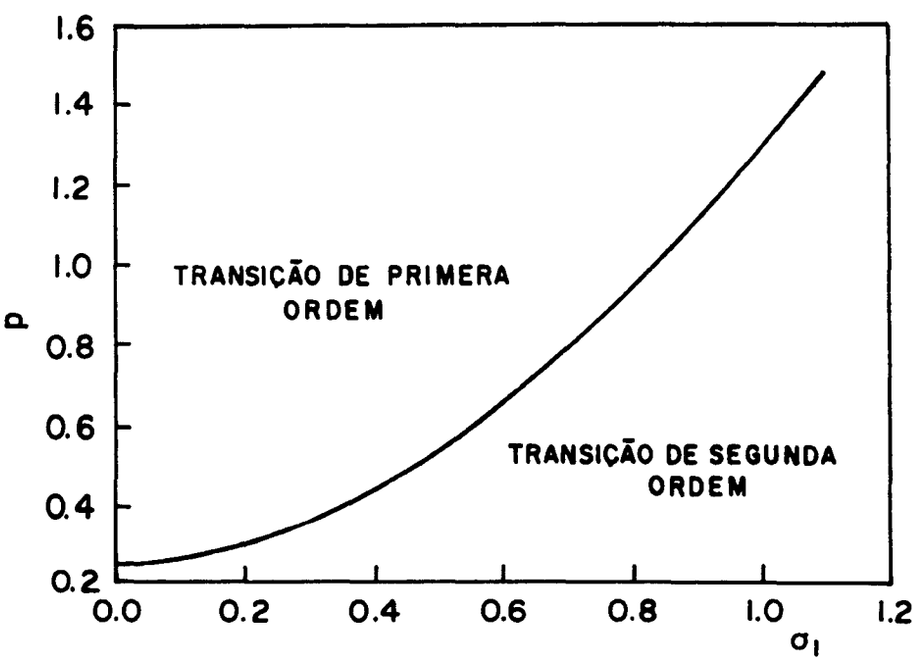


Figura 1.11 - Mostra as coordenadas do ponto E em que ocorre a mudança na ordem da transição entre as fases paramagnética e de Baxter, no semi-plano $t = 1$. Na região acima da curva a transição é de primeira ordem e na região abaixo da curva a transição é de segunda ordem. Para $\sigma_1 = 0$ temos $p = 0.25$.

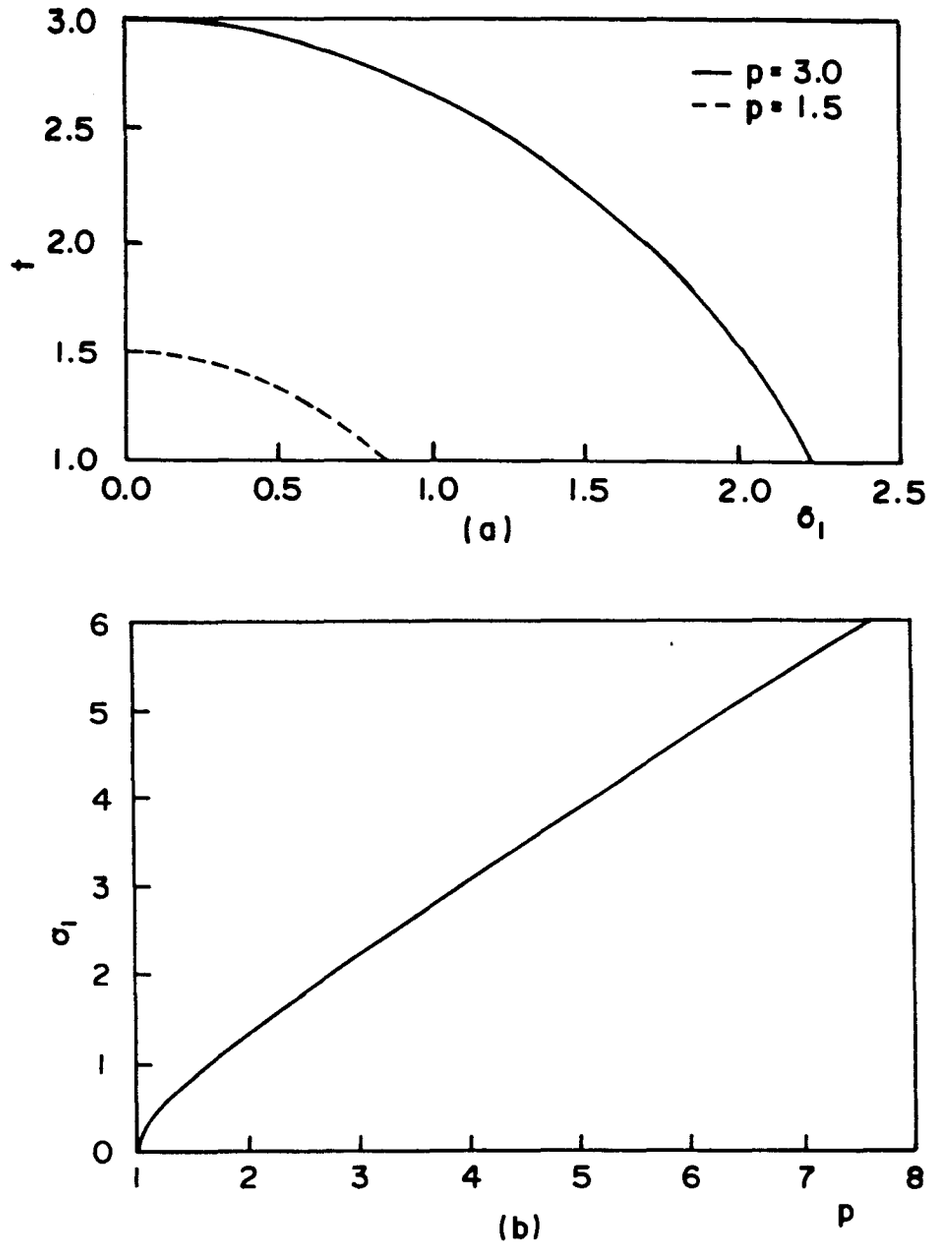
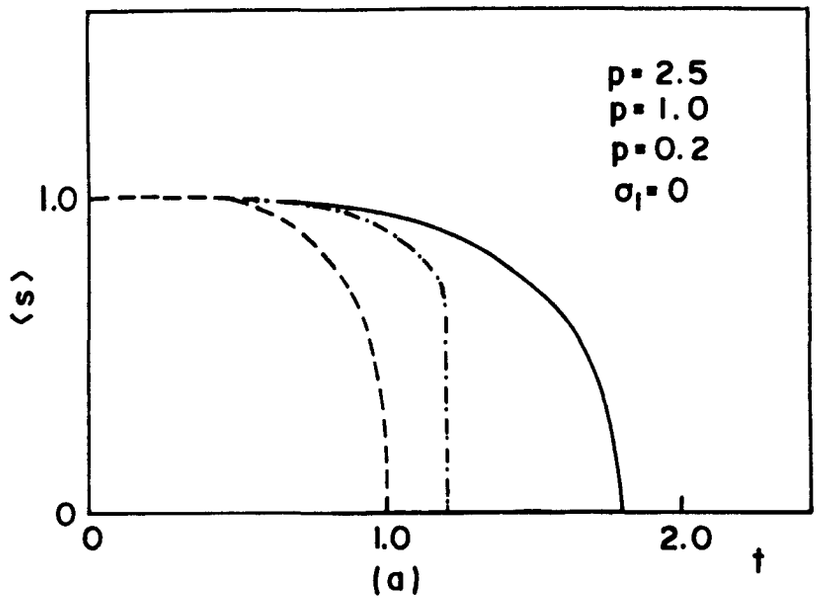


Figura 1.12 - Em (a) mostramos a solução da equação correspondente à superfície de instabilidade da fase paramagnética. Para $p = 1.5$ ($p = 3.0$) esta solução é estável na região acima da curva tracejada (curva sólida) e instável na região abaixo desta curva. No ponto $t = 1.0$ e $\sigma_1 \cong 0.8$ ($t = 1.0$ e $\sigma_1 \cong 2.2$) a superfície de instabilidade intercepta o semi-plano $t = 1$, para todos valores de p e σ_1. Cada ponto da curva mostrada em (b) nos fornece as coordenadas p e σ_1 de um ponto de interseção entre a superfície de instabilidade da solução paramagnética e o semi-plano $t = 1$, para todos valores de p e σ_1. Abaixo deste semi-plano a solução de Baxter é estável e acima é instável.



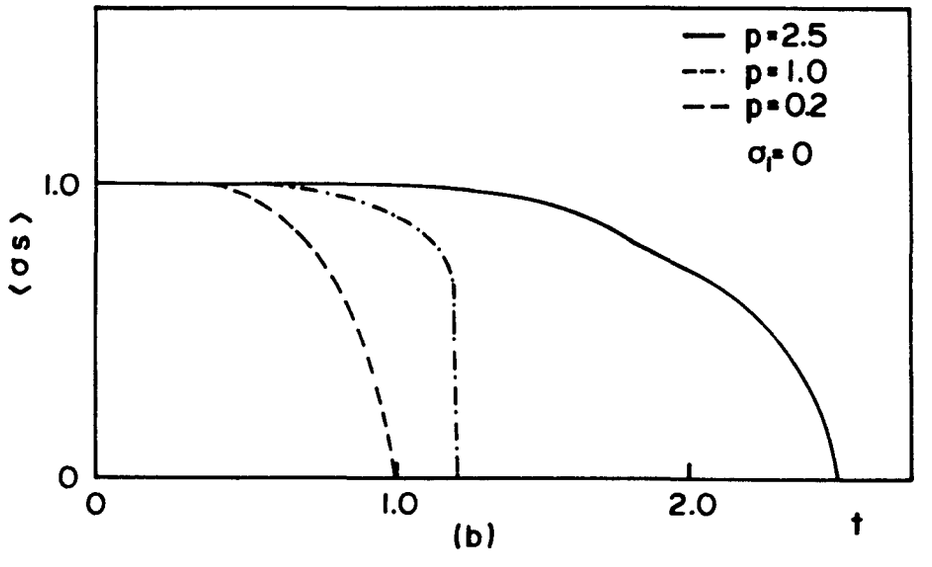


Figura 1.13 - Em (a) e (b) apresentamos os gráficos das magnetizações $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma S \rangle$ em função da temperatura (para campo magnético constante nulo), considerando $\sigma_1 = 0$ e os seguintes valores de p: $p = 0.2$ (curva tracejada), $p = 1.0$ (curva tracejada e pontilhada), e $p = 2.5$ (curva sólida). Para $p = 1$ o MAT regular se reduz ao modelo de Potts regular com 4 estados. Nessa situação, as curvas tracejadas e pontilhadas em (a) e (b) coincidem. Isso é uma conseqüênica da simetria da hamiltoniana (*para* $K_1 = K_2 = K_3$) com relação à transformação $S_i \to S_i$ e $\sigma_i \to \sigma_i S_i$ que faz com que $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle$. Note que, para p = 2.5, a curva $\langle \sigma S \rangle$ acusa a transição ocorrida em $\langle S \rangle$.

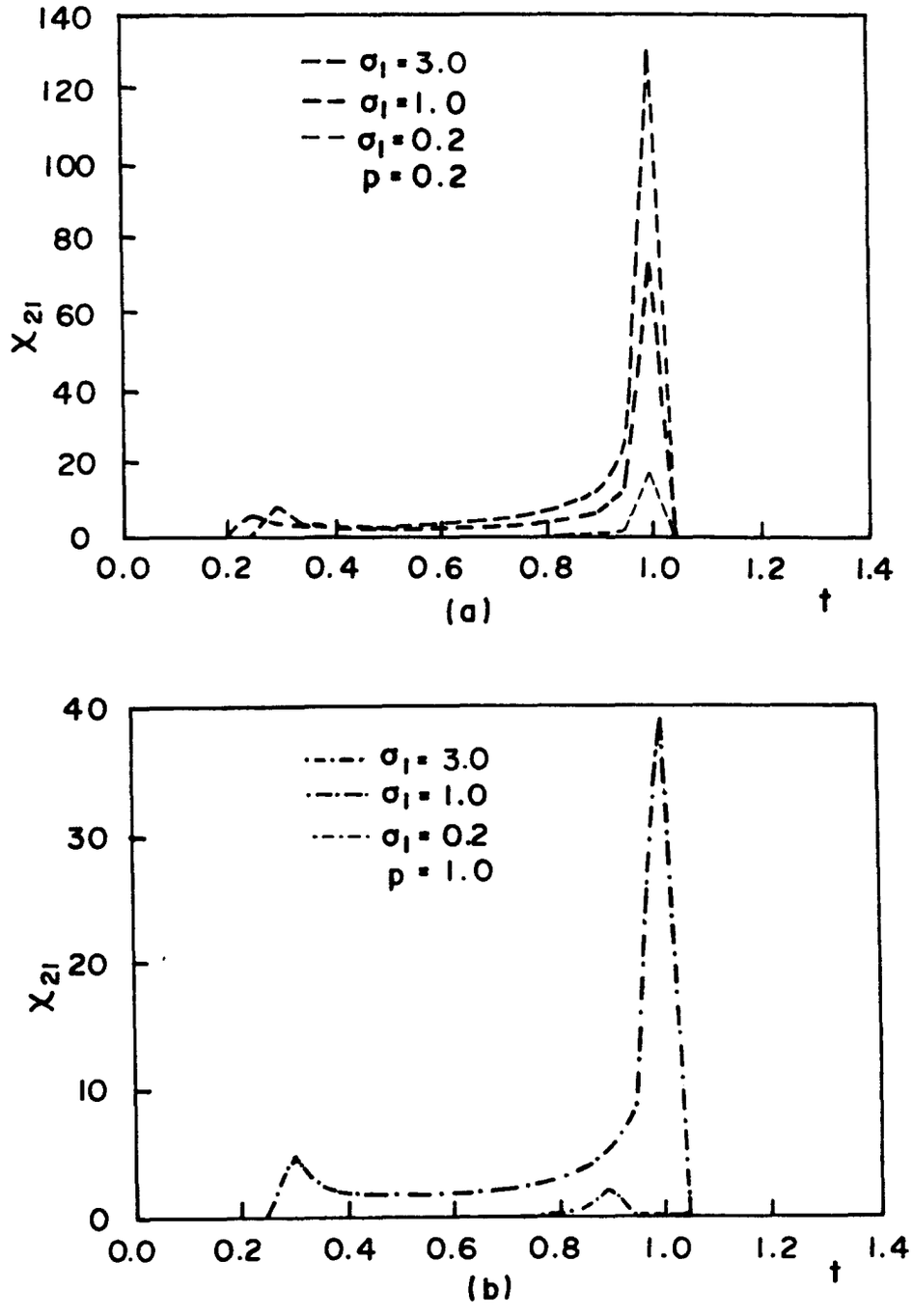


Figura 1.14 - (a) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{21}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 0.2$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{21} \cong 18.5$ em $t \cong 0.97$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) $J_1\chi_{21} \cong 130$ em $t = 0.97$ e $J_1\chi_{21} \cong 6.5$ em $t \cong 2.5$. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) $J_1\chi_{21} \cong 72.5$ em $t \cong 0.97$ e $J_1\chi_{21} \cong 7.0$ em $t \cong 0.29$. (b) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{21}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 1.0$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{21}$ assume valores infinitesimais em torno de $t = 1.04$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) χ_{21} tem um pico finito. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) χ_{21} tem dois picos finitos.

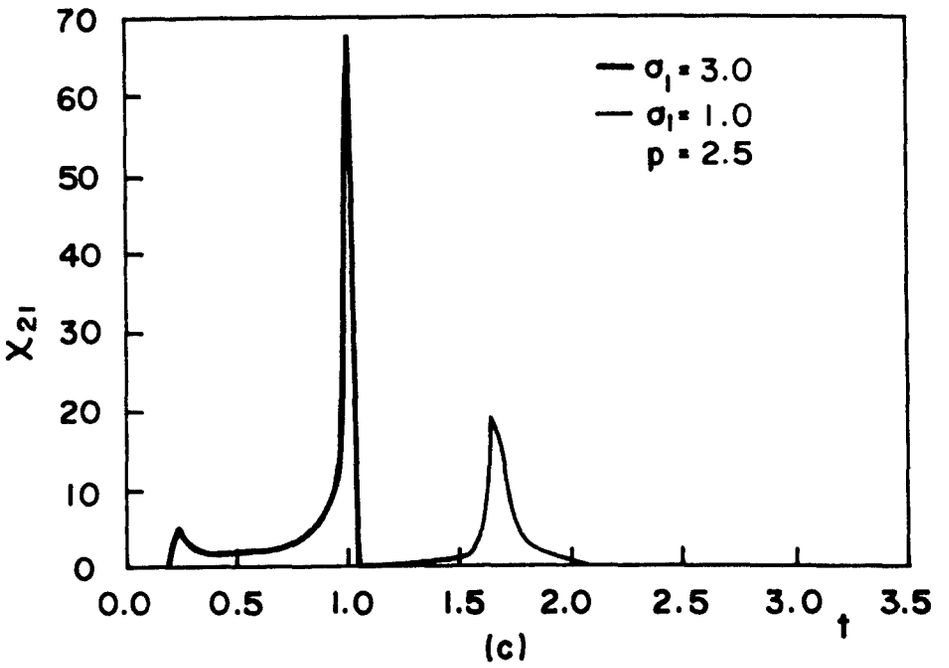


Figura 1.14 - c) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{21}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 2.5$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) χ_{21} tem um pico finito. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) χ_{21} tem dois picos finitos. Os gráficos da figura 1.14 mostram que χ_{21} não assume valores infinitos, como no caso de $\sigma_1 = 0$.

4. Foram determinadas e discutidas as funções termodinâmicas para o caso particular do MAT na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$. As equações das superfícies de instabilidade da solução paramagnética foram obtidas. Foi mostrado que a transição entre as fases paramagnéticas de Baxter é sempre de primeira ordem. O sistema de equações integrais acopladas para as magnetizações foi resolvido numericamente para valores especiais das constantes de interação e das variâncias $\tilde{h}_1$ e $\tilde{h}_2$.

1.7 - APRESENTAÇÃO DA TESE.

No capítulo 2, usamos o modelo de Ising na presença de campo magnético aleatório para apresentar de maneira detalhada o cálculo da energia livre usando o truque das réplicas. O critério de estabilidade do ponto fixo da relação autoconsistente para a magnetização foi utilizado com o objetivo de obter e discutir o diagrama de fases.

No capítulo 3, a generalização desse formalismo é feita para estudar o modelo de Potts com q estados na presença de campos magnéticos aleatórios. Foi mostrado que esse modelo tem também, como no caso regular [22], uma simetria que permite que o estudo da energia livre no intervalo $q \in (1,2)$ forneça o comportamento termodinâmico do sistema para todo $q > 2$. Também utilizamos um método simples desenvolvido por Christiano e Goulart Rosa [21] para obter a relação autoconsistente do parâmetro de ordem, na rede de Bethe. A energia livre é calculada através da generalização de um procedimento usado por Thompson [23] para obter a energia livre do modelo de Ising regular na árvore de Cayley. A rede de Bethe foi usada por permitir um tratamento matematicamente mais simples do que o do truque das réplicas e porque os resultados obtidos nesta rede reproduzem os da teoria de campo médio usual [21].

No capítulo 4, iniciamos o desenvolvimento da teoria de campo médio para o MAT com interações ferromagnéticas de alcance infinito na presença de campos magnéticos aleatórios. Calculamos a energia livre pelo truque das réplicas e a partir desta energia todas as outras funções termodinâmicas são determinadas. Em seguida mostramos a equivalência existente entre o MAT (regular e na presença de campos aleatórios) e o modelo de Potts com 4 estados. Essa equivalência será usada como dado auxiliar no capítulo 5 para a obtenção do diagrama de fases.

No capítulo 5, examinamos o MAT na presença de campo magnético aleatório apenas na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$. O diagrama de fases e a ordem das transições são obtidos a partir da análise da estabilidade das soluções das condições estacionárias da energia livre e das expansões das relações para os parâmetros de ordem em $T \lesssim T_C$. As equações da energia livre, magnetizações, calor específico, e suscetibilidade são

discutidas e resolvidas numericamente para valores especiais das constantes de interação e da variância $\tilde{h}_3$.

No capítulo 6, o caso particular do MAT na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$ é analisado. Determinamos e discutimos as expressões das funções termodinâmicas. Devido à complexidade das equações das fases de Ising e de Baxter, só conseguimos determinar as equações das superfícies de instabilidade da solução paramagnética. Também mostramos que a transição entre as fases paramagnética e de Baxter é sempre de primeira ordem. O sistema de equações integrais acopladas para as magnetizações foi resolvido numericamente para valores especiais das constantes de interação e das variâncias $\tilde{h}_1$ e $\tilde{h}_2$.

Finalmente, no capítulo 7 fazemos um resumo de nossos resultados e conclusões.

CAPÍTULO 2

MODELO DE ISING NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO - APRESENTAÇÃO DO TRUQUE DAS RÉPLICAS.

2.1 - INTRODUÇÃO.

Nesse capítulo introduzimos o formalismo que será utilizado no restante desta tese. Usamos como exemplo o modelo de Ising porque este sistema já foi bem estudado e servirá como teste. Todos os resultados aqui apresentados podem ser encontrados na literatura [10].

Na seção 2.2, através do truque das réplicas, calculamos a energia livre do modelo de Ising com interações ferromagnéticas constantes e de longo alcance, na presença de campo magnético com distribuição gaussiana. A desordem introduzida no sistema pelo campo aleatório é considerada temperada. Segundo Brout [24], isto significa que a média sobre a desordem deve ser efetuada sobre a energia livre e as grandezas dela derivadas. Ao contrário da desordem recozida onde se faz a média sobre a função de partição.

O cálculo da energia livre média é iniciado pela utilização do truque das réplicas para avaliar a média do logarítmo da função de partição. Em seguida, desacoplamos o primeiro somatório do hamiltoniano e utilizamos a identidade de Hubbard-Stratonovitch uma vez. Esse procedimento lineariza o hamiltoniano e

permite a efetuação da soma sobre as variáveis de spin para todas as réplicas do sistema, desde que seja feita a hipótese de que as réplicas sejam simétricas ou indistinguíveis. Por outro lado, esse procedimento introduz no hamiltoniano integrais sobre variáveis mudas, que podem ser identificadas como campos efetivos atuando sobre os sítios de cada réplica. Uma vez obtida a expressão final da energia livre média, a magnetização do sistema pode ser calculada.

Na seção 2.3 utilizamos o critério de estabilidade do ponto fixo da relação de recorrência para a magnetização com o objetivo de determinar e discutir o diagrama de fases.

2.2 - CÁLCULO DA ENERGIA LIVRE.

Nesta seção estão todos os detalhes do cálculo da energia livre porque o truque das réplicas apresentado. Porém, nos próximos capítulos os detalhes do cálculo dessa grandeza para modelos mais complexos serão colocados em apêndices.

Vamos considerar um sistema de N spins clássicos de Ising, com interações ferromagnéticas constantes de alcance infinito entre eles, na presença de campo magnético aleatório com distribuição gaussiana. O hamiltoniano desse sistema é:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N}\sum_{(i,j)} S_i S_j - \sum_i h_i S_i - H\sum_i S_i \quad , \tag{2.1}$$

onde $S_i = \pm 1$ é a variável de spin, h_i é o campo magnético aleatório no sítio i e $H > 0$ é o campo magnético externo constante em qualquer sítio. $J > 0$ é a interação constante entre dois sítios quaisquer e está escalada com N para que a energia seja finita no limite termodinâmico.

A distribuição gaussiana de h_i, com variância σ e o valor médio $\overline{h}$ para o campo aleatório h_i, é a mesma para todo o sítio i, e é dada por

$$p(h_i) = \left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma\right]^{-1} \exp\left[-\frac{(h_i - \overline{h})^2}{2\sigma^2}\right] \quad . \tag{2.2}$$

Os campos aleatórios $\{h_i\}$ são considerados estatisticamente independentes, portanto

$$P(\{h_i\}) = \prod_{i=1}^{N} p(h_i) \quad . \tag{2.3}$$

A função de partição z é

$$z = \underset{\{S_i\}}{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \underset{\{S_i\}}{Tr} \exp\left[\frac{\beta J}{N}\sum_{i\neq j} S_i S_j + \beta \sum_i h_i S_i + \beta H \sum_i S_i\right] \quad , \tag{2.4}$$

onde $\underset{\{S_i\}}{Tr}$ é o traço sobre as variáveis de spin em todos os sítios i; $\beta = \frac{1}{k_B T}$, sendo que k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta.

No limite termodinâmico a energia livre média por spin é

$$\bar{f} = -\frac{k_B T}{N} \lim_{N\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^{N} [p(h_i) dh_i] \ln z \quad . \tag{2.5}$$

Usando o truque das réplicas

$$\ln z = \lim_{n\to 0} \frac{(z^n - 1)}{n} \quad , \tag{2.6}$$

onde $z^n = \prod_{\alpha=1}^{n} z_\alpha$, sendo α o índice da réplica, podemos reescrever a energia livre $\bar{f}$ como

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{\substack{N\to\infty \\ n\to 0}} (Nn)^{-1} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\prod_{i=1}^{N} p(h_i) dh_i\right] Tr_n \exp\left[\sum_{\alpha=1}^{n} \left(\frac{\beta J}{N}\sum_{i\neq j} S_i^\alpha S_j^\alpha + \beta \sum_i h_i S_i^\alpha + \beta H \sum_i S_i^\alpha\right)\right] - 1 \right\} \quad , \tag{2.7}$$

onde Tr_n agora é o traço sobre todas as variáveis de spin no sítio i e na réplica α.

Tirando para fora da integral o que não depende de h_i, e trocando a ordem de Tr_n com a integral podemos escrever

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{\substack{N\to\infty \\ n\to 0}} (Nn)^{-1} \left\{ \left[Tr_n \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} \sigma} e^{\left[\sum_{\alpha=1}^{n} \left(\sum_{i\neq j} \frac{\beta J}{N} S_i^\alpha S_j^\alpha + \beta H \sum_i S_i^\alpha\right)\right]} \left(\prod_{i=1}^{N} \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. \left. e^{\frac{-(h_i - \bar{h})^2}{2\sigma^2} + \left(\beta \sum_{\alpha=1}^{n} S_i^\alpha\right) h_i} \right) \right] - 1 \right\} \quad . \tag{2.8}$$

Reconhecendo a integral que aparece na equação (2.8) como uma gaussiana

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i e^{\frac{-(h_i-\bar{h})^2}{2\sigma^2}+\left(\beta\sum_{\alpha=1}^{n} S_i^{\alpha}\right)h_i} = (2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma\, e^{\frac{(b^2-4ac)}{4a}} \quad , \tag{2.9}$$

onde $a = \frac{1}{2\sigma^2}$, $b = -\left[\frac{\bar{h}}{\sigma^2} + \beta\sum_{\alpha=1}^{n} S_i^{\alpha}\right]$ e $c = \frac{(\bar{h})^2}{2\sigma^2}$; após a substituição de (2.9) em (2.8) obtemos que:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{\substack{N\to\infty \\ n\to 0}} (Nn)^{-1} \left\{ \left[Tr_n e^{\left[\sum_{\alpha=1}^{n}\left(\sum_{i\neq j}\frac{\beta J}{N} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} + \beta H \sum_i S_i^{\alpha}\right) + \sum_i \frac{(b^2-4ac)}{4a}\right]} \right] - 1 \right\} \quad . \tag{2.10}$$

Usando a relação

$$\sum_{i\neq j} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} = \sum_{i,j} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} - \sum_{i=j} S_i^{\alpha} S_j^{\alpha} = \left(\sum_i S_i^{\alpha}\right)^2 - N \quad , \tag{2.11}$$

onde $\sum_{i\neq j}$ é o somatório sobre pares de spins que não sejam idênticos, $\sum_{i,j}$ é sobre todos os spins e $\sum_{i=j}$ é somente sobre os spins idênticos, podemos desacoplar $\sum_{i\neq j}$.

Assim, a equação (2.10) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \bar{f} = -k_B T \lim_{\substack{N\to\infty \\ n\to 0}} (Nn)^{-1} \Bigg\{ Tr_n \Bigg[\exp \sum_{\alpha=1}^{n} \frac{\beta J}{N} \left(\sum_i S_i^{\alpha}\right)^2 \exp \sum_{\alpha=1}^{n} \Big(-\beta J + \\ \beta H \sum_i S_i^{\alpha}\Big) \exp \sum_i \frac{(b^2-4ac)}{4a} \Bigg] - 1 \Bigg\} \quad . \end{aligned} \tag{2.12}$$

Utilizando-se a identidade de Hubbard-Stratonovitch

$$\exp(\lambda u^2) = (2\pi)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{1}{2}x^2 + (2\lambda)^{\frac{1}{2}} ux\right] \tag{2.13}$$

na primeira exponencial de (2.12), com $u = \sum_i S_i^{\alpha}$ e $\lambda = \frac{\beta J}{N}$, e colocando o termo constante $\exp\sum_{\alpha=1}^{n}(-\beta J)$ para fora do traço obtemos que:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{\substack{N\to\infty \\ n\to 0}} (Nn)^{-1} \left(\left(e^{-n\beta J} Tr_n \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\prod_\alpha dx^\alpha \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \exp\left[-\sum_\alpha \frac{(x^\alpha)^2}{2} + \right. \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. \left. \left. \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} (2\beta J)^{\frac{1}{2}} \sum_i \sum_\alpha S_i^\alpha x^\alpha \right] \exp\left[\beta H \sum_\alpha \sum_i S_i^\alpha + \sum_i \frac{(b^2 - 4ac)}{4a} \right] \right\} - 1 \right) \right) \quad . \tag{2.14}$$

A seguir será feita uma série de operações na expressão acima. Primeiramente faz-se a mudança de variáveis de x^α por $N^{\frac{1}{2}} x^\alpha$ e troca-se a ordem da integral e do traço. Em seguida usa-se a identidade

$$Tr_n \exp\left(\sum_i f_i \right) = Tr_n \prod_i \exp f_i = \prod_i Tr_i \exp f_i = \left(Tr_i \exp f_i \right)^N =$$

$$= \left[\exp\left(\ln Tr_i \exp f_i \right) \right]^N = \exp\left(N \ln Tr_i \exp f_i \right) \quad . \tag{2.15}$$

Colocando agora para fora do traço o que não depende de S_i^α, trocando a ordem dos limites (consultar a referência [25], que contem explicações detalhadas sobre esta inversão na ordem dos limites), e tendo em vista que Tr_i é o traço sobre um único sítio i, obtemos:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{n\to 0} \lim_{N\to\infty} (Nn)^{-1} \left(\left(e^{-n\beta J} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\prod_\alpha dx^\alpha \left(\frac{N}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \exp N \left\{ -\sum_\alpha \frac{(x^\alpha)^2}{2} + \right. \right. \right.$$

$$\left. \left. \left. \ln Tr_i \exp\left[(2\beta J)^{\frac{1}{2}} \sum_\alpha S_i^\alpha x^\alpha + \beta H \sum_\alpha S_i^\alpha + \frac{(b^2 - 4ac)}{4a} \right] \right\} - 1 \right) \right) \quad . \tag{2.16}$$

No limite termodinâmico, a integral múltipla da relação (2.16) pode ser avaliada pelo método do ponto de sela [26]. Assim, obtemos finalmente que

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{n\to 0} (nN)^{-1} \left[e^{-n\beta J} \exp N g\left(x_{max}^\alpha \right) - 1 \right] \quad , \tag{2.17}$$

$$g\left(x^\alpha \right) = -\sum_\alpha \frac{(x^\alpha)^2}{2} + \ln Tr_i \exp\left[(2\beta J)^{\frac{1}{2}} \sum_\alpha S_i^\alpha x^\alpha + \beta H \sum_\alpha S_i^\alpha + \frac{(b^2 - 4ac)}{4a} \right] \quad , \tag{2.18}$$

onde x_{max}^α é o valor de x^α que é ponto de extremo da função $g\left(x^\alpha \right)$.

Por hipótese, vamos considerar as réplicas indistinguíveis, isto é, $x^\alpha = x$ para α qualquer. Desse modo temos que

$$g(x) = -\frac{nx^2}{2} + \ln Tr_i \exp\left[(2\beta J)^{\frac{1}{2}} nS_i x + \beta HnS_i + \frac{b^2 - 4ac}{4a}\right] \quad . \tag{2.19}$$

Derivando $g(x)$ em relação a x e igualando a zero a derivada, encontramos que:

$$x_{\max} = (2\beta J)^{\frac{1}{2}} \frac{Tr_i S_i \exp \mathcal{H}_{ef}}{Tr_i \exp \mathcal{H}_{ef}} \quad , \tag{2.20}$$

onde $\mathcal{H}_{ef}$ é o hamiltoniano efetivo dado por

$$\mathcal{H}_{ef} = (2\beta J)^{\frac{1}{2}} nS_i x_{\max} + \beta HnS_i + \frac{b^2 - 4ac}{4a} \quad . \tag{2.21}$$

Definindo a grandeza m como

$$m = \frac{Tr_i S_i \exp \mathcal{H}_{ef}}{Tr_i \exp \mathcal{H}_{ef}} \quad , \tag{2.22}$$

podemos reescrever a expressão para x_{max} como

$$x_{max} = (2\beta J)^{\frac{1}{2}} m \quad . \tag{2.23}$$

Na seção 2.3 verificaremos que m corresponde à média na desordem da magnetização, isto é:

$$m = \langle\langle S_i \rangle\rangle_h \quad , \tag{2.24}$$

onde $\langle S_i \rangle$ é a média térmica da variável de spin e $\langle \cdots \rangle_h$ é a média sobre a desordem temperada.

A relação (2.17) pode ser reescrita em função de m:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{n \to \infty} (Nn)^{-1} \left[e^{-n\beta J} e^{-Nn\beta Jm^2} \left(Tr_i \exp \mathcal{H}_{ef} \right)^N - 1 \right] \quad . \tag{2.25}$$

Usando a integral (2.9) e a distribuição (2.2), podemos escrever $\exp \mathcal{H}_{ef}$ do seguinte modo:

$$e^{\mathcal{H}_{ef}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dh p(h) \left[\exp(2\beta Jm + \beta H + \beta h) S \right]^n \quad , \tag{2.26}$$

onde foi eliminado o índice de sítio i nas variáveis S_i e h_i.

Para avaliar o traço consideramos

$$\left(Tr_i \exp \mathcal{H}_{ef}\right)^N = \prod_{i=1}^{N} Tr_i \exp \mathcal{H}_{ef} \quad . \tag{2.27}$$

Assim, substituindo (2.26) e (2.27) na equação (2.25), trocando a ordem entre $\prod_{i=1}^{N} Tr_i$ e a integral, e efetuando o traço, encontramos:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{n\to 0}(nN)^{-1}\left\{e^{-n\beta J} e^{-Nn\beta Jm^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dhp(h)\left[2\cosh(2\beta Jm + \beta H + \beta h)\right]^{nN} - 1\right\} \quad . \tag{2.28}$$

Aplicando a identidade (2.6) para resolver o $\lim_{n\to 0}$, temos a expressão final:

$$\bar{f} = Jm^2 - \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty} dhp(h) \ln 2\cosh\left[\beta(2Jm + H + h)\right] \quad . \tag{2.29}$$

Para $H = 0$ a expressão acima recupera a encontrada por Schneider e Pytte [10]. Essa expressão será usada na próxima seção para a determinação do diagrama de fases.

2.3 - DIAGRAMA DE FASES.

Derivando a equação (2.29) em relação ao campo externo H, obtemos a magnetização média por spin

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial H} = \int_{-\infty}^{+\infty} dhp(h) \tanh\left[\beta(2Jm + H + h)\right] \quad . \tag{2.30}$$

De acordo com a relação (2.23) temos que $m = \left[1/(2\beta J)^{\frac{1}{2}}\right] x_{max}$. Portanto, m também é um extremo da energia livre média por spin. Desse modo, a derivada de $\bar{f}$ em relação a m é

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial m} = 0 \quad . \tag{2.31}$$

Usando a equação acima encontramos para m uma expressão igual ao segundo membro de equação (2.30), isto é:

$$m = \int_{-\infty}^{+\infty} dhp(h) \tanh\left[\beta(2Jm + H + h)\right] \quad . \tag{2.32}$$

Comparando (2.30) e (2.32) podemos concluir que m é a magnetização média por spin.

Por analogia com o parâmetro de ordem de Edwards e Anderson para o vidro de spins [27], Schneider e Pytte definiram o parâmetro de ordem q_h do seguinte modo:

$$q_h = \langle\langle S_i \rangle^2 \rangle_h = \int_{-\infty}^{+\infty} dh p(h) \tanh^2\left[\beta(2Jm + H + h)\right] \quad . \tag{2.33}$$

O parâmetro de ordem q_h é sempre diferente de zero, enquanto que m pode ser nulo ou diferente de zero. Para $m \neq 0$ e $q_h \neq 0$ temos a fase ferromagnética, e para $m = 0$ e $q_h \neq 0$ temos a fase denominada de independente por Schneider e Pytte. Essa última fase é completamente diferente da fase desordenada que aparece nos vidros de spins. Na fase vidro de spins os spins estão correlacionados, ao passo que nos modelos com campo aleatório os spins estão completamente independentes na fase desordenada. Isso é, a energia livre da equação (2.29) é independente da interação J.

Das equações (2.32) e (2.33) obtemos a fronteira entre as fases ferromagnética e independente. Na fase independente, $m^* = 0$ é um ponto fixo estável da equação (2.32) para $H = 0$. Quando a fronteira entre as fases independente e ferromagnética for ultrapassada, $m^* = 0$ continuará a ser um ponto fixo na fase ferromagnética, mas instável, e surgirá $m^* \neq 0$ como o novo ponto fixo estável. Para que isso ocorra, a condição de estabilidade (veja apêndice A) abaixo deve ser satisfeita no ponto fixo m^*:

$$\left\{\frac{\partial}{\partial m}\int_{-\infty}^{+\infty} dh p(h) \tanh\left[\beta(2Jm + H + h)\right]\right\}_{m=m^*} = 1 \quad . \tag{2.34}$$

Usando a definição (2.33), encontramos a equação de fronteira:

$$2\beta J(1 - q_h) = 1 \quad . \tag{2.35}$$

Introduzindo as variáveis

$$x = \left(\frac{2J}{\sigma}\right) \quad , \quad y = \left(\frac{k_B T}{\sigma}\right) \quad e \quad z = \frac{(h - \bar{h})}{\sigma} \quad , \tag{2.36}$$

podemos reescrever a equação (2.35) da seguinte maneira:

$$\frac{x}{y}\int_{-\infty}^{+\infty} dz \frac{e^{-\frac{z^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}\left[1-\tanh^2\left(\left(\frac{y}{x}\right)m^* + \frac{\bar{h}/\sigma}{y} + \frac{z}{y}\right)\right] = 1 \quad . \tag{2.37}$$

Considerando $v = \left(z/y\right)$ e $\bar{h} = 0$, no ponto fixo $m^* = 0$ obtemos:

$$x = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{e^{-\frac{(vy)^2}{2}}}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}}\left[1-\tanh^2(v)\right]} \quad . \tag{2.38}$$

Resolvendo numericamente a integral acima, determinamos o diagrama de fases da figura 2.1.

