

Universidade Federal de Santa Catarina
Centro de Ciências Físicas e Matemáticas
Programa de Pós-Graduação em Física

Diagramas de fases do modelo de Blume-Emery-Griffiths com aperiodicidade na rede de Bethe

Sérgio Tadeu Maciel

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Física da Universidade
Federal de Santa Catarina para obtenção do
título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo H. R. Tragtenberg

Coorientador: Prof. Dr. Nilton da Silva Branco

Outubro de 2010

*A meu pai, minha mãe, minhas irmãs
e principalmente à minha esposa pelo apoio e companheirismo.*

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Marcelo Henrique Romano Tragtenberg e ao Prof. Dr. Nilton da Silva Branco por terem me orientado neste trabalho.

Aos professores da Pós-Graduação em Física da UFSC pela grande contribuição em minha formação.

Aos amigos que fiz na UFSC, Alencar Migliavaca, Júlia Parreira, Eduardo Jara, Cesar Jacob, Adriana Marin, Emerson Lapolli, Eric Silva, Maurício Girardi, Daniel Girardi e em especial ao companheiro de grupo, Maicon Saul Faria, pela sua enorme contribuição teórica e ferramental que tanto me auxiliou na produção deste trabalho.

Aos parceiros Giovani Perin Zanini (*In Memoriam*), Iduan Borges e Rodrigo Previdi Crozetta por terem me recebido e me ajudado ao chegar a Florianópolis.

Aos meus familiares pelo apoio e incentivo, sem os quais a produção deste trabalho não seria possível.

Ao apoio financeiro do CNPQ, da CAPES e da FAPESC.

Resumo

Estudamos o efeito da aperiodicidade na interação bilinear (de troca) do modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) na rede de Bethe, no limite de coordenação infinita. Foram obtidos, numericamente, os diagramas de fases para o modelo uniforme ou puro e na presença de aperiodicidade. Nesta aproximação, os diagramas podem exibir regiões de coestabilidade de fases, transições contínuas e pontos multicríticos.

A aperiodicidade foi introduzida através de dois tipos de interações que seguem sequências dadas por duas diferentes regras de substituição: duplicação de período ($A \rightarrow AB$, $B \rightarrow AA$) e triplicação de período ($A \rightarrow ABB$, $B \rightarrow AAA$). Para efeito comparativo obtivemos também alguns diagramas de fases com interações periódicas entre os spins.

Os diagramas de fases obtidos para $\frac{K}{J}$ maiores (5 e 3) têm configurações parecidas: com uma região ferromagnética F , duas paramagnéticas P_1 e P_2 , e fases de coestabilidade $P_1 + P_2$, $F + P_2$, $F + P_2 + P_1$ e $F + P_1$.

Para $\frac{K}{J}$ menores (0, $-0,15$) têm-se uma única fase paramagnética P , uma fase ferromagnética F e uma região de coestabilidade $F + P$.

Nos diagramas de fases obtidos para $\frac{K}{J} = -0,5$ obtemos uma região de coestabilidade entre duas fases ferromagnéticas $F_1 + F_2$ e um diagrama inédito com interações enfraquecidas ($r = -0,8$) em que surge uma região antiquadrupolar AQ inserida na região ferromagnética F .

Para $\frac{K}{J} = -1$ obtivemos um outro diagrama de fases inédito com fases ferromagnética F , paramagnética P , antiquadrupolar AQ e regiões de coestabilidade entre as configurações ferromagnética e antiquadrupolar ($F + AQ$) e ferrimagnética e antiquadrupolar ($FI + AQ$).

Já os diagramas de fases obtidos para $\frac{K}{J} = (-1,5, -3,0$ e $-3,5)$ diferem pelas suas formas mas possuem praticamente a mesma configuração: fases ferromagnética F , paramagnética P , antiquadrupolar AQ , ferrimagnética FI e regiões de coestabilidade $F + AQ$ e $FI + AQ$.

