

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA



APROXIMAÇÕES DE CAMPO MÉDIO PARA O MODELO DE ISÍNG COM  
INTERAÇÕES AXIALMENTE COMPETITIVAS

TÂNIA TOMÉ MARTINS DE CASTRO

*Tânia Tomé Martins de Castro*  
*Mestranda*

Dissertação de Mestrado  
apresentada ao Instituto  
de Física da Universida-  
de de São Paulo.

SBI-IFUSP



São Paulo  
1982

## AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Sílvio R.A. Salinas, pela orientação.

Ao Prof. Carlos S.O. Yokoi, pela colaboração no programa computacional e discussões úteis à tese.

A Izabel cujo auxílio foi muito importante na elaboração desta tese e a Rita e ao pessoal da secretaria pela atenção com que atenderam.

Aos colegas e funcionários do Instituto com quem convivi durante a realização deste trabalho.

A Capes pela ajuda financeira.

## RESUMO

Estudamos o comportamento termodinâmico de um modelo de Ising numa rede cúbica simples com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos ao longo de uma das direções (modelo ANNNI). Para isto desenvolvemos uma nova aproximação de campo médio, incluindo flutuações de spins nos planos normais ao eixo de anisotropia do sistema. Construimos um diagrama de fases exibindo uma série de fases moduladas e um ponto de Lifshitz. Concluimos que, em comparação com os resultados de campo médio simples, o diagrama de fases obtido na nossa aproximação está mais perto do previsto por amostragens de Monte Carlo e análises de séries de altas temperaturas.

## ABSTRACT

We study the thermodynamic behavior of a layered Ising model in a simple cubic lattice with competing interactions between first and second neighbours along a single direction (ANNNI model). We develop a new mean field approximation which includes spin fluctuations in the planes perpendicular to the axis of anisotropy. We construct a phase diagram which displays a succession of modulated phases and a Lifshitz point. We conclude that, in comparison with the simple mean-field results, the phase diagram obtained in the new approximation is closer to the predictions of the Monte Carlo simulations and the analysis of high-temperature series expansions.

## ÍNDICE

	Página
I. <u>INTRODUÇÃO</u> .....	1
A. O ponto de Lifshitz.....	1
B. O modelo ANNNI.....	4
C. O diagrama T-p do modelo ANNNI.....	5
D. Método e motivação para o trabalho.....	9
II. <u>EQUAÇÕES DE CAMPO MÉDIO</u> .....	11
A. Introdução.....	11
B. Aproximação de pares.....	13
III. <u>CÁLCULO DAS LINHAS DE TRANSIÇÃO</u> .....	19
A. Expansão assintótica; as linhas $T_0(p)$ e $T_\lambda(p)$ .....	19
B. Análise dos harmônicos superiores; cálculo da linha de transição $T_1(p)$ .....	22
C. Conclusões.....	26
IV. <u>RESULTADOS NUMÉRICOS</u> .....	28
A. Introdução.....	28
B. Resultados.....	30
V. <u>EQUAÇÕES DE CAMPO MÉDIO COM PARES E QUADRADOS</u> .....	36

VI.	<u>AS LINHAS DE TRANSIÇÃO NA APROXIMAÇÃO COM QUADRADOS E PARES</u> .....	42
	A. As linhas $T_0(p)$ e $T_\lambda(p)$ .....	42
	B. Análise dos harmônicos superiores, cálculo da linha $T_1(p)$ .....	44
	C. Conclusões.....	49
VII.	<u>RESULTADOS NUMÉRICOS</u> (na aproximação de campo médio com pares e quadrados).....	51
	A. O cálculo.....	51
	B. Resultados.....	51
VIII.	<u>CONCLUSÃO</u> .....	53
	APÊNDICE A - O ESTADO FUNDAMENTAL.....	57
	REFERÊNCIAS E NOTAS.....	63

## CAPÍTULO I

### INTRODUÇÃO

#### A. O PONTO DE LIFSHITZ

Em 1980, um novo ponto multicrítico<sup>(1,2)</sup> foi observado no laboratório de baixas temperaturas do Instituto de Física da Universidade de São Paulo. Este ponto, havia sido introduzido teoricamente<sup>(3)</sup> cinco anos antes, através da técnica de grupo de renormalização<sup>(4)</sup> e da análise do funcional de energia livre de Landau<sup>(5)</sup> em termos do parâmetro de ordem escalar  $M(\vec{r})$  que no caso de um sistema magnético é a magnetização local,

$$F(M) = \int \left[ \frac{1}{2} AM^2 + \frac{1}{4} BM^4 + \frac{1}{2} \alpha (\nabla M)^2 + \frac{1}{4} \beta (\nabla^2 M)^2 + \dots \right] d^3\vec{r} \quad (I.1)$$

Para descrever o comportamento crítico de um sistema que apresente este ponto multicrítico a partir da teoria de Landau é necessário considerar em (I.1) os termos correspondentes à variação es

pacial de  $M(\vec{r})$ , pois os dois primeiros termos descrevem apenas o ponto crítico usual. A grande novidade está no fato de  $\alpha$  poder mudar de sinal, indo a zero sob certas condições e impondo, assim, a necessidade de considerar o termo de coeficiente  $\beta$ , o qual deve ser maior que zero no ponto em que  $\alpha=0$ . A este novo ponto, um ponto multicrítico, deu-se o nome de ponto de Lifshitz.

Num diagrama de fases  $T$ - $p$  de um sistema magnético, onde  $T$  é a temperatura e  $p$  um parâmetro externo, a análise de (I.1) mostra que o ponto de Lifshitz é o ponto de encontro de duas linhas de transição de segunda ordem,  $T_0(p)$  e  $T_\lambda(p)$ , e uma linha de transições de primeira ordem  $T_1(p)$ , conforme a figura 1. A linha  $T_0(p)$ , dada pela condição  $A=0$ ,  $B>0$  e  $\alpha>0$ , separa a fase paramagnética (desordenada) de uma fase uniformemente ordenada, caracterizada por um vetor de onda fixo. A linha  $T_\lambda(p)$ , dada pela condição  $A=0$ ,  $B>0$  e  $\alpha<0$ , separa a fase paramagnética da fase modulada, espacialmente não homogênea, caracterizada por um vetor de onda  $\vec{q}_c$  que varia com  $T$  e  $p$ . A linha  $T_1(p)$  separa a fase uniformemente ordenada da fase modulada. O ponto de Lifshitz se dá sobre as linhas de segunda ordem quando  $A=\alpha=0$  e  $B,\beta>0$ .

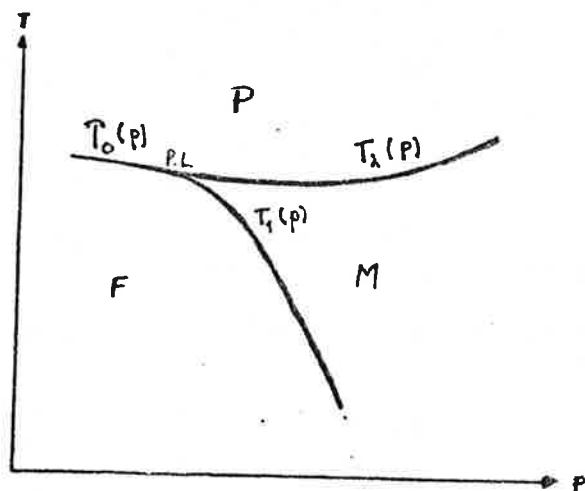


FIGURA 1 - Diagrama de fases  $T$ - $p$  para um sistema magnético com ordenamento modulado, onde  $T$  é a temperatura e  $p$  um parâmetro externo.



Caminhando sobre a linha  $T_\lambda(p)$  o vetor de onda crítico diminui com  $p$  indo a zero no ponto de Lifshitz. Esta diminuição, assintoticamente, pode ser caracterizada por um novo expoente crítico  $\beta_k$ , associado com o ponto de Lifshitz,

$$|\vec{q} - \vec{q}_0| \sim \left| \frac{p - p_L}{p_L} \right|^{\beta_k}, \quad (I.2)$$

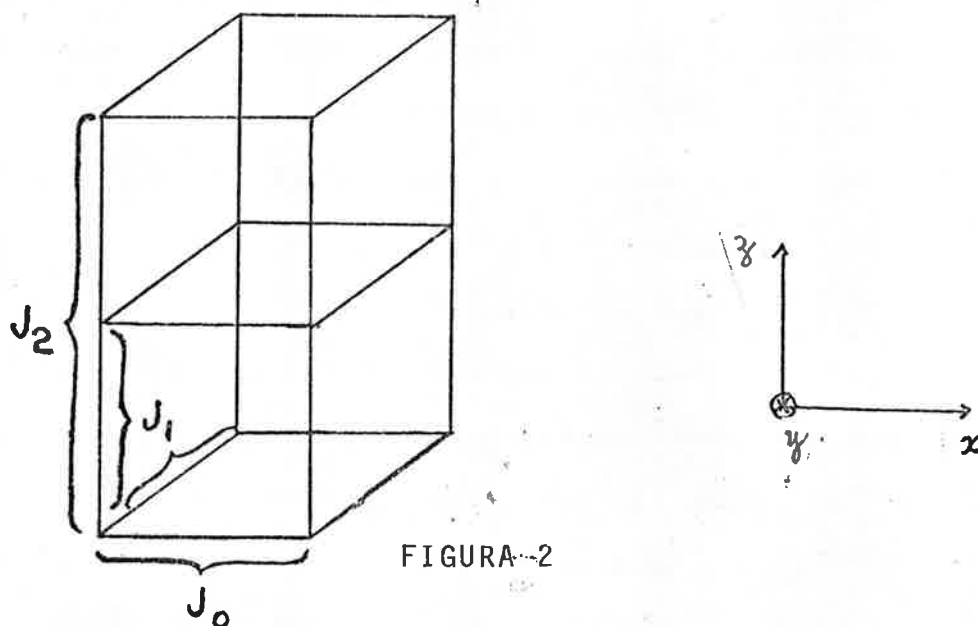
onde  $\vec{q}$  é o vetor de onda da fase modulada,  $\vec{q}_0$  é o vetor de onda da fase uniforme e  $p_L$  é o valor da razão  $p$  no ponto de Lifshitz.

Com a análise de grupo de renormalização, Hornreich e colaboradores<sup>(3)</sup>, que introduziram teoricamente o ponto de Lifshitz, estimaram além de  $\beta_k$ , todos os expoentes críticos usuais e as relações de escala<sup>(6)</sup> para o ponto de Lifshitz. Um tratamento detalhado do diagrama  $T-p$  nas vizinhanças do ponto de Lifshitz, usando a teoria de Landau, foi feito posteriormente por Michelson<sup>(7)</sup>.

A observação experimental do ponto de Lifshitz, referida no primeiro parágrafo desta tese, foi feita por Becerra e colaboradores<sup>(2)</sup> através de medidas de susceptibilidade magnética transversal em cristais de fosfato de manganês. Entretanto, não há uma correspondência direta entre o diagrama de fases obtido nesta experiência e o da figura 1, sendo preciso para isto usar eixos de escala generalizados<sup>(8)</sup>.

B. O MODELO ANNNI

Um modelo de Ising com interações competitivas numa dada direção, em uma rede cúbica simples, como mostra a figura 2, talvez seja o modelo mais simples que exibe um ponto de Lifshitz e fases moduladas.



Explicitamente, a hamiltoniana deste modelo é da-

da por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{x,y,z} \left\{ J_0 \sigma_{x,y,z} \sigma_{x\pm 1,y\pm 1,z} + J_1 \sigma_{x,y,z} \sigma_{x,y,z\pm 1} + J_2 \sigma_{x,y,z} \sigma_{x,y,z\pm 2} \right\} - \sum_{x,y,z} H \sigma_{x,y,z} .$$

(I.3)

Vamos supor que a rede tenha  $N^3$  spins, com um espaçamento unitário;  $\sigma_{x,y,z}$  denota a variável de spin de Ising no sítio  $(x,y,z)$  da rede;  $J_0 > 0$  é a interação de troca<sup>(9)</sup> entre primeiros vizinhos nos planos  $xy$ ,  $J_1 > 0$  é a interação entre primeiros vizinhos na direção  $z$  e  $J_2 < 0$  é a interação entre segundos vizi-

nhos na direção  $z$ . O último termo em (I.3) diz respeito ao campo magnético  $H$  aplicado sobre o sistema (neste trabalho vamos fazer  $H = 0$ ).

Este modelo, que atualmente vem sendo chamado de modelo ANNNI<sup>(10)</sup>, foi introduzido há uns vinte anos atrás por Elliott<sup>(11)</sup>, com o intuito de explicar o comportamento modulado da magnetização em certos cristais de terras raras. Muitas vezes este ordenamento se dava ao longo de um único eixo do cristal, como é o caso do érbio. No modelo ANNNI, o mecanismo para produzir o ordenamento modulado é a competição entre  $J_1$  e  $J_2$  na direção de anisotropia; podemos assim, considerar vários arranjos estáveis de spins, dentre os quais aquele que se realiza é o de menor energia livre. Elliott analisou o modelo ANNNI na aproximação de campo médio<sup>(12)</sup>, calculando e verificando a competição entre a entropia e a energia interna para os diversos arranjos de spins. Assim, pode concluir que para uma certa faixa de valores do parâmetro  $p = J_2/J_1$  a fase modulada apresenta entropia bem maior, prevalecendo sobre a fase de ordenamento uniforme.

Desde 1975, tem-se manifestado um grande interesse sobre o modelo ANNNI, dada a descoberta teórica do ponto de Lifshitz e a verificação de que este modelo bastante simples consegue prever um diagrama de fases  $T$ - $p$  extremamente rico, exibindo uma série de fases moduladas.

### C. O DIAGRAMA $T$ - $p$ DO MODELO ANNNI

A análise do diagrama  $T$ - $p$  do modelo ANNNI a altas temperaturas prevê o ponto de Lifshitz e as linhas paramag-

néticas e foi feita na aproximação de campo médio<sup>(7,17)</sup> e por séries de altas temperaturas<sup>(13)</sup>. O tratamento de campo médio usando o hamiltoniano do modelo ANNNI é equivalente à análise do funcional de energia livre de Landau discutida em I.A. Assim, a aproximação de campo médio fornece o diagrama T-p da figura 1 e um vetor de onda crítico sobre a linha  $T_\lambda(p)$  caracterizando fases moduladas praticamente senoidais, como pode ser visto na figura 3.

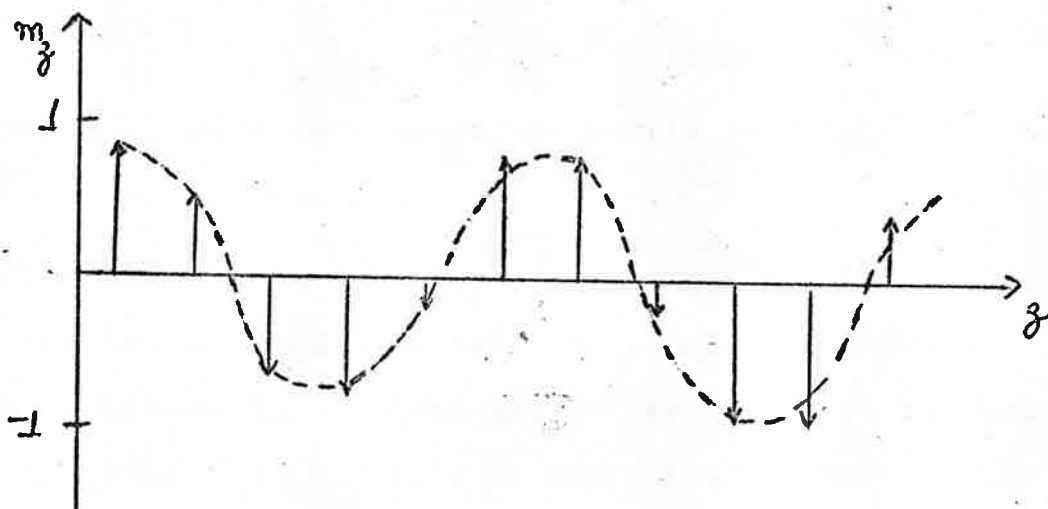


FIGURA 3 - Uma possível fase modulada perto da linha  $T_\lambda(p)$ ;  $m_z$  é o valor médio do spin nos planos perpendiculares ao eixo de anisotropia  $z$ .

As previsões de séries de altas temperaturas para esta região (região paramagnética) do diagrama T-p do modelo ANNNI são mostradas com diferenças quantitativas em relação às previsões de campo médio, dando, é claro, resultados mais precisos das linhas críticas, expoentes críticos e vetor de onda crítico.

O estudo do diagrama de fases a baixas temperaturas revela-se bem mais complicado, pois a magnetização por spin pode apresentar modulações bastante anarmônicas ao longo do eixo  $z$ . Por exemplo, para  $T=0$ , o estado fundamental do modelo ANNNI foi calculado exatamente no apêndice A, onde se verifica

que para  $p > 1/2$  no diagrama  $T-p$  a fase que se realiza é a anti-fase (2,2), como mostra a figura 4.