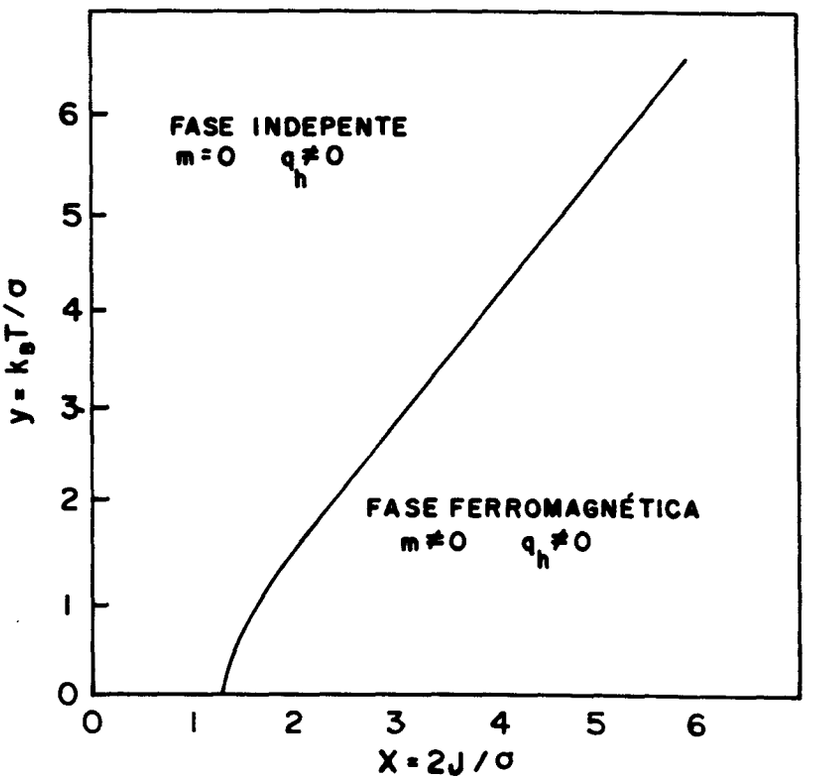


Figura 2. 1 - Diagrama de fases do modelo de spins de Ising com interação $J > 0$ de alcance infinito entre os spins, na presença de campo magnético aleatório com distribuição gaussiana cuja variância é σ. A magnetização m e o parâmetro q_h são definidos pelas equações (2.32) e (2.33), respectivamente.

A seguir mostramos que a coordenada x_c na figura 2.1 é realmente $\sqrt{\pi/2}$.

Quando $y = 0$, isto é em $t = 0$, temos:

$$x_c \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} dv \operatorname{sech}^2(v) = \sqrt{2\pi} \quad . \tag{2.39}$$

Como a integral em (2.39) é igual a *2*, obtemos $x_c = \sqrt{\pi/2}$. Considerando que $x = \left(2J/\sigma\right)$, determinamos a variância crítica σ_c:

$$\left(\frac{\sigma_c}{2J}\right) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \quad . \tag{2.40}$$

Para $x > x_c$ o sistema só existe na fase ferromagnética.

Pela observação do diagrama de fases da figura 2.1, podemos concluir que o comportamento do modelo de Ising na presença de campo aleatório é governado por efeitos antagônicos: o alinhamento ferromagnético provocado pela interação J e o desordenamento devido ao campo aleatório. Como foi apontado na referência [28], essa é uma competição entre duas energias - a energia associada à interação entre os spins e a energia do campo aleatório - e, portanto, difere da disputa entre energia e entropia que controla a transição de fase em sistemas regulares. Para campos aleatórios suficientemente altos, a ordem ferromagnética será suprimida, pois a energia do campo aleatório terá um valor maior que a energia ligada à interação *J*. A fase paramagnética $m = q_h = 0$ é obtida somente no limiar de temperatura infinita, no qual o parâmetro de ordem q_h se anula de acordo com a função $\left(\sigma/k_B T\right)^2$.

CAPÍTULO 3

SIMETRIA DO MODELO DE POTTS NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO.

3.1 - INTRODUÇÃO.

Nesse capítulo é mostrado como se faz a generalização do truque das réplicas, aplicando-o ao estudo do modelo de Potts com q estados e interações ferromagnéticas de alcance infinito, na presença de campos magnéticos aleatórios, que obedecem a uma função de distribuição gaussiana. Além de possibilitar a generalização do truque das réplicas, o estudo do modelo de Potts também é relevante para o nosso trabalho porque para $q = 4$ ele recupera o caso particular do MAT com $J_1 = J_2 = J_3$, como será mostrado no capítulo seguinte.

O modelo de Potts com campos aleatórios já foi estudado anteriormente e a expressão aqui obtida para a energia livre pode ser encontrada na literatura [13-15]. Inicialmente, na seção 3.2 determinamos a energia livre para o caso geral em que a cada estado se associa um campo magnético aleatório. Na seção 3.3 estudamos o caso particular no qual existe apenas um campo magnético aleatório, associado a um *q-ésimo* estado qualquer. A generalização da existência de uma nova simetria para a energia livre [22] foi verificada para esse caso particular do modelo de Potts desordenado.

Como conseqüência dessa simetria, mostra-se que a energia livre do modelo de Potts com q estados é mapeada, através de operações de dilatação e de inversão do

IFSC SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

campo magnético e do parâmetro de ordem, na energia livre do modelo com $q' = \frac{q}{(q-1)}$ estados. Esse mapeamento permite que o estudo da energia livre no intervalo $q \in (1,2)$ forneça o comportamento termodinâmico do sistema para todo $q>2$. O caso $q = 2$ corresponde ao ponto fixo da transformação de simetria.. A simetria não se aplica ao caso $q = 1$.

No final da seção 3.3, utilizando um método simples desenvolvido por Christiano e Goulart Rosa [21], foi obtida a relação de recorrência para a magnetização do modelo de Potts com q estados em um campo magnético aleatório na rede de Bethe. Em seguida, calculamos a energia livre para esse modelo através de um procedimento introduzido por Thompson [23] para obter a energia livre do modelo de Ising regular na árvore de Cayley, e generalizado por de Aguiar [29] para determinar a energia livre do modelo de Potts regular na árvore de Cayley, nas aproximações de campo médio e de Bethe-Peierls.

A rede de Bethe tem sido utilizada [30-38] porque o sistema magnético definido nela é exatamente solúvel e porque são recuperados os resultados da aproximação de campo médio. No caso de campo aleatório o tratamento do sistema desordenado na rede de Bethe é mais simples porque não é necessário fazer uso do truque das réplicas para obter a energia livre.

3.2 - CÁLCULO DA ENERGIA LIVRE PELO TRUQUE DAS RÉPLICAS.

Nessa seção definimos o modelo de Potts standard formado por N variáveis de Potts com q estados pelo seguinte hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N}\sum_{(i,j)}(q\delta_{S_i,S_j} - 1) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q} h_0^r\left(q\delta_{S_i,r} - 1\right) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q} h_i^r\left(q\delta_{S_i,r} - 1\right) \quad , \quad (3.1)$$

onde $J > 0$ é a interação ferromagnética de alcance infinito, $h_0^r > 0$ é o campo magnético constante aplicado na direção r, h_i^r é o campo magnético aleatório no sítio i e na direção r, q é o número de estados para cada um dos N spins. $S_i = 0, 1, ..., q-1$ é a variável de spin, δ_{S_i,S_j} é o delta de Kronecker definido como $\delta_{S_i,S_j} = 0$ se $S_i \neq S_j$ e

$\delta_{S_i,S_j} = 1$ se $S_i = S_j$. O somatório sobre todos os pares distintos *(i,j)* é indicado por $\sum_{(i,j)}$, e $\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{r=1}^{q}\right)$ é o somatório sobre todos os spins (estados).

A distribuição gaussiana para h_i^r, com variância σ_r e valor médio $\bar{h}^r$ para o estado *r*, é a mesma para todo sítio, e pode ser escrita do seguinte modo:

$$P\left(\left\{h_i^r\right\}\right) = \prod_{i=1}^{N} p\left(\left\{h_i^r\right\}\right) \quad , \tag{3.2a}$$

$$p\left(\left\{h_i^r\right\}\right) = \prod_{r=1}^{q}\left[\left(2\pi\right)^{\frac{1}{2}}\sigma_r\right]^{-1}.\exp\left[-\frac{\left(h_i^r - \bar{h}^r\right)^2}{2\sigma_r^{\,2}}\right] \quad . \tag{3.2b}$$

A função de partição z é

$$z = Tr\exp\left(-\beta\mathcal{H}\right) = Tr\exp\beta\left[\frac{J}{N}\sum_{(i,j)}\left(q\delta_{S_i,S_j} - 1\right) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q} h_0^r\left(q\delta_{S_i,r} - 1\right) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q} h_i^r\left(q\delta_{S_i,r} - 1\right)\right] \quad , \tag{3.3}$$

onde *Tr* é o traço sobre as variáveis de spin em todos os sítios *i* e para todos os estados *r*, e $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

A energia livre média por spin no limite termodinâmico é

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\int_{-\infty}^{+\infty}\prod_{i=1}^{N}\left[p\left(\left\{h_i^r\right\}\right)d\left\{h_i^r\right\}\right]\ln z \quad , \tag{3.4}$$

onde $d\left\{h_i^r\right\} = \prod_{r=1}^{q} dh_i^r$.

Mas pelo truque das réplicas temos que:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{N\to\infty}\lim_{n\to 0}(N\,n)^{-1}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}\prod_{i=1}^{N}\left[p\left(\left\{h_i^r\right\}\right)d\left\{h_i^r\right\}\right] Tr\exp\left[\sum_{\alpha=1}^{n}\left(\frac{\beta J}{N}\sum_{(i,j)}\left(q\delta_{S_i^{\alpha},S_j^{\alpha-1}}\right) + \beta\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q} h_0^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}} - 1\right) + \beta\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q} h_i^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}} - 1\right)\right)\right] - 1\right\} \quad , \tag{3.5}$$

onde Tr agora é o traço sobre as variáveis de spin para todos os sítios i, todos os estados r e todas as réplicas α.

O cálculo do traço na relação (3.5) requer a generalização do procedimento introduzido no capítulo 2. Os detalhes dessa generalização são apresentados no ítem B1 do apêndice B. A expressão final obtida para a energia livre média por spin no limite termodinâmico é a seguinte:

$$\bar{f} = \frac{qJ}{2}\sum_{r=1}^{q} m_r^2 - \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\prod_{r=1}^{q} dh^r\right) p\left(\{h^r\}\right)\left[\sum_{r=1}^{q} e^{\left(q\beta J m_r + q\beta h_0^r + q\beta h^r\right)}\right] + \\ + \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\prod_{r=1}^{q} dh^r\right) p\left(\{h^r\}\right)\left(\sum_r h^r\right) + q\sum_r h_0^r + \frac{J}{2} \quad . \tag{3.6}$$

A grandeza m_r é definida por

$$m_r = \frac{Tr_i\left(\delta_{S_i,r}\right)e^{\mathcal{H}_{ef}}}{Tr_i e^{\mathcal{H}_{ef}}} \quad ; \quad r = 1,\ldots,q \tag{3.7}$$

e seus valores determinam os extremos da energia livre. $\mathcal{H}_{ef}$ é o hamiltoniano efetivo, isto é, o hamiltoniano com a média na desordem temperada já efetuada:

$$\mathcal{H}_{ef} = q\beta J n\sum_{r=1}^{q} m_r\delta_{S_i,r} + \beta q n\sum_{r=1}^{q} h_0^r\delta_{S_i,r} + \frac{1}{2}\sum_{r=1}^{q}\left[\beta\sigma_r n\left(q\delta_{S_i,r} - 1\right)\right]^2 + \\ \beta n\sum_{r=1}^{q}\bar{h}_r\left(q\delta_{S_i,r} - 1\right) \quad . \tag{3.8}$$

No caso geral de q campos aleatórios, a grandeza m_r é a magnetização M_r do modelo de Potts com q estados. Porém, no caso particular de um campo aleatório em uma direção apenas, m_r é o parâmetro de ordem e $M_r=1+(q-1)m_r$ [39]. Esse parâmetro toma valores 0 a 1 para sistemas completamente desordenado e ordenado, respectivamente.

Para se obter a solução (3.6) foi proposta a hipótese de que as réplicas são simétricas para todos os q estados. Sem a média na desordem, essa solução recupera a encontrada por Baracca et al. [40] para o modelo de Potts com interações ferromagnéticas de alcance infinito. A seguir tratamos o caso de um campo magnético aleatório.

3.3 - CASO DE UM CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO.

Inicialmente, a partir da solução geral (3.6) vamos obter a solução para o caso particular em que só há campo aleatório, por exemplo, numa direção fixa $r = 1$. Nesse caso, só temos variância e valor médio do campo aleatório para o estado $r = 1$: $\sigma_1 = \sigma$ e $\bar{h}^1 = \bar{h}$. Todas as outras variâncias e os outros valores médios dos campos aleatórios nas direções $r = 2, 3, ..., q$ são nulos: $\sigma_2 = ... = \sigma_q = 0$ e $\bar{h}^2 = ... = \bar{h}^q = 0$. Além disso, supomos que só há campo magnético constante H para $r=1$: $h_0^1 = H$, $h_0^2 = ... = h_0^q = 0$.

Para que esse caso particular recupere exatamente o resultado para distribuição gaussiana da referência [13] e o que será obtido na rede de Bethe, os três últimos termos do resultado geral (3.6) não devem ser considerados porque eles têm origem nos termos constantes que aparecem no hamiltoniano (3.1), enquanto que nesta referência e na solução para a rede de Bethe os hamiltonianos utilizados não têm estes termos constantes.

Esses termos são colocados no hamiltoniano (3.1) porque, desta maneira, quando usamos uma distribuição discreta para o campo h_i^r, encontramos uma relação para e energia livre completamente idêntica ao resultado geral (3.6), que recupera as expressões de energia livre para distribuições discretas apresentadas nas referências [13-15].

Agora, fazemos a aproximação seguinte: para um dado sítio i, o valor da grandeza m_r para $r = 1$, que é a direção na qual há campo aleatório aplicado, é

$$m_r = \hat{m} \quad , \quad r = 1 \tag{3.9a}$$

e o valor de m_r para $r \neq 1$ é

$$m_r = \tilde{m} \quad ; \quad r = 2, 3, ..., q \, . \tag{3.9b}$$

As gaussianas em (3.6) que têm variâncias e valores médios dos campos aleatórios nulos se transformam em deltas de Dirac. Assim, usando as relações (3.9a) e (3.9b) e fazendo $h_1 = h$, a energia livre média por spin torna-se:

$$\beta\bar{f} = \frac{1}{2q\beta J}\left[(q\beta J\hat{m})^2 + (q-1)(q\beta J\tilde{m})^2\right] -$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dh}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma} e^{-\frac{\left(h-\bar{h}\right)^2}{2\sigma^2}} \cdot \ln\left[e^{(q\beta J\tilde{m}+q\beta H+q\beta h)} + (q-1)e^{q\beta J\tilde{m}}\right] \quad . \tag{3.10}$$

A seguir vamos reescrever a equação acima em função do parâmetro de ordem m definido como

$$m = \hat{m} - \tilde{m} \quad . \tag{3.11}$$

Usando novamente as relações (3.9a) e (3.9b), podemos escrever que

$$\sum_{r=1}^{q} m_r = \hat{m} + (q-1)\tilde{m} \quad . \tag{3.12}$$

Mas, usando a relação (3.7) para m_r, também temos

$$\sum_{r=1}^{q} m_r = 1 \quad . \tag{3.13}$$

Comparando (3.12) e (3.13) obtemos

$$\hat{m} + (q-1)\tilde{m} = 1 \quad . \tag{3.14}$$

Resolvendo o sistema formado pelas equações (3.11) e (3.14), encontramos as seguintes expressões para $\tilde{m}$ e $\hat{m}$ em termos de m:

$$\tilde{m} = \frac{(1-m)}{q} \quad , \tag{3.15}$$

$$\hat{m} = \frac{(mq+1-m)}{q} \quad . \tag{3.16}$$

Substituindo as expressões acima na equação (3.10) obtemos:

$$\beta\bar{f} = \frac{1}{2q\beta J}\left[\frac{(q\beta J)^2(mq+1-m)^2}{q} + \frac{(q-1)(q\beta J)^2(1-m)^2}{q^2}\right] -$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dh \frac{e^{-\left(h-\bar{h}\right)^2/2\sigma^2}}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma} \ln\left[e^{\frac{q\beta J(mq+1-m)}{q} + q\beta H + q\beta h} + (q-1)e^{\frac{q\beta J(1-m)}{q}}\right] \tag{3.17}$$

Depois de alguma álgebra, conseguimos reescrever a equação (3.17) do seguinte modo:

$$\beta \bar{f} = -\int_{-\infty}^{+\infty} dh\, P(h) \ln\left[q \frac{e^{(q\beta Jm + q\beta H + q\beta h)/2} + e^{-(q\beta Jm + q\beta H + q\beta h)/2}}{q} \right] + (q-1)\frac{\beta Jm^2}{2} - (q-2)\frac{\beta Jm}{2} - \frac{\beta J}{2} - \frac{q\beta H}{2} - \frac{q\beta \bar{h}}{2} \quad , \tag{3.18}$$

onde *P(h)* é a função distribuição gaussiana.

O argumento do logarítmo na equação (3.18) pode ser escrito numa forma simples se for usado o conceito de função hiperbólica generalizada, introduzido por de Aguiar [29] em seu estudo das propriedades do modelo de Potts regular na rede de Bethe. As funções hiperbólicas generalizadas recaem nas funções hiperbólicas usuais quando $q = 2$. Elas são bastante úteis no estudo do modelo de Potts pois permitem uma analogia direta das expessões das grandezas deste modelo com as do modelo de Ising. As definições dessas funções são as seguintes:

seno hiperbólico generalizado de $\theta = \mathrm{senh}_q(\theta)$

$$\mathrm{senh}_q(\theta) = \frac{e^{q\theta/2} - e^{-q\theta/2}}{q}, \tag{3.19}$$

co-seno hiperbólico generalizado de $\theta = \cosh_q(\theta)$

$$\cosh_q(\theta) = \frac{e^{q\theta/2} + (q-1)e^{-q\theta/2}}{q}, \tag{3.20}$$

as demais funções hiperbólicas generalizadas são definidas da mesma maneira que as funções hiperbólicas comuns. Várias propriedades das funções hiperbólicas generalizadas são apresentadas na referência [29].

Usando a definição (3.20) e considerando o caso de valor médio nulo para o campo aleatório (isto é, $\bar{h} = 0$), obtemos finalmente a expressão para a energia livre média por spin na aproximação de campo médio:

$$\beta \bar{f} = -\int_{-\infty}^{+\infty} dh P(h) \ln\left\{ q \cosh_q\left[\beta\left(Jm + H + h\right)\right]\right\} + (q-1)\frac{\beta Jm^2}{2} - (q-2)\frac{\beta Jm}{2} - \frac{\beta J}{2} - \frac{q\beta H}{2} \quad . \tag{3.21}$$

O resultado acima, sem a média na desordem, é idêntico ao encontrado por de Aguiar [29] para o modelo de Potts regular na árvore de Cayley com número de coordenação infinito. A relação (3.21) recupera, a menos dos dois últimos termos, a expressão de Wu [39], após alguma manipulação algébrica. Também a menos dos

dois últimos termos, para $q = 2$ a relação (3.21) recupera as seguintes relações: a de Schneider e Pytte [10], e a de Thompson [23] para o modelo de Ising regular na árvore de Cayley com número de coordenação infinito. Os dois últimos termos da relação (3.21) correspondem a um deslocamento do zero da energia devido ao uso do delta de Kronecker na definição do hamiltoniano (3.1), como já foi provado por de Aguiar [29].

A seguir vamos mostrar que existe uma simetria na relação (3.21) que permite que o estudo da energia livre no intervalo q $\in$ (1,2) forneça o comportamento termodinâmico do sistema para todo $q > 2$.

3.3.1 - SIMETRIA DA ENERGIA LIVRE.

Antes de mostrar a simetria existente na energia livre vamos obtê-la para a relação de recorrência do parâmetro de ordem *m*. Como o parâmetro de ordem *m* é um extremo da expressão (3.21) da energia livre, temos que

$$\frac{\partial \beta \bar{f}}{\partial m} = 0 \quad . \tag{3.22}$$

Ao efetuar a derivação acima, usamos a derivada do $\cosh_q\theta$, que é

$$\frac{d}{d\theta}\cosh_q \theta = (q-1)\,\mathrm{senh}_q \theta - \frac{(q-2)}{2}\cosh_q \theta \quad . \tag{3.23}$$

Assim, a partir da equação acima obtemos

$$m = \int_{-\infty}^{+\infty} dh P(h) \tanh_q\left(\beta J m + \beta H + \beta h\right) \quad , \tag{3.24}$$

onde $\tanh_q \theta = \dfrac{\mathrm{senh}_q \theta}{\cosh_q \theta}$. A relação acima, sem a média na desordem, é idêntica à encontrada por de Aguiar. Para $q = 2$ a relação (3.24) recupera a de Schneider e Pytte.

A relação (3.24) também pode ser colocada na forma

$$m = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d(qh)}{q} P(qh) \tanh_q\left(\beta J m + \beta H + \beta h\right) \quad , \tag{3.25}$$

que é mais adequada para a verificação da simetria.

Agora, aplicando-se as operações de dilatação e inversão ao parâmetro de ordem, aos campos magnéticos, ao valor médio do campo aleatório e à variância

$$m = -(q'-1)m', \tag{3.26}$$

$$H = -(q'-1)H', \tag{3.27}$$

$$h = -(q'-1)h', \tag{3.28}$$

$$\bar{h} = -(q'-1)\bar{h}', \tag{3.29}$$

$$\sigma = -(q'-1)\sigma', \tag{3.30}$$

onde

$$(q-1)(q'-1) = 1 \quad , \tag{3.31}$$

obtêm-se as relações

$$qm = -q'm', \tag{3.32}$$

$$qH = -q'H', \tag{3.33}$$

$$qh = -q'h', \tag{3.34}$$

$$q\bar{h} = -q'\bar{h}', \tag{3.35}$$

$$q\sigma = -q'\sigma'. \tag{3.36}$$

Usando-se essas relações e a definição de $\tanh_q\theta$ na relação de recorrência (3.25), chega-se à equação

$$m = -(q'-1)m' \quad . \tag{3.37}$$

A relação acima mostra que a relação de recorrência para a magnetização é invariante quanto às transformações de dilatação e inversão realizadas. Deve-se observar que os campos magnéticos e a função distribuição também tiveram transformação de escala porque o número de estados q foi usado como um pré-fator no hamiltoniano (3.1). Dessa maneira todas as grandezas se transformam do mesmo modo.

A simetria da energia livre pode ser verificada de maneira completamente análoga à do parâmetro de ordem. Usando-se as relações (3.31) a (3.36), e a definição de $\cosh_q\theta$ dada por (3.20) na equação (3.21), obtem-se

$$\beta\bar{f} = \beta f' + \ln(q'-1) + q'\beta H' \quad . \tag{3.38}$$

As relações (3.37) e (3.38) são idênticas às encontradas por de Aguiar para o modelo de Potts regular na rede de Bethe.

Na próxima sub-seção, obtemos a relação de recorrência (3.24) para o parâmetro de ordem e a equação (3.21) da energia livre através de um procedimento em que não se usa o truque das réplicas. Em primeiro lugar, determinamos a relação de recorrência para m e, em seguida, integramos esta relação a fim de se obter a energia livre. Esse procedimento foi introduzido por Thompson [23] para obter a energia livre do modelo de Ising regular e do vidro de spins de Ising na árvore de Cayley (cujo processo de construção é mostrado na figura 3.1).

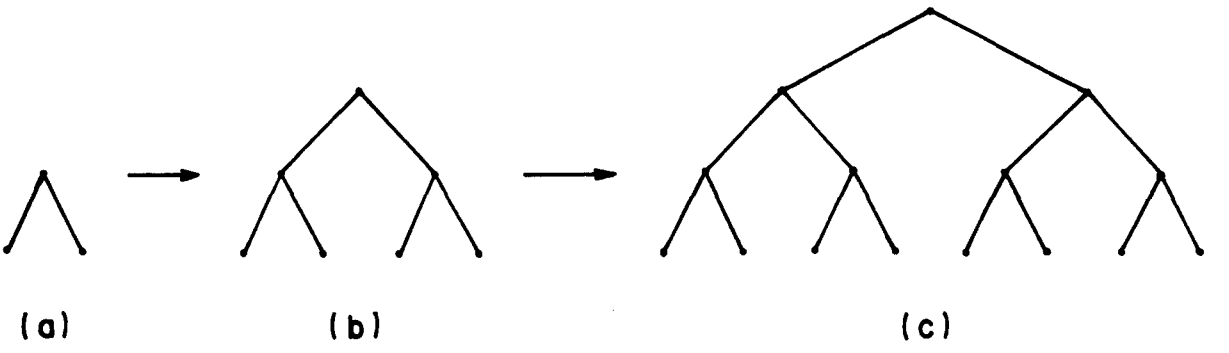


Figura 3.1 - Processo de construção da árvore de Cayley com razão de ramificação $z = 2$ e número de canadas $N = 4$. Inicialmente dois pontos são colocados lado a lado em uma linha, formando uma camada. Em seguida esses pontos são unidos por barras a um único ponto pertencente a uma camada imediatamente acima (a). Na segunda etapa do processo colocam-se lado a lado duas figuras assim formadas ligando-se seus pontos superiores da maneira mostrada acima (b). A repetição dessa última etapa por mais $N-3$ vezes dá origem à árvore de Cayley aberta desgalhada com razão de ramificação $z = 2$ e N camadas. A árvore de Cayley usual pode ser facilmente obtida unindo-se por barras $z+1=3$ árvores de Cayley desgalhadas a um único ponto chamado de topo. A camada mais inferior é chamada de superfície e a camada vizinha ao topo de camada central. A árvore de Cayley com z qualquer é construída de forma idêntica. Quando $z \to \infty$ a árvore de Cayley recebe o nome de rede de Bethe.

3.3.2 - SOLUÇÃO NA REDE DE BETHE.

O modelo de Potts com q estados e um só campo aleatório na direção fixa $r = 1$, na rede de Bethe gerada pelo aglomerado da figura 3.2, é definido pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H}^{s+1,s} = -q\tilde{J}_{ij}^{s+1}\sum_{j=1}^{z}\delta_{S_i^{s+1},S_j^s} - q\sum_{j=1}^{z}X_{jg}^{s}\delta_{S_j^s,S_g} - q\left(h_{ig}^{s+1}+H^{s+1}\right)\delta_{S_i^{s+1},S_g} \qquad (3.39)$$

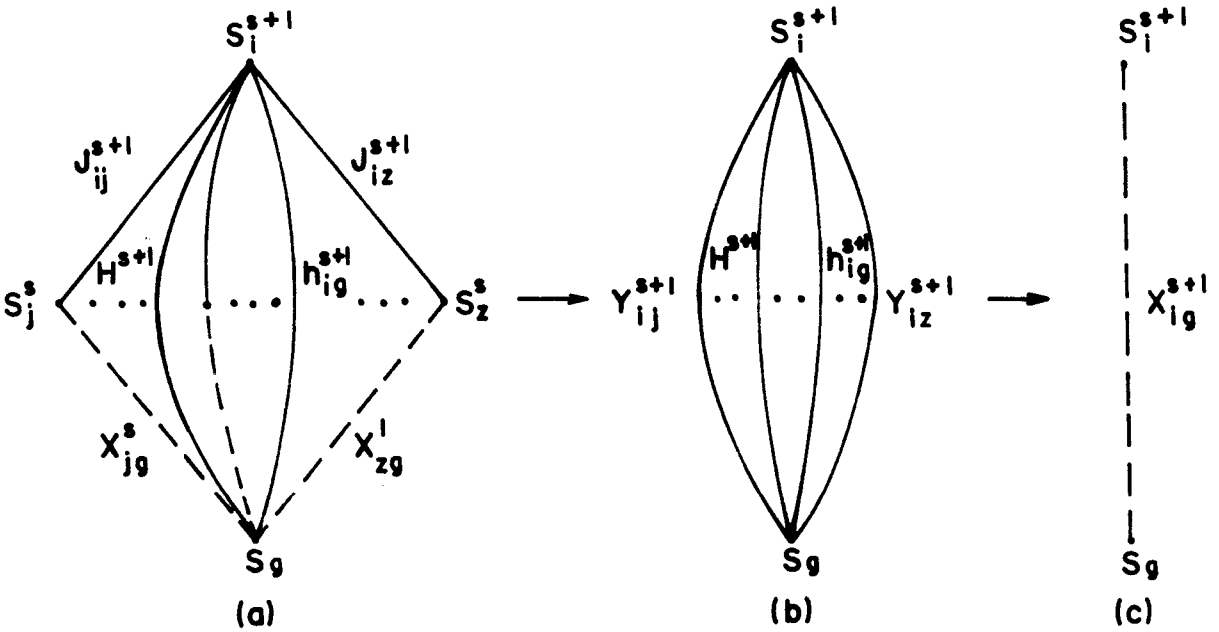


Figura 3. 2 - Aglomerado gerador da rede de Bethe com spin fantasma S_g (rede de Bethe fechada). Redes com uma camada a mais são obtidas pelo processo de substituir cada linha tracejada em (a) pelo aglomerado gerador constituído por toda figura (a). Usando-se as leis de composição (3.44) e (3.45), o campo efetivo X_{ig}^{s+1} (c), que atua sobre um spin da camada $s+1$, pode ser escrito em termos de: interações não renormalizadas J_{ij}^{s+1} entre os spins das camadas s e $s+1$; campo efetivo X_{jg}^{s} que atua nos spins da camada s; campos magnéticos constantes H^{s+1} e aleatório h_{ig}^{s+1}, indicados por linhas curvas e completamente cheias em (a). No limite em que $z \to \infty$ o teorema do limite central nos assegura que a distribuição de probabilidades para o campo efetivo X_{ig}^{s+1} será gaussiana. A sua média e variância podem ser obtidas da média e variância da distribuição de probabilidades das interações Y_{ij}^{s+1} (b).

onde $\tilde{J}_{ij}^{s+1} = \dfrac{J_{ij}^{s+1}}{z} > 0$, J_{ij}^{s+1} é a interação ferromagnética constante entre um spin do sítio i e camada $s+1 (S_i^{s+1})$ e o spin do sítio j e camada $s (S_j^s)$, e z é a razão de ramificação da rede; essa interação é escalada por z para que, no limite (termodinâmico) de $z \to \infty$, a energia livre do sistema seja bem definida; h_{ig}^{s+1} é o campo magnético aleatório e H^{s+1} é o campo magnético constante, os dois atuando entre o spin fantasma S_g e o spin S_i^{s+1}, no sitio i e camada $s+1$; X_{ig}^{s} é o campo efetivo entre o spin fantasma S_g e o spin S_j^s, no sítio j e camada s.

A distribuição gaussiana para h_{ig}^{s+1}, com variância σ^{s+1} e o valor médio $\bar{h}^{s+1}$ é a mesma para todo sítio *i*, e é definida por

$$P\left(h_{ig}^{s+1}\right)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma^{s+1}}\exp\left[\frac{-\left(h_{ig}^{s+1}-\bar{h}^{s+1}\right)^{2}}{2\left(\sigma^{s+1}\right)^{2}}\right] \quad . \tag{3.40}$$

Baseando-nos na mesma relação simples existente entre as propriedades termodinâmicas dos sistemas definidos na rede de Bethe usual sem o spin fantasma [41], vamos explorar a natureza hierárquica da rede de Bethe fechada, que está sendo utilizada aqui, para aplicar um procedimento de grupo de renormalização no espaço real. A simplicidade do procedimento depende do uso da função de correlação $\left\langle S_i^r S_j^{q-r} \right\rangle$, também chamada de transmissividade térmica:

$$\left\langle S_i^r S_j^{q-r}\right\rangle = t\left(\beta J_{ij}\right)=\frac{1-\exp\left(-q\beta J_{ij}\right)}{1+\left(q-1\right)\exp\left(-q\beta J_{ij}\right)} \quad . \tag{3.41}$$

Para calcular a função de correlação usamos a representação de Mittag-Stephen [42] para a variável de Potts,

$$S_j=\omega^{k_j} \quad , \quad \omega=\exp\left(\frac{2\pi i}{q}\right) \quad ; \quad k_j=0,1,\cdots,q-1 \quad , \tag{3.42}$$

e a identidade

$$q\delta_{S_i,S_j}=\sum_{r=0}^{q-1} S_i^r S_j^{q-r} \quad , \tag{3.43}$$

onde δ_{S_i,S_j} é a função delta de Kronecker usual e $\beta=\frac{1}{k_B T}$. A vantagem do uso da transmissividade térmica como a variável renormalizável do grupo de renormalização está em suas regras de composição simples [43]. Para um conjunto de três spins conectados em série pelas interações J_{ij} e J_{jk}, a transmissividade térmica equivalente $t\left(\beta J_{eq}\right)$ entre os spins externos é dada pelo produto

$$t\left(\beta J_{eq}\right)=t\left(\beta J_{ij}\right)t\left(\beta J_{jk}\right) \quad . \tag{3.44}$$

Por outro lado, se dois spins nos sítios i e j estão acoplados em paralelo pelas interações J_{ij} e K_{ij}, a transmissividade equivalente dual $t^d\left(\beta J_{eq}\right)$ é dada pelo produto

$$t^d\left(\beta J_{eq}\right) = t^d\left(\beta J_{ij}\right) t^d\left(\beta K_{ij}\right) \quad , \tag{3.45}$$

onde

$$t^d\left(\beta J_{ij}\right) = \exp\left(-\beta q J_{ij}\right) \quad . \tag{3.46}$$

Agora vamos aplicar as regras de composição das transmissividades para subtituir por uma única ligação um aglomerado como o mostrado na figura 3.2a, que esteja na camada superficial da rede de Bethe fechada. Como um resultado da natureza hierárquica dessa rede, obtemos uma rede semelhante com uma camada a menos e uma interação renormalizada entre o spin fantasma e os spins na nova camada superficial. A repetição desse procedimento e o uso das funções hiperbólicas generalizadas já definidas nos levam à distribuição de probabilidade para a transmissividade equivalente entre o spin fantasma e um spin na camada $s+1$ da rede, chamada de X_{ig}^{s+1}.

Utilizando as regras de composição (3.44) e (3.45), calculamos a ligação única da figura 3.2c

$$X_{ig}^{s+1} = \sum_{j=1}^{z} Y_{ij}^{s+1} + \left(h_{ig}^{s+1} + H^{s+1}\right) \quad , \tag{3.47}$$

onde

$$Y_{ij}^{s+1} = \frac{1}{q} \ln\left[\frac{1+(q-1)t(\beta \tilde{J}_{ij}^{s+1}) t(\beta X_{jg}^{s})}{1-t(\beta \tilde{J}_{ij}^{s+1}) t(\beta X_{jg}^{s})}\right] \quad , \tag{3.48}$$

com $t(\beta \tilde{J}_{ij}^{s+1})$ e $t\left(\beta X_{jg}^{s}\right)$ representando as transmissividades associadas com a interação $\tilde{J}_{ij}^{s+1} = \dfrac{J_{ij}^{s+1}}{\mathcal{Z}}$ e a ligação renormalizada X_{jg}^{s}.

No limite em que a razão de remificação $\mathcal{Z}$ é infinita, a solução obtida corresponde à da aproximação de campo médio [21]. Nesse limite (3.46) pode ser expandida em séries de potências, para se obter em primeira ordem:

$$Y_{ij}^{s+1} \cong \tilde{J}_{ij}^{s+1} t\left(\beta X_{jg}^{s}\right) \quad . \tag{3.49}$$

O teorema do limite central [44] garante que, quando $z \to \infty$, as ligações renormalizadas X_{ig}^{s+1} da equação (3.47) têm uma distribuição de probabilidade gaussiana, independentemente de qual seja a distribuição de probabilidade para os Y_{ij}^{s+1}. O mesmo teorema garante também a existência das seguintes relações:

$$\overline{X}^{s+1} = z\overline{Y}^{s+1} + \overline{h}^{s+1} + H^{s+1} \quad , \tag{3.50a}$$

$$\left(X^{s+1}\right)^2 = z\left(Y^{s+1}\right)^2 + \left(\sigma^{s+1}\right)^2 \quad , \tag{3.50b}$$

onde $\overline{X}^{s+1}$ e $\left(X^{s+1}\right)^2$ são respectivamente a média e a variância da ligação renormalizada X_{ig}^{s+1}, $\overline{Y}^{s+1}$ e $\left(Y^{s+1}\right)^2$ são respectivamente a média e a variância dos Y_{ij}^{s+1}. Usando-se a equação (3.49) essas últimas grandezas são obtidas de :

$$\overline{Y}^{s+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} P\left(X_{jg}^{s}\right) \tilde{J}_{ij}^{s+1} t\left(\beta X_{jg}^{s}\right) dX_{jg}^{s} \quad , \tag{3.51a}$$

$$\left(Y^{s+1}\right)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} P\left(X_{jg}^{s}\right)\left[\tilde{J}_{ij}^{s+1} t\left(\beta X_{jg}^{s}\right) - \overline{Y}^{s+1}\right]^2 dX_{jg}^{s} \quad . \tag{3.51b}$$

Vamos definir as grandezas:

$$m^{s} = \int_{-\infty}^{+\infty} P\left(X_{jg}^{s}\right) t\left(\beta X_{jg}^{s}\right) dX_{jg}^{s} \quad , \tag{3.52a}$$

$$q^{s} = \int_{-\infty}^{+\infty} P\left(X_{jg}^{s}\right)\left[t\left(\beta X_{jg}^{s}\right)\right]^2 dX_{jg}^{s} \quad , \tag{3.52b}$$

onde

$$t\left(\beta X_{jg}^{s}\right) = \frac{1 - \exp\left(-q\beta X_{jg}^{s}\right)}{1 + (q-1)\exp\left(-q\beta X_{jg}^{s}\right)} \quad . \tag{3.53}$$

Na relação acima observamos que para $q = 2$ a transmissividade é justamente a tangente hiperbólica. Esse fato motivou de Aguiar [29] a considerar $t\left(\beta J_{ij}\right)$ como uma tangente hiperbólica generalizada, que já foi definida. O uso das funções hiperbólicas generalizadas, suas relações e derivadas têm simplificado consideravelmente o estudo do modelo de Potts definido na rede de Bethe [45-48]. Por isso vamos utilizá-la aqui procurando um tratamento unificado para o modelo com campo magnético aleatório. Assim, passamos a escrever a transmissividade

(3.53) associada à interação renormalizada X_{jg}^{s} entre o spin fantasma e um spin da camada s do seguinte modo:

$$t\left(\beta X_{jg}^{s}\right)=\tanh_{q}\left(\beta X_{jg}^{s}\right) \quad . \tag{3.54}$$

No limite (termodinâmico) de um número infinito de camadas, temos que $\lim_{s\to\infty} t\left(\beta X_{jg}^{s}\right)=t\left(X^{*}\right)$ e (3.53) torna-se a equação autoconsistente para $t\left(X^{*}\right)$ no ponto fixo X^{*}. Já foi mostrado [41] que se pode interpretar $t\left(X^{*}\right)$ como o parâmetro de ordem local no interior da rede.

Agora combinamos os pares de equações (3.50), (3.51) e (3.52) para obter:

$$\overline{X}^{s+1}=J_{ij}^{s+1}m^{s}+\overline{h}^{s+1}+H^{s+1}, \tag{3.55a}$$

$$\left(X^{s+1}\right)^{2}=\frac{\left(J_{ij}^{s+1}\right)^{2}}{z}q^{s}-\frac{\left(J_{ij}^{s+1}\right)^{2}}{z}\left(m^{s}\right)^{2}+\left(\sigma^{s+1}\right)^{2}. \tag{3.55b}$$

Mas, no limite de $z \to \infty$, os dois primeiros termos no segundo membro da equação (3.55b) podem ser desprezados em relação à variância $\left(\sigma^{s+1}\right)^{2}$.