Abstract

We study the effect of aperiodicity in the bilinear interaction of the Blume-Emery-Griffiths (BEG) model on a Bethe lattice, at the infinite-coordination limit. We obtained the phase diagrams of the uniform model (without aperiodicity), with phase co-stability regions, continuous transitions and multicritical points.

The aperiodicity was introduced by two kinds of interaction which follow sequences given by two different substitution rules: period doubling ($A \rightarrow AB$, $B \rightarrow AA$) and period tripling ($A \rightarrow ABB$, $B \rightarrow AAA$). Periodic sequence was being utilized at some cases to compare with aperiodic sequences.

The phase diagrams obtained for bigger values of $\frac{K}{J} = (5 \text{ and } 3)$ are similar: they have one ferromagnetic region F , two paramagnetic phases P_1 and P_2 , and co-stability regions $P_1 + P_2$, $F + P_2$, $F + P_2 + P_1$ and $F + P_1$.

For $\frac{K}{J} = 0$ or $-0, 15$; we obtained phase diagrams with only one paramagnetic phase P , one ferromagnetic F and one co-stability region $F + P$.

In the case $\frac{K}{J} = -0, 5$ we obtained phase diagrams with one co-stability region $F_1 + F_2$ and a new diagram obtained for weaker interactions ($r = -0, 8$), with an antiquadrupolar region AQ inside the ferromagnetic phase F .

We obtained another new phase diagram to $\frac{K}{J} = -1$ with a ferromagnetic phase F , paramagnetic P , antiquadrupolar AQ and co-stability regions $F + AQ$ and $FI + AQ$ (ferromagnetic + antiquadrupolar).

The phase diagrams obtained for $\frac{K}{J} = (-1, 5, -3, 0 \text{ e } -3, 5)$ have almost the same configuration: a ferromagnetic phase F , paramagnetic P , antiquadrupolar AQ , ferrimagnetic FI , and co-stability regions $F + AQ$ and $FI + AQ$.

Sumário

Agradecimentos	p. 2
Resumo	p. 3
Abstract	p. 4
1 Introdução	p. 8
1.1 Motivação	p. 8
1.2 Objetivos	p. 9
2 Sequências Aperiódicas	p. 10
2.1 Definição	p. 10
2.2 Matriz de substituição	p. 11
2.3 Flutuação	p. 13
2.4 Exemplos	p. 14
3 Rede de Bethe	p. 18
3.1 Definição	p. 18
3.2 Dimensionalidade	p. 19
3.3 Relações de recorrência	p. 20
3.4 Aproximação de Campo Médio	p. 25
3.4.1 Aproximação de campo médio do tipo Curie-Weiss	p. 26
3.4.2 Aproximação de Bethe	p. 27
4 Aproximação de Campo Médio para o modelo de Blume-Emery-	

Griffiths	p. 30
4.1 Introdução	p. 30
4.2 Diagramas de fases	p. 31
5 Diagramas de Fases, Resultados e Discussões	p. 38
5.1 Introdução	p. 38
5.2 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = 5$	p. 39
5.2.1 Caso puro ($r = 0$)	p. 39
5.2.2 Caso aperiódico: duplicação de período	p. 42
5.2.3 Caso aperiódico: triplicação de período	p. 45
5.3 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = 3$	p. 46
5.3.1 Caso puro ($r = 0$)	p. 46
5.3.2 Caso aperiódico: duplicação de período	p. 48
5.4 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = 0$	p. 49
5.4.1 Caso puro ($r = 0$)	p. 49
5.4.2 Caso aperiódico: duplicação de período	p. 51
5.5 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -0,15$	p. 52
5.5.1 Caso puro ($r = 0$)	p. 52
5.5.2 Caso aperiódico: duplicação de período	p. 54
5.6 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -0,5$	p. 55
5.6.1 Caso puro ($r = 0$)	p. 55
5.6.2 Caso aperiódico: duplicação de período	p. 57
5.6.3 Caso periódico AAB e aperiódico ($r = -0,8$)	p. 60
5.7 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -1$	p. 61
5.7.1 Caso puro ($r = 0$)	p. 61
5.7.2 Caso aperiódico: duplicação de período	p. 62
5.7.3 Caso aperiódico: triplicação de período	p. 63