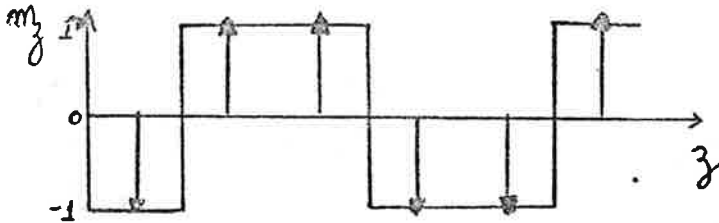


FIGURA 4 - Estado fundamental do modelo ANNNI para  $p > 1/2$ .

Esta fase tem um vetor de onda  $\vec{q} = (0, 0, q)$  tal que  $|\vec{q}|/2\pi = 1/4$  sendo praticamente uma onda quadrada e diferindo bastante da modulação praticamente senoidal que apresentam as fases moduladas perto da linha  $T_\lambda(p)$ . Para estudar esta dependência tão grande do vetor de onda das fases moduladas com a temperatura e analisar a região modulada a baixas temperaturas, W. Selke e M. Fisher<sup>(14)</sup> fizeram amostragens de Monte Carlo para o modelo ANNNI. Eles usaram condições periódicas de contorno, baseando-se no fato da magnetização apresentar uma estrutura periódica tanto a  $T=0$  quanto próximo de  $T_\lambda(p)$ . Utilizam como condição inicial o estado fundamental averiguando serem estas condições aparentemente convenientes, já que a configuração de equilíbrio é obtida com poucos passos de Monte Carlo, para temperaturas baixas. Os resultados foram obtidos para vários tamanhos do sistema, verificando-se que o vetor de onda das fases moduladas varia em degraus com a temperatura, produzindo apenas fases comensuráveis. Mas, mesmo que os resultados não dependam muito do tamanho do sistema, não se pode afirmar com certeza que num sistema infinito a mudança do vetor de onda com a temperatura ocorre como uma sequência

de fases comensuráveis, comportamento este que está sendo forçado nos cálculos de Selke e Fisher, pelas condições periódicas de contorno.

Entretanto, cálculos de campo médio<sup>(15,17)</sup> parecem confirmar qualitativamente o comportamento previsto pelas amostragens de Monte Carlo. Nestas duas referências foi calculado numericamente o diagrama T-p a baixas temperaturas para o modelo ANNNI impondo que uma dada estrutura de spins se repita a cada L planos perpendiculares à direção de anisotropia. Através deste cálculos foi verificado que o vetor de onda varia em graus com a temperatura e que refinando o cálculo (fazendo L maior) mais e mais fases aparecerão, sendo estas fases adicionais estáveis para intervalos de temperatura bem pequenos. Bak e von Boehm<sup>(15)</sup> sugerem que a curva do vetor de onda versus a temperatura exiba um número infinito de degraus, isto é, exiba um comportamento chamado pelos matemáticos de "escada do diabo"<sup>(16)</sup>. Mas numericamente e experimentalmente é impossível verificar este comportamento, já que muitas fases são estáveis em intervalos de temperatura bem pequenos e é claramente impossível detetar infinitas fases. Eles propõem então uma teoria de sólitons<sup>(15)</sup> para mostrar a estabilidade das fases comensuráveis e a transição entre as várias fases.

Comparando os resultados quantitativos para o diagrama T-p do modelo ANNNI, obtidos pelas duas técnicas comentadas acima (Campo Médio e Monte Carlo), observa-se, que para um dado valor da razão p, há uma certa discrepância entre as fases que se apresentam estáveis nas previsões de Monte Carlo e Campo Médio. Esta parte vai ser bastante explorada no decorrer deste trabalho e principalmente no capítulo IV.

## D. MOTIVAÇÃO E MÉTODO DO TRABALHO

A motivação para este trabalho se baseia essencialmente na boa descrição qualitativa do diagrama de fases para o modelo ANNNI dada pela aproximação de campo médio. A altas temperaturas, esta descrição foi dada, por exemplo, por Michelson, e a baixas temperaturas por Bak e Von Boehm, como vimos na seção I.C. Mais recentemente, na presença de um campo externo, uma análise de campo médio foi feita por Yokoi, Coutinho e Salinas<sup>(17)</sup>.

Pretendemos, no presente trabalho, introduzir flutuações de spins na aproximação de campo médio e observar como estas flutuações podem afetar o diagrama de fases T-p do modelo ANNNI. Em princípio, estas flutuações poderiam não melhorar necessariamente os resultados de campo médio para o diagrama T-p, já que é conhecido que esta aproximação apresenta uma série de defeitos (como, por exemplo, um valor superestimado para a temperatura de transição, e expoentes críticos incorretos) que dizem respeito à falta de controle desta aproximação. Assim, a introdução de flutuações dentro de uma aproximação que não leva em conta nenhuma flutuação, poderia até mesmo piorar seus resultados. Mas, felizmente, não é isto que acontece; nossos resultados estão bem mais próximos dos resultados de Monte Carlo, a baixas temperaturas, e o diagrama T-p perto do ponto de Lifshitz está indo em direção aos valores calculados por séries de altas temperaturas.

A introdução de flutuações será feita através de um método desenvolvido por Ferreira, Salinas e Oliveira<sup>(18)</sup>, que consiste num procedimento variacional para a energia livre, envolvendo a escolha de um hamiltoniano trivial que contém algumas interações entre spins. Este método será detalhadamente descrito no capítulo II.

## CAPÍTULO II

### EQUAÇÕES DE CAMPO MÉDIO

#### A. INTRODUÇÃO

Para obter a expressão de campo médio para a energia livre de Gibbs  $G(T, H, N)$  usaremos a desigualdade de Bogoliubov<sup>(19)</sup>,

$$G \leq \Phi = G_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0, \quad (\text{II.1})$$

onde,

$$(\text{II.2})$$

$$G_0 = -kT \ln \left\{ \sum_{\{s\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_0) \right\},$$

$\mathcal{H}$  é dado por (I.3) com  $J_0 = J_1 > 0$  e  $J_2 < 0$  e define um ensemble de densidade  $\rho$  e energia livre  $G$ ;  $\mathcal{H}_0$  é um hamiltoniano arbitrário definindo um ensemble de densidade  $\rho_0$  e energia livre  $G_0$ . A média  $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$  é tomada sobre o ensemble de hamiltoniano  $\mathcal{H}_0$ . Chamaremos  $\mathcal{H}_0$  de hamiltoniano de tentativa.



Para aplicar a desigualdade (II.1) temos que escolher um hamiltoniano  $\mathcal{H}_0$  de maneira a ser possível o cálculo exato do lado direito de (II.1) o qual é então minimizado com respeito aos parâmetros arbitrários de  $\mathcal{H}_0$ , encontrando assim um valor para  $G$ , que é um limite superior de seu valor real. O limite inferior do valor de  $G$  poderia ser obtido se trocássemos  $\mathcal{H}$  por  $\mathcal{H}_0$  em (II.1) de forma que a média  $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle$  seria tomada sobre o ensemble de hamiltoniano  $\mathcal{H}$ . Infelizmente este limite, muitas vezes, não pode ser calculado pois a média sobre  $\mathcal{H}$  referida acima é muito mais difícil de ser calculada exatamente do que quando é tomada sobre  $\mathcal{H}_0$ .

Esta é uma forma alternativa de fazer a aproximação de campo médio. Por exemplo, se tomarmos um hamiltoniano da forma,

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{x,y,z} \eta_z \sigma_{x,y,z} \quad (II.3)$$

onde  $\eta_z$  é um parâmetro a ser determinado, obtemos a aproximação de campo médio usual, muitas vezes chamada de aproximação de campo molecular ou de Bragg-Willians.

A desigualdade de Bogoliubov é uma maneira bastante elegante de fazer a aproximação de campo médio, advindo do fato da energia livre termodinâmica ser convexa com relação a parâmetros intensivos. Além disto, permite fazer aproximações de campo médio mais aprimoradas, de uma maneira sistemática.

## B. APROXIMAÇÃO DE CAMPO MÉDIO COM PARES

Vamos considerar um hamiltoniano de tentativa  $\mathcal{H}_0$  que leva em conta alguns pares de spins correlacionados nos planos ortogonais ao eixo de anisotropia. Na figura 5 desenhamos alguns pares conforme descrito acima.

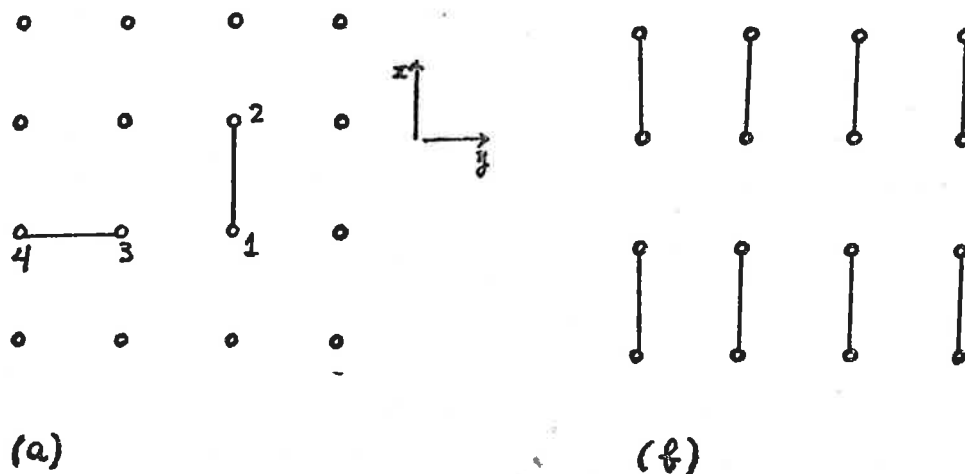


FIGURA 5 - Pares de spins ligados nos planos  $xy$  da rede cúbica simples.

Explicitamente o hamiltoniano de tentativa, neste caso, é dado por:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_j \mathcal{H}_0^{(j)} \quad (\text{II.4})$$

Onde  $\mathcal{H}_0^{(j)}$  envolve termos do tipo

$$- \eta_j^{(1)} \sigma_{x,y,z} \quad \text{para spins livres}$$

e

$$- J_1 \sigma_{x,y,z} \sigma_{x+1,y,z} - \eta_j^{(2)} (\sigma_{x,y,z} + \sigma_{x+1,y,z}) \quad \text{para pares como (1,2) na figura 5, ou}$$

-  $J_1 \sigma_{x,y,z} \sigma_{x,y+1,z} - \eta_z^{(2)} (\sigma_{x,y,z} + \sigma_{x,y+1,z})$  para pares como (3,4) na figura 5.

$\eta_z^{(1)}$  e  $\eta_z^{(2)}$  são dois parâmetros a serem determinados pela minimização da energia livre  $\Phi$  quando é levado em conta o fato de que o valor médio do spin,  $m_z = \langle \sigma_{x,y,z} \rangle_0$ , é uniforme no plano  $xy$ .

Sejam  $n_1$  o número de spins isolados, num plano  $xy$  e  $n_2$  o número de pares de spins correlacionados. Então,

$$N^2 = n_1 + 2 n_2 \quad (\text{II.5})$$

A energia livre associada com  $\mathcal{H}_0$  pode ser escrita através de (II.2), (II.4) e (II.5) da seguinte forma,

$$G_0(\mathcal{H}_0) = -kT n_1 \int_{\frac{1}{2}} \ln \left\{ 2 \cosh \beta \eta_z^{(1)} \right\} - \\ - kT n_2 \int_{\frac{1}{2}} \ln \left\{ 2 e^{\beta J_1} \cosh 2\beta \eta_z^{(2)} + 2 e^{-\beta J_1} \right\}, \quad (\text{II.6})$$

sendo o primeiro termo em (II.6) a energia livre devida aos spins livres e o segundo termo em (II.6) a energia livre associada com os pares de spins ligados.

Como  $m_z = \langle \sigma_{x,y,z} \rangle$  deve ser uniforme dentro de cada camada podemos escrever a quantidade  $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$  como,

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = & -(+2N^2 - n_2) J_1 \int_{\mathcal{Z}} m_{\mathcal{Z}}^2 - \\
& - \frac{N^2}{2} J_1 \int_{\mathcal{Z}} m_{\mathcal{Z}} (m_{\mathcal{Z}-1} + m_{\mathcal{Z}+1}) - \\
& - \frac{N^2}{2} J_2 \int_{\mathcal{Z}} m_{\mathcal{Z}} (m_{\mathcal{Z}-2} + m_{\mathcal{Z}+2}) + \\
& + \int_{\mathcal{Z}} \left\{ N^2 \eta_{\mathcal{Z}}^{(1)} + 2 n_2 (\eta_{\mathcal{Z}}^{(2)} - \eta_{\mathcal{Z}}^{(1)}) \right\} m_{\mathcal{Z}}, \quad (\text{II.7})
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
m_{\mathcal{Z}} = \langle \sigma_{x,y,\mathcal{Z}} \rangle = & \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_{\mathcal{Z}}^{(1)}} \ln [ 2 \cosh \beta \eta_{\mathcal{Z}}^{(1)} ] = \\
& = \tanh \beta \eta_{\mathcal{Z}}^{(1)}, \quad (\text{II.8.a})
\end{aligned}$$

quando  $m_{\mathcal{Z}}$  é obtido a partir dos spins livres, e

$$\begin{aligned}
m_{\mathcal{Z}} = & \frac{1}{2\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_{\mathcal{Z}}^{(2)}} \ln [ 2 e^{\beta J_1} \cosh 2\beta \eta_{\mathcal{Z}}^{(2)} + 2 e^{-\beta J_1} ] = \\
& = \frac{\sinh 2\beta \eta_{\mathcal{Z}}^{(2)}}{\cosh 2\beta \eta_{\mathcal{Z}}^{(2)} + e^{-2\beta J_1}}, \quad (\text{II.8.b})
\end{aligned}$$

quando  $m_{\mathcal{Z}}$  é obtido a partir dos spins pertencentes a pares;

(II.8.a) deve ser igual a (II.8.b) obedecendo a condição de uniformidade de  $m_{\mathcal{Z}}$  no plano  $xy$ .

Assim a expressão para  $\Phi(T, N; n_z^{(1)}; n_z^{(2)})$  é dada a partir de (II.1), (II.6) e (II.7) por

$$\begin{aligned}
\Phi = & - N^2 k T \sum_j \ln [ 2 \cosh \beta \eta_j^{(1)} ] - \\
& - k T n_2 \sum_j \ln \left[ \frac{2 e^{\beta J_1} \cosh 2 \beta \eta_j^{(2)} + 2 e^{-\beta J_1}}{(2 \cosh \beta \eta_j^{(1)})^2} \right] - (2 N^2 - n_2) J_1 \sum_j m_j^2 - \\
& - J_1 \frac{N^2}{2} \sum_j m_j (m_{j-1} + m_{j+1}) - J_2 \frac{N^2}{2} \sum_j m_j (m_{j-2} + m_{j+2}) + \\
& + \sum_j \left\{ N^2 \eta_j^{(2)} + 2 n_2 (\eta_j^{(2)} - \eta_j^{(1)}) \right\} m_j .
\end{aligned}$$

(II.9)

A minimização de  $\phi$  com respeito a  $m_j$ , nos dá

$$\begin{aligned}
\frac{2 n_2}{N^2} \eta_j^{(2)} + \frac{n_2}{N^2} \eta_j^{(1)} - J_1 (m_{j-1} + m_{j+1}) - J_2 (m_{j-2} + m_{j+2}) - \\
- 2 J_1 \left( 2 - \frac{n_2}{N^2} \right) m_j = 0 .
\end{aligned}$$

(II.10)

Agora, o que precisamos encontrar é um número de pares  $n_2$  que seja conveniente. Para isto, deve-se observar que  $\Phi$  dado pela equação (II.9) decresce com o aumento do número de pares  $n_2$ . Assim  $n_2$  deve ser o maior possível para obtermos uma boa aproximação para a energia livre. O número máximo de pares isolados é, como vemos na figura 5-b, igual a  $N^2/2$ , mas como  $\phi$  não tem singularidades em  $N^2/2$ , pode ser feita uma continuação analítica de  $\phi$  como função de  $n_2$  e consideramos valores de  $n_2$  maiores do que  $N^2/2$  para obter a menor energia livre possível.