Dessa maneira, temos:

$$\left(X^{s+1}\right)^{2}=\left(\sigma^{s+1}\right)^{2}. \tag{3.55c}$$

Usando-se a média (3.55a) e a variância (3.55c), chega-se à distribuição de probabilidade para o campo efetivo final X_{ig}^{s+1} da figura (3.2):

$$P\left(X_{ig}^{s+1}\right)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma^{s+1}}\exp\left\{-\frac{\left[X_{ig}^{s+1}-\left(J_{ij}^{s+1}m^{s}+\overline{h}^{s+1}+H^{s+1}\right)\right]^{2}}{2\left(\sigma^{s+1}\right)^{2}}\right\} \quad . \tag{3.56}$$

Pela definição (3.52a) e a relação (3.54) o parâmetro de ordem m^{s+1} é dado por:

$$m^{s+1}=\int_{-\infty}^{+\infty}P\left(X_{ig}^{s+1}\right)\tanh_{q}\left(\beta X_{ig}^{s+1}\right)dX_{ig}^{s+1}. \tag{3.57}$$

Observando a figura (3.2), e lembrando que o termo $J_{ij}^{s+1}m^{s}$ da distribuição (3.56) é o resultado da soma em série das transmissividades associadas a J_{ij}^{s+1} e X_{jg}^{s}, temos que o campo aleatório que atua no sítio i e camada $s+1$ é igual a:

$$h_{ig}^{s+1} = X_{ig}^{s+1} - \left(J_{ij}^{s+1} m^{s} + H^{s+1}\right). \tag{3.58}$$

Combinando-se as equações (3.40), (3.56) e (3.58), a relação (3.57) torna-se:

$$m^{s+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dh_{ig}^{s+1} P\left(h_{ig}^{s+1}\right) \tanh_q\left[\beta\left(J_{ij}^{s+1} m^{s} + H^{s+1} + h_{ig}^{s+1}\right)\right] \quad . \tag{3.59}$$

De maneira análoga obtemos:

$$q^{s+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dh_{ig}^{s+1} P\left(h_{ig}^{s+1}\right) \tanh_q^2\left[\beta\left(J_{ij}^{s+1} m^{s} + H^{s+1} + h_{ig}^{s+1}\right)\right] \quad . \tag{3.60}$$

Novamente considerando o limite de um número infinito de camadas, temos que $\lim_{s\to\infty} m^{s+1} = \lim_{s\to\infty} m^{s} = m$ e (3.59) torna-se a equação autoconsistente para o parâmetro de ordem m:

$$m = \int_{-\infty}^{+\infty} dh P(h) \tanh_q\left[\beta\left(Jm + H + h\right)\right] \quad , \tag{3.61}$$

onde os índices relativos aos sítios foram retirados porque a distribuição de probabilidade é a mesma para todo sítio e a interação entre os spins dos sítios i e j é constante.

No mesmo limite, (3.60) torna-se:

$$q_h = \int_{-\infty}^{+\infty} dh P(h) \tanh_q^2\left[\beta\left(Jm + H + h\right)\right]. \tag{3.62}$$

A grandeza m é o mesmo parâmetro de ordem da equação (3.24), calculado pelo truque das réplicas, na aproximação de campo médio. Para $q = 2$ a relação autoconsistente (3.61) recupera a de Schneider e Pytte e a grandeza q_h torna-se análoga ao parâmetro de ordem introduzido por eles.

Através da integração de (3.61), cujos detalhes são mostrados no ítem B2 do apêndice B, chega-se a uma expressão da energia livre média idêntica à da equação (3.21).

CAPÍTULO 4

MODELO DE ASHKIN-TELLER NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS ALEATÓRIOS.

4.1 - INTRODUÇÃO.

Nesse capítulo iniciamos o estudo do MAT com interações ferromagnéticas de alcance infinito na presença de campos magnéticos aleatórios. Primeiramente, calculamos a energia livre pelo truque das réplicas e a partir desta energia todas as outras funções termodinâmicas são determinadas. Em seguida mostramos a equivalência existente entre o MAT (regular e na presença de campos aleatórios) e o modelo de Potts com 4 estados. Essa equivalência será usada como dado auxiliar no próximo capítulo para a determinação do diagrama de fases.

4.2 - FUNÇÕES TERMODINÂMICAS.

O MAT com interações ferromagnéticas de alcance infinito $\tilde{J}_r$, campos magnéticos constantes $H^r > 0$ e campos magnéticos aleatórios h_i^r - com $r=1, 2, 3$ - será designado por MAT aleatório e é definido pelo hamiltoniano

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = &-\tilde{J}_1 \sum_{(i,j)} S_i S_j - \tilde{J}_2 \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \tilde{J}_3 \sum_{(i,j)} \sigma_i S_i \sigma_j S_j - H^1 \sum_i S_i \\ &- H^2 \sum_i \sigma_i - H^3 \sum_i \sigma_i S_i - \sum_i h_i^1 S_i - \sum_i h_i^2 \sigma_i - \sum_i h_i^3 \sigma_i S_i \quad ;\end{aligned} \tag{4.1}$$

e pela distribuição gaussiana para h_i^r, com variância $\tilde{h}_r$ e valor médio $\bar{h}_r$ para o estado r, que é a mesma para todo sítio:

$$p\left(\left\{h_i^r\right\}\right) = \prod_{r=1}^{3}\left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\tilde{h}_r\right]^{-1}.\exp\left[\frac{-\left(h_i^r-\bar{h}_r\right)^2}{2\tilde{h}_r{}^2}\right] \quad . \tag{4.2}$$

$\mathcal{H}$ e $p\left(\left\{h_i^r\right\}\right)$ foram reescritos aqui para facilitar a leitura.

Através de um procedimento completamente análogo ao mostrado detalhadamente nos capítulos sobre os modelos de Ising e de Potts, obtemos para o MAT aleatório a energia livre média por spin, no limite termodinâmico:

$$-\beta\bar{f}\left(k_r,B_r,\tilde{h}_r,\bar{h}_r\right) = 2\ln 2 + max\left[g\left(x,y,z;k_r,B_r,\tilde{h}_r,\bar{h}_r\right)\right] \quad ; \tag{4.3}$$

onde

$$g\left(x,y,z;k_r,B_r,\tilde{h}_r,\bar{h}_r\right) = -\sum_{r=1}^{3}\frac{1}{2}k_r x_r{}^2 + \int_{-\infty}^{+\infty}Dh^r \ln\left[\left(\prod_{r=1}^{3}\cosh(\theta_r)\right)\left(1+\prod_{r=1}^{3}\tanh(\theta_r)\right)\right] \quad , \tag{4.4}$$

$$Dh^r = \left[\prod_{r=1}^{3}dh^r\right]p\left(\left\{h^r\right\}\right) \quad , \tag{4.5}$$

$$\theta_r = k_r x_r + B_r + \beta h^r \quad , \tag{4.6}$$

$$k_r = \beta J_r \quad , \quad B_r = \beta H_r \quad e \quad \beta^{-1} = k_B T \quad . \tag{4.7}$$

As condições de extremo para $g\left(x,y,z;k_r,B_r,\tilde{h}_r,\bar{h}_r\right)$ são dadas pelo seguinte conjunto de equações integrais acopladas:

$$x = \int_{-\infty}^{+\infty}dh^1 p\left(h^1\right)\tanh(\theta_1) + \int_{-\infty}^{+\infty}Dh^r\frac{\operatorname{sech}^2(\theta_1)\tanh(\theta_2)\tanh(\theta_3)}{D} \quad , \tag{4.8a}$$

$$y = \int_{-\infty}^{+\infty}dh^2 p\left(h^2\right)\tanh(\theta_2) + \int_{-\infty}^{+\infty}Dh^r\frac{\operatorname{sech}^2(\theta_2)\tanh(\theta_1)\tanh(\theta_3)}{D} \quad , \tag{4.8b}$$

$$z = \int_{-\infty}^{+\infty}dh^3 p\left(h^3\right)\tanh(\theta_3) + \int_{-\infty}^{+\infty}Dh^r\frac{\operatorname{sech}^2(\theta_3)\tanh(\theta_1)\tanh(\theta_2)}{D} \quad , \tag{4.8c}$$

onde

$$D = 1 + \prod_{r=1}^{3}\tanh\left(k_r x_r + B_r + \beta h^r\right) \quad , \tag{4.9}$$

$$\theta_1 = k_1 x + B_1 + \beta h^1 \quad , \tag{4.10a}$$

$$\theta_2 = k_2 y + B_2 + \beta h^2 \quad , \tag{4.10b}$$

$$\theta_3 = k_3 z + B_3 + \beta h^3 \quad . \tag{4.10c}$$

As equações para as médias dos spins, que são obtidas através das derivadas parciais de $-\beta \bar{f}$, em relação aos campos magnéticos constantes (externos), são idênticas às condições estacionárias acima, isto é, $\langle S \rangle = x$, $\langle \sigma \rangle = y$ e $\langle \sigma S \rangle = z$.

Como indicado na introdução, quando fazemos $\tilde{h}_r = 0$ e $\bar{h}_r = 0$ - com *r=1, 2, 3* - nas equações (4.4) e (4.8), as funções de distribuição gaussianas tornam-se deltas de Dirac e desta maneira recuperamos a solução do MAT regular [4] definido por (1.6). Para $J_3 = \tilde{h}_3 = \bar{h}_3 = 0$ obtemos dois modelos de Ising aleatórios e desacoplados, e para $J_1 = J_2 = \tilde{h}_1 = \tilde{h}_2 = \bar{h}_1 = \bar{h}_2 = 0$ temos um modelo de Ising em campo aleatório.

Deve-se observar ainda que nas equações (4.4) e (4.8) as integrais em que aparece Dh^r são na verdade triplas, apesar da notação de integral simples que foi utilizada. A seguir escrevemos as equações (4.8) numa forma mais condensada, que será utilizada nos próximos capítulos.

Definindo as variáveis

$$u = \frac{\left(h^1 - \tilde{h}_1\right)}{\tilde{h}_1} \quad , \tag{4.11a}$$

$$v = \frac{\left(h^2 - \tilde{h}_2\right)}{\tilde{h}_2} \quad , \tag{4.11b}$$

$$w = \frac{\left(h^3 - \tilde{h}_3\right)}{\tilde{h}_3} \quad , \tag{4.11c}$$

obtemos as seguintes expressões para as equações (4.8):

$$x = \int_{-\infty}^{+\infty} dG \frac{\tanh(\alpha_1) + \tanh(\alpha_2)\tanh(\alpha_3)}{D} \quad , \tag{4.12a}$$

$$y = \int_{-\infty}^{+\infty} dG \frac{\tanh(\alpha_2) + \tanh(\alpha_1)\tanh(\alpha_3)}{D} \quad , \tag{4.12b}$$

$$z = \int_{-\infty}^{+\infty} dG \frac{\tanh(\alpha_3) + \tanh(\alpha_1)\tanh(\alpha_2)}{D} \quad , \tag{4.12c}$$

onde

$$dG = dudvdw \frac{e^{-\left(u^2+v^2+w^2\right)/2}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \quad , \tag{4.13}$$

$$\alpha_1 = \beta\left(J_1 x + H_1 + \bar{h}_1 + \tilde{h}_1 u\right) \quad , \tag{4.14a}$$

$$\alpha_2 = \beta\left(J_2 y + H_2 + \bar{h}_2 + \tilde{h}_2 v\right) \quad , \tag{4.14b}$$

$$\alpha_3 = \beta\left(J_3 z + H_3 + \bar{h}_3 + \tilde{h}_3 w\right) \quad , \tag{4.14c}$$

$$D = 1 + \prod_{r=1}^{3} \tanh(\alpha_r) \quad . \tag{4.15}$$

Agora voltamos nossa atenção ao cálculo das outras funções termodinâmicas. Tomando a primeira e segunda derivadas parciais das equações (4.3) e (4.4) em relação à temperatura, obtemos a entropia e o calor específico por spin

$$S = 2k_B \ln 2 + k_B \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^r \left\{ \ln D + \sum_{r=1}^{3} \left[\ln\cosh(\theta_r) - \theta_r x_r \right] \right\} \quad , \tag{4.16}$$

$$C_H = -k_B T \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^r \left[\sum_{r=1}^{3} \left(\frac{\partial x_r}{\partial T} \right) \theta_r \right] \quad , \tag{4.17}$$

onde os x_r são as soluções das equações (4.8). As equações acima são generalizações das expressões correspondentes para o MAT regular definido por (1.6), e os modelos de Ising regular e Ising em campo aleatório.

Uma outra função de interesse é a suscetibilidade magnética, que pode ser obtida através das derivadas parciais das relações (4.8) com relação a B_1, B_2 e B_3. As equações resultantes podem ser agrupadas em três conjuntos independentes contendo cada um três equações acopladas, como por exemplo:

$$\chi_{11} = \chi_I(J_1) + \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^r F(x;k_1) \left[k_2 \chi_{21} \operatorname{senh}(2\theta_3) + k_3 \chi_{31} \operatorname{senh}(2\theta_2) \right] \quad , \tag{4.18a}$$

$$\chi_{21} = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^r F(y;k_2) \left[(k_1 \chi_{11} + \beta) \operatorname{senh}(2\theta_3) + k_3 \chi_{31} \operatorname{senh}(2\theta_1) \right] \quad , \tag{4.18b}$$

$$\chi_{31} = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^r F(z;k_3) \left[k_2 \chi_{21} \operatorname{senh}(2\theta_1) + (k_1 \chi_{11} + \beta) \operatorname{senh}(2\theta_2) \right] \quad , \tag{4.18c}$$

onde

$$F(x;k_1)=\frac{\prod_{r=1}^{3}\sec h^2(\theta_r)}{2D^2\left[1-k_1(1-x^2)\right]} \tag{4.19}$$

e

$$\chi_1(k_1)=\frac{\beta(1-x^2)}{\left[1-k_1(1-x^2)\right]} \tag{4.20}$$

é a suscetibilidade magnética para o modelo de Ising na aproximação de campo médio.

Os dois outros conjuntos envolvendo χ_{22}, χ_{12}, χ_{32} e χ_{33}, χ_{31}, χ_{23} podem ser escritos a partir das equações (4.18) através de permutações cíclicas nos índices. No caso particular em que os campos constantes são nulos nós observamos que as componentes χ_{ij} da suscetibilidade para o MAT aleatório e isotrópico (isto é, com $J_1=J_2$) satisfazem as relações $\chi_{11}=\chi_{22}$, $\chi_{21}=\chi_{12}$, $\chi_{31}=\chi_{32}$, e $\chi_{13}=\chi_{23}$. Essas igualdades são conseqüência da operação de simetria $\sigma_i \leftrightarrow S_i$ que deixa o hamiltoniano (4.1) invariante. No caso isotrópico o terceiro conjunto de equações acopladas se reduz a duas equações envolvendo somente χ_{33} e χ_{23}.

Por fim, deve-se observar que todos os conjuntos de equações das suscetibilidades magnéticas para o MAT aleatório também são generalizações das expressões correspondentes para o MAT regular definido por (1.6).

Na próxima seção mostramos a equivalência existente entre o MAT (regular e em campos aleatórios) e o modelo de Potts com 4 estados.

4.3 - EQUIVALÊNCIA COM O MODELO DE POTTS DE 4 ESTADOS.

Usando o hamiltoniano (4.1) sem os campos H_r e h_r, a relação

$$2\sum_{(i,j)}S_iS_j=\left(\sum_i S_i\right)^2-N \tag{4.21}$$

e aplicando três vezes a identidade de Hubbard-Stratonovitch, obtemos a função de partição do MAT regular:

$$Z_{AT} = \left(2\pi^{-\frac{3}{2}}\right) e^{-\beta L} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{3} dx_r\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{r=1}^{3} x_r^{\,2}\right] F(\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \qquad (4.22)$$

onde

$$F(\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) = \left[e^{(\gamma_1+\gamma_2+\gamma_3)} + e^{(\gamma_1-\gamma_2-\gamma_3)} + e^{(-\gamma_1+\gamma_2-\gamma_3)} + e^{(-\gamma_1-\gamma_2+\gamma_3)}\right]^N \quad , \qquad (4.23)$$

$\gamma_r = \tilde{k}_r x_r$, $\tilde{k}_r = \beta \tilde{J}_r$ e $2L = \sum_{r=1}^{3} J_r$.

Fazendo $J_1=J_2=J_3=J_{AT}$ e $k_{AT} = \beta J_{AT}$, temos

$$Z_{AT} = \left(2\pi^{-2}\right) e^{-2\beta J_{AT}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=0}^{3} dx_r\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{r=0}^{3} x_r^{\,2}\right] e^{k_{AT} x_0} F(\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3) \quad , (4.24)$$

onde x_0 é uma variável muda que multiplica $\sum_i 1$, isto é, está associada a um spin de módulo 1, apontando sempre na mesma direção e sentido, em cada sítio i. Introduzir essa variável na expressão da função de partição corresponde a reconsiderar no hamiltoniano (1.6) a contribuição de J_0 que havia sido desprezada.

Definindo o modelo de Potts regular com q estados pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -\tilde{J}_P \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \quad , \qquad (4.25)$$

utilizando as relações

$$\sum_{r=1}^{q} \delta_{\sigma_i,r}\delta_{r,\sigma_j} = \delta_{\sigma_i,\sigma_j} \quad , \qquad (4.26)$$

$$2\sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i,r}\delta_{r,\sigma_j} = \left(\sum_{i=1}^{N} \delta_{\sigma_i,r}\right)^2 - \sum_i \delta_{\sigma_i,r}\delta_{r,\sigma_i} \qquad (4.27)$$

e aplicando q vezes a identidade de Hubbard-Stratonovitch, encontramos a função de partição Z_P, que para $q=4$ é dada por:

$$Z_P = \left(2\pi^{-2}\right) e^{-\frac{\beta J_P}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{4} dy_r\right] \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{r=1}^{4} y_r^{\,2}\right] G(y_r) \quad , \qquad (4.28)$$

onde

$$G(y_r) = \left(\sum_{r=1}^{4} e^{\tilde{k}_P y_r}\right)^N \quad . \qquad (4.29)$$

Comparando as equações encontradas para Z_{AT} e Z_P, podemos fazer as identificações abaixo:

$$J_P y_1 = J_{AT}(x_0 + x_1 + x_2 + x_3) \quad , \tag{4.30}$$

$$J_P y_2 = J_{AT}(x_0 + x_1 - x_2 - x_3) \quad , \tag{4.31}$$

$$J_P y_3 = J_{AT}(x_0 - x_1 + x_2 - x_3) \quad , \tag{4.32}$$

$$J_P y_4 = J_{AT}(x_0 - x_1 - x_2 + x_3) \quad , \tag{4.33}$$

$$\sum_{r=1}^{q} \frac{(y_r)^2}{2} = 4\left(\frac{J_{AT}}{J_P}\right)^2 \sum_{r=0}^{3} \frac{(x_r)^2}{2} \quad . \tag{4.34}$$

A relação entre os diferenciais é

$$dy_1 dy_2 dy_3 dy_4 = 16\left(\frac{J_{AT}}{J_P}\right)^4 dx_0 dx_1 dx_2 dx_3 \quad . \tag{4.35}$$

Substituindo as relações (4.30) a (4.35) em (4.28) e considerando $J_P=4J_{AT}$, encontramos

$$Z_P = \frac{e^{k_{AT}}}{64} Z_{AT} \quad . \tag{4.36}$$

Portanto, tomando o logarítmo de ambos os membros da relação (4.36), no limite termodinâmico temos a igualdade entre as energia livres

$$f_P = f_{AT} \quad , \tag{4.37}$$

o que demonstra a equivalência entre os dois modelos considerados.

Agora passamos a tratar do caso regular com campo magnético constante. Utilizando (4.1) sem o campo aleatório h_i^r encontramos para Z_{AT} uma expressão análoga à equação (4.24):

$$Z_{AT} = (2\pi)^{-2} e^{-N\beta H_0} e^{-2\beta J_{AT}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\prod_{r=0}^{3} dx_r\right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{r=0}^{3} x_r^{\,2}\right] e^{\left(k_{AT}x_0 + N\beta H_0\right)} F(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)\right\} \quad , \tag{4.38}$$

onde $\varphi_r = \widetilde{k}_r x_r + B_r$.

Adicionando o termo $-\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q} H_P^r \delta_{\sigma_{i,r}}$ ao hamiltoniano (4.25) obtemos para Z_P a seguinte relação:

$$Z_P = (2\pi)^{-2} e^{-\frac{\beta J_P}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{4} dy_r\right]\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{r=1}^{4} y_r^{\,2}\right] G\left(y_r, H_P^r\right) \quad , \quad (4.39)$$

com $G\left(y_r, H_P^r\right) = \left[\sum_{r=1}^{4} e^{\left(\tilde{k}_P y_r + \beta H_P^r\right)}\right]^N$.

Comparando as equações acima para Z_{AT} e Z_P, encontramos as relações (4.30) a (4.34) para as variáveis de integração, e também as seguintes expressões para os campos constantes:

$$H_P^1 = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 \quad , \quad (4.40)$$

$$H_P^2 = H_0 + H_1 - H_2 - H_3 \quad , \quad (4.41)$$

$$H_P^3 = H_0 - H_1 + H_2 - H_3 \quad , \quad (4.42)$$

$$H_P^4 = H_0 - H_1 - H_2 + H_3 \quad . \quad (4.43)$$

Substituindo as relações (4.30) a (4.35) e (4.40) a (4.43) na equação (4.39), e considerando novamente $J_P=4J_{AT}$ chegamos à relação (4.36) entre as funções de partição. Isso mostra a validade da equivalência entre os dois modelos considerados quando há campo magnético constante presente.

Finalmente, pode-se concluir que para o MAT aleatório definido por (4.1) e o modelo de Potts com q estados na presença de campos magnéticos constantes e aleatórios, definido pelo hamiltoniano (4.25) acrescido do termo $-\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q}\left(H_P^r + h_P^r\right)\delta_{\sigma_i,r}$, continua valendo a equivalência. Mas nesse caso devem ser consideradas, juntamente com as equações (4.30) a (4.35) e (4.40) a (4.43), as seguintes relações entre os campos magnéticos aleatórios:

$$h_P^1 = h^0 + h^1 + h^2 + h^3 \quad , \quad (4.44)$$

$$h_P^2 = h^0 + h^1 - h^2 - h^3 \quad , \quad (4.45)$$

$$h_P^3 = h^0 - h^1 + h^2 - h^3 \quad , \quad (4.46)$$

$$h_P^4 = h^0 - h^1 - h^2 + h^3 \quad . \quad (4.47)$$

As relações (4.40) a (4.47) mostram que os campos $H_P^r\left(h_P^r\right)$ são combinações lineares dos campos $H_r\left(h^r\right)$ da mesma maneira que os J's em (1.6) são combinações lineares dos ε_i.

CAPÍTULO 5

MODELO DE ASHKIN-TELLER NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO ALEATÓRIO NA DIREÇÃO DE $z = \langle \sigma S \rangle$.

5.1 - INTRODUÇÃO.

A expressão para energia livre determinada no capítulo anterior é bastante complexa, o que dificulta o seu estudo analítico. Por isso, neste capítulo estudamos o modelo de Ashkin-Teller com interações de alcance infinito na presença de campo magnético aleatório apenas na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$. Iniciamos o estudo desse modelo pela caracterização de suas fases no caso especial em que não há campos constantes (externos), buscando as soluções que satisfazem o sistema de equações integrais acopladas para as magnetizações. Em seguida, utilizamos a estratégia adotada por Christiano e Goulart Rosa [4] no estudo do MAT sem campo aleatório (ou MAT regular). A análise da estabilidade das soluções encontradas nos permite traçar inicialmente o diagrama de fases do MAT regular. As relações para as superfícies de separação entre as fases são discutidas e resolvidas numericamente. Através das expansões das magnetizações determinamos expressões que localizam as coordenadas dos pontos especiais E e G, nos quais ocorrem mudanças nas ordens das transições. Combinando todas essas informações, fomos capazes de traçar o diagrama de fases do MAT na presença de campo aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$. As equações da energia livre, magnetizações, entropia, calor específico e suscetibilidade são discutidas

e resolvidas numericamente para valores especiais das constantes de integração e da variância.

5.2 - ESTABILIDADE DAS SOLUÇÕES E DIAGRAMA DE FASES DO MAT REGULAR.

No caso particular em que só exista campo magnético aleatório h^3 na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$, as variâncias e os valores médios dos campos h^1 e h^2 são nulos e suas distribuições gaussianas se reduzem a deltas de Dirac. Nesse caso, as equações (4.12) para campos constantes nulos (isto é, $B_r = 0$) e o valor médio $\overline{h}_3 = 0$ tornam-se

$$x = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^3 \frac{\tanh(k_1 x) + \tanh(k_2 y)\tanh(k_3 z + \beta h^3)}{D_3} \quad , \tag{5.1a}$$

$$y = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^3 \frac{\tanh(k_2 y) + \tanh(k_1 x)\tanh(k_3 z + \beta h^3)}{D_3} \quad , \tag{5.1b}$$

$$z = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^3 \frac{\tanh(k_3 z + \beta h^3) + \tanh(k_1 x)\tanh(k_2 y)}{D_3} \quad . \tag{5.1c}$$

onde

$$Dh^3 = \frac{dh^3}{(2\pi)^{\frac{1}{2}} \tilde{h}_3} \exp\left[\frac{-(h^3)^2}{2\tilde{h}_3^{\,2}}\right] \text{ e} \tag{5.2}$$

$$D_3 = 1 + \tanh(k_1 x)\tanh(k_2 y)\tanh(k_3 z + \beta h^3) \quad . \tag{5.3}$$

No caso isotrópico (J_1=J_2) as relações (5.1a) e (5.1b) são idênticas isto é, x = y. Definindo as variáveis

$$p = \left(\frac{J_1}{J_3}\right) \quad , \quad t = \left(\frac{k_B T}{J_1}\right) \quad , \quad \sigma_1 = \left(\frac{\tilde{h}_3}{J_1}\right) \quad e \quad \omega = \left(\frac{h_3}{\tilde{h}_3}\right) \quad , \tag{5.4}$$

as equações (5.1) podem ser reescritas para J_1=J_2:

$$x = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \frac{\tanh\left(\frac{x}{t}\right) + \tanh\left(\frac{x}{t}\right)\tanh\left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t}\right]}{D_3} \quad , \tag{5.5a}$$

$$z = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \frac{\tanh\left[\frac{(pz+\sigma_1\omega)}{t}\right] + \tanh^2\left(\frac{x}{t}\right)}{D_3} \quad , \tag{5.5b}$$

onde

$$D\omega = \frac{d\omega}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} e^{-\omega^2/2} \qquad e \tag{5.6}$$

$$D_3 = 1 + \tanh^2\left(\frac{x}{t}\right) \tanh\left[\frac{(pz+\sigma_1\omega)}{t}\right] \quad . \tag{5.7}$$

As equações (5.1) e (5.5) têm as soluções apresentadas a seguir.

(1) Fase paramagnética. Nessa fase as constantes de interação são suficientemente fracas, e/ou a temperatura é alta bastante. Todas as três magnetizações são nulas:

$$x = y = z = 0 \quad . \tag{5.8}$$

No caso isotrópico a solução acima se reduz a $x = z = 0$.

(2) Fase de Ising. Essa fase parcialmente ordenada é caracterizada por uma das três soluções seguintes:

$$x = y = 0 \quad ; \quad z = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^3 \tanh\left(k_3 z + \beta h^3\right) \neq 0 \quad , \tag{5.9a}$$

$$x = z = 0 \quad ; \quad y = \tanh\left(k_2 y\right) \neq 0 \quad , \tag{5.9b}$$

$$y = z = 0 \quad ; \quad x = \tanh\left(k_1 x\right) \neq 0 \quad . \tag{5.9c}$$

No caso isotrópico as equações (5.9b) e (5.9c) se reduzem à solução paramagnética. A solução resultante mostra que o sistema está parcialmente ordenado com $\langle \sigma S \rangle \neq 0$, enquanto que $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma \rangle$ são nulas.

(3) Fase de Baxter. Nessa fase o sistema está todo ordenado ferromagneticamente, com três parâmetros de ordem $\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ e $\langle \sigma S \rangle$ diferentes de zero:

$$x \neq 0 \quad , \quad y \neq 0 \quad , \quad z \neq 0 \quad . \tag{5.10}$$

No caso isotrópico a solução acima se reduz a $x \neq 0$, $z \neq 0$.

A fim de se obterem os diagramas de fases do MAT regular e do MAT aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$, determinam-se as regiões no espaço de parâmetros

$p-t-\tilde{h}_3$ onde as soluções (5.8) a (5.10) sejam estáveis para $\tilde{h}_3 = 0$ e $\tilde{h}_3 \neq 0$, respectivamente. Para que isso ocorra é necessário que a função $g\left(x,y,z;k_r,B_r,\tilde{h}_r,\bar{h}\right)$ definida por (4.4) seja maximizada. No caso do MAT na presença de campo magnético aleatório apenas na direção $z=\langle \sigma S \rangle$ (com $H_r = \bar{h}_r = 0$), essa função é dada por

$$g\left(x,y,z;k_r,0,\tilde{h}_3,0\right) = -\frac{1}{2}\left(k_1x^2+k_2y^2+k_3z^2\right)+\ln\cosh\left(k_1x\right)+\ln\cosh\left(k_2y\right)+ \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^3 \ln\cosh\left(k_3z+\beta h^3\right)+\int_{-\infty}^{+\infty} Dh^3 \ln D_3 \quad . \tag{5.11}$$

De acordo com a referência [49], a maximização dessa função requer que

$$g_{xx} < 0 \quad , \tag{5.12a}$$

$$\begin{vmatrix} g_{xx} & g_{xy} \\ g_{xy} & g_{yy} \end{vmatrix} > 0 \quad , \tag{5.12b}$$

$$\begin{vmatrix} g_{xx} & g_{xy} & g_{xz} \\ g_{xy} & g_{yy} & g_{yz} \\ g_{xz} & g_{yz} & g_{zz} \end{vmatrix} < 0 \quad . \tag{5.12c}$$

Assim, aplicando-se as inequações (5.12), a solução paramagnética é estável somente se

$$k_1\left(k_1-1\right) < 0 \quad , \tag{5.13a}$$

$$k_2\left(k_2-1\right) < 0 \quad , \tag{5.13b}$$

$$k_3\left[k_3\left(1-I_3\right)-1\right] < 0 \quad , \tag{5.13c}$$

onde $I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^3 \tanh^2\left(\beta h^3\right)$.

No caso em que $J_1=J_2$, as equações (5.13) fornecem as superfícies de instabilidade

$$t = 1 \quad , \quad \textit{para todos } p \textit{ e } \sigma_1 \; ; \tag{5.14a}$$

$$\frac{p}{t}\int_{-\infty}^{+\infty} D\omega\left[1-\tanh^2\left(\frac{\sigma_1\omega}{t}\right)\right] = 1 \quad . \tag{5.14b}$$

As intersecções dessas superfícies no plano *p-t* são as linhas $t=1$ e $p=t$. Isso corresponde a considerar $\tilde{h}_3 = 0$ nas equações (5.14), tornando estas equações

idênticas às encontradas para as superfícies de instabilidade da fase paramagnética no caso do MAT regular [4]. Essas linhas delimitam a região chamada de P_{max} na figura (5.1a), onde a solução paramagnética maximiza $g(x,z;k_1,k_3,0,0,0)$. Se invertermos todas as desigualdades (5.13), obtemos a região P_{min} delimitada pelo segmento de linha reta OD e a linha semi-infinita DA', onde a solução paramagnética minimiza $g(x,z;k_1,k_3,0,0,0)$. Por outro lado, nas regiões P_{sad} e P'_{sad} as derivadas de segunda ordem $g_{xx}(0,0;k_1,k_3,0,0,0)$ e $g_{zz}(0,0;k_1,k_3,0,0,0)$ têm sinais opostos, de modo que $g(x,z;k_1,k_3,0,0,0)$ tem um ponto de sela na origem (veja figura 5.2a).

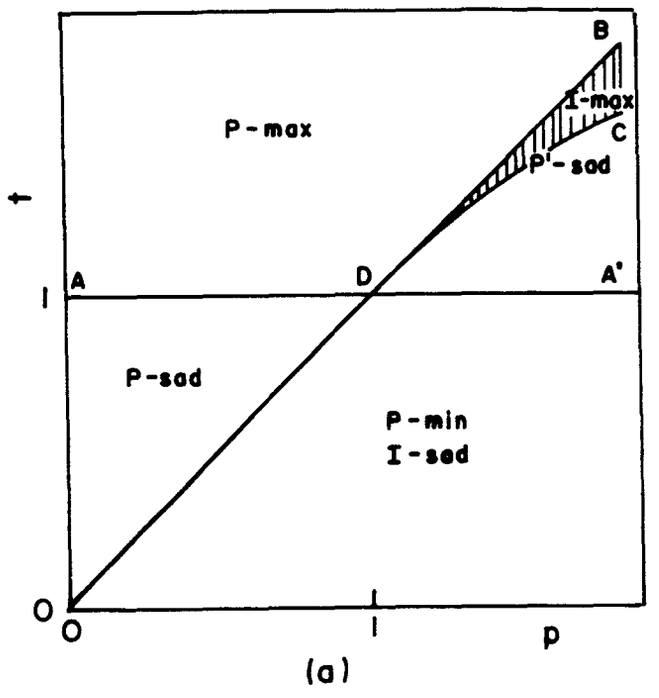


Figura 5. 1a - Em (a) apresentamos no plano *p-t* as regiões nas quais o extremo da equação (5.11) (com $J_1 = J_2$, $x = y$ e $H_r = \bar{h}_r = h^r = 0$) pode ser determinado analiticamente. Na região *P-max (P-min)* *g(x,z;p,t)* tem um máximo (mínimo) na origem. Nas regiões *P'-sad* e *P-sad* os pontos de sela de *g(x,z;p,t)* na origem se encontram girados de $\frac{\pi}{2}$ um com relação ao outro. Na região BDC o máximo *g(x,z;p,t)* é determinado pela solução de Ising, enquanto que na região *I-sad*, que coincide com *P-min*, essa solução corresponde a um ponto de sela.

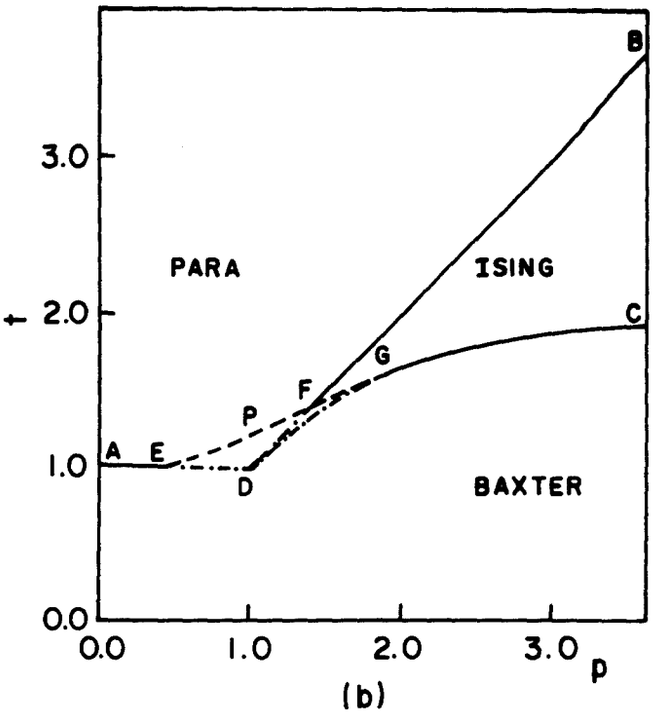


Figura 5. 1b -. Em (b) é apresentado o diagrama de fases do MAT isotrópico e regular com interações ferromagnéticas de alcance infinito. Na fase paramagnética $\langle\sigma\rangle = \langle S\rangle = \langle\sigma S\rangle = 0$, na fase de Ising $\langle\sigma\rangle = \langle S\rangle = 0$ e $\langle\sigma S\rangle \neq 0$, e na fase de Baxter $\langle\sigma\rangle = \pm\langle S\rangle \neq 0$ e $\langle\sigma S\rangle \neq 0$. Na região EDF(DFG) a fase de Baxter coexiste com a fase paramagnética (Ising). As linhas sólidas (AE, FB e GC) são linhas de transição de segunda ordem, enquanto que a linha tracejada EPG é de primeira ordem. As linhas com tradejado e ponto (ED, DF, e DG) são partes das linhas de instabilidade mostradas em (a). As coordenadas dos pontos críticos E e G são determinadas através das expansões das magnetizações (5.5) na seção 5.3. O ponto F só pode ser determinado numericamente.

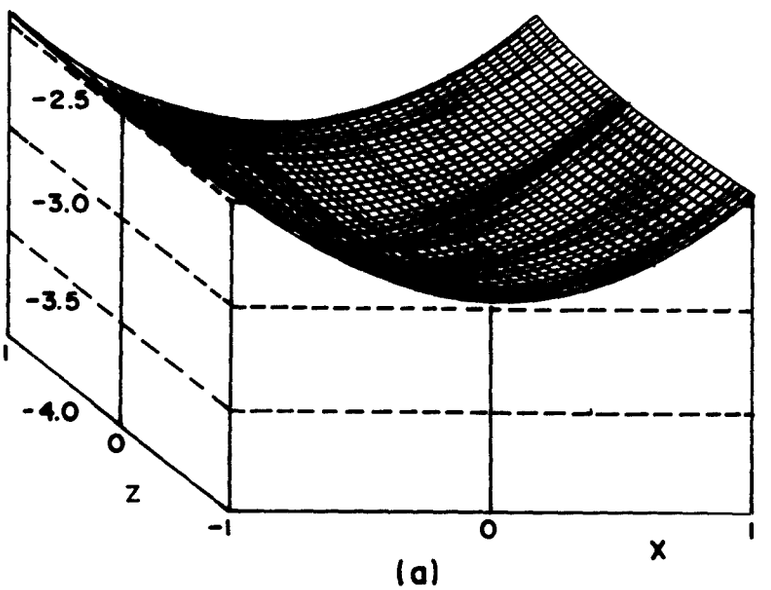


Figura 5. 2 - Nesta figura apresentamos o gráfico do funcional energia livre $f(x,z;t,p) = -2t\ln 2 + x^2 + \frac{1}{2}pz^2 - t\ln\left[\cosh^2\left(\frac{x}{t}\right)\cosh\left(\frac{pz}{t}\right)\right] - t\ln\left[1+\tanh^2\left(\frac{x}{t}\right)\left|\tanh\left(\frac{pz}{t}\right)\right|\right]$ como uma função de $x = \langle S\rangle$ e $z = \langle\sigma S\rangle$ para os seguites valores dos parâmetros p e t: (a) $p = 0.2$, $t = 2.2$. O mínimo na origem caracterizando a fase paramagnética é facilmente observado.

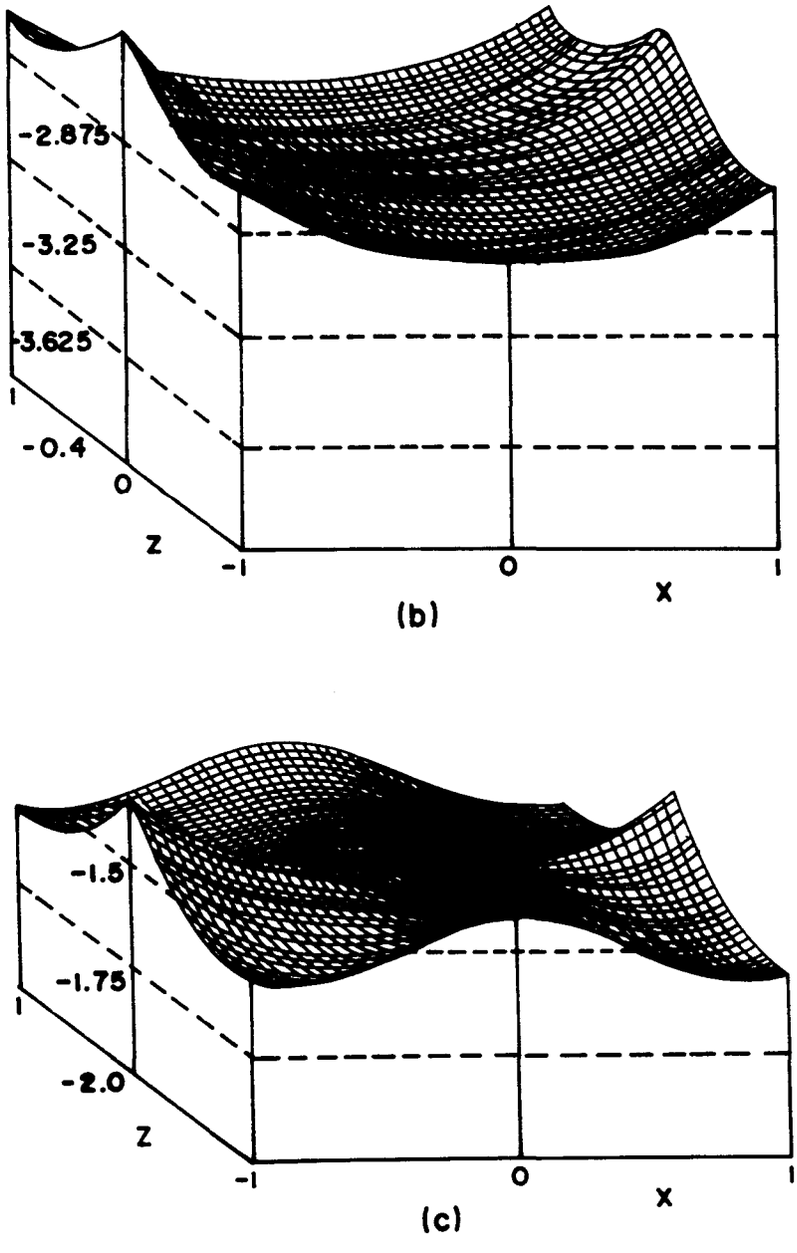


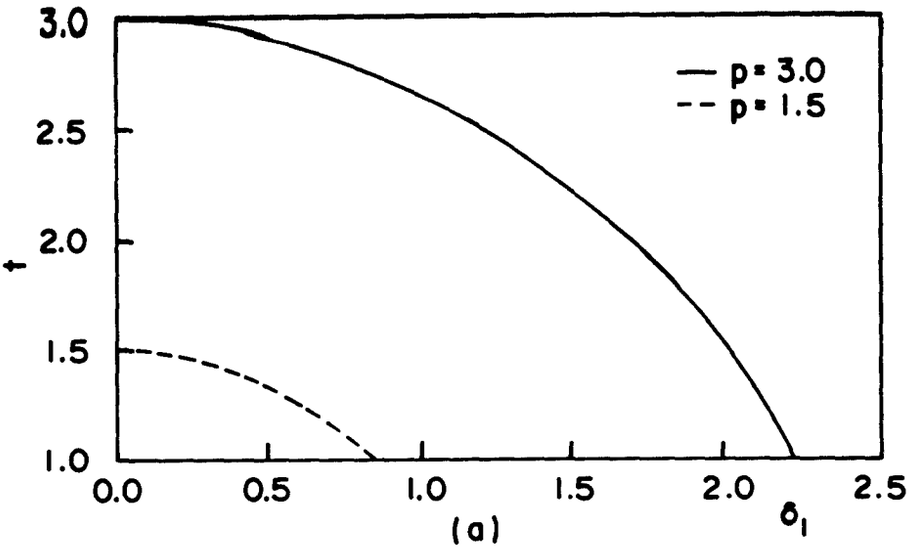
Figura 5.2 - (b) $p = 2.5$, $t = 2.2$. O mínimo global ocorre em $\langle\sigma\rangle = 0$, $\langle\sigma S\rangle \neq 0$ caracterizando a fase de Ising. Na origem observa-se um ponto de sela, como previsto. (c) $p = 0.95$, $t = 1.1$. O sistema se encontra na fase de Baxter, mas mostra dois tipos de míni mo: um mínimo local na origem e quatro mínimos globais em $x = \pm x_0$, $z = \pm z_0$.

A superfície de instabilidade $t = 1$, para todos p e σ_1, pode ser facilmente visualizada porque é um plano semi-infinito paralelo ao plano $p - \sigma_1$. A superfície (5.14b) intercepta esse plano e a equação da linha de intersecção é obtida quando se faz $t = 1$ na equação (5.14b):

$$p\int_{-\infty}^{+\infty} D\omega\left[1 - \tanh^2\left(\sigma_1\,\omega\right)\right] = 1 \quad . \tag{5.15}$$

As soluções numéricas das equações (5.14b) e (5.15) são mostradas na figura 5.3.

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO



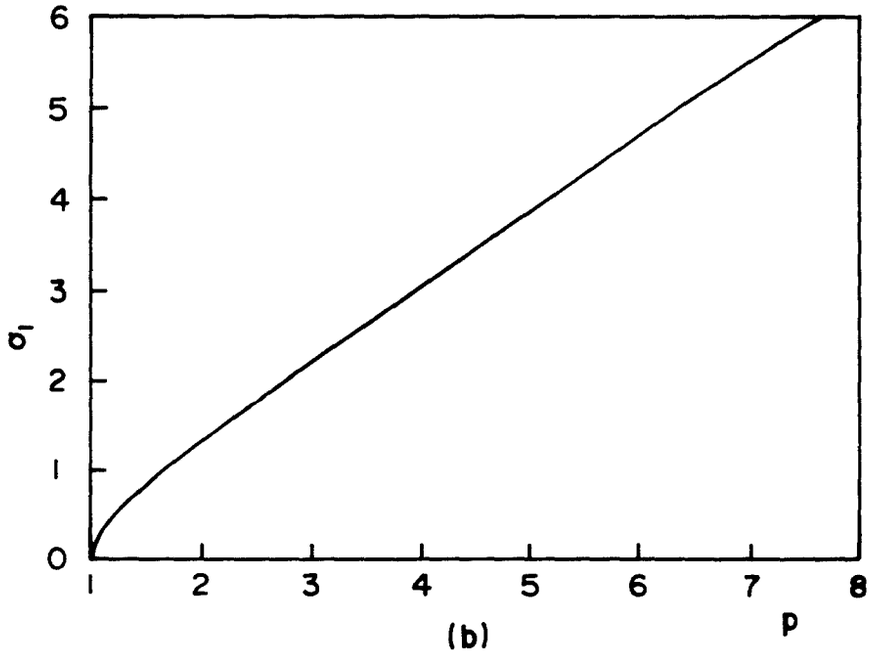


Figura 5. 3 - Em (a) mostramos a solução da equação (5.14b), que corresponde à superfície de instabilidade da solução paramagnética. Para $p = 1.5$ ($p = 3.0$) esta solução é estável na região acima da curva tracejada (curva sólida) e instável na região abaixo desta curva. No ponto $t = 1.0$ e $\sigma_1 \cong 0.8$ ($t = 1.0$ e $\sigma_1 \cong 2.2$) a superfície de instabilidade intercepta o semi-plano $t = 1$, para todos valores de p e σ_1. Em (b) mostramos a solução da equação (5.15). Cada ponto desta curva nos fornece as coordenadas p e σ_1 de um ponto de interseção entre a superfície de instabilidade da solução paramagnética e o semi-plano $t = 1$, para todos valores de p e σ_1. Abaixo deste semi-plano a solução de Baxter é estável e acima é instável.

Vamos agora analisar a estabilidade da fase de Ising. De acordo com as inequações (5.12), a solução de Ising no caso isotrópico é estável somente quando

$$\int_{-\infty}^{\infty} D\omega \left\{ 1 - \tanh^2 \left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t} \right] \right\} < \frac{t}{p} \quad , \tag{5.16a}$$

$$z^2 \langle (t-1)^2 \quad , \tag{5.16b}$$

$$p \rangle t \rangle 1 \quad . \tag{5.16c}$$

A superfície de instabilidade (5.14b), cuja intersecção no plano $p-t$ é indicada pela linha ODB na figura 5.1a, foi obtida a partir da estabilidade da solução paramagnética. Essa superfície também pode ser obtida se fizermos $z = 0$ na equação (5.16a). Dessa forma, as regiões no espaço de parâmetros $p-t-\sigma_1$ nas quais as soluções paramagnética e de Ising maximizam $g\left(x, z; k_1, k_3, 0, \tilde{h}_3, 0\right)$ não se superpõem; isto é, não há região no espaço de parâmetros onde dois máximos, determinados pelas soluções paramagnética e de Ising, coexistam. Interpretamos esse resultado como um indicativo de que a transição entre essas fases é de segunda ordem. A outra superfície, que juntamente com a superfície (5.14b) delimita a região onde a solução de Ising é maximizada, pode ser obtida quando fazemos z^2 igual ao limite superior da inequação (5.16b):

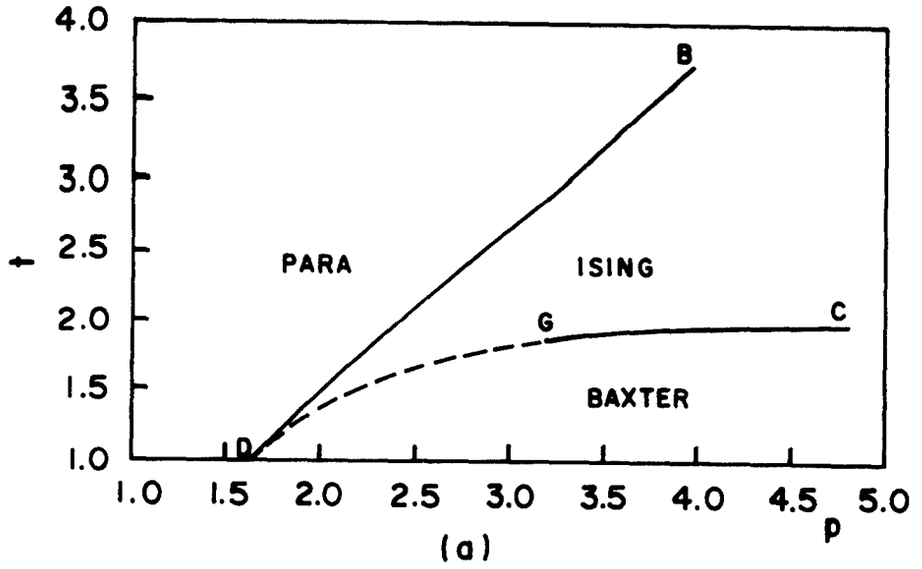
$$z = (t-1) \quad . \tag{5.17}$$

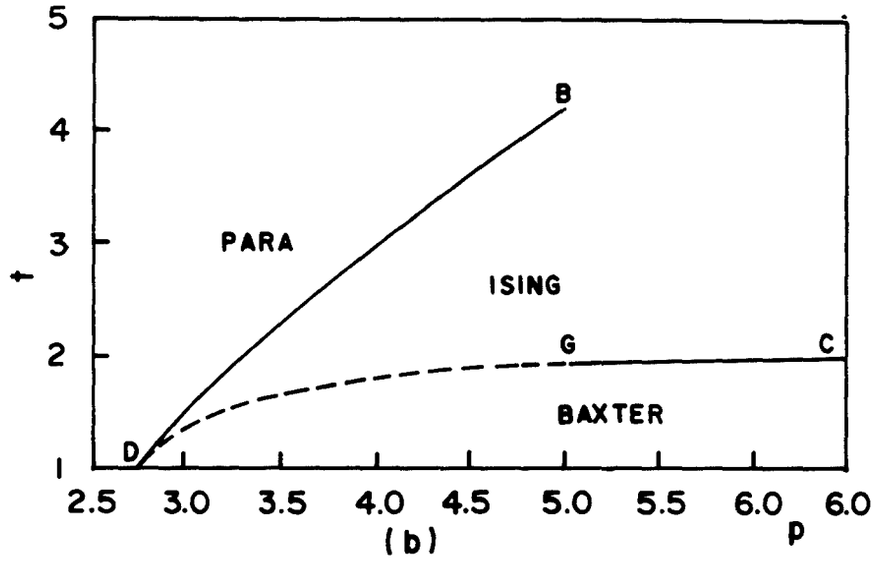
Combinando a expressão acima com a relação (5.9a) para z, obtemos que

$$(t-1) = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \tanh\left\{\frac{\left[p(t-1)+\sigma_1 \omega\right]}{t}\right\} \quad . \tag{5.18}$$

Quando se faz $t = 1$ na equação acima temos uma identidade. Portanto, o plano semi-infinito $t = 1$ também é interceptado pela superfície de instabilidade (5.18). A solução numérica dessa equação é mostrada na figura 5.4.

A intersecção da superfície de instabilidade (5.18) no plano $p-t$ é a reta ODC da figura 5.1a. Observamos que $p = 1$ e $t = 1$ é solução trivial da equação (5.18). Desse modo, a linha DC começa no ponto $p = t = 1$. No limite de p infinitamente grande essa linha de instabilidade vai assintoticamente por valores inferiores para $p = 2$. Também se verifica que essa linha é uma função côncava e monótona crescente do parâmetro p. Finalmente, deve-se observar que na região *P-min*, além do mínimo na origem, $g\left(x, z; k_1, k_3, 0, 0, 0\right)$ apresenta também um ponto de sela determinado pela solução de Ising (veja figura 5.2b).





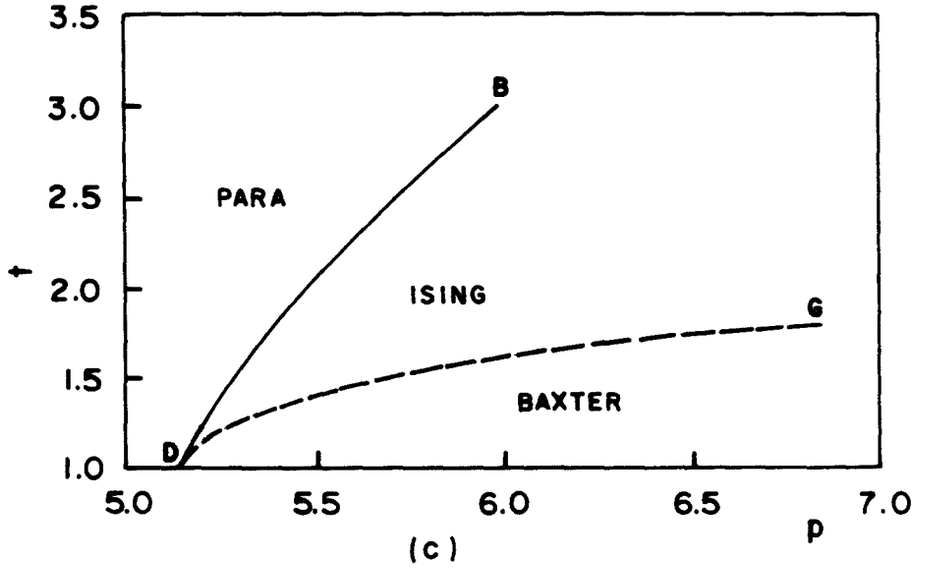


Figura 5. 4 - Em (a) mostramos as intersecções das superfícies de istabilidade (5.14b) e (5.18), que delimitam a região em que a fase de Ising é estável, no plano p-t para $\sigma_1 = 1.0$. A curva tracejada indica transição de primeira ordem e a sólida de segunda ordem. As coordenadas do ponto crítico G em que ocorre mudança na ordem da transição entre as fases de Ising e de Baxter são obtidas quando se faz p igual ao limite superior da inequação (5.80). Em (b) e (c) mostramos as projeções para $\sigma_1 = 2.0$ e $\sigma_1 = 4.0$, respectivamente. Nota-se claramente que os pontos D, G, B e C deslocam-se para a direita à medida que σ_1 aumenta, no entanto a linha DGC permanece sempre tendendo assintoticamente por valores inferiores para $t = 2$, como previsto.

A determinação da região de estabilidade para a solução de Baxter do MAT regular poderia nos fornecer todos os dados necessários para traçar seu diagrama de fases. Porém, não foi possível obter analiticamente essa região. Mesmo assim podemos recolher outros resultados, que juntamente com os já obtidos, são suficientes para que se trace um diagrama de fases qualitativamente correto. Parte dessa informação vem de dois casos particulares do MAT regular. Em $p = 0$ esse modelo se desacopla em dois modelos de Ising independentes. Sua temperatura crítica $t_C^I = 1$ foi corretamente obtida da análise da estabilidade da solução paramagnética. Isso mostra que em $p = 0$ não há superposição das soluções paramagnética e de Baxter. Em $p = 1$ o MAT regular isotrópico se reduz ao modelo de Potts com 4 estados (conforme foi demonstrado no capítulo anterior) cuja temperatura crítica $t_C^P = 1.21$ se situa dentro da região de *P-max*. Dessa forma , no intervalo de temperatura $1 < t < t_C^P$, o máximo absoluto de $g(x, z; k_1, k_3, 0, 0, 0)$, que é determinado numericamente como correspondendo à solução de Baxter (veja figura 5.2c), coexiste com o máximo relativo correspondente à solução paramagnética. Essa coexistência de dois máximos deve persistir para outros valores de p uma vez que o ponto crítico de Potts ($p = 1$, $t = t_C^P$) deve pertencer a uma linha crítica. Somos levados então a concluir que nessa parte do espaço de parâmetros há uma região na qual mais do que um máximo de $g(x, z; k_1, k_3, 0, 0, 0)$ coexistem. Em outras palavras, as regiões *P-max* e *I-max* são parcialmente invadidas pela região do espaço de parâmetros na qual o máximo absoluto de $g(x, z; k_1, k_3, 0, 0, 0)$ é determinado pela solução de Baxter. Finalmente, observamos que a linha de transição entre a fase de Baxter e as demais, além de passar pelos pontos $p = 0$, $t = 1$ e $p = 1$, $t = t_C^P$ tem que terminar na linha de instabilidade DC. Isso porque, se ela terminasse na linha DB, teríamos uma seqüência de fases sem significado físico: Baxter-Ising-Baxter-paramagnética. No que diz respeito à ordem das transições, observamos que a coexistência do máximo absoluto determinado pela solução de Baxter com o máximo relativo determinado pelas soluções de Ising ou paramagnética nos permite interpretar as transições entre essas fases como sendo de primeira ordem. Entretanto, no ponto E da figura 5.1b a ordem da transição da fase paramagnética para a de Baxter muda de primeira para segunda;

enquanto que no ponto G a ordem da transição da fase de Ising para a de Baxter também muda de primeira para segunda.

Baseados em todas essas informações apresentadas, Christiano e Goulart Rosa [4] obtiveram o diagrama de fases para o MAT regular, mostrado na figura 5.1b.

Na próxima seção, expandimos as equações (5.5) para as magnetizações. Se a expansão for realizada para x e z infinitesimalmente pequenos em $T \lesssim T_C$, determinamos as coordenadas do ponto E no espaço de parâmetros $p - t - \sigma_1$. Por outro lado, se a expansão for efetuada para $x \cong 0$ e $z \neq 0$ em $T \lesssim T_C$, obtemos as coordenadas do ponto G.

5.3 - EXPANSÕES DAS MAGNETIZAÇÕES E AS COORDENADAS DOS PONTOS E e G.

Inicialmente, supomos que existam x e z infinitesimalmente pequenos satisfazendo as equações (5.5) para $T \lesssim T_C$, quando nos aproximamos da fase paramagnética a partir da fase de Baxter. Dessa maneira, podemos expandir seus integrandos até termos de terceira ordem em x e/ou z. As expansões para os lados direitos dessas equações são:

$$x = \frac{x}{t} + \frac{p\bar{a}_1}{t^2} xz - \frac{1}{t^3}\left(\frac{1}{3} + \overline{(t_3)^2}\right)x^3 \quad , \tag{5.19a}$$

$$z = \frac{\bar{a}_1}{t} pz + \frac{\bar{a}_1}{t^2} x^2 - \frac{1}{t^3}\left(\frac{\bar{a}_1}{3} - \bar{a}_3\right)p^3 z^3 \quad , \tag{5.19b}$$

onde

$$\overline{(t_3)^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \tanh^2\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) \quad , \tag{5.20a}$$

$$\bar{a}_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \operatorname{sech}^2\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) \quad , \tag{5.20b}$$

$$\bar{a}_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \tanh\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right)\operatorname{sech}^2\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) \quad . \tag{5.20c}$$

Assim obtemos um sistema de equações algébricas acopladas que poderá ser resolvido analiticamente. Antes de se iniciar a solução desse sistema, observamos que

para J_3 finito e $J_1 = 0$ (isto é, $p = \infty$) a equação 5.19b recupera a expansão para a magnetização do modelo de Ising na presença de campo magnético aleatório obtida por Aharony [11].

Em primeiro lugar, rescrevemos a equação (5.19) do seguinte modo:

$$Ax + Bxz - Cx^3 = 0 \quad , \tag{5.21a}$$

$$Dz + Ex^2 - Fz^3 = 0 \quad , \tag{5.21b}$$

onde

$$A = \frac{1}{t} - 1 \quad , \tag{5.22}$$

$$B = \frac{p\bar{a}_1}{t^2} \quad , \tag{5.23}$$

$$C = \frac{1}{t^3}\left(\frac{1}{3} + \overline{(t_3)^2}\right) \quad , \tag{5.24}$$

$$D = \frac{p\bar{a}_1}{t} - 1 \quad , \tag{5.25}$$

$$E = \frac{\bar{a}_1}{t^2} \quad , \tag{5.26}$$

$$F = \frac{1}{t^3}\left(\frac{\bar{a}_1}{3} - \bar{a}_3\right)p^3 \quad . \tag{5.27}$$

Agora, dividindo a equação (5.21a) por x obtemos

$$x^2 = \frac{A + Bz}{C} \quad . \tag{5.28}$$

Substituindo x^2 em (5.21b) chegamos à seguinte equação do terceiro grau para z:

$$z^3 + a_2 z + a_3 = 0 \quad , \tag{5.29}$$

onde

$$a_2 = -\frac{3t^2(c_1 p - c_2 t)}{p^3} \quad , \tag{5.30}$$

$$a_3 = -\frac{9t^3(1-t)}{p^3}c_3 \quad , \tag{5.31}$$

$$c_1 = \frac{\bar{a}_1(1+3\bar{a}_1)}{\left(1+3\overline{(t_3)^2}\right)(\bar{a}_1 - 3\bar{a}_3)} \quad , \tag{5.32}$$

$$c_2 = \frac{1}{(\bar{a}_1 - 3\bar{a}_3)} \quad , \tag{5.33}$$

$$c_3 = \frac{\bar{a}_1}{\left(1+3\overline{(t_3)^2}\right)(\bar{a}_1 - 3\bar{a}_3)} \quad . \tag{5.34}$$

Observamos que $z = 0$ será sempre uma solução de (5.29) desde que $a_3 = 0$. Assim, impondo que a_3 seja igual a zero, a equação (5.29) se reduz a

$$z^3 + a_2 z = 0 \quad . \tag{5.35}$$

A equação (5.31) nos permite concluir que, como c_3 é uma grandeza sempre finita e positiva, só teremos $a_3 = 0$ se $t = 1$ para todos valores de p e σ_1. Isso é, para qualquer ponto da superfície de instabilidade definida por (5.14a) a condição $a_3 = 0$ é satisfeita.

Agora, para que a única solução real da equação (5.35) seja $z = 0$, o delta da equação

$$z^2 + a_2 = 0 \tag{5.36}$$

deve ser negativo, pois, neste caso, as duas raízes de (5.36) serão imaginárias. Desse modo, quando $t = 1$ (para todos valores de p e σ_1), a única solução real da equação (5.35) será $z = 0$ somente se

$$p < \frac{\left(1+3\overline{(t_3)^2}\right)}{\bar{a}_1(1+3\bar{a}_1)} \quad . \tag{5.37}$$

Portanto, no plano semi-infinito $t = 1$, existe uma solução aceitável somente quando a inequação (5.37) for satisfeita, o que resulta numa transição de segunda ordem da fase paramagnética para a de Baxter. Quando se inverte a inequação acima, não existe um $z = 0$ que resolva a equação (5.29). Nesse caso, existe um z positivo e finito, o que implica numa transição de primeira ordem. Assim, quando se faz p igual ao limite superior de (5.37), temos uma equação que nos dá as coordenadas do ponto

E (veja figura 5.5) no qual ocorre a mudança na ordem da transição entre as fases paramagnética e de Baxter. No caso do MAT regular e isotrópico, como $\overline{a}_1 = 0$ e $\overline{(t_3)^2} = 0$ para $\tilde{h}_3 = 0$, as coordenadas do ponto E são $p = 0.25$ e $t = 1$.

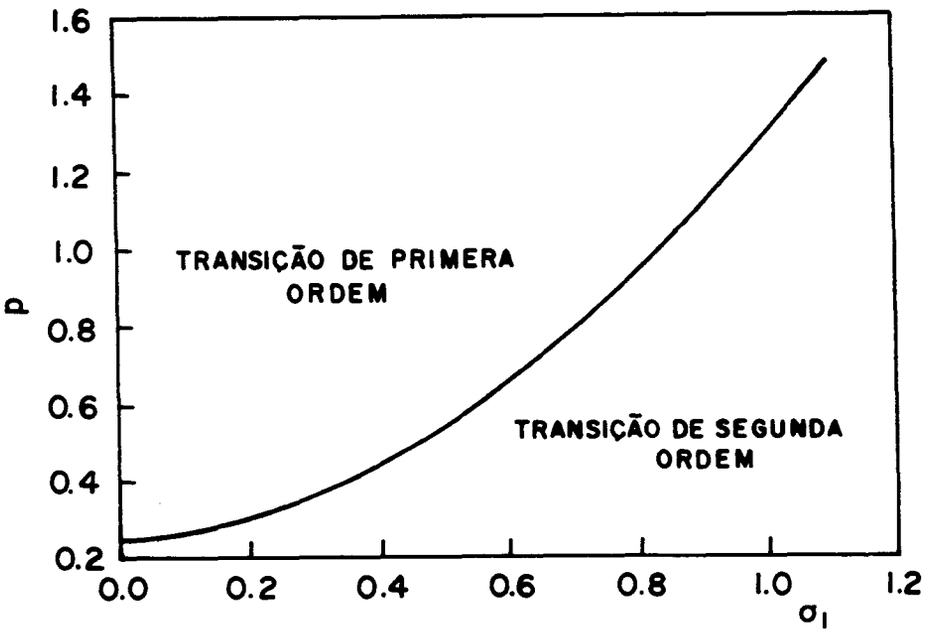


Figura 5. 5 - Mostra as coordenadas do ponto E em que ocorre a mudança na ordem da transição entre as fases paramagnética e de Baxter, no semi-plano $t = 1$. Essas coordenadas são obtidas quando se faz p igual ao limite superior da inequação (5.37). Na região acima da curva a transição é de primeira ordem e na região abaixo da curva a transição é de segunda ordem. Para $\sigma_1 = 0$ temos $p = 0.25$.

Por outro lado, a equação cúbica em z dada por (5.29) só terá uma única raiz real se o seu delta (Δ) for positivo, pois, neste caso, as outras raízes são complexas. A raiz real única da equação (5.29) [50] é dada por:

$$z = S + T \quad , \tag{5.38}$$

onde

$$S = \left(R + \Delta^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad , \tag{5.39}$$

$$T = \left(R - \Delta^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad , \tag{5.40}$$

$$\Delta = Q^3 + R^2 \quad , \tag{5.41}$$

$$Q = \frac{a_2}{3} = \frac{-t^2}{p^3}(c_1 p - c_2 t) \quad , \tag{5.42}$$

$$R = -\frac{a_3}{2} = \frac{9t^3}{2p^3}(1-t)c_3 \quad . \tag{5.43}$$

A expressão acima para z nos permitirá obter o expoente crítico para este parâmetro de ordem. Inicialmente, definimos o infinitesimal ε do seguinte modo (para $T \lesssim T_C$):

$$\varepsilon = \frac{T_C - T}{T_C} = \frac{t_C - t}{t_C} \quad . \tag{5.44}$$

Como a transição da fase paramagnética para a de Baxter ocorre sempre no plano semi-infinito $t = 1$, temos que $t_C = 1$. Desse modo, podemos escrever que

$$\varepsilon = 1 - t \quad . \tag{5.45}$$

As expressões de S e T até termos de primeira ordem em ε são dadas por:

$$S = b^{\frac{1}{3}}\left(1 + \frac{c}{3b}\varepsilon\right) \quad , \tag{5.46a}$$

$$T = (-b)^{\frac{1}{3}}\left(1 - \frac{d}{3b}\varepsilon\right) \quad , \tag{5.46b}$$

onde

$$b = \left[\frac{(c_2 - c_1 p)^3}{p^9}\right]^{\frac{1}{2}} \quad , \tag{5.47a}$$

$$c = \frac{9c_3}{2p^3} - 3b\left\{\frac{c_2\left[(c_2)^2 - 2c_2 c_1 p + (c_1 p)^2\right]}{2(1-4p)^3} + 1\right\} \quad , \tag{5.47b}$$

$$d = \frac{9c_3}{p^3} - c \quad . \tag{5.47c}$$

Substituindo as expressões para S e T acima na relação (5.38), encontramos que

$$z \cong \frac{3c_3}{(c_2 - c_1 p)}\varepsilon \quad ; \quad p < \frac{\left(1 + 3\overline{(t_3)^2}\right)}{\overline{a}_1\left(1 + 3\overline{a}_1\right)} \quad , \quad T \lesssim T_C. \tag{5.48}$$

Para o caso do MAT regular isotrópico, como $c_1 = 4$, $c_2 = 1$ e $c_3 = 1$ quando $\tilde{h}_3 = 0$, obtemos que

$$z \cong \frac{1}{(1-4p)}\varepsilon \quad ; \quad p < 0.25 \quad , T \lesssim T_C . \tag{5.49}$$

Assim, o parâmetro de ordem z se anula linearmente com ε tanto para o MAT aleatório e isotrópico na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$ como para o MAT regular e isotrópico, o que resulta no expoente crítico $\beta = 1$ para os dois casos.

Agora voltamos nossa atenção para a solução x. Substituindo z dado por (5.48) na relação (5.28), obtemos que

$$x^2 \cong \frac{3\left[1 + \dfrac{3p\bar{a}_1 c_3}{(c_2 - c_1 p)}\right]}{1 - 3\overline{(t_3)^2}}\varepsilon \quad ; \quad p < \frac{\left(1 + 3\overline{(t_3)^2}\right)}{\bar{a}_1(1 + 3\bar{a}_1)} \quad , T \lesssim T_C . \tag{5.50}$$

Para o caso do MAT regular e isotrópico chegamos ao resultado

$$x^2 \cong 3\left(\frac{1-p}{1-4p}\right)\varepsilon \quad ; \quad p < 0.25 \quad , T \lesssim T_C . \tag{5.51}$$

Portanto, como o quadrado do parâmetro de ordem x se anula linearmente com ε, temos o coeficiente crítico $\beta = \frac{1}{2}$ para os dois casos.

Vamos agora localizar o ponto G através de um procedimento completamente análogo ao utilizado na localização do ponto E. Inicialmente, supomos que existam $x \cong 0$ e $z = z_l + \delta z$ satisfazendo as equações (5.5) para $T \lesssim T_C$. z_l é um número positivo e finito, e δz é um infinitesimal. Assim, podemos expandir seus integrandos até termos de terceira ordem em x e/ou δz. As expansões encontradas foram as seguintes:

$$\left(\frac{x}{t}\right)^2 = \frac{3}{1+I_1}\left\{(1-t) + \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \left[b_8 + A_1\left(\frac{p\delta z}{t}\right) + B_1\left(\frac{p\delta z}{t}\right)^2 \right]\right\} \quad , \tag{5.52a}$$

$$\delta z = -z_I + \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \left\{ b_8 + A_1\left(\frac{p\delta z}{t}\right) + B_1\left(\frac{p\delta z}{t}\right)^2 + C_1\left(\frac{p\delta z}{t}\right)^3 + \left[1 - {b_8}^2 - E_1\left(\frac{p\delta z}{t}\right)\right]\left(\frac{x}{t}\right)^2 \right\} \quad , \tag{5.52b}$$

onde

$$A_1 = \frac{1}{b_4}\left(b_1 - b_4 b_5 b_8\right) \quad , \tag{5.53}$$

$$B_1 = \frac{1}{b_4}\left(b_4 b_6 b_8 - b_1 b_5 - b_2\right) \quad , \tag{5.54}$$

$$C_1 = \frac{1}{b_4}\left(b_3 + b_2 b_5 + b_1 b_6 - b_4 b_7 b_8\right) \quad , \tag{5.55}$$

$$E_1 = A_1 b_8 \quad , \tag{5.56}$$

$$b_1 = 1 - \tanh^2\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) \quad , \tag{5.57}$$

$$b_2 = \left[1 - \tanh^2\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right)\right]\tanh\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) \quad , \tag{5.58}$$

$$b_3 = \left[\frac{1}{3} + \tanh\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) - \tanh^2\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right)\right]\tanh\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) - \frac{1}{3} \quad , \tag{5.59}$$

$$b_4 = 1 + \tanh\left(\frac{pz_I}{t}\right)\tanh\left(\frac{\sigma_1 \omega}{t}\right) \quad , \tag{5.60}$$

$$b_5 = \frac{b_1 \tanh\left(\frac{pz_I}{t}\right)}{b_4} \quad , \tag{5.61}$$

$$b_6 = \frac{\tanh\left(\frac{pz_I}{t}\right)}{b_4}\left[\frac{{b_1}^2 \tanh\left(\frac{pz_I}{t}\right)}{b_4}\right] \quad , \tag{5.62}$$

$$b_7 = \frac{\tanh\left(\frac{pz_I}{t}\right)}{b_4}\left[b_3 + \frac{2b_1 b_2 \tanh\left(\frac{pz_I}{t}\right)}{b_4} + \left(\frac{\tanh\left(\frac{pz_I}{t}\right)}{b_4}\right)^2 {b_1}^3\right] \quad , \tag{5.63}$$

$$b_8 = \tanh\left[\frac{(pz_1 + \sigma_1\omega)}{t}\right] \quad , \tag{5.64}$$

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \; b_8(3b_8 + 4) \quad . \tag{5.65}$$

Substituindo (5.52a) em (5.52b) encontramos a seguinte equação cúbica para δz:

$$(\delta z)^3 + \frac{D_2 t}{D_3 p}(\delta z)^2 + \frac{t^3}{D_3 p^3}\left(D_1 \frac{p}{t} - 1\right)(\delta z) + \frac{D_0 t^3}{D_3 p^3} = 0 \quad , \tag{5.66}$$

onde

$$D_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \left\{ b_8 + \frac{3(1 - b_8^{\,2})[(1-t) + I_2]}{1 + I_1} \right\} - z_1 \quad , \tag{5.67}$$

$$D_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \left\{ A_1 + \frac{3(1 - b_8^{\,2})I_3}{1 + I_1} - \frac{3E_1[(1-t) + I_2]}{1 + I_1} \right\} \quad , \tag{5.68}$$

$$D_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \left\{ B_1 + \frac{3(1 - b_8^{\,2})I_4}{1 + I_1} - \frac{3E_1 I_3}{1 + I_1} \right\} \quad , \tag{5.69}$$

$$D_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \left\{ C_1 - \frac{3E_1 I_4}{1 + I_1} \right\} \quad , \tag{5.70}$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \; b_8 \quad , \tag{5.71}$$

$$I_3 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \; A_1 \quad , \tag{5.72}$$

$$I_4 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \; B_1 \quad , \tag{5.73}$$

Observamos que $\delta z = 0$ será sempre uma solução de (5.66) desde que $D_0 = 0$. Assim, impondo que D_0 seja nulo, a equação (5.66) se reduz a

$$(\delta z)^3 + \frac{D_2 t}{D_3 p}(\delta z)^2 + \frac{t^3}{D_3 p^3}\left(D_1 \frac{p}{t} - 1\right)(\delta z) = 0 \quad . \tag{5.74}$$

Usando a relação (5.67), notamos que $D_0 = 0$ implica que

$$I_2 - z_1 + \frac{3}{1 + I_1} \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \left(1 - b_8^{\,2}\right)[(1-t) + I_2] = 0 \quad . \tag{5.75}$$

Agora, vamos encontrar z_1 que satisfaça (5.75). Supondo que

$$z_1 = I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \tanh\left[\frac{(pz_1 + \sigma_1\omega)}{t}\right] \tag{5.76}$$

e considerando a expressão acima com as equações (5.17) e (5.18), obtemos

$$z_1 = I_2 = (t-1) \quad . \tag{5.77}$$

Substituindo os valores de z_1 e I_2 dados por (5.77) em (5.75), podemos concluir que

$$z_1 = (t-1) \tag{5.78}$$

é uma solução desta equação. Mas a relação acima corresponde exatamente à superfície de instabilidade (5.17), cuja intersecção no plano *p-t* é a reta DC da figura 5.1a. Portanto, $\delta z = 0$ nessa superfície.

Assim, para que a única solução real da equação (5.74) seja $\delta z = 0$, o delta da equação

$$(\delta z)^2 + \frac{D_2 t}{D_3 p}(\delta z) + \frac{t^3}{D_3 p^3}\left(D_1 \frac{p}{t} - 1\right) = 0 \tag{5.79}$$

deve ser negativo, pois, neste caso, as duas raízes de (5.79) serão imaginárias. Dessa maneira, quando $z_1 = (t-1)$, a única solução real da equação (5.74) será $\delta z = 0$ somente se

$$p < \frac{4D_3 t}{4D_1 D_3 - (D_2)^2} \quad . \tag{5.80}$$

Portanto, na superfície $z_1 = (t-1)$, existe uma solução aceitável somente quando a inequação (5.80) for satisfeita, o que resulta numa transição de segunda ordem da fase de Ising para a de Baxter. Quando se inverte a inequação acima, não existe um $\delta z = 0$ que resolva a equação (5.74). Nesse caso, existe um δz positivo e finito, o que implica numa transição de primeira ordem. Assim, quando se faz p igual ao limite superior da inequação (5.80), temos uma equação que nos dá as coordenadas do ponto G (veja figura 5.4) no qual ocorre a mudança na ordem da transição entre as fases paramagnética e de Baxter. Quando se faz $\widetilde{h}_3 = 0$ nessa equação, encontramos que para o MAT regular e isotrópico as coordenadas do ponto G são $p \cong 1.8$ e $t \cong 1.5$.

5.4 - DIAGRAMA DE FASES DO MAT NA PRESENÇA DE CAMPO NA DIREÇÃO DE $z = \langle \sigma s \rangle$.

Tendo em vista todas as informações apresentadas nas seções anteriores, fizemos então um estudo numérico das equações (5.5), o que nos possibilitou traçar o diagrama de fases do MAT isotrópico na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$, mostrado na figura 5.6.