A escolha do número ideal de pares vai ser feita pela comparação dos primeiros termos da expansão em séries de altas temperaturas da energia livre exata por partícula no plano  $xy$ ,

$$\frac{G}{N^2} = -kT \ln 2 - kT (\beta J_1)^2 - kT \frac{20}{4!} (\beta J_1)^4 + \dots, \quad (\text{II.11})$$

e os primeiros termos da expansão para temperaturas altas de  $\phi/N^3$ . Lembrando que, quando  $\beta J_1$  é pequeno, estamos na fase paramagnética,  $m_z = 0$ , temos

$$\frac{\phi}{N^3} = -kT \ln 2 - \frac{kT m_2}{2N^2} (\beta J_1)^2 + \dots \quad (\text{II.12})$$

Portanto,

$$m_2 = 2N^2 \quad (\text{II.13})$$

Com esta escolha de  $m_2$ , a equação de minimização (II.10) pode ser escrita como

$$4\eta_z^{(2)} - 3\eta_z^{(1)} = J_1 (m_{z-1} + m_{z+1}) + J_2 (m_{z-2} + m_{z+2}). \quad (\text{II.14})$$

Substituindo (II.14), (II.13) e (II.8) em (II.9) obtemos a seguinte expressão para a energia livre

$$N^{-3} \{ G(T, N; m_z) \} = kT \ln 2 + \frac{kT}{2N} \sum_z \ln (1 - m_z^2) -$$

$$\begin{aligned}
 & - 2 \frac{kT}{N} \sum_j \ln \left\{ e^{-\beta J_1} \left( 1 + \sqrt{e^{4\beta J_1} + m_j^2 (1 - e^{4\beta J_1})} \right) \right\} + \\
 & + \frac{J_1}{2N} \sum_j m_j (m_{j-1} + m_{j+1}) + \frac{J_2}{2N} \sum_j m_j (m_{j-2} + m_{j+2}),
 \end{aligned}$$

(II.15)

onde  $m_z$  é dado pela solução do sistema de  $N$  equações acopladas,

$$m_j = \frac{\sinh(2\beta \eta_j^{(2)})}{\cosh(2\beta \eta_j^{(2)}) + e^{-2\beta J_1}} \quad (II.16)$$

onde,  $2\beta \eta_j^{(2)} = \frac{3}{4} \ln \left( \frac{1 + m_j}{-1 + m_j} \right) + \frac{\beta}{2} \left\{ J_1 (m_{j-1} + m_{j+1}) + J_2 (m_{j-2} + m_{j+2}) \right\}.$

(II.17)

## CAPÍTULO III

### CÁLCULO DAS LINHAS DE TRANSIÇÃO

#### A. AS LINHAS DE TRANSIÇÃO $T_0(p)$ e $T_\lambda(p)$

A transição entre a fase desordenada, com  $m_z = 0$ , e a fase ordenada, com  $m_z \neq 0$ , é determinada fazendo uma aproximação assintótica para as equações (II.16) e (II.17). Então podemos escrever (II.17) como

$$\frac{2}{\beta} (1 + e^{-2\beta J_1}) m_z - \frac{3}{\beta} m_z \approx J_2 (m_{z-1} + m_{z+1}) + J_2 (m_{z-2} + m_{z+2}). \quad (\text{III.1})$$

É conveniente escrever  $m_z$  na sua representação de Fourier,

$$m_z = \int q m_q e^{iqz}, \quad (\text{III.2})$$



com  $q$  pertencente à primeira zona de Brillouin,  $-\pi < q \leq \pi$ .

Substituindo (III.2) em (III.1) temos

$$m_q \sim \frac{\beta}{(2 e^{-2\beta J} - 1)} J(q) m_q, \quad (\text{III.3})$$

onde  $J(q) = 2 J_1 \cos q + 2 J_2 \cos 2q.$  (III.4)

$J(q)$  é limitado superiormente e, portanto, tem um valor máximo. Verifica-se que para temperaturas altas a equação (III.3) só tem a solução  $q=0$ . Abaixando a temperatura, a primeira solução não nula vai se dar quando  $J(q)$  tem um máximo, dando um valor crítico de  $q = q_c$ . Portanto, a temperatura de transição é determinada por,

$$k T_c (2 e^{-2J_1/kT_c} - 1) = \max_q \{ J(q) \} \quad (\text{III.5})$$

Assim, obtêm-se os vetores de onda críticos. A fase modulada, assintoticamente perto da temperatura de transição, vai ser caracterizada por um vetor de onda  $q_c$ , dado por,

$$q_c = \cos^{-1} \left( 1/4p \right) \quad (\text{III.6})$$

As outras soluções de (III.5) são  $q_c = 0$  e  $\pi$ . A solução  $q_c = 0$  acontece na fase ferromagnética, para temperaturas abaixo da transição; acima da transição  $q_c = 0$  caracteriza a fase paramagnética. A solução  $q_c = \pi$  caracteriza uma fase metamagnética.

Para  $p < 1/4$  o sistema é ferromagnético e a linha de transição ferromagnética-paramagnética,  $T_0(p)$ , é dada por,

$$\frac{kT_0}{J_1} (2 e^{-2J_1/kT_0} - 1) = \frac{J(0)}{J_1} = \frac{3}{2} - 2 \Delta p \quad (\text{III.7})$$

onde  $J(0) = 2J_1 + 2J_2$  e  $\Delta p = p - 1/4$  (III.8)

Para  $p > 1/4$  o sistema está na fase modulada e a linha de transição modulada-paramagnética,  $T_\lambda(p)$ , é dada por,

$$\frac{kT_\lambda}{J_1} (2 e^{-2J_1/kT_\lambda} - 1) = \frac{J(\cos^{-1}(1/4p))}{J_1} = \frac{kT_0}{J_1} (2 e^{-2J_1/kT_0} - 1) + 16 \Delta p^2 + o(\Delta p^3) \quad (\text{III.9})$$

com  $J(\cos^{-1}(1/4p)) = -2J_2 - J_1^2/4J_2$  (III.10)

O encontro das duas linhas dadas em (III.7) e (III.9) acontece quando  $\Delta p = 0$ , ou seja,  $p = 1/4$ . No ponto de Lifshitz a temperatura é dada então pela equação,

$$\frac{kT_L}{J_1} (2 e^{-2J_1/kT_L} - 1) = 3/2 \quad (\text{III.11})$$

Verificamos também que as linhas  $T_0(p)$  e  $T_\lambda(p)$  se encontram tangencialmente no ponto de Lifshitz.

B. ANÁLISE DOS HARMÔNICOS SUPERIORES; CÁLCULO DA LINHA DE TRANSIÇÃO  $T_1(p)$

Investigaremos o comportamento da linha de transição ferromagnética-modulada,  $T_1(p)$ . Nossa análise se restringirá à vizinhança do ponto de Lifshitz, encontrando assim uma expressão assintótica para esta linha.

Perto da transição  $m_z$  é pequeno e podemos expandir (II.16) e (II.17) em termos de potências de  $m_z$ , obtendo a seguinte expressão para a equação de minimização,

$$\begin{aligned} & \beta \left\{ J_1 (m_{j-1} + m_{j+1}) + J_2 (m_{j-2} + m_{j+2}) \right\} = \\ & = m_j (2 e^{-2\beta J_1} - 1) + \frac{m_j^3}{3} \left\{ (1 + e^{-2\beta J_1})^2 (2 - e^{-2\beta J_1}) - 3 \right\} + \\ & \qquad \qquad \qquad + \dots \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

Vamos escrever  $m_z$  numa série de Fourier,

$$\begin{aligned} m_j = M_1 \cos(q_c j + \phi_1) + M_3 \cos(3q_c j + \phi_3) + M_5 \cos(5q_c j + \phi_5) \\ + \dots \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

onde sô foi necessário considerar termos de harmônicos ímpares.  $M_1, M_3, \dots$  são coeficientes reais e  $\phi_n = n\phi_1 + \nu\pi$ , onde  $\nu$  é inteiro. Neste caso vamos adotar  $\nu = 0$ .

Substituindo (III.13) em (III.12) e comparando os termos de mesmos harmônicos temos

$$M_1 \approx \pm 2 \left\{ 1 - \frac{T (2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{T_2 (2 e^{-2J_1/kT_2} - 1)} \right\}^{1/2} \cdot \left\{ \frac{(2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{[(1 + e^{-2J_1/kT})^2 (2 - e^{-2J_1/kT}) - 3]} \right\}^{1/2}, \quad (\text{III.14})$$

B. ANÁLISE DOS HARMÔNICOS SUPERIORES; CÁLCULO DA LINHA DE TRANSIÇÃO  $T_1(p)$

Investigaremos o comportamento da linha de transição ferromagnética-modulada,  $T_1(p)$ . Nossa análise se restringirá à vizinhança do ponto de Lifshitz, encontrando assim uma expressão assintótica para esta linha.

Perto da transição  $m_z$  é pequeno e podemos expandir (II.16) e (II.17) em termos de potências de  $m_z$ , obtendo a seguinte expressão para a equação de minimização,

$$\begin{aligned} & \beta \left\{ J_1 (m_{j-1} + m_{j+1}) + J_2 (m_{j-2} + m_{j+2}) \right\} = \\ & = m_j (2 e^{-2\beta J_1} - 1) + \frac{m_j^3}{3} \left\{ (1 + e^{-2\beta J_1})^2 (2 - e^{-2\beta J_1}) - 3 \right\} + \\ & \qquad \qquad \qquad + \dots \end{aligned} \quad (\text{III.12})$$

Vamos escrever  $m_z$  numa série de Fourier,

$$\begin{aligned} m_j = M_1 \cos(q_c j + \phi_1) + M_3 \cos(3q_c j + \phi_3) + M_5 \cos(5q_c j + \phi_5) \\ + \dots \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

onde s̄o foi necessário considerar termos de harmônicos ímpares.  $M_1, M_3, \dots$  são coeficientes reais e  $\phi_n = n\phi_1 + \nu\pi$ , onde  $\nu$  é inteiro. Neste caso vamos adotar  $\nu = 0$ .

Substituindo (III.13) em (III.12) e comparando os termos de mesmos harmônicos temos

$$M_1 \approx \pm 2 \left\{ 1 - \frac{T (2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{T_\lambda (2 e^{-2J_\lambda/kT_\lambda} - 1)} \right\}^{1/2} \cdot \left\{ \frac{(2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{[(1 + e^{-2J_1/kT})^2 (2 - e^{-2J_1/kT}) - 3]} \right\}^{1/2}, \quad (\text{III.14})$$

$$M_3 \sim -\frac{1}{12} \left\{ 1 - \frac{J(3q_c)}{kT(2e^{-2J_1/kT} - 1)} \right\} \left\{ \frac{(1 + e^{-2J_1/kT})(2 - (-1 + 2e^{-2J_1/kT}))}{(-1 + 2e^{-2J_1/kT})} \right\} \times M_1^3.$$

(III.15)

Os coeficientes  $M_5, M_7, \dots$  não são necessários, pois bem perto da linha  $\lambda$ ,  $m_z$  é aproximadamente senoidal.

Expandindo a energia livre (II.15) em série de  $m_z$ , obtemos:

$$\begin{aligned} N^{-3} G(T, N; m_z) = & kT \ln 2 - 2kT \ln e^{\beta J_1} (1 + e^{-2\beta J_1}) - \\ & - \frac{kT}{2N} (2e^{-2J_1/kT} - 1) \sum_j m_j^2 - \frac{kT}{4N} \left\{ 1 - (e^{-2J_1/kT} - 1)^2 (2 + e^{-2J_1/kT}) \right\} \times \\ & \sum_j m_j^4 + \frac{J_1}{2N} \sum_j m_j (m_{j-1} + m_{j+1}) + \frac{J_2}{2N} \sum_j m_j (m_{j-2} + m_{j+2}) + \\ & + \dots \end{aligned}$$

(III.16)

Para a fase modulada com  $m_z$  dado por (III.13) a energia livre pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} N^{-3} G = & kT \ln 2 - 2kT \ln e^{\beta J_1} (1 + e^{-2\beta J_1}) + \\ & \frac{1}{4} \left\{ -\frac{1}{\beta} (2e^{-2\beta J_1} - 1) + J(q_c) \right\} M_1^2 + \frac{1}{4} \left\{ -\frac{1}{\beta} (2e^{-2\beta J_1} - \right. \\ & \left. 1) + J(3q_c) \right\} M_3^2 - \frac{3}{32} \left\{ 1 - (e^{-2\beta J_1} - 1)^2 (2 + e^{-2\beta J_1}) \right\} \times \\ & \left\{ M_1^4 + \frac{4}{3} M_1^3 M_3 \right\} + \dots \end{aligned}$$

(III.17)

Como o cálculo que está sendo feito é bem perto da transição e  $M_1$  é da ordem de  $\left\{ T ( 2 e^{-2J_1/kT} - 1 ) - T_\lambda ( 2 e^{-2J_1/kT_\lambda} - 1 ) \right\}^{1/2}$  e  $M_3$  é da ordem de  $M_1^3$ , não é preciso considerar  $M_3$  numa aproximação assintótica para a energia livre. Nesta aproximação, substituindo (III.14) em (III.17), temos a seguinte expressão assintótica para a energia livre na fase modulada na vizinhança do ponto de Lifshitz:

$$N^{-3} G^{(m)} \approx N^{-3} G^1 - \frac{kT ( 2 e^{-2J_1/kT} - 1 )}{2} \left\{ 1 - \frac{T ( 2 e^{-2J_1/kT} - 1 )}{T_\lambda ( 2 e^{-2J_1/kT_\lambda} - 1 )} \right\}^2 \frac{( 2 e^{-2J_1/kT} - 1 )}{( 3 e^{-2J_1/kT} - e^{-6J_1/kT} - 1 )}$$

(III.18)

com  $G^1 = kT \ln 2 - 2 kT \ln e^{\beta J_1} ( 1 + e^{-2\beta J_1} )$

Para a fase ferromagnética, perto do ponto de Lifshitz, podemos usar a expansão (III.16) da energia livre e levar em conta o fato de que  $m_z = m$  é uniforme para dado  $T$  e  $p$ . Assim a energia livre assintótica, na fase ferromagnética, pode ser escrita como:

$$N^{-3} G = N^{-3} G^1 + \frac{kT}{2} \left( \frac{J(0)}{kT} - ( 2 e^{-2J_1/kT} - 1 ) \right) m^2 - \frac{kT}{4} \left\{ 1 - ( e^{-2J_1/kT} - 1 )^2 ( 2 + e^{-2J_1/kT} ) \right\} m^4 + \dots$$

(III.19)

Retornando à equação de minimização expandida em termos de  $m_z$  dada na expressão (III.12) e fazendo  $m_z = m$  acha

mos que  $m$  na fase ferromagnética é dada por:

$$m \approx \pm \sqrt{3} \left\{ 1 - \frac{T (2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{T_0 (2 e^{-2J_1/kT_0} - 1)} \right\}^{1/2} \times \left\{ \frac{(2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{(3 e^{-2J_1/kT} - e^{-6J_1/kT} - 1)} \right\}^{1/2} \quad (\text{III.20})$$

Substituindo (III.20) em (III.19) obtemos a seguinte expressão assintótica para a energia livre na fase ferromagnética:

$$N^{-3} G^{(f)} \approx N^{-3} G^{(i)} - \frac{3}{4} kT (2 e^{-2J_1/kT} - 1) \left\{ 1 - \frac{T (2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{T_0 (2 e^{-2J_1/kT_0} - 1)} \right\}^2 \left\{ \frac{(2 e^{-2J_1/kT} - 1)}{(3 e^{-2J_1/kT} - e^{-6J_1/kT} - 1)} \right\}. \quad (\text{III.21})$$

Na linha de transição ferromagnética-modulada as energias livres das duas fases devem se igualar. Fazendo isto, obtemos a seguinte expressão assintótica para a linha  $T_1(p)$ :

$$\frac{kT_1}{J_1} (2 e^{-2J_1/kT_1} - 1) \approx \frac{kT_0}{J_1} (2 e^{-2J_1/kT_0} - 1) - (2 + \sqrt{6}) 16 \Delta p^2 \quad (\text{III.22})$$

Esta linha é de primeira ordem, com um salto da entropia dado também na aproximação assintótica por,

$$N^{-3} (S^{(m)} - S^{(f)}) \approx \left\{ 8\sqrt{6} \frac{J_1 \Delta p^2}{T_1 (2 e^{-2J_1/kT_1} - 1)} \right\} \left\{ \frac{(2 e^{-2J_1/kT_1} - 1) (2 e^{-2J_1/kT_1} - 1 + (4J_1/kT_1) e^{-2J_1/kT_1})}{(3 e^{-2J_1/kT_1} - e^{-6J_1/kT_1} - 1)} \right\} \quad (\text{III.23})$$

### C. CONCLUSÕES

Desenhemos as linhas  $T_0(p)$ ,  $T_\lambda(p)$  e  $T_1(p)$ , a partir das expressões (III.7), (III.9) e (III.22) respectivamente, como pode ser visto na figura 6, onde também estão desenhados os resultados de campo médio simples<sup>(17)</sup> e séries de altas temperaturas<sup>(13)</sup>.