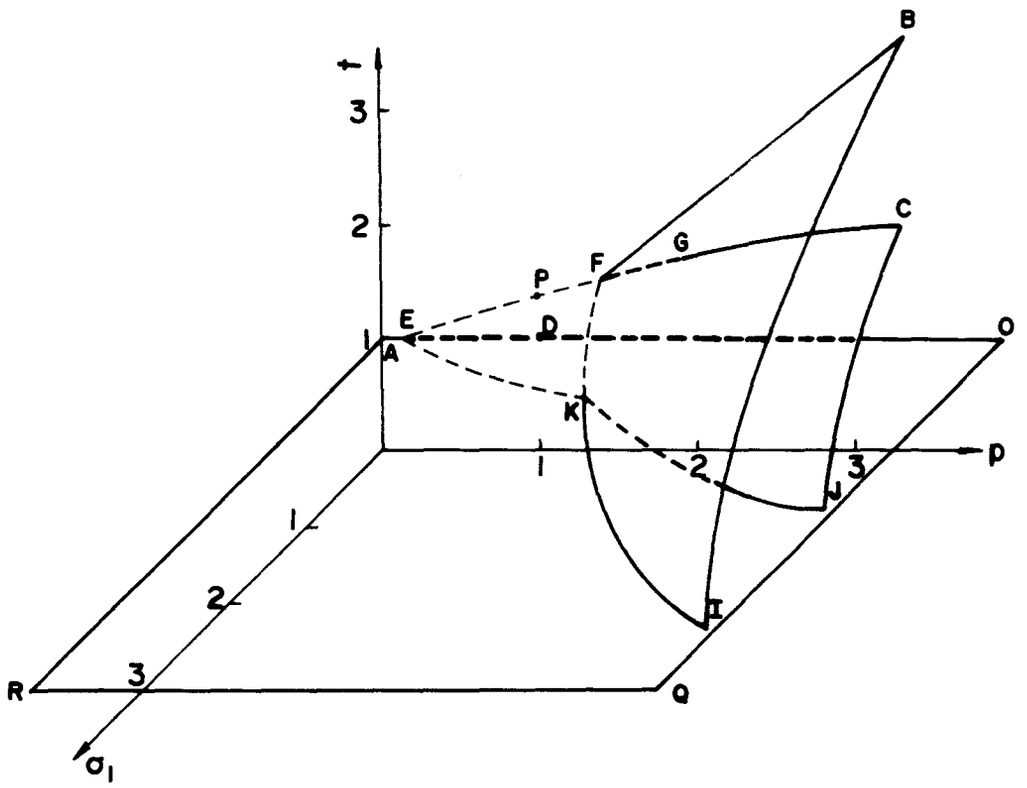


Figura 5. 6 - Diagrama de fases do MAT isotrópico com interações ferromagnéticas de alcance infinito, na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$. A fase paramagnética ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$) é limitada por baixo pelas seguintes superfícies: EPFKE (superfície de transição de primeira ordem), FBIKF (superfície de transição de segunda ordem), e AEKIQRA (superfície de transição de segunda ordem). A fase de Ising ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0, \langle \sigma S \rangle \neq 0$) é limitada por cima pela superfície FBIKF, e por baixo pela superfície FGCJKF. A ordem da transição de fase nessa última superfície depende da posição do ponto crítico G. Os vários cortes realizados nas superfícies FBIKF e FGCJKF (veja figura 5.4) mostram como a posição de G muda no espaço de parâmetros $pt\sigma_1$. A fase de Baxter ($\langle \sigma \rangle \neq 0$, $\langle S \rangle \neq 0$, $\langle \sigma S \rangle \neq 0$)só existe abaixo dos seguintes planos: EPFKE, AEKIQRA e FGCJKF. O plano AOQR é a superfície de instabilidade dada pela equação (5.14a). As coordenadas dos pontos críticos E e G foram determinadas analiticamente e são mostradas nas figuras 5.4 e 5.5, para valores especiais de p e σ_1.

Na próxima seção, as equações das magnetizações, entropia, calor específico e suscetibilidade são discutidas e resolvidas analiticamente para valores especiais das constantes de interação e da variância.

5.5 - MAGNETIZAÇÕES, ENTROPIA, CALOR ESPECÍFICO E SUSCETIBILIDADE.

A solução numérica das equações (5.5) para as magnetizações é apresentada nas figuras 5.7 a 5.10. Essas figuras mostram claramente as influências do parâmetro de acoplamento $p=\left(J_3/J_1\right)$ e da variância $\sigma_1=\left(\tilde{h}_3/J_1\right)$ sobre o comportamento das magnetizações, nas várias regiões dos diagramas das figuras 5.1 e 5.6 em que ocorrem transições de fase.

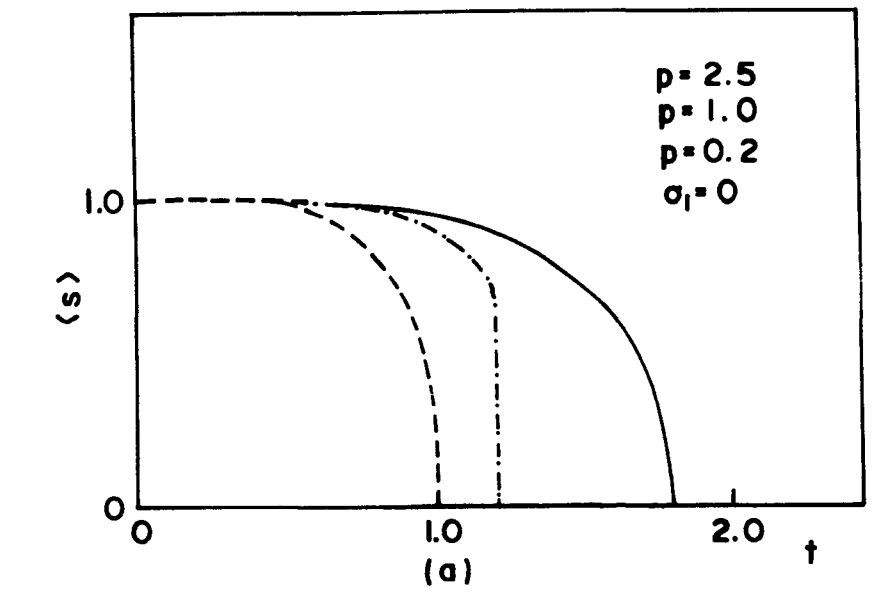
Outras funções de interesse são a entropia e o calor específico, cujas expressões no caso geral de três campos magnéticos aleatórios são dadas por (4.16) e (4.17), respectivamente. Quando consideramos campo magnético aleatório apenas na direção de $z=\langle\sigma S\rangle$, as equações para a entropia e o calor específico são as seguintes (caso $J_1=J_2$):

$$\left(\frac{S}{k_B}\right)=2\left[\ln 2+\ln\cosh\left(\frac{x}{t}\right)-\left(\frac{x^2}{t}\right)\right]-\frac{pz^2}{t}+\int_{-\infty}^{+\infty}D\omega\ln\left\{D_3\cosh\left[\frac{(pz+\sigma_1\omega)}{t}\right]\right\} \quad ,(5.81)$$

$$C_H=-\left[2\left(\frac{\partial x}{\partial T}\right)J_1x+\left(\frac{\partial z}{\partial T}\right)J_3z\right] \quad , \qquad (5.82)$$

onde x e z são as soluções das equações (5.5). As expressões da entropia e do calor específico para as fases paramagnética e de Ising podem ser obtidas facilmente a partir das relações acima. Na fase paramagnética $(x=z=0)$, o calor específico é nulo e a entropia é dada por

$$\left(\frac{S^P}{k_B}\right)=2\ln 2+\int_{-\infty}^{+\infty}D\omega\ln\cosh\left(\frac{\sigma_1\omega}{t}\right) \quad . \qquad (5.83)$$



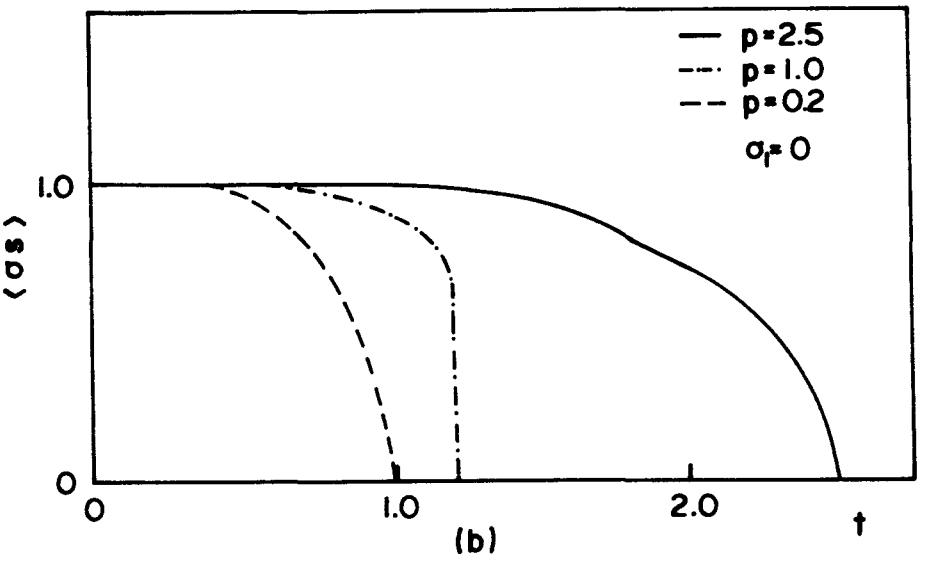
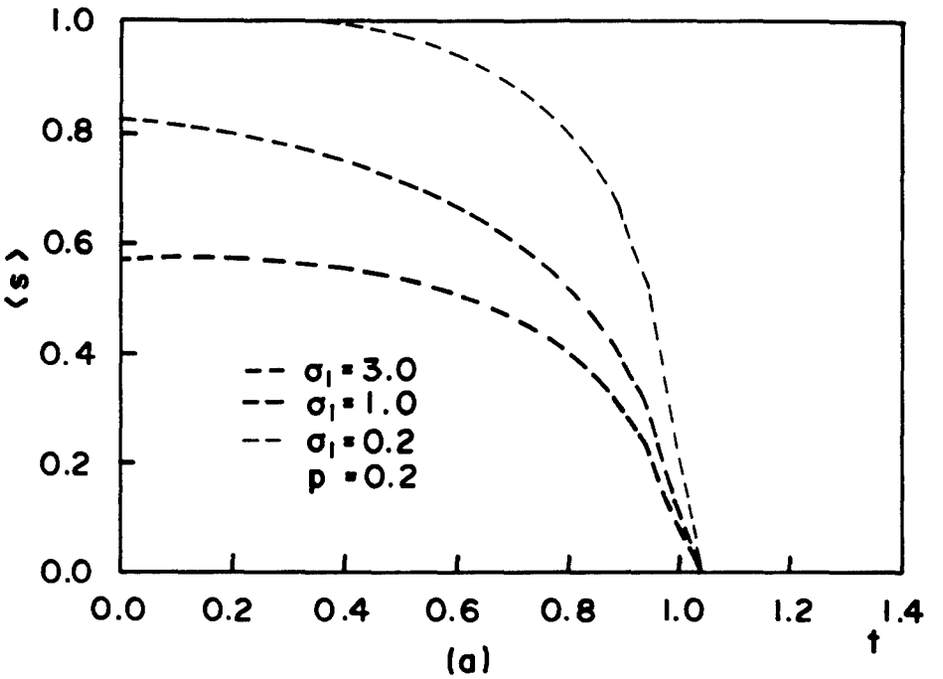


Figura 5. 7 - Em (a) e (b) apresentamos os gráficos das magnetizações $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma S \rangle$ em função da temperatura (para campo magnético constante nulo), considerando $\sigma_I = 0$ e os seguintes valores de p: $p = 0.2$ (curva tracejada), $p = 1.0$ (curva tracejada e pontilhada), e $p = 2.5$ (curva sólida). Para $p = 1$ o MAT regular se reduz ao modelo de Potts regular com 4 estados. Nessa situação, as curvas tracejadas e pontilhadas em (a) e (b) coincidem. Isso é uma conseqüênica da simetria da hamiltoniana (*para* $K_1 = K_2 = K_3$) com relação à transformação $S_i \to S_i$ e $\sigma_i \to \sigma_i S_i$ que faz com que $\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle$. Note que, para p = 2.5, a curva $\langle \sigma S \rangle$ acusa a transição ocorrida em $\langle S \rangle$.



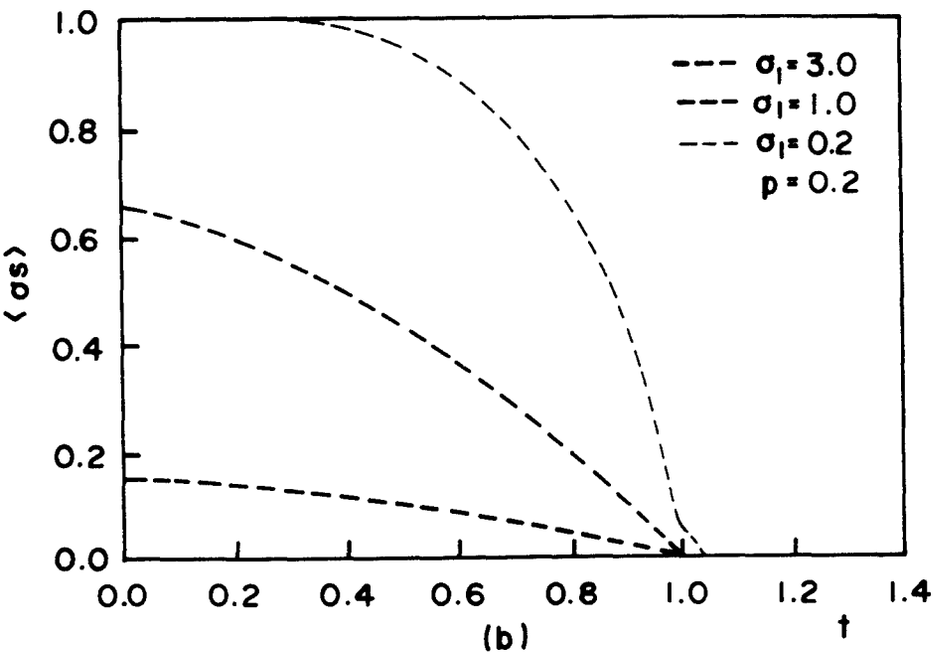


Figura 5. 8 - Em (a) e (b) mostramos os gráficos das magnetizações $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma S \rangle$ em função da temperatura (para campo magnético constante nulo), considerando $p = 0.2$ e os seguintes valores de σ_1: $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina), $\sigma_1 = 1.0$ (curva média), e $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa). À medida que a variância σ_1 aumenta, as magnetizações diminuem, como era de se esperar. Como $p < 0.25$, a transição entre as fases de Baxter e paramagnética é sempre de segunda ordem. Isso é evidenciado pelo fato de a magnetização se aproximar suavemente de zero, quando a temperatura tende por valores inferiores para a temperatura crítica.

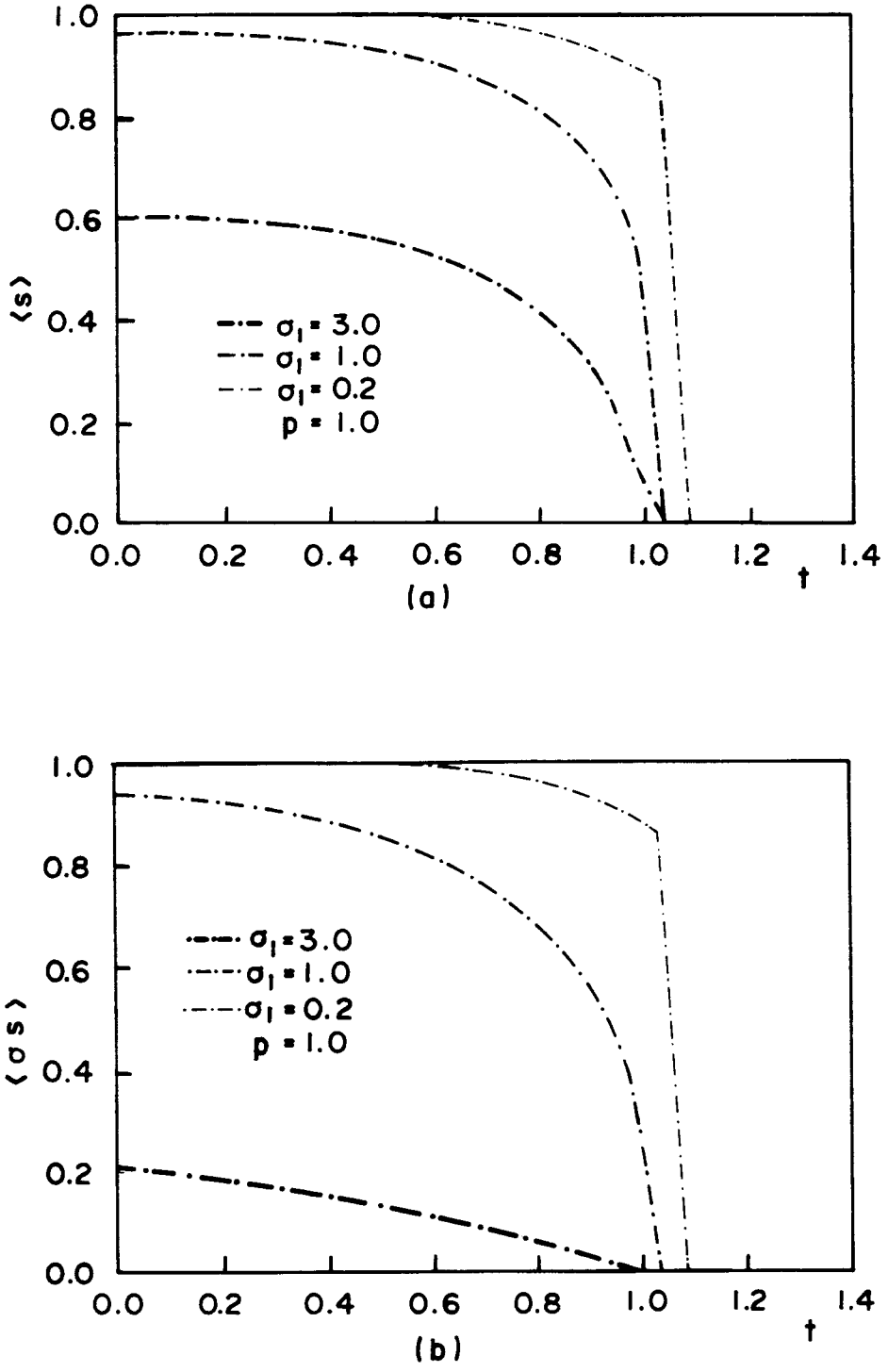


Figura 5. 9 - Em (a) e (b) mostramos os gráficos das magnetizações $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma S \rangle$ em função da temperatura (para campo magnético constante nulo), considerando $p = 1.0$ e os seguintes valores de σ_I: $\sigma_I = 0.2$ (curva fina), $\sigma_I = 1.0$ (curva média), e $\sigma_I = 3.0$ (curva grossa). À medida que a variância σ_I aumenta, a transição de primeira ordem (mostrada pelo salto na curva para $\sigma_I = 0.2$) entre as fases paramagnética e de Baxter torna-se de segunda ordem.

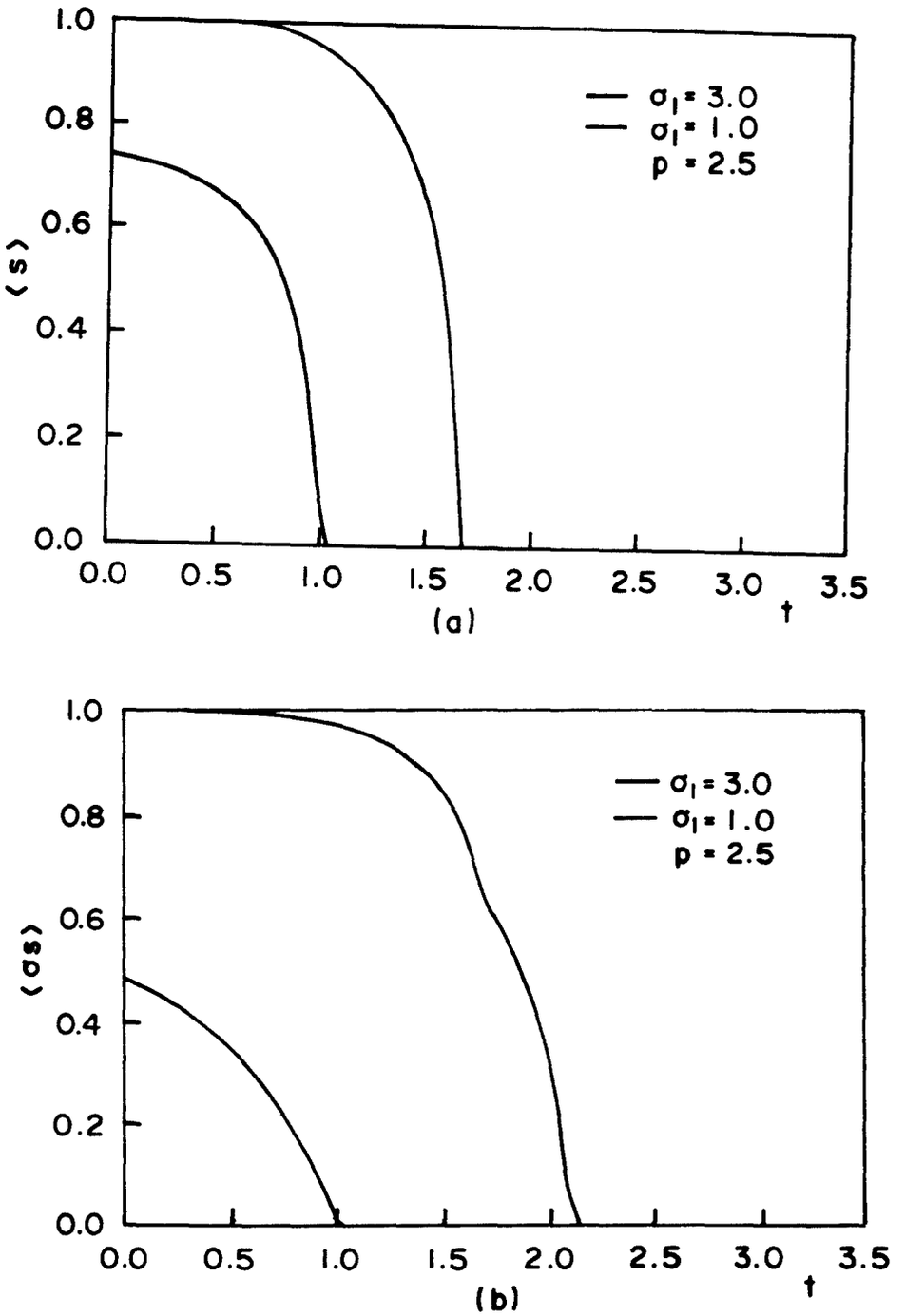


Figura 5. 10 - Em (a) e (b) mostramos os gráficos das magnetizações $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma S \rangle$ em função da temperatura (para campo magnético constante nulo), considerando $p = 2.5$ e os seguintes valores de σ_1: $\sigma_1 = 1.0$ (curva média), e $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa). No gráfico (b), para $\sigma_1 = 1.0$, o rebaixamento que ocorre em $t \cong 1.7$ evidencia a transição entre as fases de Ising e de Baxter. Para $\sigma_1 = 3.0$ esse rebaixamento desaparece, pois não mais existe a fase de Ising (veja diagrama de fases de figura 5.6)

Para o caso regular $\left(\tilde{h}_3 = 0\right)$, a entropia na fase de alta temperatura é $2\ln 2$. Na fase de Ising $\left(x = 0 \quad , \quad z = \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \tanh\left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t}\right]\right)$, a entropia e o calor específico tornam-se:

$$\left(\frac{S^I}{k_B}\right) = 2\ln 2 - \frac{pz^2}{t} + \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \ln\cosh\left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t}\right] \quad , \tag{5.84}$$

$$\left(\frac{C_H^I}{k_B}\right) = \frac{k_3^2 z^2 \left\{1 - \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \tanh^2\left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t}\right]\right\}}{1 - k_3\left\{1 - \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \tanh^2\left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t}\right]\right\}} - \frac{\left(\frac{pz}{t}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} D\omega\, \sigma_1 \omega \tanh^2\left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t}\right]}{1 - k_3\left\{1 - \int_{-\infty}^{+\infty} D\omega\, t \tanh^2\left[\frac{(pz + \sigma_1 \omega)}{t}\right]\right\}} \quad . \tag{5.85}$$

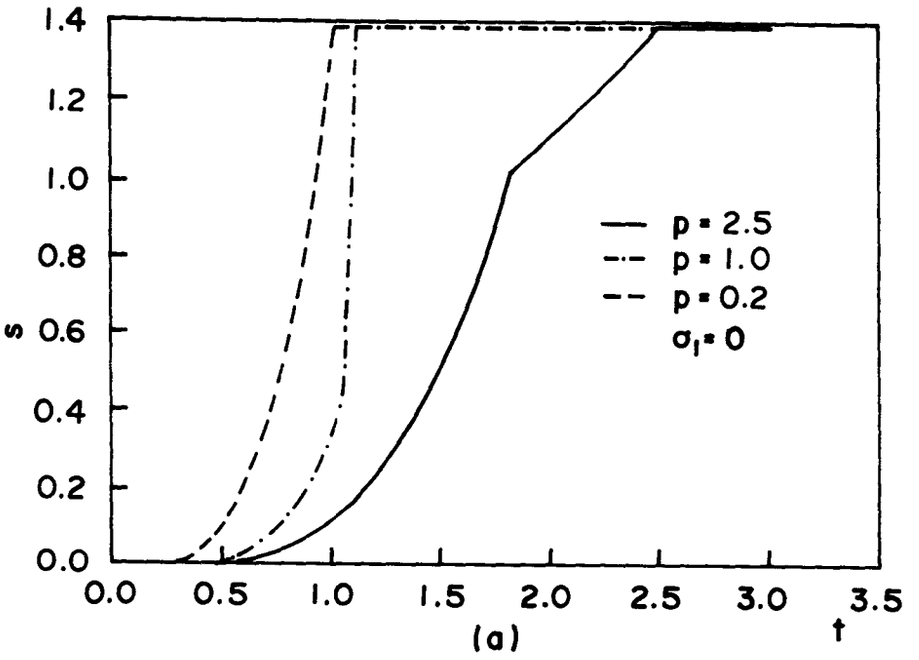
No caso regular, as relações acima se reduzem aos resultados da teoria de campo médio para o modelo de Ising:

$$\left(\frac{S^I}{k_B}\right) = 2\ln 2 - \frac{pz^2}{t} + \ln\cosh\left(\frac{pz}{t}\right) \quad , \tag{5.86}$$

$$\left(\frac{C_H^I}{k_B}\right) = \frac{k_3^2 z^2 \left(1 - z^2\right)}{1 - k_3\left(1 - z^2\right)}. \tag{5.87}$$

Portanto, a expressão (5.87) para C_H^I tem um comportamento singular se $z^2 = 1 - \frac{t}{p}$, que para $z = 0$ é a equação da linha de instabilidade DB da figura 5.1a.

Ao longo da linha de transição FB, C_H^I tem uma descontinuidade $\Delta C_H = \frac{3}{2} k_B$, como pode ser verificado na figura 5.11a. O comportamento de S e C_H na fase de Baxter, assim como ao longo dos planos de transição, é obtido através da solução numérica das equações (5.81) e (5.82) acopladas às equações (5.5). Os resultados para valores especiais de p e σ_1 são mostrados nas figuras 5.11 a 5.14.



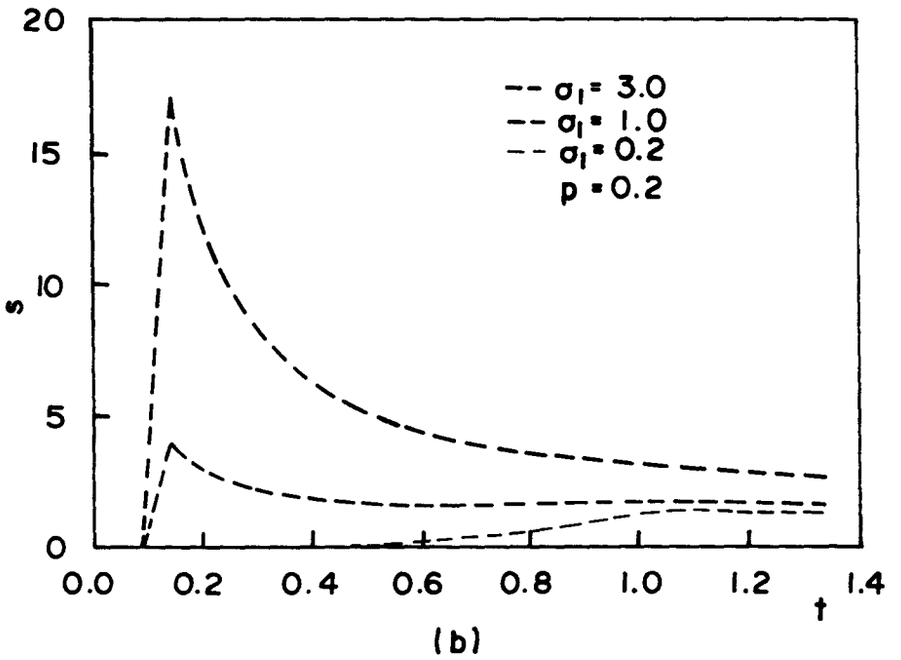
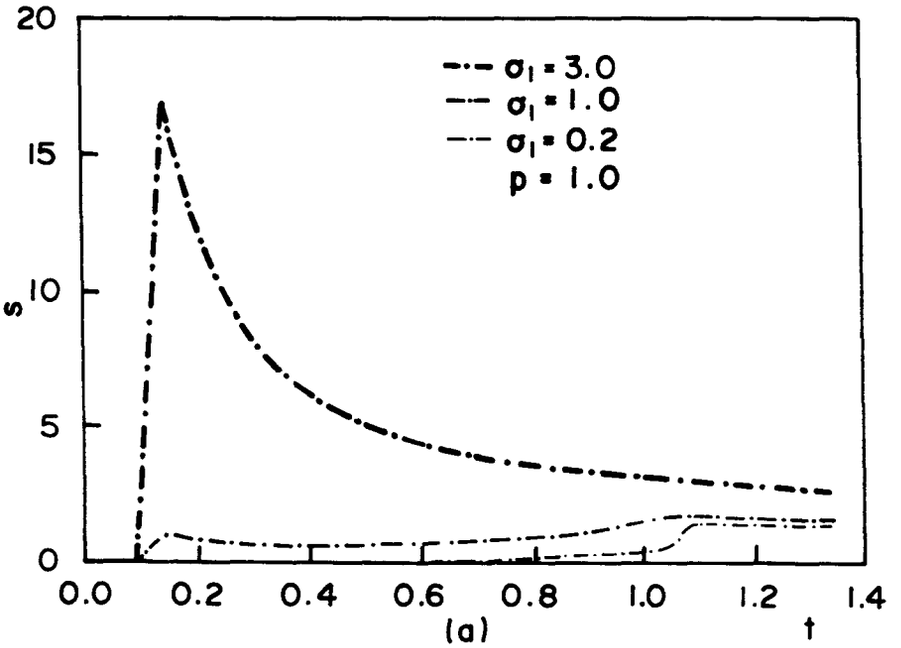


Figura 5. 11 - (a) Mostra a entropia em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $\sigma_1 = 0$. Os seguintes valores de p são considerados: $p = 0.2$ (curva tracejada), $p = 1.0$ (curva tracejada e pontilhada), e $p = 2.5$ (curva sólida). (b) Gráfico da entropia em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 0.2$. Os seguintes valores da variância σ_1 são considerados: $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina), $\sigma_1 = 1.0$ (curva média), $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa). Como era de se esperar, a entropia aumenta à medida que a variância aumenta.



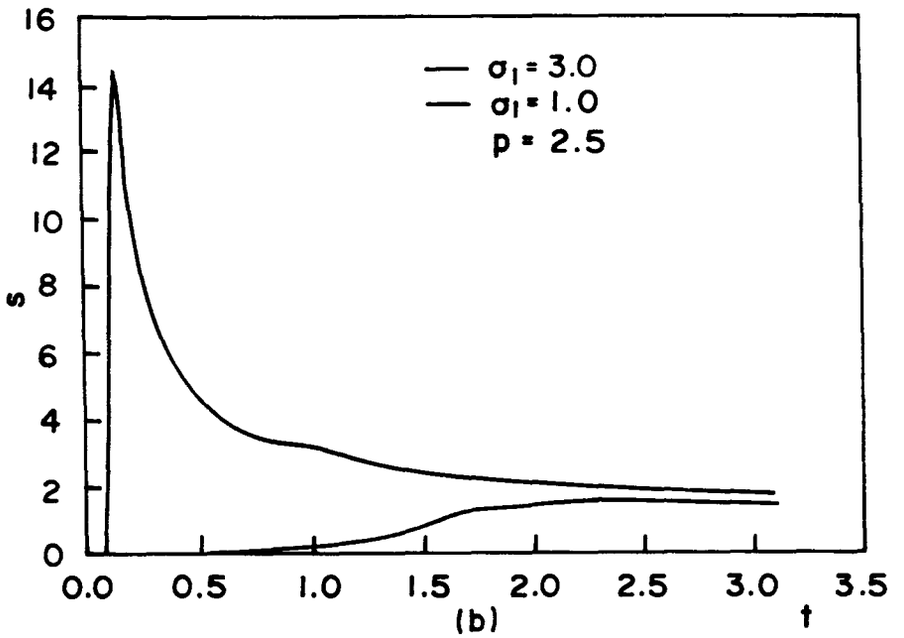


Figura 5. 12 - (a) Gráfico da entropia em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 1.0$. Os seguintes valores de σ_1 são considerados: $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina), $\sigma_1 = 1.0$ (curva média), $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa). (b) Gráfico da entropia em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 2.5$. Os seguintes valores de σ_1 são considerados: $\sigma_1 = 1.0$ (curva média), $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa).

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

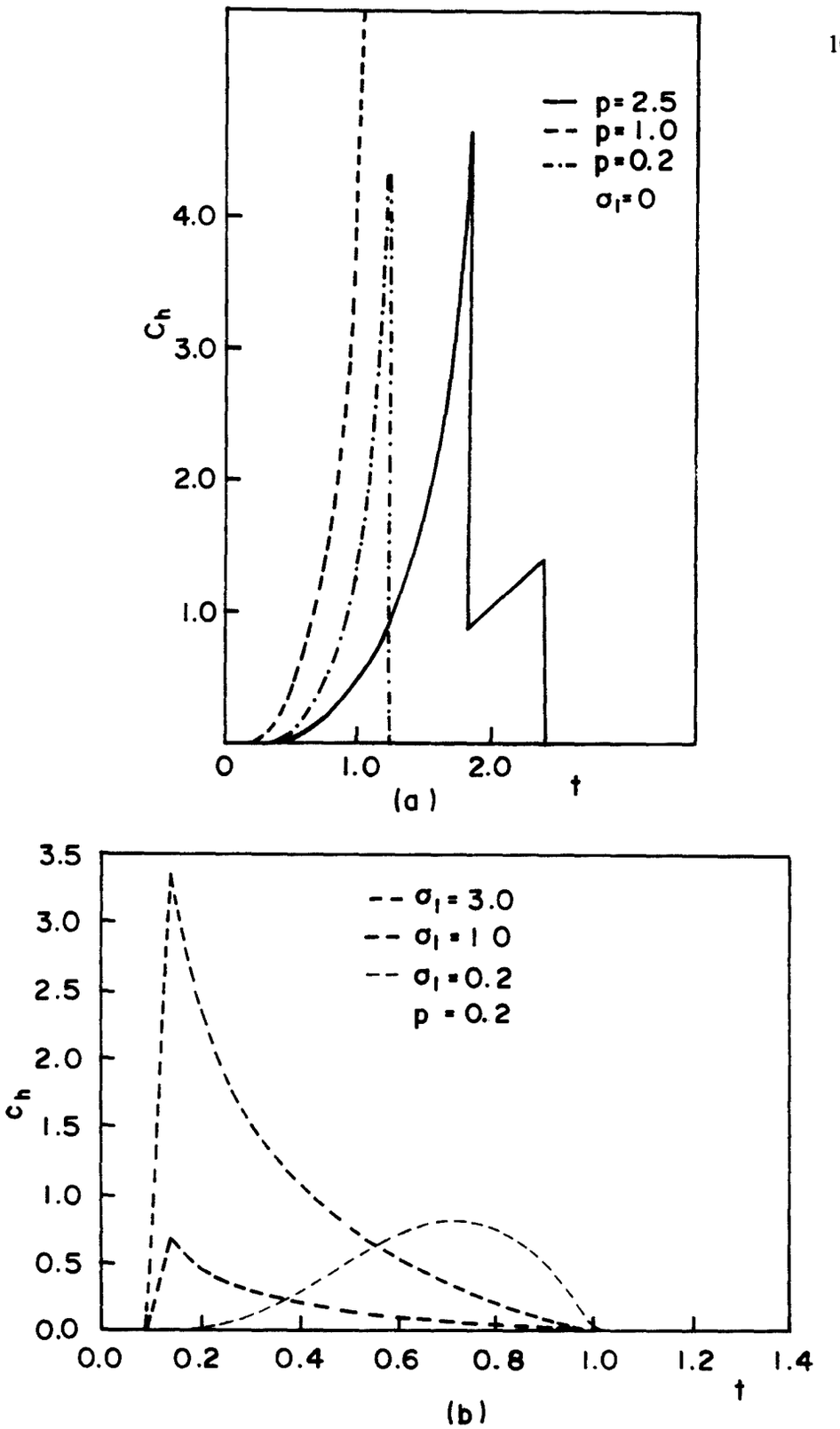


Figura 5. 13 - (a) Gráfico do calor específico (em unidades de k_B) em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $\sigma_1 = 0$. Para $p = 0.2$ (curva tracejada) o calor específico é zero acima de $t = 1$ e mostra um comportamento divergente quando se aproxima da temperatura crítica a partir da fase de Baxter. Para $p = 1$ (curva tracejada e pontilhada) C_h parece ter um salto finito na temperatura crítica do modelo de Potts regular $t_c^p \cong 1.21$, anulando-se acima desta temperatura. Para $p = 2.5$, C_h tem duas descontinuidades. Há um salto finito $\Delta C_h = \frac{3}{2}$ na linha crítica entre as fases paramagnética e de Ising e um salto menor entre as fases de Ising e de Baxter. (b) Gráfico do calor específico (em unidades de k_B) em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 0.2$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $C_h \cong 0.8$ em $t \cong 0.72$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) $C_h \cong 3.8$ em $t \cong 0.17$. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) $C_h \cong 0.7$ em $t \cong 0.15$. O calor específico se anula na fase paramagnética para todos valores de σ_1 quando $p = 0.2$.

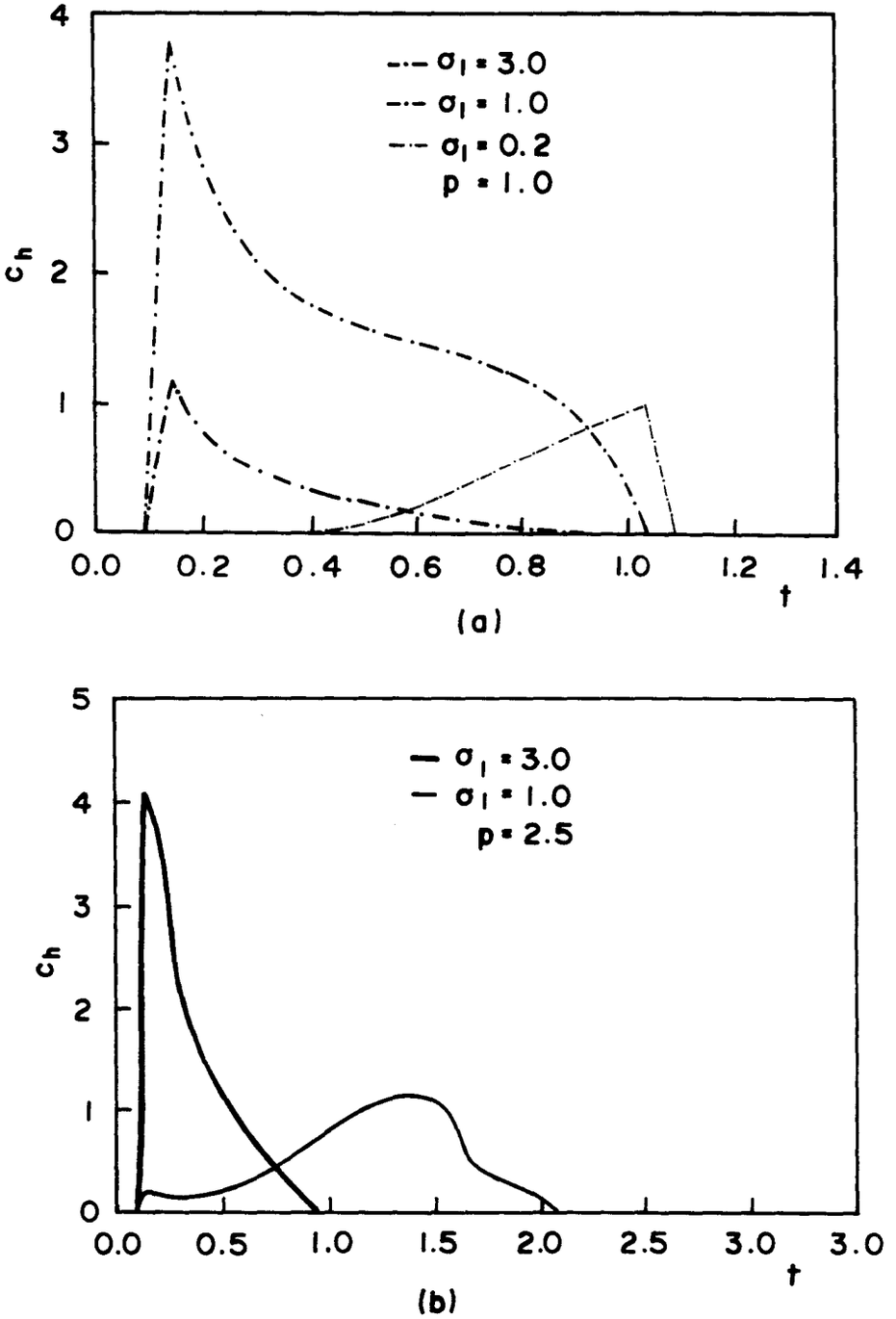


Figura 5. 14 - (a) Gráfico do calor específico (em unidades de k_B) em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 1.0$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $C_h \cong 1.0$ em $t \cong 1.03$. O pico do calor específico para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) é $C_h \cong 3.8$, enquanto que para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) este pico é $C_h \cong 1.2$. (b) Gráfico do calor específico (em unidades de k_B) em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 2.5$. Os seguintes valores de σ_1 são considerados: $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) e $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa).

Agora, voltamos nossa atenção para a suscetibilidade. Para o caso isotrópico, as equações gerais (4.18) e (4.20) tornam-se:

$$J_1\chi_{11} = J_1\chi_I + F_1(x;t)\int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \frac{\operatorname{sech}^2\left[\frac{(pz+\sigma_1\omega)}{t}\right]}{D_3^2}\left\{\frac{\left[J_1\chi_{21}\operatorname{senh}\frac{2(pz+\sigma_1\omega)}{t} + pJ_1\chi_{31}\operatorname{senh}2\left(\frac{x}{t}\right)\right]}{t}\right\}, \quad (5.88a)$$

$$J_1\chi_{21} = F_1(x;t)\int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \frac{\operatorname{sech}^2\left[\frac{(pz+\sigma_1\omega)}{t}\right]}{D_3^2}\left\{\frac{\left[(J_1\chi_{11}+1)\operatorname{senh}\frac{2(pz+\sigma_1\omega)}{t} + pJ_1\chi_{31}\operatorname{senh}2\left(\frac{x}{t}\right)\right]}{t}\right\}, \quad (5.88b)$$

$$J_1\chi_{31} = F_1(z;t)\left\{\frac{\left[J_1\chi_{21}\operatorname{senh}2\left(\frac{x}{t}\right) + (J_1\chi_{11}+1)\operatorname{senh}2\left(\frac{x}{t}\right)\right]}{t}\right\}\int_{-\infty}^{+\infty} D\omega \frac{\operatorname{sech}^2\left[\frac{(pz+\sigma_1\omega)}{t}\right]}{D_3^2}, \quad (5.88c)$$

onde

$$F_1(x;t) = \frac{\operatorname{sech}^4\left(\frac{x}{t}\right)}{2\left[1-\frac{(1-x^2)}{t}\right]}, \quad (5.89a)$$

$$F_1(z;t) = \frac{\operatorname{sech}^4\left(\frac{x}{t}\right)}{2\left[1-\frac{p(1-z^2)}{t}\right]} \quad \text{e} \quad (5.89b)$$

$$\chi_I(t) = \frac{(1-x^2)}{t\left[1-\frac{(1-x^2)}{t}\right]} \quad (5.89c)$$

é a suscetibilidade magnética para o modelo de Ising na aproximação de campo médio.

Os dois outros sistemas de equações envolvendo χ_{12}, χ_{22}, χ_{23} e χ_{13}, χ_{23}, χ_{33} podem ser escritos através de uma permutação cíclica de variáveis e índices. A suscetibilidade isotrópica χ_{12} satisfaz as relações $\chi_{11} = \chi_{22}$, $\chi_{21} = \chi_{12}$, $\chi_{31} = \chi_{32}$ e $\chi_{13} = \chi_{23}$.

Novamente, podemos considerar as soluções paramagnética e de Ising das equações (5.88) e (5.89). No caso regular, fazendo $x = z = 0$ nessas equações, obtemos que na fase paramagnética as componentes χ_{21}, χ_{31} e χ_{23} são nulas e

$$\chi_{11}^{p} = \frac{\beta}{(t-1)} \quad , \tag{5.90}$$

$$\chi_{33}^{p} = \frac{\beta}{1-\frac{p}{t}} \quad . \tag{5.91}$$

Assim, as duas componentes acima divergem ao longo das linhas de transição de segunda ordem AE$(t=1)$ e FB $(t=p)$ da figura 5.1b. No caso de campo magnético aleatório na direção $z = \langle \sigma S \rangle$, não conseguimos mostrar analiticamente se esse comportamento divergente existe ou não. Por outro lado, verificamos numericamente que, à medida que a variância σ_1 assume valores diferentes de zero, as componentes χ_{11} e χ_{33} têm valores finitos para $t=1$ e $t=p$. Na fase de Ising do modelo isotrópico (regular) recuperamos as seguintes expressões para as componentes de suscetibilidade [4]:

$$\chi_{11}^{I} = \beta \frac{\left[1-k_1\left(1-z^2\right)\right]}{\left[\left(1-k_1\right)^2 - k_1^{\,2} z^2\right]} \quad , \tag{5.92}$$

$$\chi_{21}^{I} = \frac{\beta z}{\left[\left(1-k_1\right)^2 - k_1^{\,2} z^2\right]} \quad , \tag{5.93}$$

$$\chi_{31}^{I} = \chi_{23}^{I} = 0 \quad , \tag{5.94}$$

$$\chi_{33}^{I} = \frac{\beta\left(1-z^2\right)}{\left[1-k_3\left(1-z^2\right)\right]} \quad . \tag{5.95}$$

As expressões para χ_{11} e χ_{21} mostram que elas são divergentes se $z^2 = (t-1)^2$. Para $z \neq 0$ essa condição é idêntica à equação que determina a linha de instabilidade DGC da figura 5.1b. Por outro lado, χ_{33} diverge se $z^2 = 1 - \frac{t}{p}$. Essa condição, que é a mesma já encontrada na discussão para o calor específico, somente é satisfeita na linha de transição entre as fases paramagnética e de Ising, onde $z = 0$. No caso de

campo magnético aleatório na direção $z = \langle \sigma S \rangle$, novamente não mostramos analiticamente a existência desse comportamento divergente. Numericamente, verificamos que, à medida que σ_1 assume valores diferentes de zero, as componentes χ_{11} e χ_{21} têm valores finitos no plano de transição entre as fases de Ising e de Baxter; e a componente χ_{33} tem valores finitos no plano de transição entre as fases de Ising e paramagnética. O comportamento das componentes da suscetibilidade na fase de Baxter, assim como ao longo dos planos de transição, é obtido através da solução numérica das equações (5.88) e (5.89) acopladas às equações (5.5). Os resultados parra valores especiais de p e σ_1 são mostrados nas figuras 5.15 a 5.18.

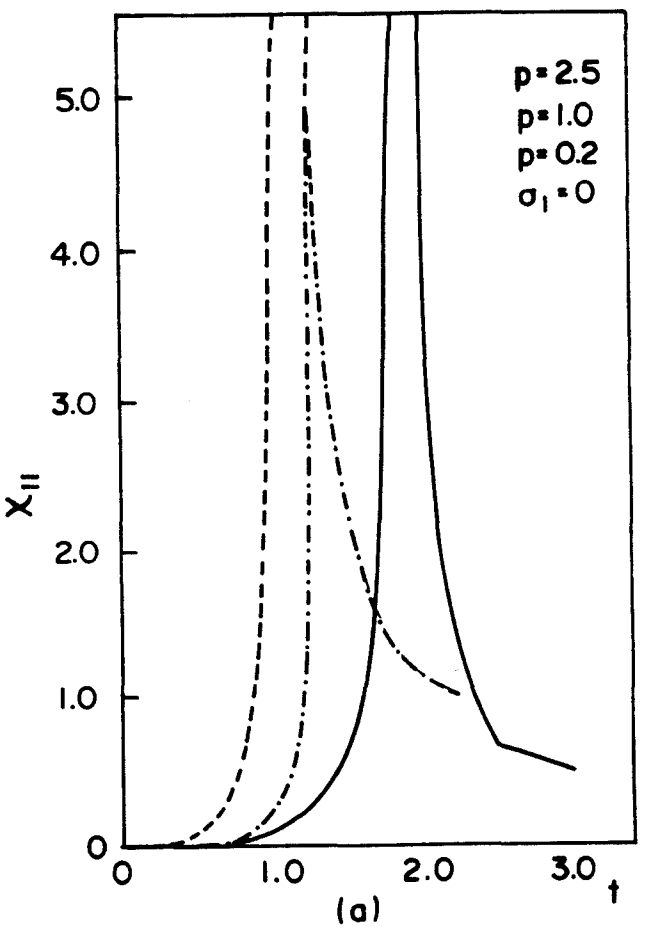
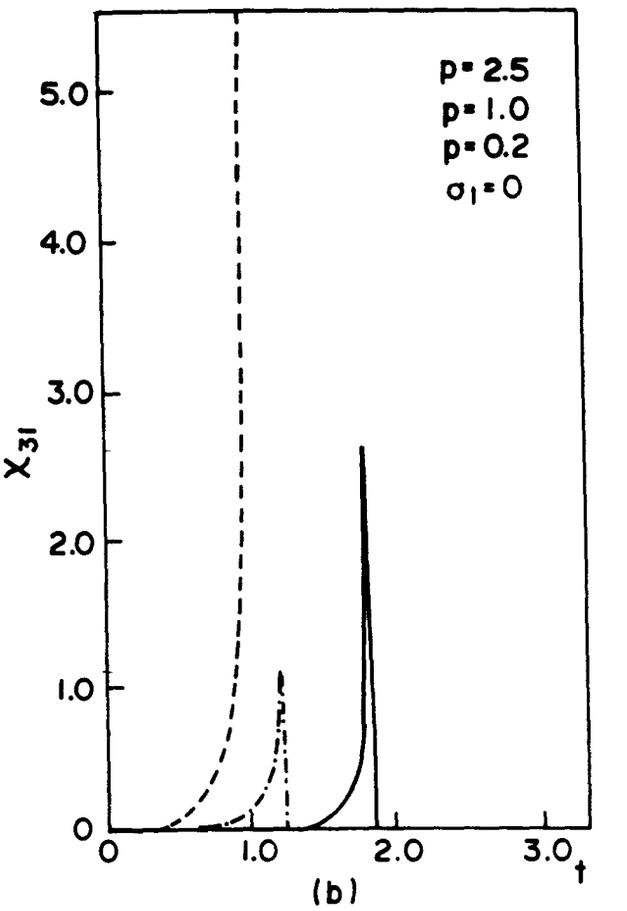


Figura 5. 15 - (a) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{11}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $\sigma_1 = 0$. Para $p = 0.2$ (curva tracejada) χ_{11} é divergente (zero) se a temperatura crítica $t = 1$ for alcançada a partir da fase de Baxter (paramagnética). Para $p = 1$ (curva tracejada e pontilhada) χ_{11} é divergente na temperatua crítica do modelo de Potts regular, $t_c^p \cong 1.21$. Para $p = 2.5$ (curva sólida) χ_{11} mostra uma descontinuidade infinita ao cruzar a linha de transição entre as fases de Baxter e de Ising.



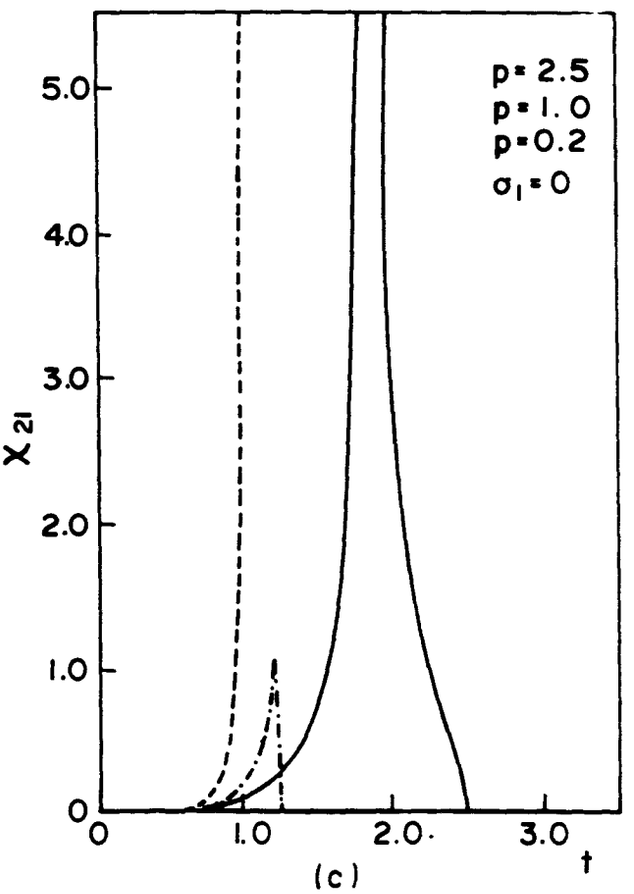
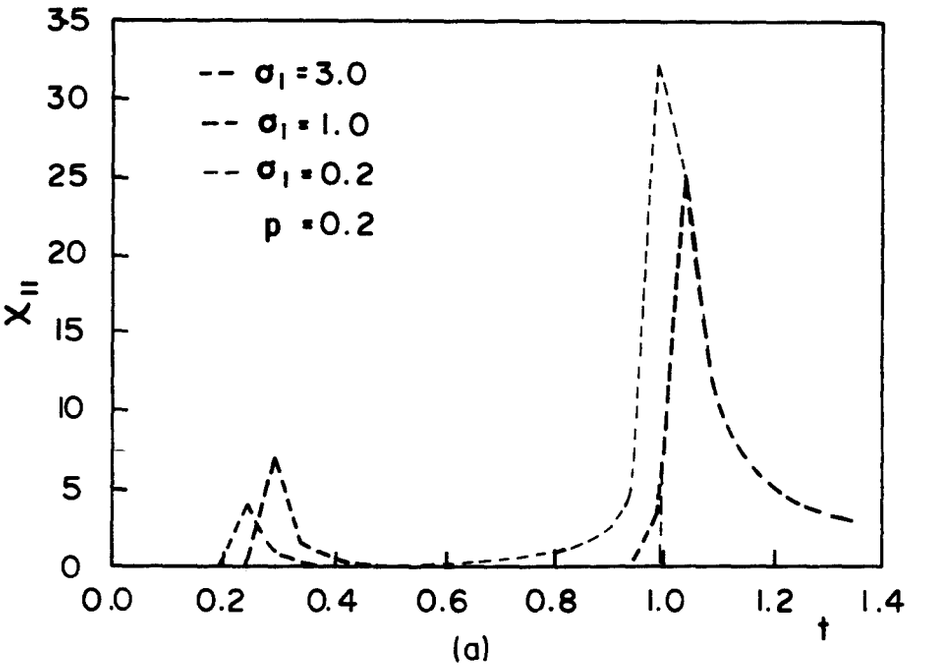


Figura 5.15 - (b) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{31}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $\sigma_1 = 0$. Para $p = 0.2$ (curva tracejada) χ_{31} é divergente (zero) se a temperatura crítica $t = 1$ for alcançada a partir da fase de Baxter (paramagnética). Para $p = 1$ (curva tracejada e pontilhada) χ_{31} é nula acima de t_c^p. Para $p = 2.5$ (curva sólida) $J_1\chi_{31} \cong 2.7$ (zero) se a linha de transição entre as fases de Baxter e de Ising for cruzada a partir da fase de Baxter (de Ising). (c) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{21}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $\sigma_1 = 0$. Para $p = 0.2$ (curva tracejada) χ_{21} é divergente (zero) se a temperatura crítica $t = 1$ for alcançada a partir da fase de Baxter (paramagnética). Para $p = 1$ (curva tracejada e pontilhada) χ_{21} é zero acima de t_c^p onde tem uma descontinuidade finita. . Para $p = 2.5$, χ_{21} é zero acima de 2.5 e mostra uma descontinuidde infinita ao cruzar a linha de transição entre as fases de Baxter e de Ising.



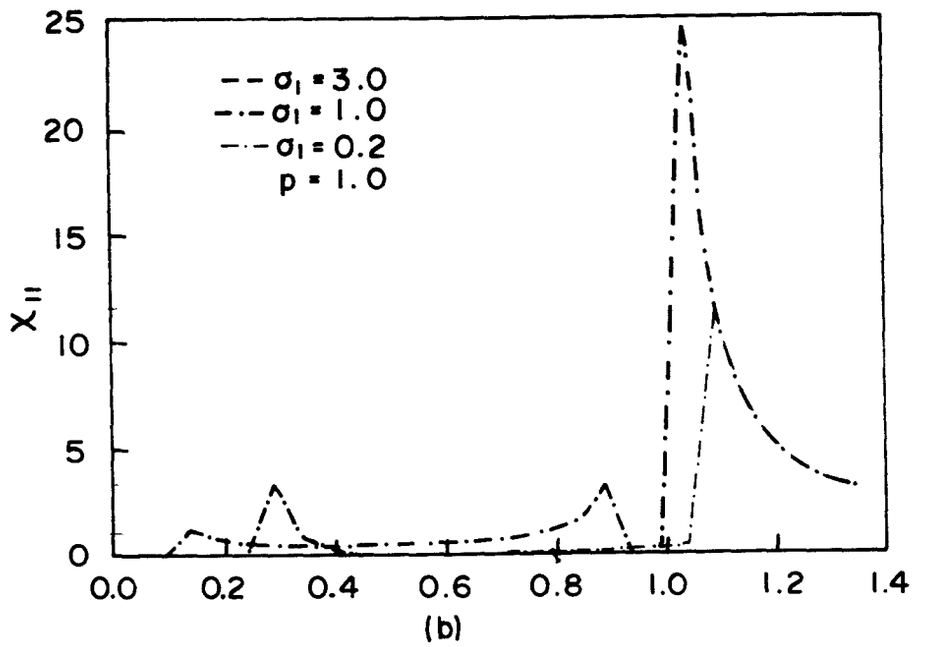


Figura 5. 16 - (a) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{11}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 0.2$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{11} \cong 32.5$ em $t \cong 0.97$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) $J_1\chi_{11} \cong 4.0$ em $t \cong 0.25$. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) $J_1\chi_{11} \cong 7.5$ em $t \cong 0.3$. Em $t \cong 1.05$ as curvas média e grossa apresentam o mesmo valor finito para $J_1\chi_{11}$. (b) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{11}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 1.0$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{11} \cong 11.8$ em $t \cong 1.1$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) $J_1\chi_{11} \cong 1.0$ em $t \cong 1.13$ e $J_1\chi_{11} \cong 3.7$ em $t \cong 0.9$. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) $J_1\chi_{11} \cong 3.7$ em $t \cong 0.3$. As curvas fina e grossa coincidem a partir de $t \cong 1.1$.

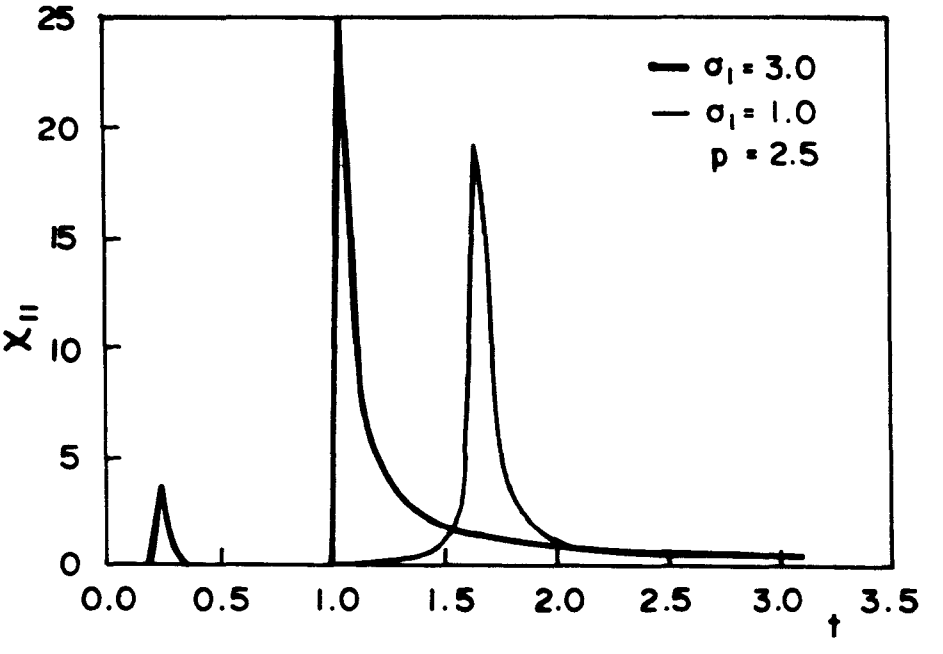


Figura 5.16 - (c) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{11}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 2.5$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) $J_1\chi_{11} \cong 19.3$ em $t \cong 1.13$. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) χ_{11} tem dois picos finitos. Os gráficos da figura 5.16 mostram que χ_{11} não assume valores infinitos, como no caso de $\sigma_1 = 0$ (veja figura 5.15 (a)).

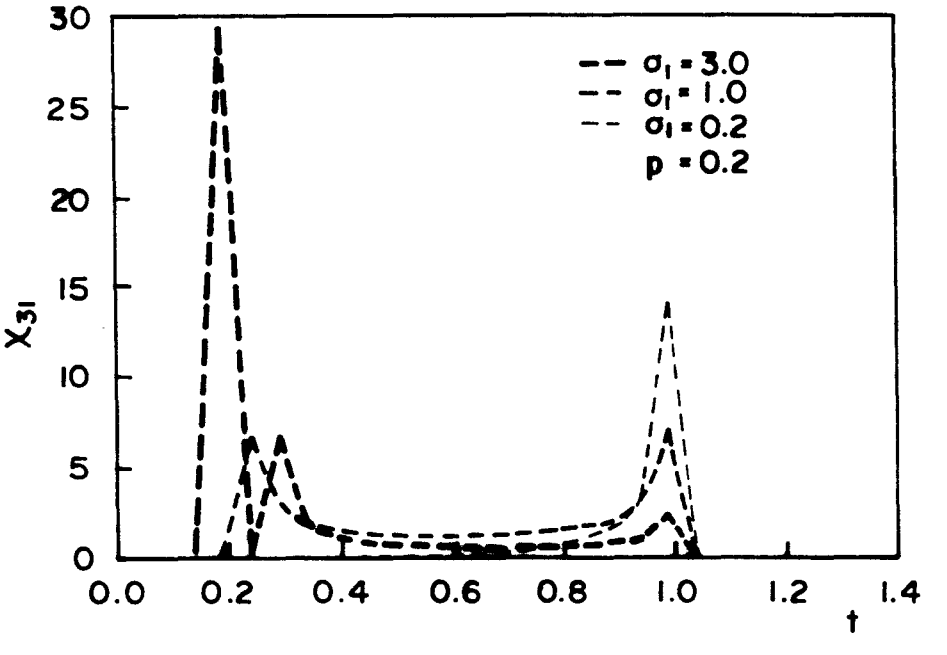


Figura 5. 17 - (a) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{31}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 0.2$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{31} \cong 14.5$ em $t \cong 0.97$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) χ_{31} tem dois picos finitos. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) χ_{31} tem três picos finitos. O valor infinito que χ_{31} apresenta na temperatura crítica, quando $\sigma_1 = 0$ e $p = 0.2$, torna-se finito com a introdução do campo magnético aleatório.

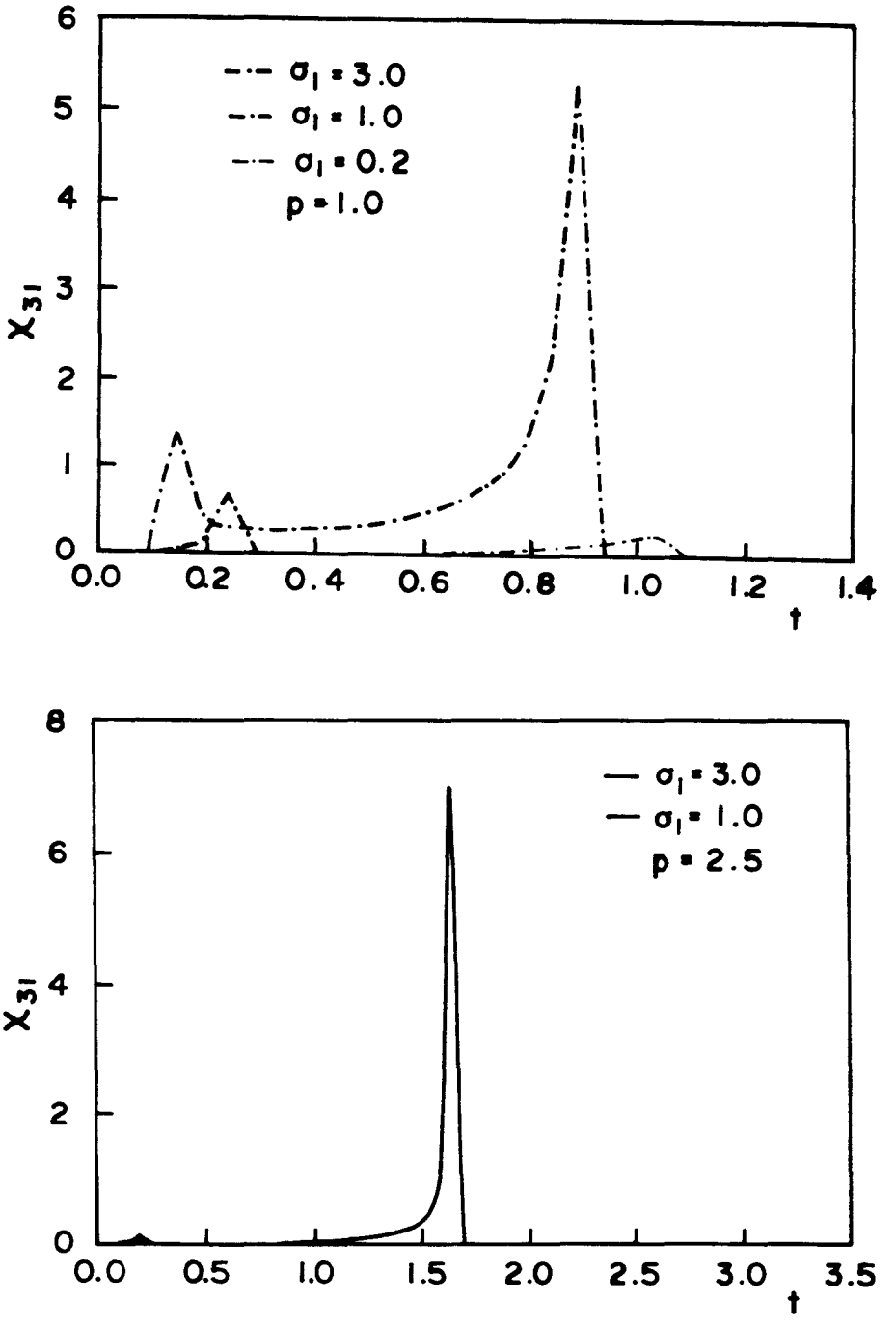


Figura 5.17 - (b) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{31}$ em função da temperatura, para campo magnético constante e $p = 1.0$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{31} \cong 0.19$ em $t \cong 1.13$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) χ_{31} tem dois picos finitos. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) χ_{31} tem um pico finito. (c) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{31}$ em função da temperatura, para campo magnético constante e $p = 2.5$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) $J_1\chi_{31} \cong 7.0$ em $t \cong 1.7$. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) $J_1\chi_{31} \cong 0.02$ em $t \cong 0.2$. Os gráficos da figura 5.17 mostram que χ_{31} se anula na fase paramagnética.

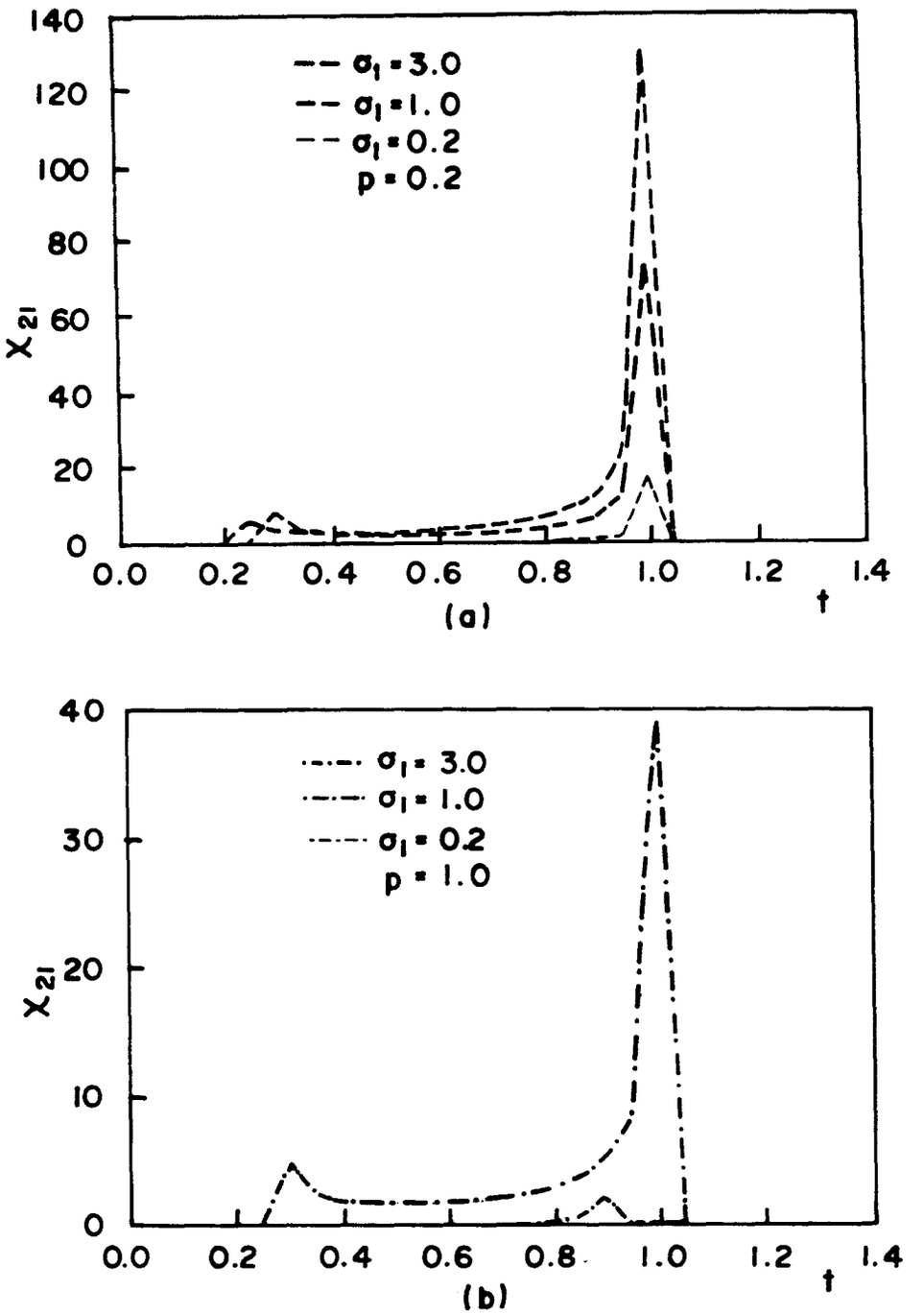


Figura 5. 18 - (a) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{21}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 0.2$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{21} \cong 18.5$ em $t \cong 0.97$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) $J_1\chi_{21} \cong 130$ em $t = 0.97$ e $J_1\chi_{21} \cong 6.5$ em $t \cong 2.5$. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) $J_1\chi_{21} \cong 72.5$ em $t \cong 0.97$ e $J_1\chi_{21} \cong 7.0$ em $t \cong 0.29$. (b) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{21}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 1.0$. Para $\sigma_1 = 0.2$ (curva fina) $J_1\chi_{21}$ assume valores infinitesimais em torno de $t = 1.04$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) χ_{21} tem um pico finito. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) χ_{21} tem dois picos finitos.

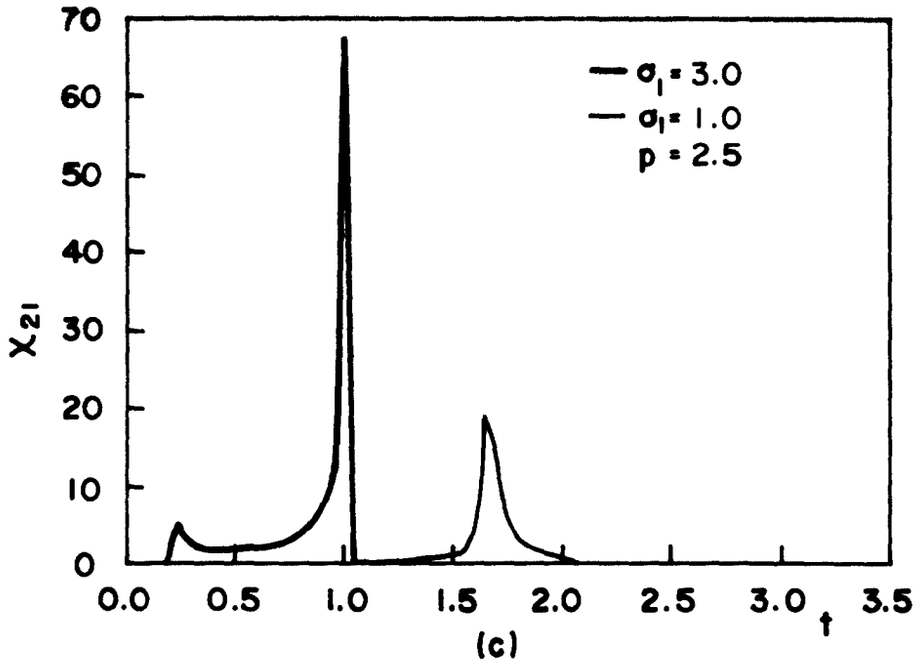


Figura 5.18 - c) Gráfico da suscetibilidade magnética $J_1\chi_{21}$ em função da temperatura, para campo magnético constante nulo e $p = 2.5$. Para $\sigma_1 = 1.0$ (curva média) χ_{21} tem um pico finito. Para $\sigma_1 = 3.0$ (curva grossa) χ_{21} tem dois picos finitos. Os gráficos da figura 5.18 mostram que χ_{21} não assume valores infinitos, como no caso de $\sigma_1 = 0$ (veja figura 5.15(c)).

CAPÍTULO 6

MODELO DE ASHKIN-TELLER NA PRESENÇA DE CAMPOS MAGNÉTICOS ALEATÓRIOS NAS DIREÇÕES DE $x = \langle S \rangle$ E $y = \langle \sigma \rangle$.

6.1 - INTRODUÇÃO.

Neste capítulo analisamos o caso particular do MAT na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$. Determinamos expressões para a energia livre, as magnetizações, a entropia, o calor específico e a suscetibilidade. Caracterizamos as fases do modelo, no caso especial em que não há campos constantes (externos), através das soluções que satisfazem o sistema de equações integrais acopladas para as magnetizações. Devido à complexidade das equações das fases de Ising e de Baxter, só conseguimos deduzir as equações das superfícies de instabilidade da solução paramagnética. Também mostramos que a transição entre as fases paramagnética e de Baxter é sempre de primeira ordem. O sistema de equações integrais acopladas foi resolvido numericamente para valores especiais das constantes de interação e das variâncias $\tilde{h}_1$ e $\tilde{h}_2$.

6.2 - FUNÇÕES TERMODINÂMICAS E ESTABILIDADE DA SOLUÇÃO PARAMAGNÉTICA.

No caso paticular em que só há campos magnéticos aleatórios h^1 e h^2 nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$, a variância e o valor médio do campo h^3 são nulos e sua distribuição gaussiana se reduz a uma delta de Dirac. Nesse caso, as equações (4.3) e (4.4) para valores médios $\overline{h}_1 = \overline{h}_2 = 0$ fornecem a seguinte expressão para a energia livre média:

$$-\beta \bar{f}\left(k_r, B_r, \tilde{h}_1, \tilde{h}_2, 0\right) = 2\ln 2 + max\left[g\left(x, y, z; k_r, B_r, \tilde{h}_1, \tilde{h}_2, 0\right)\right] \tag{6.1}$$

onde

$$\begin{aligned} g\left(x, y, z; k_r, B_r, \tilde{h}_1, \tilde{h}_2, 0\right) = & -\frac{1}{2}\left(k_1 x^2 + k_2 y^2 + k_3 z^2\right) + \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^1 \ln\cosh\left(k_1 x + \beta h^1 + B_1\right) + \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^2 \ln\cosh\left(k_2 y + \beta h^2 + B_2\right) + \ln\cosh\left(k_3 z + B_3\right) + \\ & \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Dh^1 Dh^2 \ln D_{1,2} \quad , \end{aligned} \tag{6.2}$$

$$Dh^1 = \frac{dh^1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\tilde{h}_1} \exp\left[\frac{-\left(h^1\right)^2}{2\tilde{h}_1}\right], \tag{6.3}$$

$$Dh^2 = \frac{dh^2}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\tilde{h}_2} \exp\left[\frac{-\left(h^2\right)^2}{2\tilde{h}_2}\right], \tag{6.4}$$

$$D_{1,2} = 1 + \tanh\left(k_1 x + \beta h^1 + B_1\right)\tanh\left(k_2 y + \beta h^2 + B_2\right)\tanh\left(k_3 z + B_3\right) \quad . \tag{6.5}$$

As condições de extremo para $g\left(x, y, z; k_r, B_r, \tilde{h}_1, \tilde{h}_2, 0\right)$, no caso especial de campos magnéticos constantes (externos) nulos (isto é, $B_r = \beta H_r = 0$), são dadas pelo seguinte conjunto de equações integrais acopladas das magnetizações:

$$x = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Dh^1 Dh^2 \frac{\tanh\left(k_1 x + \beta h^1\right) + \tanh\left(k_2 y + \beta h^2\right)\tanh\left(k_3 z\right)}{D_{1,2}} \quad , \tag{6.6a}$$

$$y = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Dh^1 Dh^2 \frac{\tanh\left(k_2 y + \beta h^2\right) + \tanh\left(k_1 x + \beta h^1\right)\tanh\left(k_3 z\right)}{D_{1,2}} \quad , \tag{6.6b}$$

$$z = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Dh^1 Dh^2 \frac{\tanh(k_3 z) + \tanh(k_1 x + \beta h^1)\tanh(k_2 y + \beta h^2)}{D_{1,2}} \quad . \qquad (6.6c)$$

No caso isotrópico $(J_1 = J_2)$ com $\tilde{h}_1 = \tilde{h}_2$, as relações (6.6a) e (6.6b) são idênticas isto é, $x = y$. Utilizando-se as variáveis

$$p = \left(\frac{J_1}{J_3}\right) \quad , \quad t = \left(\frac{k_B T}{J_1}\right) \quad , \quad \sigma = \left(\frac{\tilde{h}_1}{J_1}\right) = \left(\frac{\tilde{h}_2}{J_1}\right) \quad , \quad u = \frac{h_1}{\tilde{h}_1} \quad e \quad v = \frac{h_2}{\tilde{h}_2} \quad , (6.7)$$

as equações (6.6), no caso de $J_1 = J_2$ e $\tilde{h}_1 = \tilde{h}_2$, tornam-se:

$$x = \int_{-\infty}^{+\infty} Du \int_{-\infty}^{+\infty} Dv \frac{\tanh\left(\frac{x+\sigma u}{t}\right) + \tanh\left(\frac{x+\sigma v}{t}\right)\tanh\left(\frac{pz}{t}\right)}{D_{1,2}} \quad , \qquad (6.8a)$$

$$z = \int_{-\infty}^{+\infty} Du \int_{-\infty}^{+\infty} Dv \frac{\tanh\left(\frac{pz}{t}\right) + \tanh\left(\frac{x+\sigma u}{t}\right)\tanh\left(\frac{x+\sigma v}{t}\right)}{D_{1,2}} \quad . \qquad (6.8b)$$

$$D_{1,2} = 1 + \tanh\left(\frac{x+\sigma u}{t}\right)\tanh\left(\frac{x+\sigma v}{t}\right)\tanh\left(\frac{pz}{t}\right) \quad , \qquad (6.9a)$$

$$Du = \frac{du}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{u^2}{2}} \qquad e \qquad Dv = \frac{dv}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{v^2}{2}} \quad , \qquad (6.9b)$$

Os comportamentos de $x = \langle S \rangle$ e $z = \langle \sigma S \rangle$ acima com a temperatura, para valores especiais de p e σ, são mostrados na figura 6.1. As soluções que satisfazem as equações (6.6) e (6.8) são apresentadas a seguir.