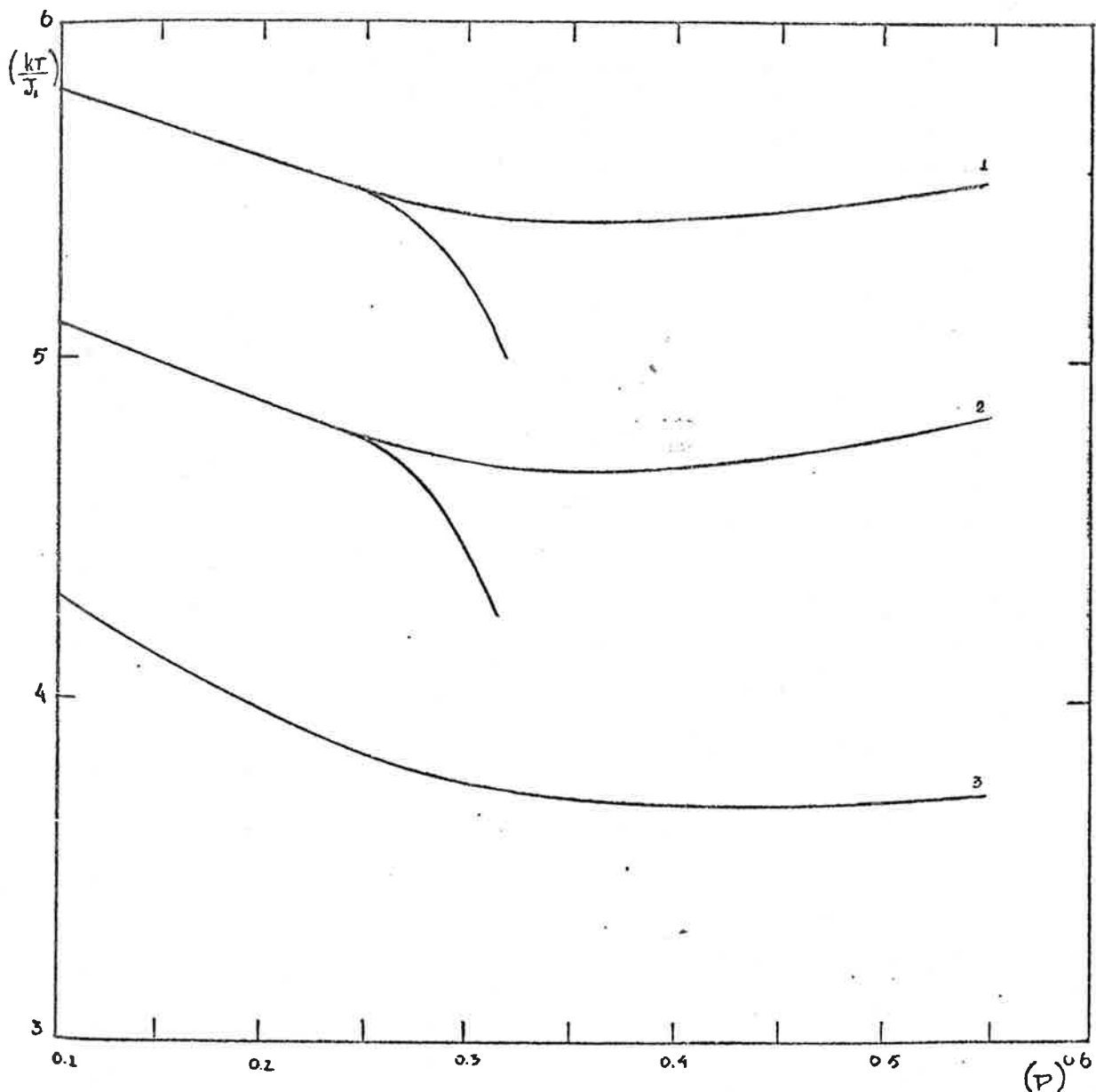


FIGURA 6 - Diagrama T-p construído (1) a partir de expressões de campo médio simples<sup>(17)</sup>, (2) a partir das expressões de campo médio com pares e (3) a partir de séries de altas temperaturas<sup>(13)</sup>.

A comparação dos três resultados mostra que 1) as linhas  $T_0(p)$ ,  $T_\lambda(p)$  e  $T_1(p)$ , na aproximação de campo médio com pares, continuam se encontrando tangencialmente no ponto de



Lifshitz, definido pela mesma razão  $p = 1/4$  ; 2) a linha  $T_1(p)$  continua sendo de primeira ordem como era previsto pela aproximação mais simples de campo médio; 3) a temperatura de Lifshitz, para esta aproximação de pares, é reduzida aproximadamente de 13% em relação à obtida por campo médio simples, assim como as linhas  $T_0(p)$  e  $T_\lambda(p)$  estão deslocadas na mesma proporção e se aproximam dos resultados de séries de altas temperaturas e 4) o vetor de onda crítico perto da linha  $T_\lambda(p)$  é determinado pela expressão (III.6) que é a mesma de campo médio simples.

Portanto a introdução de pares nos planos normais ao eixo  $z$  faz com que as linhas de transição paramagnéticas se desloquem em direção aos resultados de séries de altas temperaturas, melhorando desta maneira os resultados quantitativos de campo médio, mas o diagrama de fases  $T-p$  a altas temperaturas continua sendo topologicamente idêntico ao calculado por campo médio simples.

## CAPÍTULO IV

### CÁLCULOS NUMÉRICOS

#### A. INTRODUÇÃO

O vetor de onda das fases moduladas perto da linha  $T_\lambda$  descrito pela equação (III.6) caracteriza fases moduladas onde harmônicos superiores são influenciados como flutuações sobre um arranjo praticamente senoidal. Entretanto, penetrando no interior da região modulada podem surgir várias fases bastante anarmônicas de modulações distintas.

Para prever estas fases moduladas no diagrama T-p, teremos que resolver as equações (II.16-17) no caso de aproximação de campo médio com pares. Analiticamente as equações (II.16) são impossíveis de serem resolvidas, pois apresenta-se aí um sistema infinito de equações acopladas não lineares. Assim sendo, desenvolveremos um cálculo numérico para resolver estas equações.

Nas referências (15) e (17) foram analisadas equações de campo médio simples, similares às equações (II.16-17). Os

cálculos computacionais serão feitos como na referência (17). Suponhamos que a mesma estrutura de spins se repita a cada  $L$  camadas, ou seja, vamos procurar soluções periódicas de modo que o sistema infinito de equações (II.16-17) se reduz a um sistema de  $L$  equações acopladas, que podem ser resolvidas numericamente através de um processo iterativo. Como configuração inicial usamos uma estrutura senoidal. Esta configuração permite gerar um valor para as expressões (II.16-17), que por sua vez é usado para calcular uma nova configuração de spin. Para temperaturas baixas a convergência é obtida depois de poucas iterações, exceto para certos valores de  $L$ . Já para  $T/T_\lambda(p) \geq 0.8$  a convergência em geral é muito lenta.

Obtida a convergência calcula-se a energia livre por spin de acordo com a expressão (II.15), considerando que o sistema agora tem  $N=L$ . Para um dado valor de  $p$  e a uma certa temperatura o vetor de onda estável é aquele que corresponde à menor energia livre.

Neste trabalho consideramos valores de  $L$  até 20, de modo que os vetores de onda são dados por,

$$q = \frac{2 \pi K}{L} \tag{IV.1}$$

onde  $0 \leq K < L \leq 20$ . Desta maneira somente algumas estruturas comensuráveis são consideradas e nenhuma estrutura incomensurável é levada em conta. Entretanto, de acordo com as referências (15), (17) e (20), acredita-se que para valores grandes de  $L$  apareçam todas as possíveis fases comensuráveis, mas que nenhuma das fases, além das previstas com  $L$  até 20, seja estável dentro de um intervalo grande de temperatura.

## B. RESULTADOS

A figura 7 mostra o vetor de onda versus a temperatura reduzida  $T/T_c$ , onde  $T_c$  é a temperatura de transição entre a fase modulada e a fase paramagnética para  $p = 0.6$ . As curvas são desenhadas a partir de (a) cálculos numéricos com as equações de campo médio com pares, (b) cálculos numéricos com as equações de campo médio simples da referência (17) e (c) amostragens de Monte Carlo feitas na referência (14). Observamos que em (a) o vetor de onda cresce, em degraus, à medida que a temperatura é diminuída, indo de  $q/2\pi = 2/11$  até  $1/4$  que é estável para um intervalo de temperatura grande, passando pela fase  $q/2\pi = 1/5$  também estável para um intervalo de temperatura grande. Neste caso (figura 7-a) a curva do vetor de onda versus a temperatura é monotônica. Em (b), primeiramente  $q$  decresce com a diminuição da temperatura, indo de  $q/2\pi = 2/11$  para  $q/2\pi = 1/6$  que é estável por um intervalo de temperatura grande, depois o vetor de onda cresce com a diminuição da temperatura até  $q/2\pi = 1/4$ , com as mesmas características apresentadas em (a) são que as transições entre as fases moduladas ocorrem a temperaturas mais altas do que em (a). Neste caso o comportamento do vetor de onda com a temperatura é não monotônico. Em (c) as amostragens de Monte Carlo mostram um comportamento monotônico do vetor de onda com a temperatura. A fase  $q/2\pi = 1/4$  é estável até  $T/T_c \approx 0.8$ . Para  $T/T_c \geq 0.8$  aparece uma sucessão de fases moduladas com vetores de onda que decrescem com o aumento da temperatura até  $T/T_c \approx 0.9$ , quando é atingido o vetor de onda crítico  $q/2\pi \sim 2/11$ . A figura 8 mostra  $q/2\pi$  versus  $T/T_c$ , onde estão desenhadas juntas as curvas 7(a), 7(b) e 7(c).

Assim, a comparação entre as curvas do vetor de on

da versus a temperatura mostra que os resultados de campo médio com pares dão uma curva topologicamente mais próxima da obtida por Monte Carlo. Nestes dois casos aparecem praticamente as mesmas fases que, embora em intervalos de temperatura diferentes, dão o mesmo decréscimo monotônico de  $q$  com o aumento de  $T$ , o qual não é observado em campo médio simples.

Este é um resultado muito importante, pois mostra que a introdução de flutuações na aproximação de campo médio afeta a estabilidade de certas fases moduladas tornando os resultados mais próximos das previsões de Monte Carlo, que costumam coincidir muito bem com os resultados exatos.

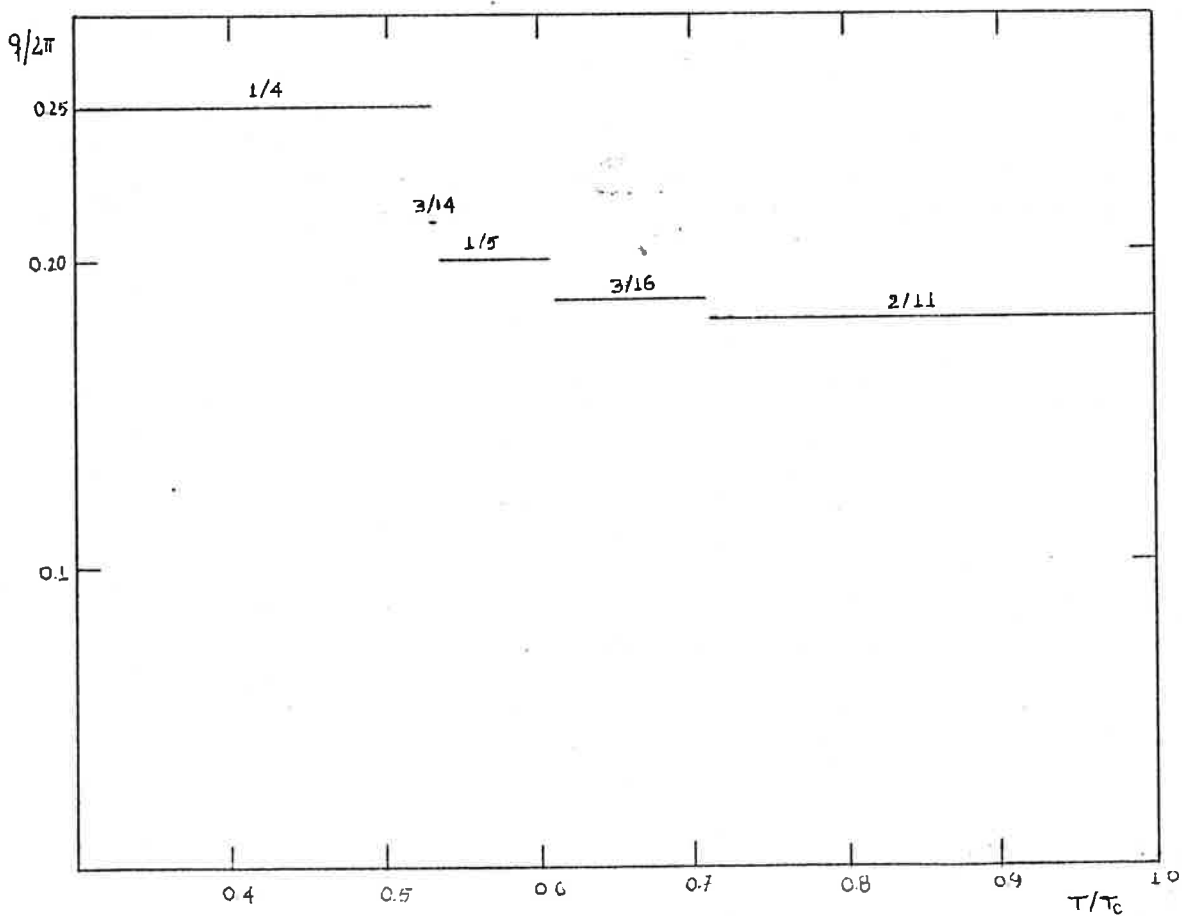


FIGURA 7(a) - O vetor de onda versus a temperatura reduzida, para  $p = 0.6$ , obtido através de cálculos de campo médio com pares. Para este caso  $\frac{kT_c}{J_1} \approx 4.9$ .

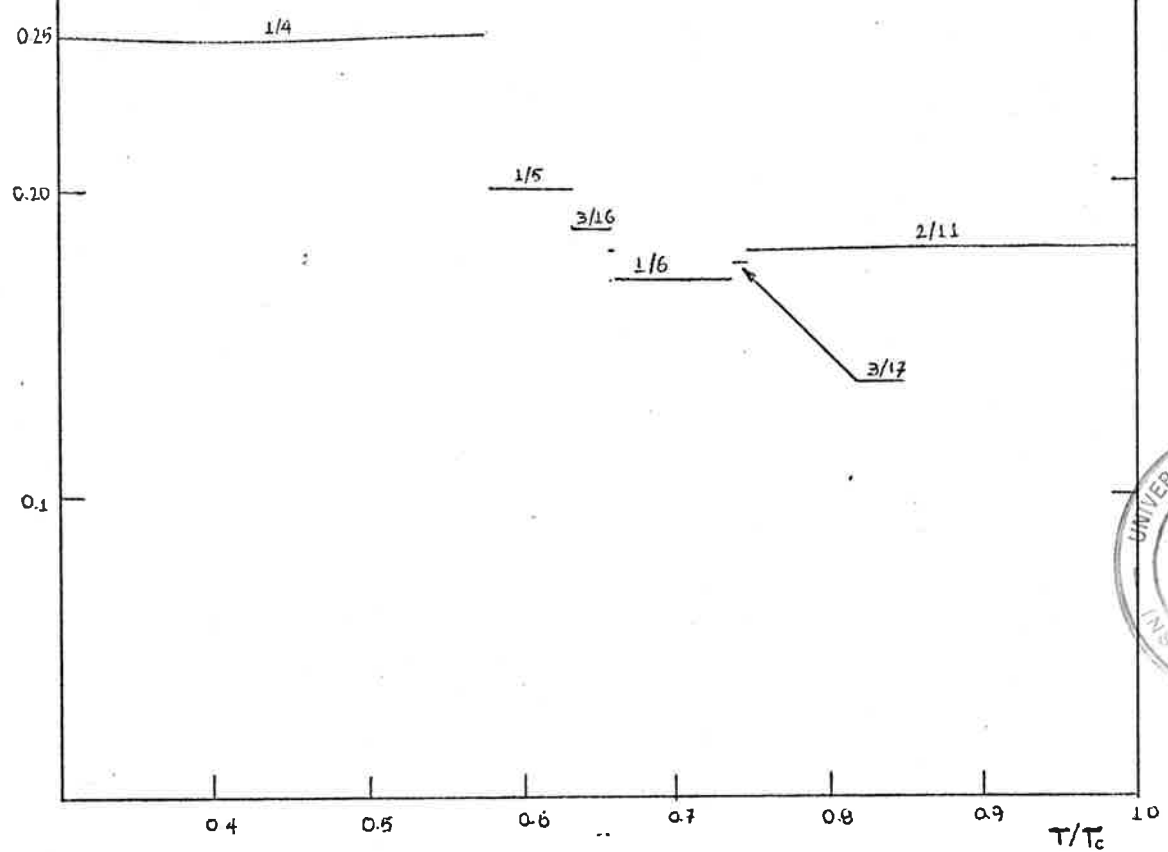


FIGURA 7(b) - A curva do vetor de onda versus a temperatura reduzida, para  $\rho = 0.6$ , obtida a partir de cálculos de campo médio simples da referência (17), tal que  $\frac{kT_c}{J_1} \approx 5.2$ .

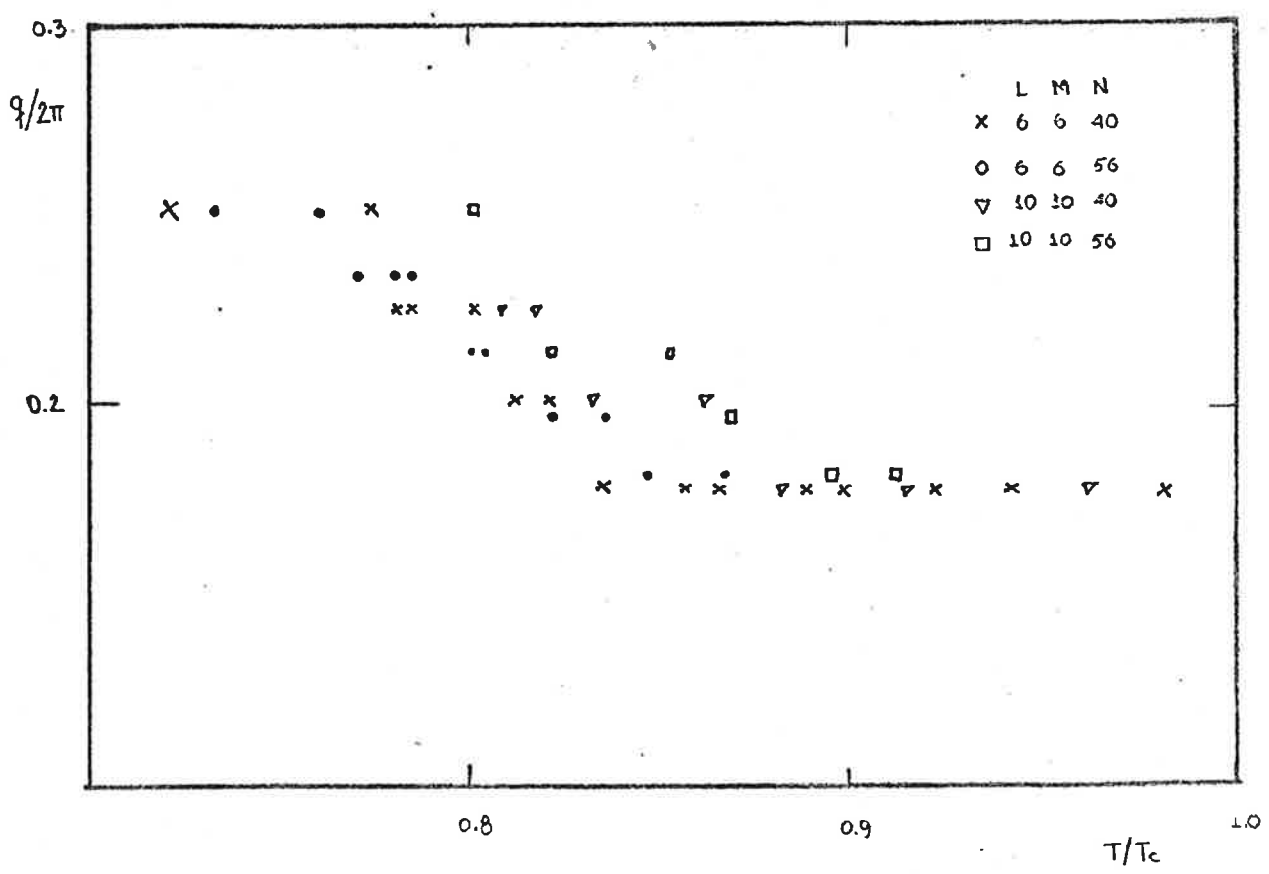


FIGURA 7(c) - Curva do vetor de onda versus  $T/T_c$  obtida através de dados de Monte Carlo par um sistema de  $L \times M \times N$  spins na referência (14), tal que  $\frac{kT_c}{J_1} = 3.63$ .

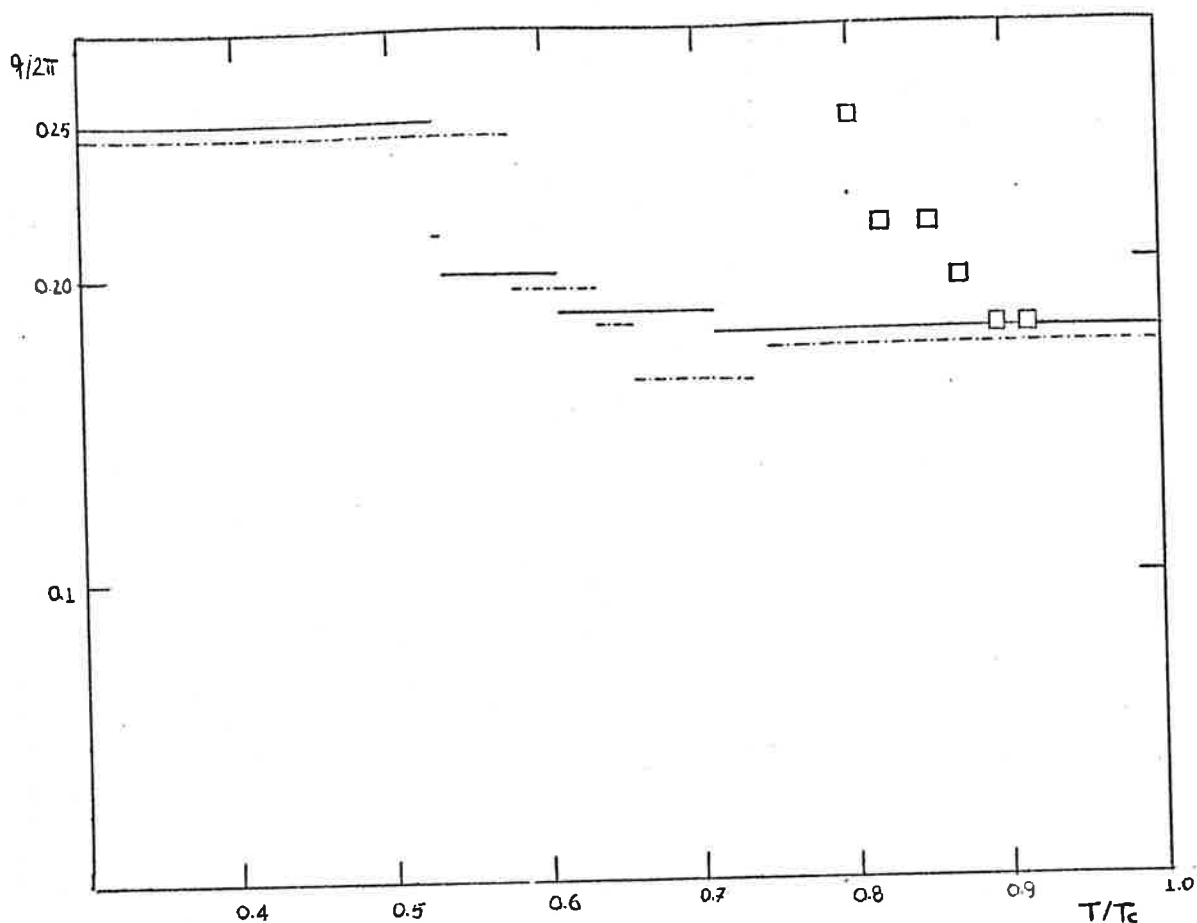


FIGURA 8 - Curva de  $q/2\pi \times T/T_c$  : □□□ denota as amostragens de Monte Carlo da figura 7(c); — denota os resultados de campo médio com pares e --- os resultados de campo médio simples.

Desenhamos a partir de cálculos para alguns valores de  $p$  algumas fases moduladas no diagrama  $T-p$  da figura 9. Este diagrama foi calculado na aproximação de campo médio simples na referência (15) e está esboçado na figura 10.

Comparando as figuras 9 e 10 vemos que, na nossa aproximação de campo médio com pares, além das linhas paramagnéticas se deslocarem para baixo em relação às linhas calculadas por campo médio simples (veja figura 6), as linhas de transição dentro da região modulada também se deslocam para baixo em relação às de campo médio simples, implicando num deslocamento das fases moduladas. Para ver este efeito mais claramente observe a figura 11, onde são desenhadas a fase com vetor de onda  $q/2\pi = 2/11$  para os dois casos.

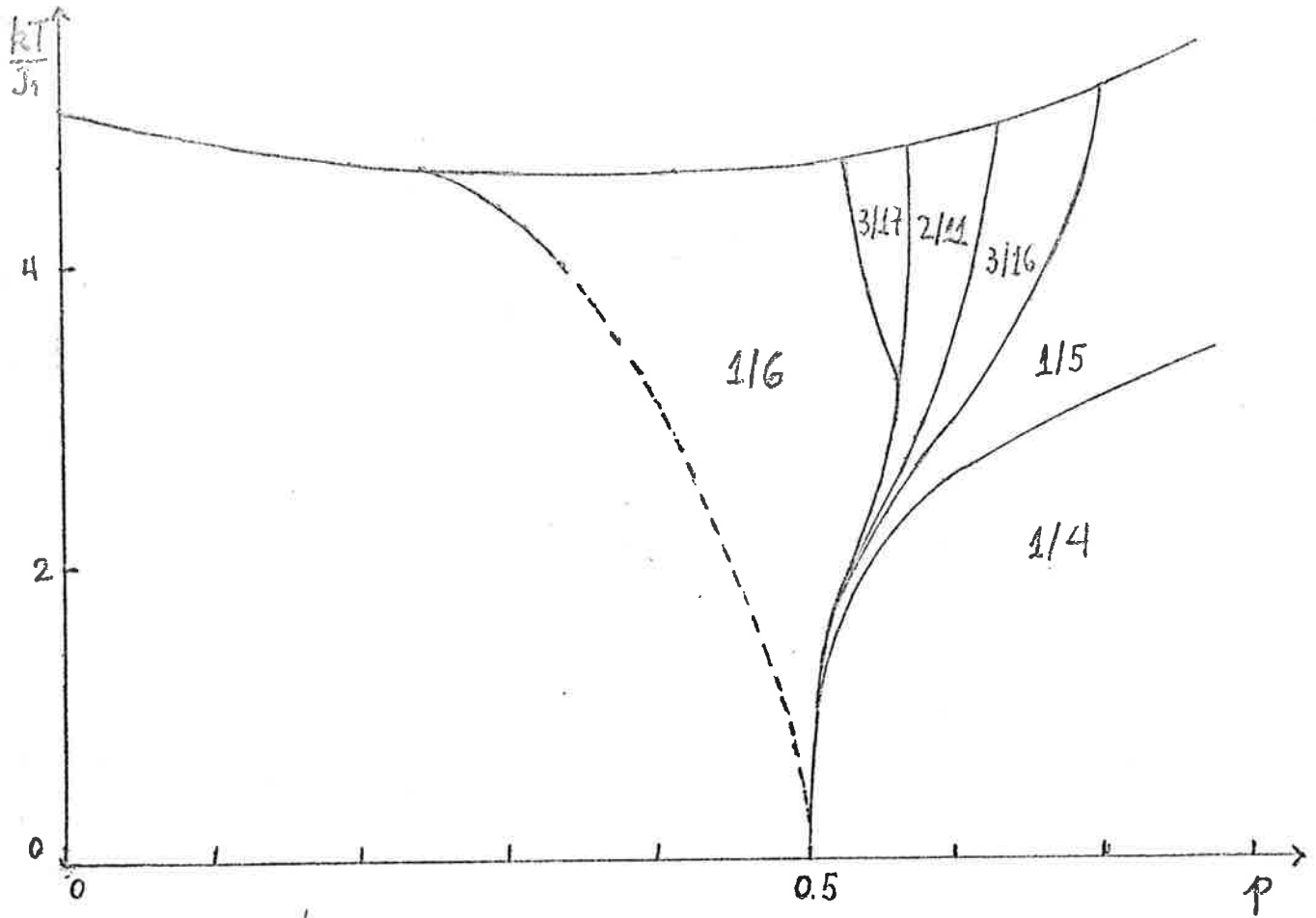


FIGURA 9 - Diagrama de fases construído com base nos cálculos numéricos com pares.

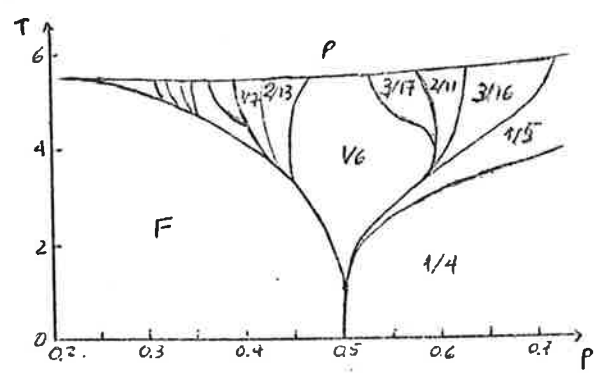


FIGURA 10 - Diagrama de fases construído com base nos cálculos numéricos de campo médio simples (referência (15)).



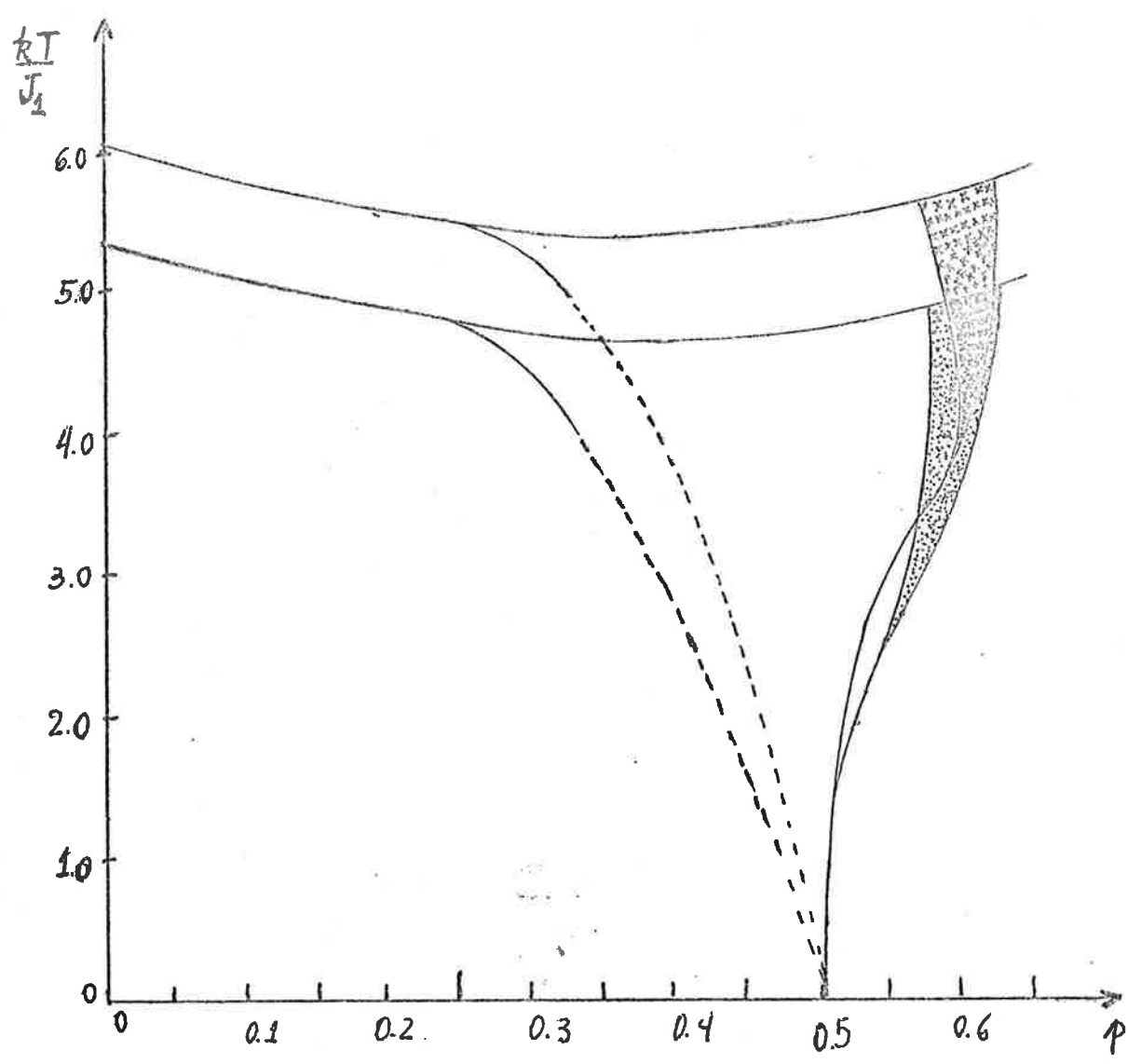


FIGURA 11 - A fase  $q/2\pi = 2/11$  desenhada para o caso de campo médio com pares  $\bar{e}$  assinalada por ... e para o caso de campo médio simples por xxxxxxxx.

## CAPÍTULO V

### EQUAÇÕES DE CAMPO MÉDIO COM PARES E QUADRADOS

Incluiremos agora, além de pares, quadrados de spins interagentes nos planos  $xy$  como mostra a figura 12 abaixo.

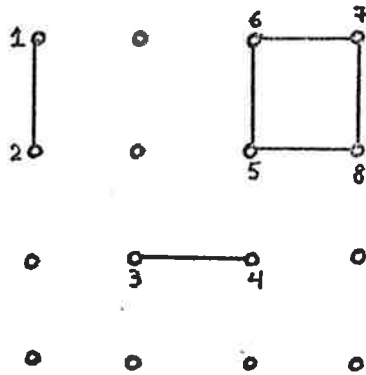


FIGURA 12 - Quadrados e pares de spins interagentes nos planos  $xy$ .