(1) Fase paramagnética. Nessa fase as constantes de interação são suficientemente fracas, e/ou a temperatura é alta bastante. Todas as três magnetizações são nulas:

$$x = y = z = 0 \quad . \qquad (6.10)$$

No caso isotrópico com $\tilde{h}_1 = \tilde{h}_2$ a solução acima se reduz a $x = z = 0$.

(2) Fase de Ising. Essa fase parcialmente ordenada é caracterizada por uma das três soluções seguintes:

$$x = y = 0 \quad ; \quad z = \tanh(k_3 z) \neq 0 \quad , \qquad (6.11a)$$

$$x = z = 0 \quad ; \quad y = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^2 \tanh(k_2 y + \beta h^2) \neq 0 \quad , \qquad (6.11b)$$

$$y = z = 0 \quad ; \quad x = \int_{-\infty}^{+\infty} Dh^1 \tanh\left(k_1 x + \beta h^1\right) \neq 0 \quad . \tag{6.11c}$$

No caso isotrópico com $\tilde{h}_1 = \tilde{h}_2$ as equações (6.11b) e (6.11c) se reduzem à solução paramagnética. A solução restante mostra que o sistema está parcialmente ordenado com $\langle \sigma S \rangle \neq 0$, enquanto que $\langle S \rangle$ e $\langle \sigma \rangle$ são nulas.

(3) Fase de Baxter. Nessa fase o sistema está todo ordenado ferromagneticamente, com três parâmetros de ordem $\langle S \rangle$, $\langle \sigma \rangle$ e $\langle \sigma S \rangle$ diferentes de zero:

$$x \neq 0 \quad , \quad y \neq 0 \quad , \quad z \neq 0 \quad . \tag{6.12}$$

No caso isotrópico a solução acima se reduz a $x \neq 0$, $z \neq 0$.

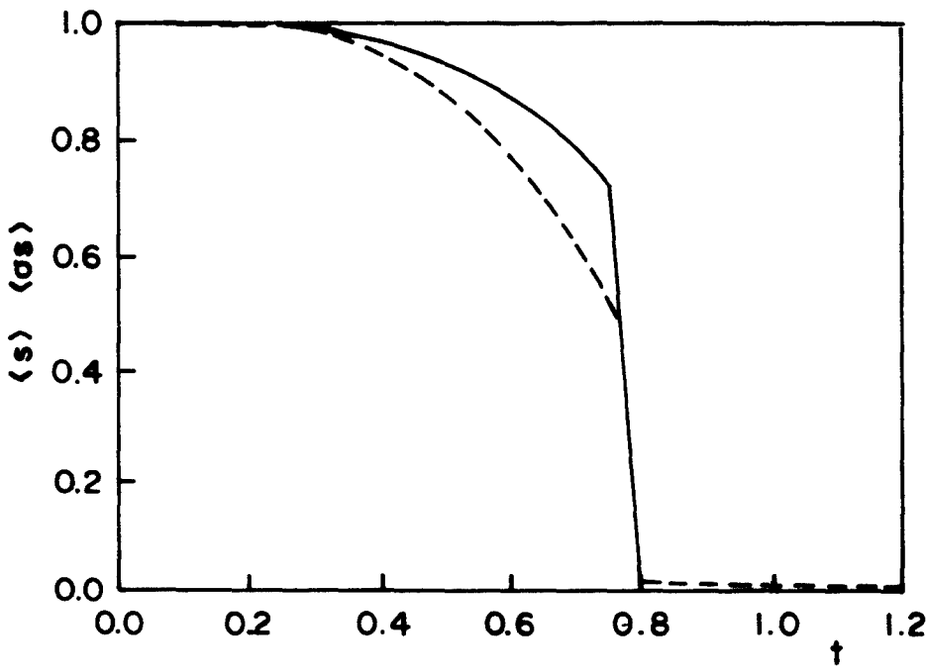


Figura 6. 1 - Gráfico das magnetizações $x = \langle S \rangle$ (curva sólida) e $z = \langle \sigma S \rangle$ (curva tracejada), para campo magnético constante nulo, com $p = 0.001$ e $\sigma = 0.2$. Os saltos nas duas curvas sugerem uma transição de primeira ordem entre as fases de Baxter e paramagnética, o que é confirmado pela análise das expansões das equações (6.8).

Para se obterem as equações das superfícies de instabilidade da fase paramagnética, determinam-se as regiões no espaço de parâmetros para as quais a solução (6.10) seja estável. Isso é conseguido através das inequações (5.12) utilizadas no capítulo 5. Desse modo, a solução paramagnética é estável somente se

$$k_1\left[k_1(1-I)-1\right]<0 \quad , \tag{6.13a}$$

$$k_2\left[k_2(1-I)-1\right]<0 \quad , \tag{6.13b}$$

$$k_3(k_3-1)-(k_3)^2 I^2<0 \quad , \tag{6.13c}$$

onde $I=\int_{-\infty}^{+\infty} Dh^1 \tanh^2\left(\beta h^1\right)$.

No caso isotrópico $\left(J_1=J_2\right)$ com $\tilde{h}_1=\tilde{h}_2$, as equações (6.13) fornecem as superfícies de instabilidade

$$t=1-\int_{-\infty}^{+\infty} Du \tanh^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad , \tag{6.14a}$$

$$t=p\left[1-\int_{-\infty}^{+\infty} Du \tanh^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right)\right] \quad . \tag{6.14b}$$

As superfícies acima delimitam a região no espaço de parâmetros $p-t-\sigma$ onde a solução paramagnética maximiza a função $g\left(x,z;k_1,k_3,0,\tilde{h}_1=\tilde{h}_2,0\right)$.

Agora voltamos nossa atenção para a entropia e o calor específico, cujas expressões no caso geral de três campos magnéticos aleatórios são dadas por (4.16) e (4.17), respectivamente. Quando consideramos campos magnéticos aleatórios nas direções de $x=\langle s\rangle$ e $y=\langle\sigma\rangle$, as equações para a entropia e o calor específico, no caso de $J_1=J_2$ e $\tilde{h}_1=\tilde{h}_2$, são dadas por:

$$\begin{aligned}\left(\frac{S}{k_B}\right)=2\left[\ln 2-\left(\frac{x^2}{t}\right)\right]+\ln\cosh\left(\frac{pz}{t}\right)-\frac{pz^2}{t}+\\ \int_{-\infty}^{+\infty} Du\int_{-\infty}^{+\infty} Dv \ln\left\{D_{1,2}\cosh\left(\frac{x+\sigma u}{t}\right)\cosh\left(\frac{x+\sigma v}{t}\right)\right\} \quad ,\end{aligned} \tag{6.15}$$

$$C_H=-\left[2\left(\frac{\partial x}{\partial T}\right)J_1 x+\left(\frac{\partial z}{\partial T}\right)J_3 z\right] \quad , \tag{6.16}$$

onde x e z são as soluções das equações (6.8). As expressões de entropia e do calor específico para as fases paramagnética e de Ising podem ser obtidas facilmente a partir das relações acima. Na fase paramagnética $\left(x=z=0\right)$, o calor específico é nulo e a entropia é dada por

IFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$\left(\frac{S^P}{k_B}\right) = 2\ln 2 + \int_{-\infty}^{+\infty} Du \int_{-\infty}^{+\infty} Dv \ln\left[\cosh\left(\frac{\sigma u}{t}\right)\cosh\left(\frac{\sigma v}{t}\right)\right] \quad . \tag{6.17}$$

Na fase de Ising $\left(x = 0, z = \tanh\left(pz/t\right)\right)$, a entropia e o calor específico tornam-se:

$$\left(\frac{S^I}{k_B}\right) = 2\ln 2 + \ln\cosh\left(\frac{pz}{t}\right) - \frac{pz^2}{t} + \int_{-\infty}^{+\infty} Du \int_{-\infty}^{+\infty} Dv \ln\left\{\frac{\cosh\left(\frac{\sigma u}{t}\right)\cosh\left(\frac{\sigma v}{t}\right)}{1+\tanh\left(\frac{\sigma u}{t}\right)\tanh\left(\frac{\sigma v}{t}\right)\tanh\left(\frac{pz}{t}\right)}\right\} \quad , \tag{6.18}$$

$$\left(\frac{C_H^I}{k_B}\right) = \frac{k_3^{\,2} z^2\left(1-z^2\right)}{1-k_3\left(1-z^2\right)} \quad . \tag{6.19}$$

A expressão acima para o calor específico corresponde ao resultado da teoria de campo médio para o modelo de Ising. Essa expressão para C_H^I tem um comportamento singular se $z^2 = 1 - t/p$.

Outra função de interesse é a suscetibilidade. Quando consideramos campos aleatórios nas direções de $x = \langle s \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$, no caso isotrópico com $\tilde{h}_1 = \tilde{h}_2$, as equações gerais (4.18) e (4.20) tornam-se:

$$J_1\chi_{11} = J_1\chi_I + \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{pz}{t}\right)}{2\left[1-\frac{\left(1-x^2\right)}{t}\right]} \int_{-\infty}^{+\infty} Du \int_{-\infty}^{+\infty} Dv \frac{F_2(x,u,v;t)}{D_{1,2}^2} \left\{\frac{\left[J_2\chi_{21} senh\left(\frac{2pz}{t}\right) + pJ_1\chi_{31} senh\left(\frac{2(x+\sigma v)}{t}\right)\right]}{t}\right\} \quad , \tag{6.20a}$$

$$J_1\chi_{21} = \frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{pz}{t}\right)}{2\left[1-\frac{\left(1-x^2\right)}{t}\right]} \int_{-\infty}^{+\infty} Du \int_{-\infty}^{+\infty} Dv \frac{F_2(x,u,v;t)}{D_{1,2}^2} \left\{\frac{\left[\left(J_1\chi_{11}+1\right) senh\left(\frac{2pz}{t}\right) + pJ_1\chi_{31} senh\left(\frac{2(x+\sigma v)}{t}\right)\right]}{t}\right\} \quad , \tag{6.20b}$$

$$J_1\chi_{31}=\frac{\operatorname{sech}^2\left(\frac{pz}{t}\right)}{2\left[1-\frac{pz\left(1-z^2\right)}{t}\right]}\int_{-\infty}^{+\infty}Du\int_{-\infty}^{+\infty}Dv\,\frac{F_2(x,u,v;t)}{D_{1,2}^2}\left\{\frac{\left[J_1\chi_{21}senh\left(\frac{2(x+\sigma u)}{t}\right)+(J_1\chi_{11}+1)senh\left(\frac{2(x+\sigma v)}{t}\right)\right]}{t}\right\}, \tag{6.20c}$$

onde

$$F_2(x,u,v;t)=\operatorname{sech}^2\left(\frac{x+\sigma u}{t}\right)\operatorname{sech}^2\left(\frac{x+\sigma v}{t}\right), \tag{6.21}$$

e $\chi_1(t)$ é a suscetibilidade magnética para o modelo de Ising na aproximação de campo médio (veja equação (5.89c)). Os dois outros sistemas de equações envolvendo χ_{12}, χ_{22}, χ_{23} e χ_{13}, χ_{23}, χ_{33} podem ser escritos atráves de uma permutação cíclica de variáveis e índices. A suscetibilidade isotrópica χ_{ij} satisfaz as relações $\chi_{11}=\chi_{22}$, $\chi_{21}=\chi_{12}$, $\chi_{31}=\chi_{32}$ e $\chi_{13}=\chi_{23}$.

Na próxima seção, mostramos que a transição entre as fases paramagnética e de Baxter é sempre de primeira ordem.

6.3 - ORDEM DA TRANSIÇÃO ENTRE AS FASES PARAMAGNÉTICA E DE BAXTER.

O procedimento utilizado nesta seção será completamente análogo ao adotado na seção 5.3. Inicialmente, supomos que existam x e z infinitesimalmente pequenos satisfazendo as equações (6.8) para $T \lesssim T_C$; quando nos aproximamos da fase paramagnética a partir da fase de Baxter. Assim, podemos expandir seus integrandos até termos de terceira ordem em x e/ou z. As expansões para os lados direitos dessas equações são:

$$x=\frac{\bar{b}_1 x}{t}+\frac{p\left(\bar{b}_1\right)^2}{t^2}xz-\frac{1}{t^3}\left(\bar{b}_3-\frac{\bar{b}_1}{3}\right)x^3-\frac{p^2}{t^3}\bar{b}_1\overline{\left(t_1\right)^2}\left[\bar{b}_1-2\overline{\left(t_1\right)^2}\right]xz^2, \tag{6.22a}$$

$$z=\frac{p}{t}\left\{1-\left[\overline{(t_1)^2}\right]^2\right\}z+\frac{(\bar{b}_1)^2}{t^2}y^2-\frac{p}{t^3}2\overline{(t_1)^2}\left[\overline{(b_1)^2}+2\,\overline{t_1b_1}\right]yz^2$$
$$-\frac{p^3}{3t^3}\left\{1-4\left[\overline{(t_1)^2}\right]^2+3\left[\overline{(t_1)^4}\right]^2\right\}z^3 \quad , \tag{6.22b}$$

onde

$$\overline{(t_1)^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}Du\tanh^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad , \tag{6.23}$$

$$\bar{b}_1=\int_{-\infty}^{+\infty}Du\,\mathrm{sech}^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad , \tag{6.24}$$

$$\bar{b}_3=\int_{-\infty}^{+\infty}Du\tanh^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right)\mathrm{sech}^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad , \tag{6.25}$$

$$\overline{(b_1)^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}Du\,\mathrm{sech}^4\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad , \tag{6.26}$$

$$\overline{t_1b_1}=\int_{-\infty}^{+\infty}Du\tanh\left(\frac{\sigma u}{t}\right)\mathrm{sech}^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad , \tag{6,27}$$

$$\overline{(t_1)^4}=\int_{-\infty}^{+\infty}Du\tan\mathrm{h}^4\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad . \tag{6.28}$$

Desse modo obtemos um sistema de equações algébricas acopladas que poderá ser resolvido analiticamente. Antes de se iniciar a solução desse sistema, observamos que para $p=0$ a equação (6.22a) recupera a expansão para a magnetização do modelo de Ising na presença de campo magnético aleatório obtida por Aharony [11].

Em primeiro lugar, reescrevemos as equações (6.22) da seguinte maneira:

$$\boldsymbol{A}_1x+\boldsymbol{B}_1xz-\boldsymbol{C}_1xz^2+\boldsymbol{D}_1x^3=0 \quad , \tag{6.29a}$$

$$\boldsymbol{E}_1z+\boldsymbol{F}_1x^2-\boldsymbol{G}_1x^2z-\boldsymbol{H}_1z^3=0 \quad , \tag{6.29b}$$

onde

$$\boldsymbol{A}_1=\frac{\bar{b}_1}{t}-1 \quad , \tag{6.30}$$

$$\boldsymbol{B}_1=\frac{p(\bar{b}_1)^2}{t^2} \quad , \tag{6.31}$$

$$C_1 = \frac{p^2 \overline{b_1} \overline{(t_1)^2}}{t^3} \left[\overline{b_1} - 2\overline{(t_1)^2} \right] \quad , \tag{6.32}$$

$$D_1 = \frac{1}{t^3} \left[\overline{b_3} - \frac{\overline{b_1}}{3} \right] \quad , \tag{6.33}$$

$$E_1 = \frac{p}{t} \left\{ 1 - \left[\overline{(t_1)^2} \right]^2 \right\} - 1 \quad , \tag{6.34}$$

$$F_1 = \frac{\left(\overline{b_1}\right)^2}{t^2} \quad , \tag{6.35}$$

$$G_1 = \frac{p2\overline{(t_1)^2}}{t^3} \left[\overline{(b_1)^2} - 2\,\overline{t_1 b_1} \right] \quad , \tag{6.36}$$

$$H_1 = \frac{p^3}{3t^3} \left\{ 1 - 4\left[\overline{(t_1)^2} \right]^2 + 3\left[\overline{(t_1)^4} \right]^2 \right\} z^3 \quad . \tag{6.37}$$

Agora, dividindo a equação (6.29a) por x obtemos

$$x^2 = \frac{C_1 z^2 - B_1 z - A_1}{D_1} \quad . \tag{6.38}$$

Substituindo x^2 em (6.29b) chegamos à seguinte equação de terceiro grau para z:

$$z^3 + r_1 z^2 + r_2 z + r_3 = 0 \quad , \tag{6.39}$$

onde

$$r_1 = -\frac{t d_2}{p d_1} \quad , \tag{6.40}$$

$$r_2 = \frac{-3t^2}{p^3} \left(d_4 p - d_5 t - d_6 t p \right) \quad , \tag{6.41}$$

$$r_3 = \frac{\left(\overline{b_1}\right)^2 t^3}{d_1 p^3} \left(\overline{b_1} - t \right) \quad , \tag{6.42}$$

$$d_1 = 2\left(\bar{b}_1\right)^2\left[\overline{\left(t_1\right)^2}\right]^2\left\{\left(\bar{b}_1\right)^2 - 4\left[\overline{\left(t_1\right)^2}\right]^2\right\} + \frac{1}{3}\left(\bar{a}_3 - \frac{\bar{a}_1}{3}\right)\left\{1 - 4\left[\overline{\left(t_1\right)^2}\right]^2 + 3\left[\overline{\left(t_1\right)^4}\right]^2\right\} \quad , \tag{6.43}$$

$$d_2 = \bar{b}_1\overline{\left(t_1\right)^2}\left[3\bar{b}_1 + 2\overline{\left(t_1\right)^2}\right] \quad , \tag{6.44}$$

$$d_3 = 2\overline{\left(t_1\right)^2}\left[\overline{\left(b_1\right)^2} + 2\overline{t_1 b_1}\right] \quad , \tag{6.45}$$

$$d_4 = \frac{\bar{b}_1 d_3 - \left(\bar{b}_1\right)^4 + \left\{1 - \left[\overline{\left(t_1\right)^2}\right]^2\right\}\left(\bar{b}_3 - \frac{\bar{b}_1}{3}\right)}{3d_1} \quad , \tag{6.46}$$

$$d_5 = \frac{\bar{a}_3 - \frac{\bar{a}_1}{3}}{3d_1} \quad , \tag{6.47}$$

$$d_6 = \frac{d_3}{3d_1} \quad . \tag{6.48}$$

Obsevamos que $z = 0$ será sempre uma solução de (6.39) desde que $r_3 = 0$. Desse modo, impondo que r_3 seja igual a zero, a equação (5.39) se reduz a

$$z^3 + r_1 z^2 + r_2 z = 0 \quad . \tag{6.49}$$

A equação (6.42) nos permite concluir que, como $\left(\bar{b}_1\right)^2$ e d_1 são grandezas sempre finitas, só teremos $r_3 = 0$ se

$$t = \bar{b}_1 = 1 - \int_{-\infty}^{+\infty} Du \tanh^2\left(\frac{\sigma u}{t}\right) \quad , \tag{6.50}$$

onde foi utilizada a relação (6.24) para $\bar{b}_1$. A relação acima é igual à equação da superfície de instabilidade da solução paramagnética dada por (6.14a).

No capítulo 5, através da análise da estabilidade das soluções paramagnética e de Ising, chegamos à conclusão que o semi-plano $t = 1$ era a região do espaço de parâmetros em que ocorria a transição entre as fases paramagnética e de Baxter, para o MAT isotrópico na presença de campo aleatório na direção $z = \langle \sigma S \rangle$. Para o MAT

isotrópico com $\tilde{h}_1 = \tilde{h}_2$ na presença de campos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$, apesar de não ter sido possível determinar a região no espaço de parâmetros em que a solução de Ising é estável, nota-se que (6.50) é idêntica à equação (6.14a) para um dos planos de instabilidade da fase de Baxter. Assim, é razoável considerar $t = \bar{b}_1$ como o plano em que ocorre a transição entre as fases de Baxter e paramagnética. Isso é confirmado pelos comportamentos das magnetizações x e z com a temperatura (veja figura 6.1). Portanto, pode-se concluir que $r_3 = 0$ para qualquer ponto pertencente a esse plano de transição de fase. Isto é, para qualquer ponto desse plano, a única solução real da equação (6.49) será $z = 0$ somente se

$$p < \frac{12 d_5 \bar{b}_1}{\left[\left(\frac{d_2}{d_1}\right)^2 + 12\left(d_4 - d_6 \bar{b}_1\right)\right]} \quad . \tag{6.51}$$

Portanto, no plano $t_1 = \bar{b}_1$, existe uma solução aceitável somente quando a inequação (6.51) for satisfeita, o que resulta numa transição de segunda ordem da fase paramagnética para a de Baxter. Quando se inverte a inequação acima, não existe um $z = 0$ que resolva a equação (6.39). Nesse caso, existe um z positivo e finito, o que implica numa transição de primeira ordem. Assim, se a única solução real da equação (6.39) for um z positivo e finito, a transição entre as fases paramagnética e de Baxter será sempre de primeira ordem e a inequação (6.51) nunca será satisfeita. Por isso, nosso próximo passo será encontrar a única solução real da equação (6.39), a fim de se verificar se esta solução é finita ou não.

A equação cúbica em z dada por (6.39) só terá uma única raiz real se o seu delta (Δ_1) for positivo, pois, neste caso, as outras raízes são complexas. A raiz real única da equação (6.39) [50] é dada por:

$$z = S_1 + T_1 - \frac{1}{3} r_1 \quad , \tag{6.52}$$

onde

$$S_1 = \left(R_1 + \Delta_1^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad , \tag{6.53}$$

$$T_1 = \left(R_1 - \Delta_1^{\frac{1}{2}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad , \tag{6.54}$$

$$\Delta_1 = Q_1^3 + R_1^2 \quad , \tag{6.55}$$

$$Q_1 = \frac{3r_2 - (r_1)^2}{9} = -\frac{t^2}{p^3}\left[(d_4 - d_6 t)p - d_5 t\right] - \frac{t^2}{p^2}\frac{(d_2)^2}{9(d_1)^2} \quad , \tag{6.56}$$

$$R_1 = \frac{9r_1r_2 - 27r_3 - 2(r_3)^3}{54} = -\frac{(\bar{b}_1)^2 t^3}{2d_1 p^3}(\bar{b}_1 - t) + \frac{t^3 d_2}{p^3 d_1}\left\{\frac{1}{27} + \frac{1}{2p}\left[(d_4 - d_6 t)p - d_5 t\right]\right\} \quad . \tag{6.57}$$

A expressão (6.52) nos permite escrever z em função do infinitesimal ε, que é definido da seguinte maneira (para $T \lesssim T_C$):

$$\varepsilon = \frac{T_C - T}{T_C} = \frac{t_C - t}{t_C} \quad . \tag{6.58}$$

Como a transição da fase paramagnética para a de Baxter ocorre sempre no plano $t_1 = \bar{b}_1$, temos que $t_C = \bar{b}_1$. Dessa maneira, podemos escrever que

$$\varepsilon = 1 - \left(\frac{t}{\bar{b}_1}\right) \quad . \tag{6.59}$$

As expansões de S_1 e T_1 até termos de primeira ordem em ε são dadas por:

$$S_1 \cong E_0 + E_1\varepsilon \quad , \tag{6.60}$$

$$T_1 \cong F_0 + F_1\varepsilon \quad , \tag{6.61}$$

$$E_0 = \left[D_0 + (A_0 + B_0 + C_0)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}} \quad , \tag{6.62}$$

$$E_1 = \frac{\left[D_1 + \dfrac{(C_1 - B_1 - A_1)}{2(A_0 + B_0 + C_0)^{\frac{1}{2}}} \right]}{3\left[D_0 + (A_0 + B_0 + C_0)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{2}{3}}} \quad , \tag{6.63}$$

$$F_0 = \left[D_0 - (A_0 + B_0 + C_0)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{1}{3}} \quad , \tag{6.64}$$

$$F_1 = \frac{\left[D_1 - \frac{(C_1 - B_1 - A_1)}{2(A_0 + B_0 + C_0)^{\frac{1}{2}}} \right]}{3\left[D_0 - (A_0 + B_0 + C_0)^{\frac{1}{2}} \right]^{\frac{2}{3}}} \quad , \tag{6.65}$$

$$A_0 = \frac{(\bar{b}_1)^6}{p^9}\left[d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right]^3 \quad , \tag{6.66}$$

$$A_1 = \frac{3(\bar{b}_1)^6}{p^9}\left[d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right]^2 \left\{ (d_5 + d_6 p)\bar{b}_1 + 2\left[d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right] \right\} \quad , \tag{6.67}$$

$$B_0 = \frac{(\bar{b}_1)^6 (d_2)^2}{3p^6 (d_1)^2}\left\{ \frac{\left[d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right]^2}{p^2} - \frac{\left[d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right](d_2)^2}{9p(d_1)^2} + \frac{(d_2)^4}{243(d_1)^4} \right\} \quad , \tag{6.68}$$

$$B_1 = \frac{(\bar{b}_1)^6 (d_2)^2}{3p^6 (d_1)^2}\left\{ \left[\frac{2\left(d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right)}{p} - \frac{(d_2)^2}{9(d_1)^2} \right] \frac{(d_5 + d_6 p)\bar{b}_1}{p} + 6\left[\frac{\left(d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right)^2}{p^2} - \frac{\left(d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p \right)}{9p} \frac{(d_2)^2}{(d_1)^2} + \frac{(d_2)^4}{243(d_1)^4} \right] \right\} \quad , \tag{6.69}$$

$$C_0 = \frac{(\bar{b}_1)^6 (d_2)^2}{p^6 (d_1)^2}\left[\frac{1}{27} - \frac{d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p}{2p} \right]^2 \quad , \tag{6.70}$$

$$C_1 = \frac{(\bar{b}_1)^6 (d_2)^2}{p^6 (d_1)^2}\left[\frac{1}{27} - \frac{d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p}{2p} \right]\left\{ \left(\frac{d_5 + d_6 p}{p} + \frac{1}{2} \right)\bar{b}_1 - 6\left[\frac{1}{27} - \frac{d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p}{2p} \right] \right\} \quad , \tag{6.71}$$

$$D_0 = \frac{(\bar{b}_1)^3 d_2}{p^3 d_1}\left[\frac{1}{27} - \frac{d_5\bar{b}_1 + (d_6\bar{b}_1 - d_4)p}{2p} \right] \quad , \tag{6.72}$$

$$D_1 = \frac{(\bar{b}_1)^3 d_2}{p^3 d_1}\left[\frac{(d_5 + d_6 p)\bar{b}_1}{2p} - 3\left(\frac{1}{27} - \frac{d_5\bar{b}_1(d_6\bar{b}_1 - d_4)p}{2p} \right) \right] - \frac{(\bar{b}_1)^6}{2d_1 p^3} \quad . \tag{6.73}$$

A expansão de r_1 até termos de primeria ordem em ε é:

$$r_1 \cong -\frac{\bar{b}_1 d_2}{p d_1} + \frac{\bar{b}_1 d_2}{p d_1}\varepsilon \quad . \tag{6.74}$$

Substituindo as expansões para S_1 ,T_1 e r_1 em (6.52), encontramos a expansão de z até termos de primeira ordem em ε:

$$z \cong \left(E_0 + F_0 + \frac{\bar{b}_1 d_2}{3 p d_1}\right) + \left(E_1 + F_1 - \frac{\bar{b}_1 d_2}{p d_1}\right)\varepsilon \quad ; p < \frac{12 d_5 \bar{b}_1}{\left[\left(\frac{d_2}{d_1}\right)^2 + 12\left(d_y - d_6 \bar{b}_1\right)\right]} \, , \; T \lesssim T_C \tag{6.75}$$

Verifica-se numericamente que $\left(E_0 + F_0 + \frac{\bar{b}_1 d_2}{3 p d_1}\right)$ é um número finito no espaço de parâmetros $p - t - \sigma$, isto é, a única solução real da equação (6.39) é um z finito. Portanto, a transição entre as fases paramagnética e de Baxter é sempre de primeira ordem (veja figura 6.1).

CAPÍTULO 7

CONCLUSÃO.

Como já foi apontado na introdução, o objetivo desta tese é o estudo das propriedades termodinâmicas do MAT com interações ferromagnéticas de alcance infinito na presença de campos magnéticos aleatórios. Isso foi conseguido usando o truque das réplicas para a obtenção da energia livre e as análises das equações integrais acopladas dos parâmetros de ordem, da estabilidade de suas soluções, e das suas expansões para $T \lesssim T_C$.

Para introduzir de maneira detalhada o truque das réplicas, foi utilizado o modelo de Ising com interações ferromagnéticas de alcance infinito na presença de campo magnético aleatório. Em seguida, a generalização dessa técnica foi feita para o modelo de Potts com q estados. O resultado original encontrado para o modelo de Potts foi o seguinte: a simetria existente no caso particular em que só existe um campo magnético aleatório, associado a um *q-ésimo* estado qualquer. Como conseqüência dessa simetria, mostra-se que a energia livre é mapeada, através de operações de dilatação e de inversão do campo magnético e do parâmetro de ordem, na energia livre do modelo com $q' = \frac{q}{(q-1)}$ estados. Esse mapeamento permite que o estudo da energia livre no intervalo $q \in (1,2)$ forneça o comportamento termodinâmico para todo $q > 2$. O ponto $q = 2$ corresponde ao ponto fixo da transformação de simetria. A simetria não se aplica ao caso $q = 1$.

Para o MAT com interações ferromagnéticas de alcance infinito na presença de campos magnéticos aleatórios todos os resultados encontrados são originais.

Deve ser ressaltado que a estratégia utilizada no estudo desse modelo se mostrou poderosa pois permitiu a obtenção de resultados analíticos. Os principais resultados obtidos para esse modelo são os seguintes:

1. Diagrama de fases do MAT isotrópico na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$ (veja a figura 5.6).A fase paramagnética ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = \langle \sigma S \rangle = 0$) é limitada por baixo pelas seguintes superfícies: EPFKE (superfície de transição de primeira ordem), FBIKF (superfície de transição de segunda ordem), e AEKIQRA (superfície de transição de segunda ordem). A fase de Ising ($\langle \sigma \rangle = \langle S \rangle = 0, \langle \sigma S \rangle \neq 0$) é limitada por cima pela superfície FBIKF, e por baixo pela superfície FGCJKF. A ordem da transição de fase nessa última superfície depende da posição do ponto crítico G. Os vários cortes realizados nas superfícies FBIKF e FGCJKF (veja figura 5.4) mostram como a posição de G muda no espaço de parâmetros p-t-σ_1. A fase de Baxter ($\langle \sigma \rangle \neq 0, \langle S \rangle \neq 0, \langle \sigma S \rangle \neq 0$) só existe abaixo dos seguintes planos: EPFKE, AEKIQRA e FGCJKF.

2. Deve ser destacado que obtivemos expressões analíticas para as coordenadas dos pontos especiais E e G desse diagrama de fases (veja figuras 5.4 e 5.5, inequações (5.37) e (5.80)), nos quais ocorrem mudanças nas ordens das transições. As expansões das equações de autoconsistência para os parâmetros de ordem nos levaram à determinação analítica de coeficientes críticos para a transição entre as fases de Baxter e paramagnética (veja equações (5.48) e (5.50)).

3. No caso do MAT isotrópico na presença de campo magnético aleatório na direção de $z = \langle \sigma S \rangle$, as equações das funções termodinâmicas foram discutidas e resolvidas numericamente para valores especiais das constantes de interação e da variância (veja figuras 5.3, 5.7 a 5.18).

4. Foram determinadas e discutidas as funções termodinâmicas para o caso particular do modelo na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$. As equações das superfícies de instabilidade da solução paramagnética foram obtidas. Foi mostrado que a transição entre as fases paramagnética e de Baxter é sempre de primeira ordem. O sistema de equações integrais acopladas para as

magnetizações foi resolvido numericamente para valores especiais das constantes de interação e das variâncias $\tilde{h}_1$ e $\tilde{h}_2$.

A seguir indicamos casos especiais que serão analisados em trabalhos futuros:

1. Caracterização do diagrama de fases do MAT na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$, $y = \langle \sigma \rangle$ e $z = \langle \sigma S \rangle$. Discussão e solução numérica das equações das funções termodinâmicas desse modelo.
2. Caracterização do diagrama de fases do MAT na presença de campos magnéticos aleatórios nas direções de $x = \langle S \rangle$ e $y = \langle \sigma \rangle$. Solução numérica das funções termodinâmicas desse modelo.
3. Estudo do MAT antiferromagnético na presença de campos magnéticos aleatórios através da mesma estratégia adotada nessa tese.
4. Determinação da solução com quebra de simetria de réplica para o modelo de Potts com q estados e para o MAT na presença de campos magnéticos aleatórios.

APÊNDICE A

CRITÉRIO DE ESTABILIDADE.

Um ponto fixo é estável quando os iterados consecutivos de qualquer ponto em sua vizinhança se encontrarem sucessivamente mais próximos dele. A partir dessa definição o critério de estabilidade de um ponto fixo X^* de um mapeamento unidimensional como

$$X_{n+1} = f(X_n) \tag{A.1}$$

pode ser determinado expandindo-se em série de Taylor (até primeira ordem) a equação acima em torno do ponto fixo. Desse maneira obtem-se

$$X_{n+1} = f(X^*) + f'(X^*)(X_n - X^*) + \cdots \tag{A.2}$$

Como $f(X^*) = X^*$, essa equação pode ser reescrita como

$$f'(X^*) \cong \frac{X_{n+1} - X^*}{X_n - X^*} \quad . \tag{A.3}$$

Note que para que X_{n+1} se encontre mais próximo de X^* do que X_n é necessário que

$$|X_{n+1} - X^*| < |X_n - X^*| \quad . \tag{A.4}$$

Assim a condição para que o ponto fixo X^* seja estável pode ser dada por

$$|f'(X^*)| < 1 \quad . \tag{A.5}$$

APÊNDICE B

DETALHES DE CÁLCULOS ANALÍTICOS.

B1 - Energia livre do Modelo de Potts da seção 3.2.

Usando o truque da réplica, chegamos à seguinte relação para a energia livre média por spin:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{N\to\infty}\lim_{n\to 0}(Nn)^{-1}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}\prod_{i=1}^{N}\left[p\left(\{h_i^r\}\right)d\{h_i^r\}\right]Tr\exp\left[\sum_{\alpha=1}^{n}\left(\frac{\beta J}{N}\sum_{(i,j)}\left(q\delta_{S_i^\alpha,S_j^\alpha}-1\right)+\beta\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q}h_0^r\left(q\delta_{S_i^\alpha,r}-1\right)+\beta\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q}h_i^r\left(q\delta_{S_i^\alpha,r}-1\right)\right)\right]-1\right\}\quad , \tag{B1.1}$$

sendo Tr o traço sobre as variáveis de spin para todos os sítios i, todos os estados r e todas as réplicas α.

Tirando para fora da integral o que não depende de h_i^r, e trocando a ordem do traço Tr com a integral, podemos escrever:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{N\to\infty}\lim_{n\to 0}(Nn)^{-1}\left\{\left[Tre^{\sum_{\alpha=1}^{n}\left(\frac{\beta J}{N}\sum_{(i,j)}\left(q\delta_{S_i^\alpha,S_j^\alpha}-1\right)+\beta\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q}K_0\left(q\delta_{S_i^\alpha,r}-1\right)\right)}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\prod_{i=1}^{N}\left[p\left(\{h_i^r\}\right)d\{h_i^r\}\right]e^{\beta\sum_{\alpha=1}^{n}\sum_{i=1}^{N}\sum_{r=1}^{q}K_i\left(q\delta_{S_i^\alpha,r}-1\right)}\right)\right]-1\right\}\quad . \tag{B1.2}$$

A integral acima entre parênteses pode ser desenvolvida do seguinte modo:

$$I = \int\int\int\cdots\left[p\left(\{h_1^r\}\right)d\{h_1^r\}\right]e^{\beta\sum_{\alpha}\sum_{r}K_1\left(q\delta_{S_1^\alpha,r}-1\right)}\cdots\left[p\left(\{h_N^r\}\right)d\{h_N^r\}\right]e^{\beta\sum_{\alpha}\sum_{r}K_N\left(q\delta_{S_N^\alpha,r}-1\right)}$$

$$
\begin{aligned}
I = \int\int\int\cdots\prod_{r=1}^{q}\left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_r\right]^{-1} e^{-\left[\left(h_1^r-\bar{h}^r\right)^2/2\sigma_r^2\right]} e^{h_1^r\beta\sum_a\left(q\delta_{S_1^a,r}-1\right)} d\left\{h_1^r\right\}\cdots\cdots \\
\cdots\cdots\prod_{r=1}^{q}\left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_r\right]^{-1} e^{-\left[\left(h_N^r-\bar{h}^r\right)^2/2\sigma_r^2\right]} e^{h_N^r\beta\sum_a\left(q\delta_{S_N^a,r}-1\right)} d\left\{h_N^r\right\}
\end{aligned}
\tag{B1.3}
$$

$$
\begin{aligned}
I = &\int\left(\left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_1\right]^{-1} e^{-\left[\left(h_1^1-\bar{h}^1\right)^2/2\sigma_1^2\right]} e^{h_1^1\beta\sum_a\left(q\delta_{S_1^a,1}-1\right)} dh_1^1\right)\cdots\ \cdots \\
&\cdots\int\left(\left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_q\right]^{-1} e^{-\left[\left(h_1^q-\bar{h}^q\right)^2/2\sigma_q^2\right]} e^{h_1^q\beta\sum_a\left(q\delta_{S_1^a,q}-1\right)} dh_1^q\right)\cdots\ \cdots \\
&\cdots\int\left(\left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_1\right]^{-1} e^{-\left[\left(h_N^1-\bar{h}^1\right)^2/2\sigma_1^2\right]} e^{h_N^1\beta\sum_a\left(q\delta_{S_N^a,1}-1\right)} dh_N^1\right)\cdots\ \cdots \\
&\cdots\int\left(\left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_q\right]^{-1} e^{-\left[\left(h_N^q-\bar{h}^q\right)^2/2\sigma_q^2\right]} e^{h_N^q\beta\sum_a\left(q\delta_{S_N^a,q}-1\right)} dh_N^q\right)\cdots\ \cdots
\end{aligned}
\tag{B1.3}
$$

Na relação (B1.3) cada integral entre parênteses é uma integral gaussiana do tipo:

$$
\begin{aligned}
G &= \left[(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_r\right]^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left[\left(h_i^r-\bar{h}^r\right)^2/2\sigma_r^2\right]} e^{h_i^r\beta\sum_a\left(q\delta_{S_i^a,r}-1\right)} dh_i^r \quad , \\
G &= \exp\left[\frac{(b\sigma_r)^2}{2}+\bar{h}^r b\right] \quad ,
\end{aligned}
\tag{B1.4}
$$

onde $b = \beta\sum_a\left(q\delta_{S_i^a,r}-1\right)$.

Substituindo o valor de G em (B1.3), encontramos a seguinte expressão para I:

$$
\begin{aligned}
I &= \prod_{i=1}^{N}\prod_{r=1}^{q} e^{\frac{\left[\beta\sigma_r\sum_a\left(q\delta_{S_i^a,r}-1\right)\right]^2}{2}} e^{\frac{\bar{h}_r\beta\sum_a\left(q\delta_{S_i^a,r}-1\right)}{2}} \quad , \\
I &= \exp\left\{\frac{\sum_i\sum_r\left[\beta\sigma_r\sum_a\left(q\delta_{S_i^a,r}-1\right)\right]^2}{2}+\beta\sum_i\sum_r\sum_a\bar{h}^r\left(q\delta_{S_i^a,r}-1\right)\right\} \quad .
\end{aligned}
\tag{B1.5}
$$

Assim, se substituirmos o valor (B1.5) para I na expressão (B1.2) da energia média, obtemos:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{N\to\infty} \lim_{n\to 0} (Nn)^{-1} \left(\left\{ Tre^{\sum_{\alpha=1}^{n} \left[\frac{\beta J}{N} \sum_{(i,j)} \left(q\delta_{S_i^\alpha, S_j^\alpha} - 1 \right) + \beta \sum_i \sum_r K_0 \left(q\delta_{S_i^\alpha, r} - 1 \right) \right]} \right. \right.$$

$$\left. \left. e^{\frac{\sum_i \sum_r \left[\beta\sigma_r \sum_\alpha q\delta_{S_i^\alpha, r} - 1 \right]^2}{2} + \beta \sum_i \sum_r \sum_\alpha \bar{h}^r \left(q\delta_{S_i^\alpha, r} - 1 \right)} \right\} - 1 \right) \quad . \tag{B1.6}$$

Usando a relação

$$\sum_{(i,j)} \delta_{S_i, S_j} = \frac{1}{2} \left[\sum_{r=1}^{q} \left(\sum_{i=1}^{N} \delta_{S_i, r} \right)^2 \right] - \frac{N}{2} \quad , \tag{B1.7}$$

podemos desacoplar $\sum_{(i,j)}$ em (B1.6) e temos:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{N\to\infty} \lim_{n\to 0} (Nn)^{-1} \left(\left\{ E.Tre^{\sum_{\alpha=1}^{n} \left[\frac{\beta Jq}{2N} \sum_{r=1}^{q} \left(\sum_{i=1}^{N} \delta_{S_i^\alpha, r} \right)^2 + \beta q \sum_i \sum_r K_0 \left(\delta_{S_i^\alpha, r} \right) \right]} \right. \right.$$

$$\left. \left. e^{\frac{\sum_i \sum_r \left[\beta\sigma_r \sum_\alpha \left(q\delta_{S_i^\alpha, r} - 1 \right) \right]^2}{2} + \beta \sum_i \sum_r \sum_\alpha \bar{h}^r \left(q\delta_{S_i^\alpha, r} - 1 \right)} \right\} - 1 \right) \quad , \tag{B1.8}$$

onde $E = \exp\left[-n\beta \left(\frac{Jq}{2} + \frac{J(N-1)}{2} + Nq \sum_r h_0^r \right) \right]$ não depende da variável de spin $S_{i,r}^\alpha$.

Utilizando a identidade de Hubbard-Stratonovitch

$$\exp(a^2) = (2\pi)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-\frac{1}{2} x^2 + 2^{\frac{1}{2}} ax \right) \quad , \tag{B1.9}$$

com $a = \left(\frac{\beta Jq}{2N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_i \delta_{S_{i,r}^\alpha}$, obtemos:

$$\bar{f} = -k_B T \lim_{N\to\infty}\lim_{n\to 0}(Nn)^{-1}\left(\left\{E.Tr\left(\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{\alpha,r} dx^{\alpha,r}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\exp\left[-\sum_{\alpha}\sum_{r}\frac{\left(x^{\alpha,r}\right)^2}{2}+\right.\right.\right.\right.$$

$$\left(\frac{\beta Jq}{N}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{\alpha}\sum_{r}\left(\sum_{i}\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}\right)x^{\alpha,r}+\beta q\sum_{\alpha}\sum_{i}\sum_{r}h_0^r\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}+ \qquad \text{(B1.10)}$$

$$\left.\left.\left.\left.\left.\frac{\sum_{i}\sum_{r}\left[\beta\sigma_r\sum_{\alpha}\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right]^2}{2}+\beta\sum_{i}\sum_{r}\sum_{\alpha}\bar{h}^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right]\right)\right)\right\}-1\right) \quad .$$

Realizando a mudança de variáveis $x^{\alpha} \leftarrow N^{1/2}x^{\alpha}$, trocando a ordem da integral e do *Tr*, usando a identidade

$$Tr\exp\left(\sum_i f_i\right) = Tr\prod_i \exp f_i = \prod_i Tr_i \exp f_i = \left(Tr_i \exp f_i\right)^N = \qquad \text{(B1.11)}$$

$$= \left[\exp\left(\ln Tr_i \exp f_i\right)\right]^N = \exp\left(N \ln Tr_i \exp f_i\right) \quad ,$$

onde o traço Tr_i é sobre um sítio *i*, para todas as variáveis $S_{i,r}^{\alpha}$, temos:

$$\bar{f} = -kT \lim_{N\to\infty}\lim_{n\to 0}\left(\left(\left(\left(\frac{E}{nN}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{\alpha,r} dx^{\alpha,r}\left(\frac{N}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\exp N\left\{-\frac{1}{2}\sum_{\alpha}\sum_{r}\left(x^{\alpha,r}\right)^2+\right.\right.\right.\right.$$

$$\ln Tr_i \exp\left[\left(\beta Jq\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{\alpha}\sum_{r}\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}x^{\alpha,r}+\beta q\sum_{\alpha}\sum_{r}h_0^r\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}+ \qquad \text{(B1.12)}$$

$$\left.\left.\left.\left.\frac{\sum_{r}\left[\beta\sigma_r\sum_{\alpha}\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right]^2}{2}+\beta\sum_{r}\sum_{\alpha}\bar{h}^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right\}\right]-1\right)\right) \quad .$$

Trocando a ordem dos limites e aplicando o método do ponto de sela à integral múltipla acima, obtemos:

$$\bar{f} = -kT \lim_{n\to 0}\frac{1}{Nn}\left\{\left[E.\exp Ng\left(\left\{x_{max}^{\alpha,r}\right\}\right)\right]-1\right\} \quad , \qquad \text{(B1.13)}$$

onde

$$g\left(\left\{x^{\alpha,r}\right\}\right)=-\sum_{\alpha}\sum_{r}\frac{\left(x^{\alpha,r}\right)^2}{2}+\ln Tr_i\left\{(\beta Jq)^{\frac{1}{2}}\sum_{\alpha}\sum_{r}\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}x^{\alpha,r}+\right.$$

$$\left.\beta q\sum_{\alpha}\sum_{r}h_0^r\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}+\frac{\sum_{r}\left[\beta\sigma_r\sum_{\alpha}\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right]^2}{2}+\beta\sum_{r}\sum_{\alpha}\bar{h}^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right\}\quad .\tag{B1.14}$$

Considerando as réplicas indistinguíveis, em qualquer estado r, temos $x^{\alpha,r}=x^{\alpha}$. Portanto, podemos escrever:

$$g\left(\left\{x^{r}\right\}\right)=-\frac{n}{2}\sum_{r=1}^{q}\left(x^{r}\right)^2+\ln Tr_i\exp\left\{(\beta Jq)^{\frac{1}{2}}n\sum_{r}\delta_{\sigma_{i,r}}x^{r}+\beta qn\sum_{r}h_0^r\delta_{\sigma_{i,r}}+\right.$$

$$\left.\frac{\sum_{r}\left[\beta\sigma_r\sum_{\alpha}\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right]^2}{2}+\beta\sum_{r}\sum_{\alpha}\bar{h}^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right\}\quad .\tag{B1.15}$$

O ponto de extremo é:

$$\left\{x_{max}^{r}\right\}=\left\{\left(x^1\right)_{max},\left(x^2\right)_{max},\cdots,\left(x^q\right)_{max}\right\}\quad .\tag{B1.16}$$

Definindo as funções

$$\begin{aligned}g_1\left(x^1\right)&=g\left[x^1,\left(x^2\right)_{max},\cdots,\left(x^q\right)_{max}\right]\quad,\\ &\vdots\qquad\qquad\vdots\\ g_q\left(x^q\right)&=g\left[\left(x^1\right)_{max},\left(x^2\right)_{max},\cdots,x^q\right]\quad,\end{aligned}\tag{B1.17}$$

as condições estacionárias (ou de extremo) podem ser escritas do seguinte modo:

$$\begin{aligned}g_1'\left[\left(x^1\right)_{max}\right]&=\left(\frac{\partial g}{\partial x^1}\right)_{\left\{\left(x^1\right)_{max},\left(x^2\right)_{max},\cdots,\left(x^q\right)_{max}\right\}}=0\quad,\\ &\vdots\qquad\qquad\vdots\\ g_q'\left[\left(x^q\right)_{max}\right]&=\left(\frac{\partial g}{\partial x^q}\right)_{\left\{\left(x^1\right)_{max},\left(x^2\right)_{max},\cdots,\left(x^q\right)_{max}\right\}}=0\quad.\end{aligned}\tag{B1.18}$$

Realizando as derivadas da função (D1.15), no ponto de extremo, temos:

$$g_1'\left[\left(x^1\right)_{\max}\right] = -\left(x^1\right)_{\max} + \frac{Tr_i\left(\beta Jq\right)^{\frac{1}{2}}\left(\delta_{S_i,1}\right)e^{\mathcal{H}_{ef}}}{Tr_i e^{\mathcal{H}_{ef}}} = 0 \quad ,$$

$$\vdots \qquad\qquad \vdots \tag{B1.19}$$

$$g_q'\left[\left(x^q\right)_{\max}\right] = -\left(x^q\right)_{\max} + \frac{Tr_i\left(\beta Jq\right)^{\frac{1}{2}}\left(\delta_{S_i,q}\right)e^{\mathcal{H}_{ef}}}{Tr_i e^{\mathcal{H}_{ef}}} = 0 \quad ,$$

onde H_{ef}, que é o hamiltoniano efetivo, isto é, o hamiltoniano com a média na desordem temperada já efetuada, é igual a:

$$\mathcal{H}_{ef} = \left(\beta Jq\right)^{\frac{1}{2}} n\sum_r \delta_{S_{i,r}} x^r_{\max} + \beta qn\sum_r h_0^r \delta_{S_{i,r}} + \frac{\sum_r \left[\beta\sigma_r \sum_\alpha \left(q\delta_{S^\alpha_{i,r}} - 1\right)\right]^2}{2} + \beta\sum_r\sum_\alpha \bar{h}^r\left(q\delta_{S^\alpha_{i,r}} - 1\right) \quad . \tag{B1.20}$$

Definindo a grandeza m_r como:

$$m_r = \frac{Tr_i\left(\delta_{S_i,r}\right)e^{\mathcal{H}_{ef}}}{Tr_i e^{\mathcal{H}_{ef}}} \quad , \tag{B1.21}$$

podemos escrever as condições estacionárias do seguinte modo:

$$\left(x^r\right)_{max} = \left(\beta Jq\right)^{\frac{1}{2}} m_r \qquad ; \qquad s = 1, \cdots, q \tag{B1.22}$$

No caso geral de q campos aleatórios, a grandeza m_r é a magnetização M_r do modelo de Potts com r estados.

Usando a relação (B1.22) o hamiltoniano efetivo H_{ef} pode ser escrito da seguinte maneira:

$$\mathcal{H}_{ef} = q\beta J\sum_\alpha \sum_r m_r \delta_{S^\alpha_{i,r}} + \beta q\sum_\alpha \sum_r h_0^r \delta_{S^\alpha_{i,r}} + \frac{\sum_r \left[\beta\sigma_r \sum_\alpha \left(q\delta_{S^\alpha_{i,r}} - 1\right)\right]^2}{2} + \beta\sum_r\sum_\alpha \bar{h}^r\left(q\delta_{S^\alpha_{i,r}} - 1\right) \quad . \tag{B1.23}$$

Na relação acima, continuamos a usar $\sum_\alpha(\cdots)$, apesar de termos feito a hipótese de que as réplicas são indistinguíveis, porque, no cálculo de $Tr_i e^{\mathcal{H}_{ef}}$ esta notação será mais conveniente quando tivermos que transformar $e^{\sum_\alpha(\cdots)}$ em $\prod_\alpha e^{(\cdots)}$.

Com m_s e H_{ef} já definidos, a função $g\left(\left\{x_{max}^{\alpha,r}\right\}\right)$ pode ser escrita como:

$$g\left(\left\{x_{\max}^{\alpha,r}\right\}\right) = -\frac{nq}{2}\beta J\sum_{r=1}^{q} m_r{}^2 + \ln Tr_i e^{\mathcal{H}_4} \quad . \tag{B1.24}$$

Substituindo (B1.24) em (B1.13), obtemos:

$$\bar{f} = -kT\lim_{n\to 0}\frac{1}{nN}\left\{\left[Ee^{-\frac{Nnq}{2}\beta J\sum_{r=1}^{q} m_r^2}\left(Tr_i e^{H_{ef}}\right)^N\right]-1\right\} \quad . \tag{B1.25}$$

A seguir, vamos avaliar o traço na relação (B1.25).

Inicialmente, temos que:

$$\left(Tr_i e^{H_{ef}}\right)^N = \prod_{i=1}^{N} Tr_i e^{\mathcal{H}_4} \quad , \tag{B1.26}$$

onde

$$e^{\mathcal{H}_4} = e^{q\beta J\sum_{\alpha}\sum_{r} m_r\delta_{S_{i,r}^{\alpha}} + \beta q\sum_{\alpha}\sum_{r} h_0'\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}} e^{\frac{1}{2}\sum_{r}\left[\beta\sigma_r\sum_{\alpha}\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)\right]^2 + \beta\sum_{r}\sum_{\alpha}\bar{h}^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)} \tag{B1.27}$$

Considerando as relações (B1.2) a (B1.5), concluímos que a segunda exponencial que aparece na relação (B1.27) é equivalente à integral abaixo:

$$I' = \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q}\left(\frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma_r}\right)dh^r\right]e^{-\sum_{r=1}^{q}\left[\left(h^r-\bar{h}^r\right)^2/2\sigma_r^2\right]+\beta\sum_{r}\sum_{\alpha}h^r\left(q\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}-1\right)} \quad . \tag{B1.28}$$

Substituindo (B1.28) em (B1.27), introduzindo todos os termos para dentro da integral, reagrupando-os e transformando $e^{\sum_{\alpha}(\cdots)}$ em $\prod_{\alpha} e^{(\cdots)}$, obtemos:

$$e^{\mathcal{H}_4} = \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right]p\left(\left\{h^r\right\}\right)\prod_{\alpha=1}^{n} e^{q\beta J\sum_{r} m_r\delta_{S_{i,r}^{\alpha}} + \beta q\sum_{r} h_0'\delta_{S_{i,r}^{\alpha}} + \beta q\sum_{r} h^r\delta_{S_{i,r}^{\alpha}} - \beta\sum_{r} h^r} \quad , \tag{B1.29}$$

onde $p\left(\left\{h^r\right\}\right)$ é a distribuição de probabilidade gaussiana definida pela equação (3.3b).

Usando (B1.29) em (B1.26), e desenvolvendo o traço temos:

UFSC — SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO

$$\prod_{i=1}^{N} Tr_i e^{\mathcal{H}_4} = \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right)\prod_{\alpha=1}^{n} e^{-\beta Nn\sum_r h^r}\prod_{i=1}^{N} Tr_i \prod_{\alpha=1}^{n} e^{\sum_r \left(q\beta Jm_r+\beta q h_0^r+\beta q h^r\right)\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}},$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right) e^{-\beta Nn\sum_r h^r}\prod_{i=1}^{N}\prod_{\alpha=1}^{n} Tr_i e^{\sum_r \left(q\beta Jm_r+\beta q h_0^r+\beta q h^r\right)\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}},$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right) e^{-\beta Nn\sum_r h^r}\left[\sum_{S_i^{\alpha}=1}^{q} e^{\sum_r \left(q\beta Jm_r+\beta q h_0^r+\beta q h^r\right)\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}}\right]^{Nn},$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right) e^{-\beta Nn\sum_r h^r}\left[\sum_{S_i^{\alpha}=1}^{q} e^{\left(q\beta Jm_1+\beta q h_0^1+\beta q h^1\right)\delta_{S_{i,1}^{\alpha}}+\cdots+\left(q\beta Jm_q+\beta q h_0^q+\beta q h^q\right)\delta_{S_{i,q}^{\alpha}}}\right]^{Nn},$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right) e^{-\beta Nn\sum_r h^r}\left[e^{\left(q\beta Jm_1+\beta q h_0^1+\beta q h^1\right)\delta_{1,1}+\cdots+\left(q\beta Jm_q+\beta q h_0^q+\beta q h^q\right)\delta_{1,q}}+\right. \quad \text{(B1.30)}$$

$$\left.\cdots \quad \cdots+e^{\left(q\beta Jm_1+\beta q h_0^1+\beta q h^1\right)\delta_{q,1}+\cdots+\left(q\beta Jm_q+\beta q h_0^q+\beta q h^q\right)\delta_{q,q}}\right]^{Nn}.$$

Como $\delta_{q,q'}=0$ se $q\neq q'$ e $\delta_{q,q'}=1$ se $q=q'$, temos

$$\prod_{i=1}^{N} Tr_i e^{\mathcal{H}_4} = \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right) e^{-\beta Nn\sum_r h^r}\left[\sum_{r=1}^{q} e^{\left(q\beta Jm_r+\beta q h_0^r+\beta q h^r\right)\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}}\right]^{Nn} \quad \text{(B1.31)}$$

Substituindo (B1.31) em (B1.25), e reaplicando o truque da réplica, obtemos:

$$\bar{f} = -kT\lim_{n\to 0}\frac{1}{Nn}\left\{\left(E^{\frac{1}{nN}}\right)^{nN} . e^{-\frac{Nnq\beta J}{2}\sum_{r=1}^{q} m_r^2} . \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right) e^{-\beta Nn\sum_r h^r}\right.$$

$$\left.\left[\sum_{r=1}^{q} e^{\left(q\beta Jm_r+\beta q h_0^r+\beta q h^r\right)\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}}\right]^{Nn}-1\right\},$$

$$= -kT\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\{h^r\}\right)\frac{1}{N}\left\{\lim_{n\to 0}\frac{\left(\left(\left(E^{\frac{1}{nN}}\right)^{N} . e^{-\frac{Nq\beta J}{2}\sum_{r=1}^{q} m_r^2} . e^{-\beta N\sum_r h^r}\right.\right.\right.}{n}$$

$$\left.\left.\left.\left[\sum_{r=1}^{q} e^{\left(q\beta Jm_r+\beta q h_0^r+\beta q h^r\right)\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}}\right]^{N}\right)\right)^{n}-1\right\}, \quad \text{(B1.32)}$$

$$\bar{f} = -kT\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\left\{h^r\right\}\right)\frac{1}{N}\ln\left\{\left(E^{\frac{1}{nN}}\right)^N .e^{-\frac{Nq\beta J}{2}\sum_{r=1}^{q} m_r^2} .e^{-\beta N\sum_r H^r} .\right.$$

$$\left.\left[\sum_{r=1}^{q} e^{\left(q\beta J m_r+\beta q h_0^r+\beta q H^r\right)\delta_{S_{i,r}^{\alpha}}}\right]^N\right\} ,$$

$$= -\frac{kT}{Nn}\ln E + \frac{qJ}{2}\sum_{r=1}^{q} m_r^2 + \int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\left\{h^r\right\}\right)\sum_r h^r -$$

$$\frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\left\{h^r\right\}\right)\ln\left[\sum_{r=1}^{q} e^{\left(q\beta J m_r+\beta q h_0^r+q\beta H^r\right)}\right] .$$

Como $E = \exp\left[-n\beta\left(\frac{Jq}{2}+\frac{J(N-1)}{2}+Nq\sum_r h_0^r\right)\right]$, temos:

$$-\frac{kT}{Nn}\ln E = \frac{Jq}{2N}+\frac{J(N-1)}{2N}+q\sum_r h_0^r = \frac{J}{2}+q\sum_r h_0^r \quad , \qquad \text{(B1.33)}$$

onde $(Jq)/_{2N}$ foi considerado nulo, pois $N \to \infty$.

Finalmente, obtemos a seguinte expressão para a energia livre média por spin:

$$\bar{f} = \frac{qJ}{2}\sum_{r=1}^{q} m_r^2 - \frac{1}{\beta}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\left\{h^r\right\}\right)\ln\left[\sum_{r=1}^{q} e^{\left(q\beta J m_r+\beta q h_0^r+q\beta H^r\right)}\right] +$$

$$+\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\prod_{r=1}^{q} dh^r\right] p\left(\left\{h^r\right\}\right)\left(\sum_r h^r\right)+q\sum_r h_0^r+\frac{J}{2} . \qquad \text{(B1.34)}$$

B2 - ENERGIA LIVRE DO MODELO DE POTTS DA SUB-SEÇÃO 3.3.2.

O hamiltoniano de modelo de Potts com q estados na rede de Bethe, com um campo magnético constante H e um campo magnético aleatório h_i, na direção $r = 1$, é definido por

$$H = -q\tilde{J}\sum_{\langle i,j\rangle}\delta_{S_i,S_j} - q\sum_{i=1}^{N}\left(H+h_i\right)\delta_{S_{i,1}} \quad , \qquad \text{(B2.1)}$$

onde a soma é sobre todos pares de vizinhos mais próximos $\langle i, j\rangle$. $\tilde{J} = \left(J/_z\right) > 0$ é a interação ferromagnética entre os spins dos sítios i e j, com z sendo a razão de

ramificação da rede. S_i e δ_{S_i,S_j} são a variável de spin e o delta de Kronecker usuais, respectivamente.

A distribuição de probabilidade para o campo aleatório h_i com variância σ e média $\bar{h}$ é a mesma para todo sítio *i*, sendo definida por

$$P(h_i) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}\sigma} \exp\left[-\left(h_i - \bar{h}\right)^2 \Big/ 2\sigma^2 \right] \quad . \tag{B2.2}$$

A função de partição do sistema é

$$z = \sum_{\{S\}} \left[\exp\left(-\beta E_{Potts}\{S\}\right) \right] \left[\exp q \sum_{i=1}^{N} \left(B + \beta h_i\right) \delta_{S_{i,1}} \right] \quad , \tag{B2.3}$$

onde

$$E_{Potts} = -q\tilde{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{S_i,S_j} \quad , \tag{B2.4}$$

$$B = \beta H \quad , \tag{B2.5}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad . \tag{B2.6}$$

A energia livre por spin no limite termodinâmico é

$$-\beta f = \lim_{N\to\infty} \frac{\ln z}{N} \quad . \tag{B2.7}$$

Tomando a média na desordem temperada e trocando a ordem entre o limite e a integral, obtemos

$$-\beta \bar{f} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i) \ln z \quad . \tag{B2.8}$$

Da expressão para a energia livre média por spin acima todas as propriedades termodinâmicas podem ser calculadas. A magnetização M é dada por

$$M = \frac{\partial}{\partial B}\left(-\beta \bar{f}\right) \quad . \tag{B2.9}$$

Porém a magnetização está relacionada com o parâmetro de ordem *m* da seguinte maneira [39]:

$$M = 1 + (q-1)m \quad . \tag{B2.10}$$

Assim, conhecendo-se o parâmetro de ordem, a magnetização pode ser calculada pela equação (B2.10). Por outro lado, o conhecimento da magnetização

permite que a energia livre seja determinada através da integração da equação (B2.8). Pelo teorema fundamental do cálculo diferencial e integral, pode-se escrever a menos de uma função Φ que

$$-\beta \bar{f} = \int_{-\infty}^{+\infty} M dB \quad . \tag{B2.11}$$

Essa função Φ é encontrada através do esquema proposto por Thompson [23] para o modelo de Ising regular e o vidro de spins de Ising na rede de Bethe. Esse esquema foi generalizado por de Aguiar [22] para o modelo de Potts regular definido na mesma rede através do uso das funções hiperbólicas generalizadas. Aqui mostramos que esse esquema pode ser extendido para o modelo de Potts desordenado definido pelo hamiltoniano (B2.1).

Primeiramente, são definidas grandezas auxiliares análogas às das relações (B2.3) e (B2.8):

$$Q = \sum_{\{S\}} \left[\exp\left(-\beta E_{Potts}\{S\}\right)\right]\left[\exp q \sum_{i=1}^{N} \left(B + \beta h_i\right)\left(\delta_{S_{i,1}} - 1\right)\right] \quad , \tag{B2.12}$$

$$-\beta \overline{F} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i) \ln Q \quad . \tag{B2.13}$$

Combinando-se (B2.3) e (B2.8), pode-se escrever que:

$$Q = e^{-Nq(B+\beta h_i)} z \quad . \tag{B2.14}$$

Tomando-se o logarítmo e a média na desordem temperada nos dois membros da equação (B2.14), considerando-se o limite termodinâmico e utilizando-se as expressões (B2.8) e (B2.13), obtem-se:

$$-\beta \overline{F} = -q \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i)\left(B + \beta h_i\right) - \beta \bar{f} \quad . \tag{B2.15}$$

Quando $\overline{h} = 0$, a integral em (B2.15) pode ser simplificada:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i)\left(B + \beta h_i\right) = B \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i) + \beta \int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i) h_i = B \quad , \tag{B2.16}$$

pois

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i) = 1 \quad , \tag{B2.17}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dh_i P(h_i) h_i = 0 \quad . \tag{B2.18}$$

Assim, temos que:

$$-\beta \overline{F} = -qB - \beta \bar{f} \quad . \tag{B2.19}$$

A derivada de (B2.19) em relação a B fornece

$$\frac{\partial}{\partial B}\left(-\beta \overline{F}\right) = M - q \tag{B2.20}$$

e seu limite quando B tende para infinito é

$$\lim_{B\to\infty}\left(-\beta \overline{F}\right) = -\beta \overline{F}\left(B \to \infty\right) = -\beta E^{(0)}_{Potts} \quad , \tag{B2.21}$$

onde

$$E^{(0)}_{Potts} = \frac{-\frac{1}{2}q\tilde{J}}{2} = \frac{-qJ}{2} \tag{B2.22}$$

é a energia do estado fundamental por spin.

Integrando-se (B2.20) de B até o infinito obtem-se, tendo-se em vista (B2.19) e (B2.21), que:

$$\int_{b=B}^{+\infty}\left[M(b) - q\right]db = -\beta \overline{F}\left(B \to \infty\right) + B\overline{F}(B) = -\beta E^{(0)}_{Potts} + qB + \beta \bar{f} \quad . \tag{B2.23}$$

Substituindo-se (B2.10) em (B2.23), a energia livre média por spin pode ser escrita como:

$$\beta \bar{f} = \beta E^{(0)}_{Potts} - qB + (q-1)\int_{b=B}^{+\infty}\left[m(b) - 1\right]db \quad , \tag{B2.24}$$

onde o zero da energia livre está deslocado por causa dos termos finitos $\beta E^{(0)}_{Potts}$ e $-qB$.

O problema agora é calcular a integral que aparece em (B2.24). Inicialmente, vamos considerar a seguinte integral dupla:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dh P(h)\left\{\int_{b=B}^{+\infty}\left[\frac{\partial}{\partial b}\ln q\cosh_q\left(\beta Jm + b + \beta h\right) - \frac{q}{2}\right]db\right\} \quad , \tag{B2.25}$$

onde $b = \beta H \geq 0$, $h_i = h$ já que a distribuição de probabilidade do campo aleatório é a mesma para todo sítio, e o parâmetro de ordem m é dado pela relação (3.61).

Considerando-se que $q\cosh_q \theta \cong e^{q\theta/2}$ quando $\theta \to \infty$ (veja definição (3.20) para $\cosh_q \theta$) e que $m \to 1$ quando $b \to \infty$, a integral I torna-se

$$I = \frac{qB}{2} - \int_{-\infty}^{+\infty} dh P(h)\ln q\cosh_q\left(\beta Jm + B + \beta h\right) \quad . \tag{B2.26}$$

A mesma integral I dada por (B2.25) pode ser calculada quando se efetua a derivada existente no integrando através do uso da expressão (3.23) para $\frac{d}{d\theta}\cosh_q\theta$. Desse modo chegamos à expressão:

$$I=(q-1)\int_{b=B}^{+\infty}\left[m(b)-1\right]db+(q-1)\frac{\beta J}{2}\left(1-m^2\right)-(q-2)\frac{\beta J}{2}(1-m) \quad .(B2.27)$$

Igualando-se a relação (B2.26) à (B2.27):

$$\begin{aligned}(q-1)\int_{b=B}^{+\infty}\left[m(b)-1\right]db=\frac{qB}{2}-\int_{-\infty}^{+\infty}dhP(h)\ln q\cosh_q(\beta Jm+B+\beta h)\\ -(q-1)\frac{\beta J}{2}\left(1-m^2\right)+(q-2)\frac{\beta J}{2}(1-m)\end{aligned} \quad (B2.28)$$

Finalmente, substituindo-se a equação (B2.28) em (B2.24) obtém-se a expressão da energia livre média por spin:

$$\begin{aligned}\beta\bar{f}=-\int_{-\infty}^{+\infty}dhP(h)\ln\left\{q\cosh_q\left[\beta(Jm+H+h)\right]\right\}+(q-1)\frac{\beta J}{2}m^2\\ -(q-2)\frac{\beta Jm}{2}-\frac{\beta J}{2}-\frac{q\beta H}{2}\end{aligned} \quad , \quad (B2.29)$$

que é completamente análoga à relação (3.21) encontrada no capítulo 3 a partir do truque das réplicas.

IFSC — SERVIÇO DE INFORMAÇÃO

REFERÊNCIAS

[1] J. Ashkin e E. Teller, Phys. Rev. 64, 178 (1943).

[2] C. Fan, Phys. Lett. 39A, 136 (1972).

[3] R.V. Ditzian, J.R. Banavar, G.S. Grest, e L.P. Kadanoff, Phys. Rev. B 22, 2542 (1980).

[4] P.L. Christiano e S. Goulart Rosa, Jr., Phys. Rev. B 33, 5107 (1986).

[5] P.L. Christiano e S. Goulart Rosa, Jr., Phys. Rev. A 34, 730 (1986).

[6] J.V. Moreira, Tese de Doutorado, Universidade Federal da Paraíba - Departamento de Física, 1991 (não publicada).

[7] J.V. Moreira e P.L. Christiano, Phys. Lett. 162A, 149 (1992).

[8] J.V. Moreira e P.L. Christiano, J. Phys. A25, L739 (1992).

[9] Y. Imry e S. Ma, Phys. Rev. Lett 35, 1399 (1975).

[10] T. Schneider e E. Pytte, Phys. Rev. B 15, 1519 (1977).

[11] A. Aharony, Phys. Rev. B 18, 3318 (1978).

[12] D.P. Belanger e A.P. Young, Journ. Magn. Magn. Mat. 100, 272 (1991) e suas referências.

[13] H. Nishimori, Phys Rev. B 28, 4011 (1983).

[14] D. Blankschtein, Y. Shapir e A. Aharony, Phys. Rev. B 29, 1263 (1984).

[15] José F. Fontanari, W.K. Theumann e David R. C. Dominguez, Phys. Rev. B 39, 7132 (1989).

[16] S. Fishman e A. Aharony, J. Phys. C 12, L729 (1979);
P.Z. Wong, S. Von Molnar, e P. Dimon, J. Appl. Phys. 53, 7954 (1982).

[17] P.G. de Gennes, J. Phys. Chem. 88, 6469 (1984);
J.V.Maher, W.I. Goldburg, D.W. Pohl, e M. Lanz, Phys. Rev. Lett. 53, 60 (1984).

[18] A. Wong e M.H.W. Chan, Phys Rev. Lett 65, 2567 (1980).

[19] A. Maritan, M.R. Swift, M Cieplak, M.H.W. Chan, M.W. Cole e J.R. Banavar, Phys. Rev. Lett 67, 1821 (1991).

[20] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling e B.P. Flannery, NUMERICAL RECIPES in FORTRAN - The Art of Scientific Computing, 2nd ed. (Cambridge University Press, 1992).

[21] P.L. Christiano, Tese de Doutorado, Instituto de Física e Química de São Carlos, 1985 (não publicada).

[22] F.S. de Aguiar e S. Goulart Rosa Jr., Phys. Lett A 162, 232 (1992).

[23] C.J. Thompson, J. Stat. Phys. 27, 441 (1992).

[24] R. Brout, Phys. Rev. 115, 824 (1959).

[25] J.L. van Hemmen e R.G. Palmer, J. Phys. A 12, 563 (1979).

[26] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicsts, 3rd ed. (Academic Press, 1985).

[27] S.F. Edwards and P. W. Anderson, J. Phys. F 5, 965 (1975).

[28] D.S. Fisher, G.M. Grinstein e A. Khurana, Phys. Tod., Dec. 56, (1988).

[29] F.S. de Aguiar, Tese de Doutorado, Instituto de Física e Química de São Carlos, 1992 (não publicada).

[30] J. Vannimenus, Z. Phys. B.43, 141 (1981).

[31] T. Horiguchi e T. Morita, J. Stat. Phys. 35, 355 (1984).

[32] B. Shapiro, Phys. Rev. Lett. 50, 747 (1983).

[33] R.G. Larson e H.T. Davis, J. Phys. C 15, 2327 (1982).

[34] S.L.A. de Queiroz, J. Phys. A 14, L339 (1981).

[35] B.D. Hughes e M. Sahimi, J. Stat. Phys. 29, 781 (1982).

[36] J.E. Krizan, Phys Rev. B19, 4841 (1979).

[37] G.R. Reich e P.L. Leath, J. Stat. Phys. 19, 611 (1978).

[38] M. Kardar e M. Kaufman, Phys. Rev. Lett. 51, 1210 (1983).

[39] F.Y. Wu, Rev. Mod. Phys. 54, nº 1 (1982).

[40] A. Baracca, M. Bellesi, R. Livi, R. Rechtman, e S. Ruffo, Phys. Lett. 99A, 156 (1983).

[41] P.L. Christiano e S. Goulart Rosa Jr., Phys. Rev. A 34, 730 (1986).

[42] L. Mittag e M.J. Stephen, J. Phys. 17, L109 (1974).

[43] C. Tsallis e S.V. Levy, Phys. Lett. 47, 950 (1981).

[44] D. Gillespie, Am. J. Phys. 51, 520 (1983).

[45] F.S. de Aguiar. F.A. Bosco, A.S. Martinez e S. Goulart Rosa Jr., J. Stat. Phys. 58, 1231 (1989).

[46] F.S. de Aguiar e S. Goulart Rosa Jr., Physica A 143, 186 (1990).

[47] F.S. de Aguiar, L.B. Bernardes e S. Goulart Rosa Jr., J. Stat. Phys. 64, 673 (1991).

[48] L.B. Bernardes e S. Goulart Rosa Jr., Phys. Lett. A 191, 193 (1994).

[49] R.E. Williamson, R. H. Crowell e H. F. Troter, Calculus of Vector Funtions (Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1972).

[50] M.R. Spiegel, Manual de Fórmulas e Tabelas Matemáticas, coleção Schaum (McGraw-Hill, 1973).

[51] D.P. Belanger, Braz. Journ. Phys., vol.22, nº 4, 283 (1992) e suas referências.

[52] J. Cardy, Phy. Rev. B29, 505 (1984).

[53] D.P. Belanger, A.R. King, V. Jaccarino e J.L. Cardy, Phys. Rev. B28, 2522 (1983).

[54] J.Z. Imbrie, Phys. Rev. Lett. 53, 1747 (1984).

[55] J. Bricmont e A. Kupiainen, Phys. Rev. Lett. 59, 1829 (1987).

[56] M. Mezard e A.P. Young, Phys. Rev. Lett. 18, 653 (1992).

[57] D.P. Belanger, A.R. King e V. Jaccarino, Phys. Rev. B 31, 4538 (1985).

[58] A. Aharony, Y. Imry, e S.K. Ma, Phys. Rev. Lett. 37, 1364 (1976).

[59] A.P. Young, J. Phys. A 10, L257 (1977).

[60] G. Parisi e N. Sourlas, Phys. Rev.. Lett. 43, 744 (1979).

[61] K.Binder e A.P.Young,Rev.Mod.Phys.,58,801(1986).

[62] A.B.Harris, J.Phys.C7,1671(1974).

[63] V. Jaccarino, em: Condensed Matter Physics, the Theodore D. Holstein Symp., ed R.L.Orbach,Springer,New York,(1987).

[64] V.Jaccarino e A.R.King, Hyperfine interacrtions,17-19,403,(1984).

[65] A.R.King e D.P. Belanger,J.Magn.Mater,54-57,19,(1986).

[66] V.Jaccarino e A.R.King,J.dePhys.,49,C8-1209,(1988).

[67] V.Jaccarino e A.R.King,Physica A,163,291,(1990).

[68] D.P.Belanger,Phase Transitions,11,53,(1988).

[69] R.J.Birgenau, Y.Shapira, G.Shirane, R.A.Cowley e H. Yoshizawa, Physica B,137,83,(1986).

[70] R.A.Cowlay, R.J.Birgenau e G.Shirane,Physica A,140,285,(1986).

[71] R.J.Birgenau, R.A.Cowlay, G.Shirane e H.Yoshizawa, J.Stat.Phys., 34, 817 (1984).

[72] P.Z. Wong, J.W.Cable e P.Dimon, J.Appl.Phys.,55,2377,(1984).

[73] T.Nattermann e J.Villain, Phase Transitions,11,817,(1988).

[74] G.Gristein, Fundamentals Problems in Statistical Mechanics VI,ed. E.G.D. Cohen,(North-Holland,1985).

[75] T. Nattermann, Ferroelectrics,104,171,(1990).

[76] R.V.Ditizian,Phys.Lett. A 38,451(1972), J.Phys. C 5, L250 (1972).

[77] R.Baxter,Phys.Rev.Lett.26,832(1971), Ann.Phys.(N.Y.)70,193(1972).

[78] R.Baxter, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics,(Academic Press,1982).

[79] H.J.F. Knops, J.Phys. A 8,1508(1975).

[80] M.E.Fisher e R.J.Burford,Phys.Rev. 156,583(1976).

[81] C.LeGuillou e J.Zinn-Justin, Phys.Rev.Lett.39,95,(1977).

[82] K.G.Wilson e M.E.Fisher, Phys. Rev. Lett. 28, 240 (1972).

[83] A.Aharony, Phase Transictions and Critical Phenomena, ed. C.Domb e M.S. Green, vol. 6,(Academic Press,1976).

[84] J.Rudnick,Phys.Rev.B18,1406(1978).

[85] R.Banavar,D.Jasnow, e D.P.Landau,Phys.Rev.B 20,3820(1979).

[86] L.D.Landau e E.M.Lifshitz, Statistical Physics, (pergamon,1958).

[87] E.H.Stanley, Intruduction to Phase Transitions and Critical Phenomena, (Clarendon Press,1971).

[88] P.Pfeuty e G.Toulouse,Introduction to the Renormalization Group and to

Critical Phenomena,(John Wiley & Sons,1977).

[89] Kihara,T.,Y.Midzuno, e J.Shizume,J.Phys.Soc.Jpn.,9,681,(1954).

[90] Mittag,L. e J.Stephen,J.Phys.A7,L109,(1974).

[91] Baxter,R.J.,J.Phys. C6,L445,(1973).

[92] R. Brout, Phase Transitions,(Benjamin,1965).