Seja  $n_2$  o número de pares como (1,2) ou (3,4),  $n_4$  o número de quadrados como (5,6,7,8) e  $n_1$  o número de spins livres. Desta mesma maneira  $N^2 = n_1 + 2n_2 + 4n_4$ .

Como em (II) usaremos a desigualdade Bogoliubov da da por (II.1). O hamiltoniano de tentativa vai ser da forma (II.4) s̄o que agora inclui um novo termo devido aos quadrados, que ẽ da do por

$$-J_1 \left\{ \sigma_{x,y,z} \sigma_{x,y+1,z} + \sigma_{x,y,z} \sigma_{x+1,y,z} + \sigma_{x+1,y,z} \sigma_{x+1,y+1,z} + \right. \\ \left. \sigma_{x,y+1,z} \sigma_{x+1,y+1,z} \right\} - \eta_z^{(4)} \left\{ \sigma_{x,y,z} + \sigma_{x,y+1,z} + \sigma_{x+1,y,z} + \right. \\ \left. + \sigma_{x+1,y+1,z} \right\} \quad (V.1)$$

sendo  $\eta_z^{(1)}$ ,  $\eta_z^{(2)}$  e  $\eta_z^{(4)}$  parâmetros a serem determinados como no capítulo II.

A energia livre associada com  $\mathcal{H}_0$  serã,

$$G_0(\mathcal{H}_0) = -kT n_1 \int_{\mathbb{Z}} \ln \left( 2 \cosh \beta \eta_z^{(1)} \right) - kT n_2 \int_{\mathbb{Z}} \ln \left\{ 2 e^{\beta J_1} \cosh 2\beta \eta_z^{(2)} + \right. \\ \left. 2 e^{-\beta J_1} \right\} - kT n_4 \int_{\mathbb{Z}} \ln \left\{ 2 e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + \right. \\ \left. 8 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + 2 e^{-4\beta J_1} + 4 \right\}, \quad (V.2)$$

onde os dois primeiros termos do lado direito desta equaçã são idênticos àqueles calculados em (II.6) e o último termo diz respeito à contribuição dos quadrados. O valor médio do spin no pla no xy,  $m_z$ , devido aos quadrados vai ser dado por:

$$m_z = \frac{1}{4\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_z^{(4)}} \ln \left\{ 2 e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 8 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + 2 e^{-4\beta J_1} + 4 \right\}$$

$$\frac{e^{4\beta J_1} \sinh 4\beta \eta_z^{(4)} + 2 \sinh 2\beta \eta_z^{(4)}}{e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 4 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + e^{-4\beta J_1} + 2} \quad (V.3)$$

## CAPÍTULO V

### EQUAÇÕES DE CAMPO MÉDIO COM PARES E QUADRADOS

Incluiremos agora, além de pares, quadrados de spins interagentes nos planos  $xy$  como mostra a figura 12 abaixo.

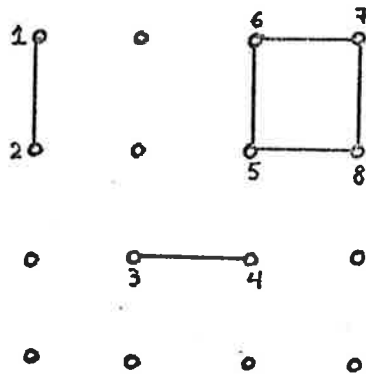


FIGURA 12 - Quadrados e pares de spins interagentes nos planos  $xy$ .

Seja  $n_2$  o número de pares como (1,2) ou (3,4),  $n_4$  o número de quadrados como (5,6,7,8) e  $n_1$  o número de spins livres. Desta mesma maneira  $N^2 = n_1 + 2n_2 + 4n_4$ .

Como em (II) usaremos a desigualdade Bogoliubov dada por (II.1). O hamiltoniano de tentativa vai ser da forma (II.4) s̄o que agora inclui um novo termo devido aos quadrados, que ẽ da do por

$$-J_1 \left\{ \sigma_{x,y,z} \sigma_{x,y+1,z} + \sigma_{x,y,z} \sigma_{x+1,y,z} + \sigma_{x+1,y,z} \sigma_{x+1,y+1,z} + \sigma_{x,y+1,z} \sigma_{x+1,y+1,z} \right\} - \eta_z^{(4)} \left\{ \sigma_{x,y,z} + \sigma_{x,y+1,z} + \sigma_{x+1,y,z} + \sigma_{x+1,y+1,z} \right\} \quad (V.1)$$

sendo  $\eta_z^{(1)}$ ,  $\eta_z^{(2)}$  e  $\eta_z^{(4)}$  parâmetros a serem determinados como no capítulo II.

A energia livre associada com  $H_0$  serã,

$$G_0(H_0) = -kT n_1 \sum_z \ln ( 2 \cosh \beta \eta_z^{(1)} ) - kT n_2 \sum_z \ln \left\{ 2 e^{\beta J_1} \cosh 2\beta \eta_z^{(2)} + 2 e^{-\beta J_1} \right\} - kT n_4 \sum_z \ln \left\{ 2 e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 8 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + 2 e^{-4\beta J_1} + 4 \right\}, \quad (V.2)$$

onde os dois primeiros termos do lado direito desta equaçã são idênticos àqueles calculados em (II.6) e o último termo diz respeito à contribuição dos quadrados. O valor médio do spin no plano xy,  $m_z$ , devido aos quadrados vai ser dado por:

$$m_z = \frac{1}{4\beta} \frac{\partial}{\partial \eta_z^{(4)}} \ln \left\{ 2 e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 8 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + 2 e^{-4\beta J_1} + 4 \right\} = \frac{e^{4\beta J_1} \sinh 4\beta \eta_z^{(4)} + 2 \sinh 2\beta \eta_z^{(4)}}{e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 4 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + e^{-4\beta J_1} + 2} \quad (V.3)$$

e deve obedecer à condição de uniformidade no plano  $xy$ , ou seja (V.3) deve se igualar ao valor médio do spin calculado a partir de spins livres dado por (II.8.a) e também a (II.8.b) que diz respeito ao valor médio do spin calculado a partir de pares de spins,

$$m_z = \tanh \beta \eta_z^{(1)} = \frac{\sinh 2\beta \eta_z^{(2)}}{\cosh 2\beta \eta_z^{(2)} + e^{-2\beta J_1}} =$$

$$= \frac{e^{4\beta J_1} \sinh 4\beta \eta_z^{(4)} + 2 \sinh 2\beta \eta_z^{(4)}}{e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 4 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + e^{-4\beta J_1} + 2} \quad (V.4)$$

A média  $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$  pode ser calculada facilmente usando (V.4) e  $\phi(T, N; \eta_z^{(1)}; \eta_z^{(2)}; \eta_z^{(4)})$  vai ser dada por:

$$\phi \equiv G_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -kT N^2 \int_{\mathcal{J}} \ln \left\{ 2 \cosh \beta \eta_z^{(1)} \right\} -$$

$$kT n_2 \int_{\mathcal{J}} \ln \left\{ \frac{2 e^{\beta J_1} \cosh 2\beta \eta_z^{(2)} + 2 e^{-\beta J_1}}{(2 \cosh \beta \eta_z^{(1)})^2} \right\} -$$

$$kT n_4 \int_{\mathcal{J}} \ln \left\{ 2 e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 8 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + \right.$$

$$2 e^{4\beta J_1} + 4 \left. \right\} - J_1 (2N^2 - n_2 - 4n_4) \int_{\mathcal{J}} m_z^2 -$$

$$J_1 \frac{N^2}{2} \int_{\mathcal{J}} m_z (m_{z-1} + m_{z+1}) - J_2 \frac{N^2}{2} \int_{\mathcal{J}} m_z (m_{z-2} +$$

$$m_{z+2}) + \int_{\mathcal{J}} \left\{ \eta_z^{(1)} (N^2 - 2n_2 - 4n_4) + 2n_2 \eta_z^{(2)} + \right.$$

$$\left. + 4n_4 \eta_z^{(4)} \right\} m_z. \quad (V.5)$$

Minimizando  $\phi$  com respeito a  $m_z$  obtemos:

$$\eta_z^{(1)} (N^2 - 2n_2 - 4n_4) + 2n_2 \eta_z^{(2)} + 4n_4 \eta_z^{(4)} = N^2 J_1 (m_{z+1} + m_{z-1}) + N^2 J_2 (m_{z-2} + m_{z+2}) + J_1 (2N^2 - n_2 - 4n_4) 2m_z. \quad (V.6)$$

A escolha do número ideal de pares e quadrados será feita como no capítulo II. A expansão de  $\phi/N^3$  para  $\beta J_1 \rightarrow 0$ , agora, vai resultar na seguinte expressão:

$$\frac{\Phi}{N^3} = kT \left\{ \ln 2 + (\beta J_1)^2 \left( \frac{n_2}{2N^2} + \frac{2n_4}{N^2} \right) + \frac{(\beta J_1)^4}{4!} \left( -\frac{2n_2}{N^2} + \frac{16n_4}{N^2} \right) + \dots \right\} \quad (V.7)$$

Comparando (V.7) com a série de altas temperaturas da energia livre exata  $G/N^2$  dada em (II.11), temos:

$$n_4 = N^2$$

e

(V.8)

$$n_2 = -2N^2$$

Assim a equação de minimização (V.6) pode ser escrita como:

$$\eta_z^{(1)} - 4\eta_z^{(2)} + 4\eta_z^{(4)} = J_1 (m_{z-1} + m_{z+1}) + J_2 (m_{z-2} + m_{z+2}) \quad (V.9)$$

Usando (V.4), (V.5), (V.8) e (V.9) podemos escre-

ver a energia livre de Gibbs como

$$\begin{aligned}
 N^{-3} G(T, N; m_z) &= kT \ln 2 - \frac{3}{2} kT \sum_j \ln \left\{ 1 - m_z^2 \right\} + \\
 &2kT \sum_j \ln \left\{ e^{-\beta J_1} \left( 1 + \sqrt{e^{4\beta J_1} + m_z^2 (1 - e^{4\beta J_1})} \right) \right\} - \\
 &kT \sum_j \ln \left\{ 2 e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 8 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + 2 e^{-4\beta J_1} + \right. \\
 &\left. 4 \right\} + \frac{J_1}{2} \sum_j (m_{j+1} + m_{j-1}) + \frac{J_2}{2} \sum_j (m_{j+2} + m_{j-2}),
 \end{aligned}
 \tag{V.10}$$

$$\text{com } m_z = \frac{e^{4\beta J_1} \sinh 4\beta \eta_z^{(4)} + 2 \sinh 2\beta \eta_z^{(4)}}{e^{4\beta J_1} \cosh 4\beta \eta_z^{(4)} + 4 \cosh 2\beta \eta_z^{(4)} + e^{-4\beta J_1} + 2}
 \tag{V.11}$$

$$\begin{aligned}
 e \quad \beta \eta_z^{(4)} &= \frac{1}{2} \ln \left\{ \left( e^{-2\beta J_1} m_z + \sqrt{1 + m_z^2 (e^{-4\beta J_1} - 1)} \right) / (1 - m_z) \right\} \\
 &- \frac{1}{8} \ln \left\{ (1 + m_z) / (1 - m_z) \right\} + \frac{\beta}{4} \left\{ J_1 (m_{j-1} + \right. \\
 &\left. m_{j+1}) + J_2 (m_{j-2} + m_{j+2}) \right\}.
 \end{aligned}
 \tag{V.12}$$

Na expressão (V.10), a equação de consistência (V.4) foi usada para escrever os parâmetros  $\eta_z^{(1)}$  e  $\eta_z^{(2)}$  em termos de  $m_z$ , enquanto  $\eta_z^{(4)}$  dado em (V.12), está simplesmente escrito co função de  $\eta_z^{(1)}$  e  $\eta_z^{(2)}$  através da equação de minimização (V.9), pois verificamos que  $\eta_z^{(4)}$  não pode ser escrito explicitamente co-



mo função de  $m_z$  através de (V.3).

O valor médio do spin no plano  $xy$ ,  $m_z$ , é dado pelo sistema de equações acopladas (V.11), tal que  $\beta n_z^{(4)}$  é dado por (V.12).

## CAPÍTULO VI

### CÁLCULO DAS LINHAS DE TRANSIÇÃO NA APROXIMAÇÃO COM QUADRADOS E PARES

#### A. AS LINHAS $T_0(p)$ e $T_\lambda(p)$

A transição entre a fase desordenada,  $m_z = 0$ , e as fases ordenadas é determinada, como no capítulo III, fazendo uma aproximação assintótica para  $m_z$ , perto da transição de fase. Assim, podemos escrever de (V.11) e (V.12),

$$\begin{aligned} J_1 (m_{j-1} + m_{j+1}) + J_2 (m_{j-2} + m_{j+2}) \sim \frac{1}{\beta} m_j - \frac{2}{\beta} (1 + e^{-2\beta J_1}) m_j \\ + \frac{1}{\beta} \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)}{(1 + e^{4\beta J_1})} m_j \end{aligned} \quad (\text{VI.1})$$

Escrevendo  $m_z$  na representação de Fourier como em (III.2) e substituindo em (VI.1) obtemos,

$$m_q \sim \beta \left\{ \frac{1 + e^{4\beta J_1}}{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5} \right\} J(q) m_q \quad (\text{VI.2})$$

onde  $J(q) = 2J_1 \cos q + 2J_2 \cos 2q$ . Procedendo como no capítulo III devemos resolver a equação,

$$\frac{kT_c \left( e^{-4J_1/kT_c} - 2 \left( e^{-2J_1/kT_c} + e^{2J_1/kT_c} \right) + 5 \right)}{\left( 1 + e^{4J_1/kT_c} \right)} = \max_q (J(q)) \quad (\text{VI.3})$$

A condição de maximização de  $J(q)$  dá as soluções  $q_c = 0, \pi$  e  $\cos^{-1}(1/4p)$ .

Para  $p < 1/4$  o sistema está na fase ferromagnética ( $q_c = 0$ ) e a linha  $T_0(p)$  é dada por:

$$\frac{kT_0}{J_1} \left\{ \frac{e^{-4J_1/kT_0} - 2 \left( e^{-2J_1/kT_0} + e^{2J_1/kT_0} \right) + 5}{1 + e^{4J_1/kT_0}} \right\} = \frac{3}{2} - 2\Delta p \quad (\text{VI.4})$$

Para  $p > 1/4$  temos a fase modulada. A linha de transição modulada-paramagnética,  $T_\lambda(p)$ , é dada por,

$$\frac{kT_\lambda}{J_1} \left\{ \frac{e^{-4J_1/kT_\lambda} - 2 \left( e^{-2J_1/kT_\lambda} + e^{2J_1/kT_\lambda} \right) + 5}{1 + e^{4J_1/kT_\lambda}} \right\} = \frac{kT_0}{J_1} \left\{ \frac{e^{-4J_1/kT_0} - 2 \left( e^{-2J_1/kT_0} + e^{2J_1/kT_0} \right) + 5}{1 + e^{4J_1/kT_0}} \right\} + 16\Delta p^2 + o(\Delta p^3).$$

O encontro das linhas  $T_0(p)$  e  $T_\lambda(p)$ , dadas por (VI.4) e (VI.5) respectivamente, acontece para  $\Delta p = 0$ , no ponto de Lifshitz, com a temperatura de Lifshitz  $T_L$  dada por,

$$\frac{k T_L}{J_1} \left\{ \frac{e^{-4J_1/k T_L} - 2 \left( e^{-2J_1/k T_L} + e^{2J_1/k T_L} \right) + 5}{1 + e^{4J_1/k T_L}} \right\} =$$

$$= 3/2$$

(VI.6)

Verificamos também que as linhas  $T_0$  e  $T_\lambda$  se encontram tangencialmente no ponto de Lifshitz.

#### B. ANÁLISE DOS HARMÔNICOS SUPERIORES, CÁLCULO DA LINHA $T_1(p)$

Procedendo da mesma maneira que no capítulo III-B, perto da transição  $m_z$  é pequeno e podemos expandir (V.11) e (V.12), obtendo:

$$\beta \left\{ J_1 (m_{j-1} + m_{j+1}) + J_2 (m_{j-2} + m_{j+2}) \right\} =$$

$$m_j \left\{ 1 - 2(1 + e^{-2\beta J_1}) + \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)}{(1 + e^{4\beta J_1})} \right\} +$$

$$\frac{m_j^3}{3J} \left\{ 1 - (1 + e^{-2\beta J_1})^2 (2 - e^{-2\beta J_1}) - \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)^2}{2(1 + e^{4\beta J_1})^4} \times \right.$$

$$\left. [ (e^{4\beta J_1} + 1/4)(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6) - 3(1 + e^{4\beta J_1})^2 ] \right\} +$$

(VI.7)

Considerando  $m_z$  numa s\u00e9rie de Fourier como em (III.13) e substituindo em (VI.7) temos:

$$M_1 \approx \pm 2 \left\{ \frac{1 - \frac{T}{T_\lambda} \left[ e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5 \right] / [1 + e^{4\beta J_1}]}{T_\lambda \left[ e^{-4\beta_\lambda J_1} - 2(e^{-2\beta_\lambda J_1} + e^{2\beta_\lambda J_1}) + 5 \right] / [1 + e^{4\beta_\lambda J_1}]} \right\}^{1/2} \times$$

$$\left\{ \frac{[e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5]}{(1 + e^{4\beta J_1})} \right\} \times \left\{ 1 - (1 + e^{-2\beta J_1})^2 \right.$$

$$\left. (2 - e^{-2\beta J_1}) - \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)^2}{2(1 + e^{4\beta J_1})^4} \left[ (e^{4\beta J_1} + 1/4)(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6) - 3(1 + e^{4\beta J_1})^2 \right] \right\}^{-1/2}$$

(VI.8)

com  $\beta_\lambda = \frac{1}{k T_\lambda}$

Na se\u00e7\u00e3o B do cap\u00edtulo III verificou-se que no c\u00e1lculo assint\u00f3tico da energia livre n\u00e3o \u00e9 necess\u00e1rio o c\u00e1lculo dos coeficientes  $M_3, M_5, \dots$  da expans\u00e3o em s\u00e9rie de Fourier (III-3). Assim, por analogia, estes coeficientes n\u00e3o foram calculados para este caso.

Expandindo a energia livre (V.10), com  $\beta n_z^{(4)}$  dado por (V.12), em s\u00e9rie de  $m_z$ , perto da linha  $\lambda$ , obtemos:

$$\begin{aligned}
N^{-3}(G-G') &= \frac{kT}{N} \left\{ \frac{3}{2} - (1 - e^{-2\beta J_2}) - \frac{(e^{4\beta J_2} + e^{-4\beta J_2} + 6)}{2(e^{4\beta J_2} + 1)} \right\} \left[ \sum_{\mathcal{Z}} m_{\mathcal{Z}}^2 \right] + \\
&\frac{kT}{4N} \left\{ 3 - (e^{-2\beta J_1} - 1)^2 (2 - e^{-2\beta J_2}) + (e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)^2 \right. \\
&\left. \left[ (e^{4\beta J_1} + 1/4) (e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6) - 3(e^{4\beta J_1} + 1)^2 \right] \right. \\
&\left. \left[ 2(1 + e^{4\beta J_1})^4 \right]^{-1} \right\} \left[ \sum_{\mathcal{Z}} m_{\mathcal{Z}}^4 + \dots + \frac{J_1}{2N} \sum_{\mathcal{Z}} m_{\mathcal{Z}}^2 \right] + \\
&(m_{\mathcal{Z}-1} + m_{\mathcal{Z}+1}) + \frac{J_2}{2N} \sum_{\mathcal{Z}} m_{\mathcal{Z}} (m_{\mathcal{Z}-2} + m_{\mathcal{Z}+2})
\end{aligned}$$

(VI.9)

onde  $G' = kT \ln 2 + \ln \left\{ e^{\beta J_1} (1 + e^{-2\beta J_2}) / 2(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6) \right\}$ .

Para a fase modulada, substituindo (VI.8) em (VI.9) temos a expressão assintótica para a energia livre dada por

$$\begin{aligned}
N^{-3}(G^{(m)} - G') &\sim -\frac{kT}{2} \left\{ \frac{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5}{1 + e^{4\beta J_1}} \right\} \\
&\left\{ \frac{1 - T \left[ \frac{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5}{T_{\lambda} \left[ \frac{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5}{1 + e^{4\beta J_1}} \right]} \right]}{1 + e^{4\beta J_1}} \right\}^2 \\
&\left\{ \frac{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5}{e^{4\beta J_1} + 1} \right\} \left\{ e^{-6\beta J_1} - 3e^{-2\beta J_1} - \right. \\
&\left. 1 - \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)^2}{2(1 + e^{4\beta J_1})^4} \left[ (e^{4\beta J_1} + 1/4) (e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6) - \right. \right. \\
&\left. \left. - 3(e^{4\beta J_1} + 1)^2 \right] \right\}^{-1}
\end{aligned}$$

(VI.10)

Para a fase ferromagnética,  $m_z = m$  e (VI.9) é escrito como,

$$\begin{aligned}
 N^{-3} (G - G') \approx & \frac{1}{2} k T \left\{ \frac{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5}{(1 + e^{4\beta J_1})} \right\} \left\{ 1 - \right. \\
 & \left. \frac{T [(e^{4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5) / (1 + e^{4\beta J_1})]}{T_0 [(e^{-4\beta_0 J_1} - 2(e^{-2\beta_0 J_1} + e^{2\beta_0 J_1}) + 5) / (1 + e^{4\beta_0 J_1})]} \right\} m^2 + \\
 & \frac{1}{4} k T \left\{ 3 - (e^{-2\beta J_1} - 1)^2 (2 - e^{-2\beta J_1}) + \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)^2}{2(e^{4\beta J_1} + 1)^4} \times \right. \\
 & \left. [(e^{4\beta J_1} + 1/4)(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6) - 3(e^{4\beta J_1} + 1)^2] \right\} m^4 + \dots
 \end{aligned}$$

(VI.11)

$$\text{com, } \beta_0 = \frac{1}{k T_0}$$

Usando de novo a equação de minimização (V.9) com

$m_z = m$  temos

$$\begin{aligned}
 m \approx & \pm \sqrt{3} \left\{ 1 - \frac{T [e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5] / [1 + e^{4\beta J_1}]}{T_0 [e^{-4\beta_0 J_1} - 2(e^{-2\beta_0 J_1} + e^{2\beta_0 J_1}) + 5] / [1 + e^{4\beta_0 J_1}]} \right\}^{1/2} \\
 & \left\{ (e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5) / (1 + e^{4\beta J_1}) \right\}^{1/2} \times \\
 & \left\{ 1 - (1 + e^{-2\beta J_1})^2 (2 - e^{-2\beta J_1}) - \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)^2}{2(e^{4\beta J_1} + 1)^4} \left[ (e^{4\beta J_1} + 1/4)(e^{4\beta J_1} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + e^{-4\beta J_1} + 6) - 3(e^{4\beta J_1} + 1)^2 \right] \right\}^{-1/2}
 \end{aligned}$$

(VI.12)

Substituindo (VI.12) em (VI.11), a energia livre na fase ferromagnética é dada assintoticamente por

$$\begin{aligned}
N^{-3} (G^{(f)} - G^{(i)}) &\sim -\frac{3}{4} kT \left\{ \frac{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5}{1 + e^{4\beta J_1}} \right\} \times \\
&\left\{ \frac{1 - T \left[ (e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5) / (1 + e^{4\beta J_1}) \right]}{T_0 \left[ (e^{-4\beta_0 J_1} - 2(e^{-2\beta_0 J_1} + e^{2\beta_0 J_1}) + 5) / (1 + e^{4\beta_0 J_1}) \right]} \right\}^2 \times \\
&\left\{ \frac{e^{-4\beta J_1} - 2(e^{-2\beta J_1} + e^{2\beta J_1}) + 5}{1 + e^{4\beta J_1}} \right\} \left\{ e^{-6\beta J_1} - 3e^{-2\beta J_1} - 1 - \right. \\
&\left. \frac{(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6)^2}{2(1 + e^{4\beta J_1})^4} \left[ (e^{4\beta J_1} + 1/4)(e^{4\beta J_1} + e^{-4\beta J_1} + 6) - \right. \right. \\
&\left. \left. - 3(e^{4\beta J_1} + 1)^2 \right] \right\}^{-1}
\end{aligned}$$

(VI.13)

Na transição  $G^{(f)} = G^{(m)}$ , logo a linha de transição ferromagnética-modulada,  $T_1(p)$ , perto do ponto de Lifshitz é dada por

$$\begin{aligned}
\frac{kT_1}{J_1} \left\{ \frac{e^{-4J_1/kT_1} - 2(e^{-2J_1/kT_1} + e^{2J_1/kT_1}) + 5}{(1 + e^{4J_1/kT_1})} \right\} &\approx \\
\frac{kT_0}{J_1} \left\{ \frac{e^{-4J_1/kT_0} - 2(e^{-2J_1/kT_0} + e^{2J_1/kT_0}) + 5}{(1 + e^{4J_1/kT_0})} \right\} &- \\
-(2 + \sqrt{6}) 16 \Delta p^2 &
\end{aligned}$$

(VI.14)

Calculamos o salto da entropia na linha  $T_1(p)$  e verificamos que esta linha continua sendo de primeira ordem.



### C. CONCLUSÕES

A partir das expressões (VI.4), (VI.5) e (VI.14) desenhamos as linhas  $T_0(p)$ ,  $T_\lambda(p)$  e  $T_1(p)$  respectivamente, e fizemos uma comparação destas curvas com as calculadas no capítulo III, na aproximação de campo médio simples (ref. (17)) e por expansão em séries de altas temperaturas (ref. (13)), como está sendo esboçado na figura 13. Observa-se que as linhas de transição  $T_0$ ,  $T_\lambda$  e  $T_1$  calculadas na aproximação de campo médio com pares e quadrados estão deslocadas de aproximadamente 1% para baixo em relação às linhas de campo médio com pares, aproximando-se mais dos resultados de séries de altas temperaturas. As mesmas características qualitativas do diagrama T-p a altas temperaturas citadas na seção C do capítulo III continuam valendo.

Assim, vemos que, à medida que mais flutuações são incluídas no hamiltoniano da tentativa  $H_0$ , os resultados de campo médio para o diagrama T-p a altas temperaturas parecem convergir para os resultados de séries de altas temperaturas. Porém, esta convergência é muito lenta e os cálculos se tornam complicados.

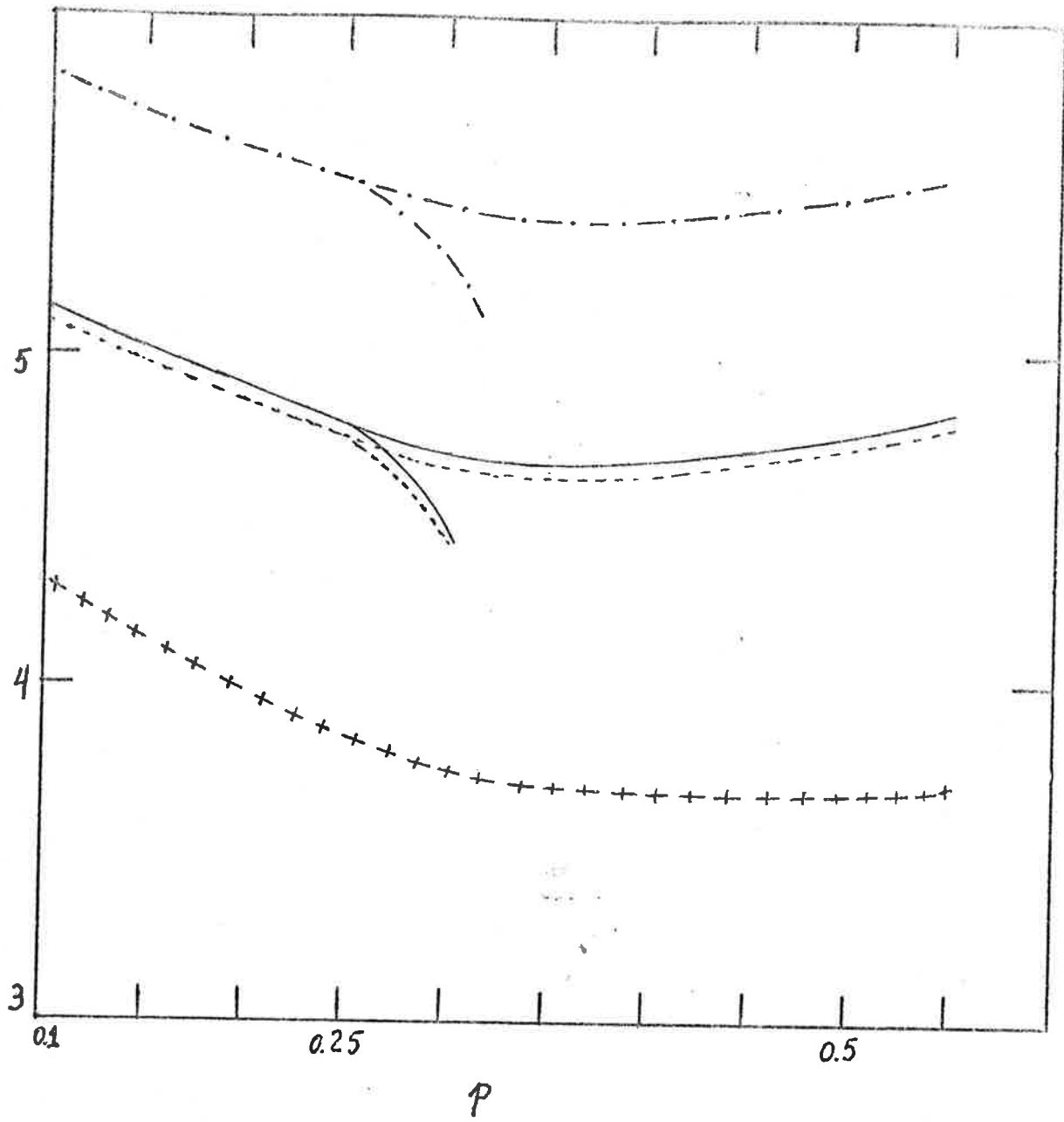


FIGURA 13 - As linhas  $T_0(p)$ ,  $T_\lambda(p)$  e  $T_1(p)$  desenhadas para  
-.-.- campo médio simples, — pares, ---- pares e  
quadrados e +++ séries de altas temperaturas.

## CAPÍTULO VII

### RESULTADOS NUMÉRICOS

(na aproximação de campo médio com pares e quadrados)

#### A. O CÁLCULO

O cálculo feito nesta seção é idêntico ao considerado em IV sendo que agora o sistema de equações acopladas a serem resolvidas é dado por (V.11) e a energia livre por spin é dada por (V.10).

#### B. RESULTADOS

Na figura 14 mostramos a curva do vetor de onda  $q/2\pi$  versus temperatura reduzida  $T/T_c$  calculada através da aproximação de campo médio com pares e quadrados e através da aproximação com pares, para a razão  $p = 0,6$ .

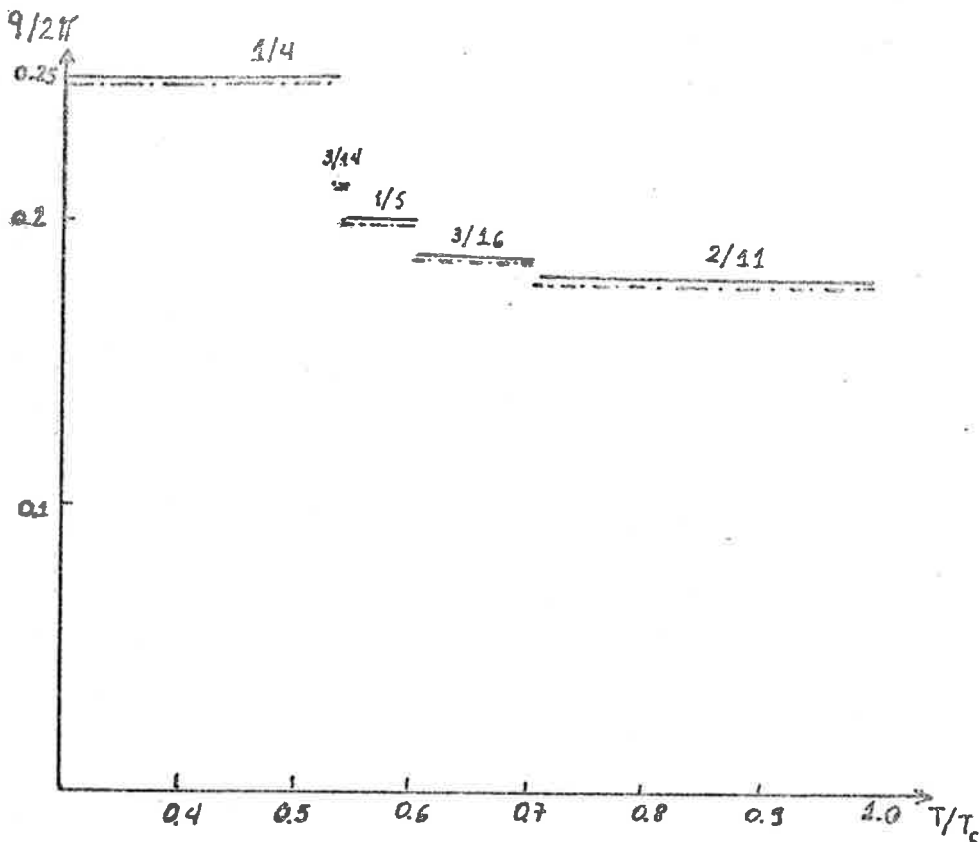


FIGURA 14 - Curvas de  $9/2\pi \times T/T_c$  para  $p=0.6$ . A curva — é calculada na aproximação com pares do capítulo IV e a curva ---- é calculada na aproximação com pares e quadrados.

A comparação dos dois resultados mostra que as fases estáveis são as mesmas, verificando-se nos dois casos o mesmo comportamento do vetor de onda com a temperatura e as mesmas comparações feitas em IV, com os resultados de campo médio simples e amostragens de Monte Carlo valem aqui. Nota-se que a temperatura de transição entre as fases é ligeiramente menor, o que não chega a afetar de uma maneira significativa a estabilidade das fases moduladas para um dado valor de  $p$ .

## CAPÍTULO VIII

### CONCLUSÃO

Neste trabalho foram feitos cálculos de campo médio incluindo algumas flutuações de spins, para prever o diagrama de fases T-p de um modelo de Ising numa rede cúbica simples, com interações ferromagnéticas  $J_1 > 0$  entre primeiros vizinhos na rede e interações competitivas antiferromagnéticas  $J_2 < 0$ , numa só direção (o chamado modelo ANNNI).

O método para tratar estas flutuações de spins na aproximação de campo médio utiliza a desigualdade de Bogoliubov, implicando na escolha de um hamiltoniano de tentativa, como está explicitado no capítulo II.

Em primeiro lugar, fizemos a aproximação de campo médio com um hamiltoniano de tentativa que leva em conta alguns pares de spins interagentes nos planos ortogonais ao eixo de anisotropia. Obtivemos as linhas do tipo  $\lambda$ : ferromagnética-paramagnética ( $T_0(p)$ ) e modulada-paramagnética ( $T_\lambda(p)$ ); a linha de

transição ferromagnética-modulada ( $T_1(p)$ ) foi obtida assintoticamente nas vizinhanças do ponto de Lifshitz. O diagrama T-p a altas temperaturas foi, então, construído na aproximação de campo médio com pares, apresentando as mesmas características qualitativas do calculado por aproximação de campo médio simples<sup>(17)</sup>. Ou seja, as linhas  $T_0$ ,  $T_\lambda$  e  $T_1$  continuam se encontrando tangencialmente no ponto de Lifshitz, para a mesma razão  $p = 0,25$ , como na aproximação simples de campo médio, e a linha  $T_1(p)$  continua sendo de primeira ordem. Quantitativamente, observamos que as linhas paramagnéticas, calculadas na aproximação de campo médio com pares, estão deslocadas 13% para baixo em relação às calculadas por campo médio simples, indo em direção das previsões de séries de altas temperaturas<sup>(13)</sup>.

Para temperaturas baixas determinamos o diagrama T-p através de cálculos numéricos, usando as equações de campo médio com pares, desenvolvidos no capítulo IV. Foi observada uma sucessão de fases moduladas comensuráveis, que correspondem ao conjunto de todos os valores possíveis de vetores de onda comensuráveis que podem ser obtidos para as condições de contorno periódicas adotadas, com período máximo  $L$  igual a 20. Notamos que algumas poucas fases preenchem quase toda a região modulada do diagrama T-p e que existem muitas fases que são estáveis em intervalos bem estreitos de temperatura. Pode ser que para periodicidades maiores as fases estáveis em intervalos grandes de temperatura não difiram das fases aqui previstas, mas que apareçam todas as possíveis fases comensuráveis, dando lugar a um possível comportamento de "escada do diabo".

Estas características básicas do diagrama T-p a baixas temperaturas já haviam sido observadas na aproximação de

campo médio simples<sup>(15,17)</sup> por amostragens de Monte Carlo<sup>(14)</sup>. Mas, como dissemos na introdução (capítulo I) a aproximação de campo médio simples, embora descreva o mesmo comportamento em de graus do vetor de onda das fases moduladas com a temperatura, não prevê exatamente as mesmas fases moduladas para um dado valor de  $p$  que são previstas pelas amostragens de Monte Carlo. Por exemplo, para  $p = 0,6$  Monte Carlo prevê um comportamento monotônico da curva do vetor de onda versus temperatura, e a aproximação de campo médio simples prevê comportamento não monotônico. Na aproximação de campo médio com pares, desenvolvida por nós, observa-se para  $p = 0,6$  um comportamento monotônico de  $q/2\pi \times T/T_c$  semelhante ao previsto por Monte Carlo.

Concluimos, portanto, que a introdução de flutuações de spins na aproximação de campo médio tornou os resultados desta aproximação melhores e veio a afetar a estabilidade de certas fases moduladas, previstas por campo médio simples, que diferiam dos resultados de Monte Carlo. Estas flutuações, como foi dito na introdução, poderiam em princípio piorar ou melhorar os resultados da aproximação de campo médio, mostraram ser um passo na direção dos resultados de séries de altas temperaturas e Monte Carlo.

Observando esta melhora na aproximação de campo médio, com a introdução de pares de spins correlacionados, fizemos nos capítulos V, VI e VII uma aproximação de campo médio que leva em conta mais flutuações de spins através de um hamiltoniano de tentativa que inclui, além de pares, quadrados de spins interagentes nos planos ortogonais ao eixo de anisotropia. Verificamos, desta maneira, que os resultados de campo médio convergem mais para os resultados de séries de altas temperaturas e Monte

Carlo, mas esta convergência é lenta. Por exemplo, as linhas paramagnéticas calculadas pela aproximação de campo médio com pares e quadrados abaixam 1% apenas em relação às calculadas na aproximação de campo médio com pares. As fases moduladas estáveis para um dado valor de  $p$  são as mesmas que aparecem na aproximação de campo médio com pares.

Acreditamos que o objetivo do nosso trabalho, de introduzir flutuações de spins na aproximação de campo médio para o modelo ANNNI, foi cumprido de uma maneira bastante satisfatória, já que os resultados se aproximam de valores presumivelmente exatos. Achamos que a introdução de mais flutuações, além das aqui tratadas, só iria complicar mais os cálculos e não trazer nenhuma contribuição significativa.



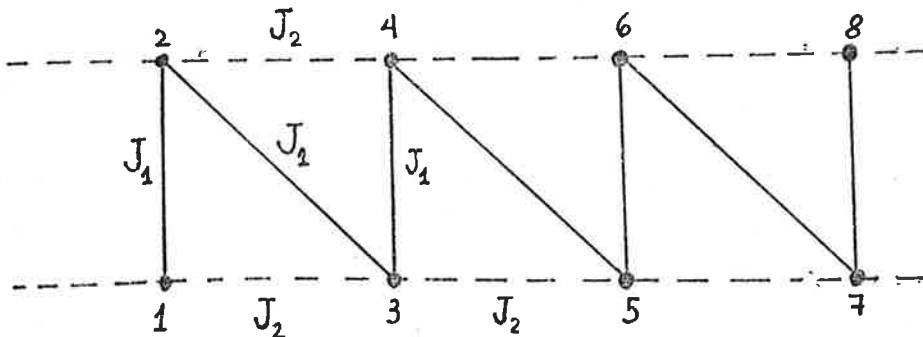
## APÊNDICE A

### O ESTADO FUNDAMENTAL

A determinação do estado fundamental do modelo ANNNI pode ser feita de uma maneira bastante simples, pois nos planos  $xy$  as interações são todas ferromagnéticas ( $J_1 > 0$ ) e o problema se reduz ao cálculo da energia do estado fundamental de um modelo de Ising em uma dimensão dado pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = - \sum_{j=1}^N \{ J_1 \sigma_j \sigma_{j+1} + J_2 \sigma_j \sigma_{j+2} \}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $\sigma_z$  corresponde a  $\sigma_{x,y,z}$  na expressão (I.3). Para determinar qual o arranjo de spins que se verifica vamos calcular a energia livre por spin. Para isto, usaremos o método da matriz de transferência, considerando uma idealização do arranjo de spins na direção  $z$ , como pode ser visto abaixo.



Este arranjo possibilita a construção de uma matriz de transferência de pares de spins, tal que um elemento de matriz é dado por,

$$T_{(\sigma_j, \sigma_{j+1}), (\sigma_{j+2}, \sigma_{j+3})} = \exp \left\{ \beta \left[ \frac{J_1}{2} (\sigma_j \sigma_{j+1} + \sigma_{j+2} \sigma_{j+3}) + J_1 \sigma_{j+1} \sigma_{j+2} + J_2 (\sigma_j \sigma_{j+2} + \sigma_{j+1} \sigma_{j+3}) \right] \right\} \quad (\text{A.2})$$

Adotando condições de contorno periódicas, temos a função de partição canônica,

$$Z = \sum_{\{\sigma_j\}} T_{(\sigma_1, \sigma_2), (\sigma_3, \sigma_4)} T_{(\sigma_3, \sigma_4), (\sigma_5, \sigma_6)} \dots T_{(\sigma_{N-1}, \sigma_N), (\sigma_2, \sigma_1)}$$

$$\text{ou, } Z = T_n T^{N/2} \quad (\text{A.3})$$

Desta forma a energia livre será,

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln T_n T^{N/2} \quad (\text{A.4})$$

Vamos, agora, construir a matriz  $T$ . De (A.2), temos a seguinte matriz  $4 \times 4$ :

$$T = \begin{bmatrix} e^{2\beta J_1 + 2\beta J_2} & e^{\beta J_1} & e^{-\beta J_1} & e^{-2\beta J_2} \\ e^{-\beta J_1} & e^{-2\beta J_1 + 2\beta J_2} & e^{-2\beta J_2} & e^{\beta J_1} \\ e^{\beta J_1} & e^{-2\beta J_2} & e^{-2\beta J_1 + 2\beta J_2} & e^{-\beta J_1} \\ e^{-2\beta J_2} & e^{-\beta J_1} & e^{\beta J_1} & e^{2\beta J_1 + 2\beta J_2} \end{bmatrix}$$

Considerando que  $J_1 > 0$  e  $J_2 < 0$  e que a temperatura zero  $\beta J_1$  se torna infinito e  $-\beta J_2$  também, podemos escrever (A.5) da seguinte forma,

$$T = \begin{bmatrix} e^{2\beta J_1 + 2\beta J_2} & e^{\beta J_1} & 0 & e^{-2\beta J_2} \\ 0 & 0 & e^{-2\beta J_2} & e^{\beta J_1} \\ e^{\beta J_1} & e^{-2\beta J_2} & 0 & 0 \\ e^{-2\beta J_2} & 0 & e^{\beta J_1} & e^{2\beta J_1 + 2\beta J_2} \end{bmatrix}$$

(A.6)

que pode ser escrita também como,

$$T = e^{\beta J_1} \begin{bmatrix} e^{\beta J_1 + 2\beta J_2} & 1 & 0 & e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} & 1 \\ 1 & e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} & 0 & 0 \\ e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} & 0 & 1 & e^{\beta J_1 + 2\beta J_2} \end{bmatrix}$$

(A.7)

Observe em (A.7) que os elementos  $T_{1,1} = T_{4,4} = (T_{1,4})^{-1} = (T_{2,3})^{-1} = (T_{3,2})^{-1} = (T_{4,1})^{-1}$ . Portanto, esta matriz pode ser escrita de duas formas: 1) o elemento  $T_{1,1} = T_{4,4}$  é relevante de modo que  $T_{1,4}$ ,  $T_{2,3}$ , ... são desprezíveis e 2) o elemento  $T_{1,4} = T_{2,3} = \dots$  é relevante de modo que  $T_{1,1} = T_{4,4}$  são

desprezíveis. Vamos desenvolver estas duas formas:

1) Para  $e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} > 1$ ,  $\beta J_1 + 2\beta J_2 < 0$  ou seja  $p > 1/2$ , temos,

$$T = e^{\beta J_1} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} \\ 0 & 0 & e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} & 1 \\ 1 & e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} & 0 & 0 \\ e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

(A.8)

Os autovalores  $\lambda$ , desta matriz são dados pela equação,

$$\lambda^4 - 2\lambda^2 \gamma^2 - 4\lambda \gamma + \gamma^4 = 0$$

, onde  $\gamma = e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2}$  (A.9)

que pode ser escrita como

$$\gamma^4 \left\{ \left( \frac{\lambda}{\gamma} \right)^4 - 2 \left( \frac{\lambda}{\gamma} \right)^2 + 1 - \frac{4\lambda}{\gamma^3} \right\} = 0 \quad (\text{A.10})$$

Assim, para calcular o autovalor máximo, o último termo de (A.10) pode ser desprezado já que  $\gamma \rightarrow \infty$  e temos que,

$$\lambda_{\max} \simeq e^{-2\beta J_2 - \beta J_1}$$

$$\text{ou } e^{\beta J_1} \lambda_{\text{max}} \approx e^{-2\beta J_2} \quad (\text{A.11})$$

Portanto, a energia livre no limite  $\beta \rightarrow \infty$  vai ser dado por (A.4) e (A.11) como:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} F / \left( \frac{N}{2} \right) = 2 J_2$$

, ou seja

$$\frac{u}{N} = J_2 \quad (\text{A.12})$$

Concluindo, neste primeiro caso,  $p > 1/2$ , observamos que o estado que se verifica é a anti-fase (2,2), pois esta fase apresenta a energia dada por (A.12).

2)  $e^{-\beta J_1 - 2\beta J_2} < 1$ ,  $\beta J_1 + 2\beta J_2 > 0$ , ou seja  $p < 1/2$  e  $T$  pode ser escrita como:

$$T = e^{\beta J_1} \begin{bmatrix} e^{\beta J_1 + 2\beta J_2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & e^{\beta J_1 + 2\beta J_2} \end{bmatrix}$$

(A.13)

Os autovalores  $\lambda$  desta matriz são determinados pela seguinte expressão:

$$(-\lambda^2 + e^{\beta J_1 + 2\beta J_2} \lambda - 1)(-\lambda^2 + e^{\beta J_1 + 2\beta J_2} \lambda + 1) = 0 \quad (\text{A.14})$$

Assim, a  $T \rightarrow 0$ , temos

$$\lambda_{\max} = e^{\beta J_1 + 2\beta J_2}$$

ou

$$\lambda_{\max} e^{\beta J_1} = e^{2\beta J_1 + 2\beta J_2}$$

(A.15)

A energia livre no limite  $\beta \rightarrow \infty$  é:

$$\frac{F}{(N/2)} = -2J_1 - 2J_2 \quad \text{ou seja} \quad \frac{U}{N} = -J_1 - J_2 \quad (\text{A.16})$$

que é a energia livre da fase ferromagnética. Portanto para  $p < 1/2$ , o estado fundamental do modelo ANNI é dado pela fase ferromagnética.

NOTAS E REFERÊNCIAS

- 1 - Para uma descrição sobre pontos multicríticos ver, por exemplo, Griffiths, R.B., artigo preparado para apresentação na "International Conference on Solid-State Phase Transformations", 10-14 de agosto de 1981, Carnegie Mellon University.
- 2 - Becerra, C.C., Shapira, Y., Oliveira, N.F. e Chang, T.S. (1980) Phys. Rev. Lett. 44, 1692.
- 3 - Hornreich, R.M., Luban, M. e Shtrikman, S. (1975) Phys. Rev. Lett. 35, 1678.
- 4 - Ver, por exemplo, Fisher, M.E. e Nelson, D.R. (1975) Ann. Phys. 91, 226.
- 5 - Landau, L.D. e Lifshitz, E.M. (1968) "Statistical Physics", Pergamon Press.
- 6 - Uma descrição dos expoentes críticos e relações de escala pode ser encontrada no livro de Ma, S.K. (1976) "Modern Theory of Critical Phenomena", W.A. Benjamin Inc.
- 7 - Michelson, A. (1977) Phys. Rev. B16, 577.
- 8 - Shapira, Y., Becerra, C.C., Oliveira, N.F. e Chang, T.S. (1981) Phys. Rev. B24, 2780.
- 9 - Veja, por exemplo, Keffer, F. (1966) em "Handbuch der Physik" editado por S. Flügge, Springer, Berlin, volume XVIII/2.

- 10 - O nome modelo ANNNI foi introduzido no artigo de Fisher, M. E. e Selke, W. (1980) Phys. Rev. Lett. 44, 1502.
- 11 - Elliott, R.J. (1961) Phys. Rev. 124, 346; modelos semelhantes foram introduzidos por Kaplan, T. (1959) Phys. Rev. 116, 888; Villain, J. (1959) J. Phys. Chem. Solids 11, 303; Yoshimori, A. (1959) J. Phys. Soc. Japan 14, 807.
- 12 - Ver, por exemplo, Smart, J.S. (1966) "Effective field theories of magnetism", W.B. Saunders Co.
- 13 - Redner, S. e Stanley, H.E. (1977) J. Phys. C10, 4765.
- 14 - Selke, W. e Fisher, M. (1979) Phys. Rev. B20, 257.
- 15 - Bak, P. e von Boehm, J. (1980) Phys. Rev. B21, 5297.
- 16 - Mandelbrot, B.B. (1977) "Fractals: Form, Change and Dimension", Freeman.
- 17 - Yokoi, C.S.O., Coutinho-Filho, M.D. e Salinas, S.R. (1981) Phys. Rev. B24, 4047; neste artigo não foi publicada inteiramente a análise de campo médio a campo nulo. A parte não publicada foi comunicada pessoalmente.
- 18 - Ferreira, L.G., Salinas, S.R. e Oliveira, M.J. (1977) Phys. Stat. Sol. (b) 83, 229.
- 19 - Falk, H. (1970) Amer. J. Phys. 38, 858.
- 20 - Rasmussen, E.B. e Knak Jensen, S.J. (1981) Phys. Rev. B24, 2744.