5.8	Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -1,5$	p. 64
5.8.1	Caso puro ($r = 0$)	p. 64
5.8.2	Caso aperiódico: duplicação de período	p. 65
5.9	Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -3$	p. 66
5.9.1	Caso puro ($r = 0$)	p. 66
5.9.2	Caso aperiódico: duplicação de período	p. 67
5.10	Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -3,5$	p. 69
5.10.1	Caso puro ($r = 0$)	p. 69
5.10.2	Caso aperiódico: duplicação de período	p. 71
6	Conclusões e Perspectivas	p. 72
	Conclusões	p. 72
	Perspectivas	p. 72
	Referências Bibliográficas	p. 73

1 *Introdução*

1.1 *Motivação*

A motivação deste trabalho reside no fato de, em geral, sistemas físicos reais apresentarem algum tipo de impureza ou desordem entre seus átomos. Esta desordem pode modificar as propriedades físicas de um sistema e os efeitos podem ser particularmente significativos nas proximidades de singularidades, como por exemplo, em pontos de transição de fases. Em alguns casos, tais perturbações podem alterar a classe de universalidade das transições de fases de segunda ordem. Além disto, muitos dos dispositivos produzidos pelo homem apresentam algum nível de impureza, ou mesmo defeitos estruturais, como por exemplo, em dispositivos magnéticos de armazenamento de dados.

Soma-se a isto o desenvolvimento de tecnologias de crescimento de ligas [1] [2], que torna possível a construção de materiais formados por 2 ou mais átomos em camadas compostas por sequências previamente estabelecidas.

A Fig. 1.1 representa um certo material formado por camadas aperiódicas de dois tipos diferentes de átomos.

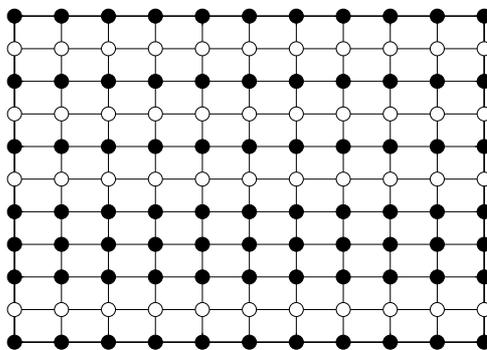


Figura 1.1: Representação de um material formado por 2 átomos distintos dispostos em camadas aperiódicas.

1.2 Objetivos

Nosso interesse é estudar os efeitos de desordem nas interações de troca do modelo de Blume-Emery-Griffiths na rede de Bethe, no limite de coordenação infinita. A geometria desta rede permite a execução de cálculos exatos, além de representar bem o comportamento de sistemas de alta dimensionalidade (em alguns casos, até mesmo o comportamento de sistemas bidimensionais).

A desordem é inserida no sistema por meio de sequências aperiódicas previamente definidas e associadas às interações de troca do modelo. Os possíveis efeitos ocasionados por tais desordens aperiódicas seriam verificados nos diagramas de fases obtidos numericamente e comparados com aqueles obtidos por Hoston e Berker [3] para campo médio.

2 Sequências Aperiódicas

Neste capítulo, definiremos as sequências aperiódicas determinísticas obtidas por regras de substituição e apresentaremos as matrizes de substituição associadas a cada uma dessas sequências. O estudo dessas matrizes nos dará importantes informações de cada sequência aperiódica, tais como a proporção de cada letra na sequência e a flutuação associada ao grau de aperiodicidade, entre outras.

As sequências aperiódicas são uma ferramenta importante para se introduzir inhomogeneidade determinística nas interações de modelos magnéticos como o BEG. Na abordagem do modelo BEG na rede de Bethe são necessárias sequências longas para se chegar à termodinâmica do modelo, uma vez que o resultado converge para um número grande de iterações. Em abordagens do modelo BEG em redes regulares finitas, são necessárias várias configurações de sequências aperiódicas e a determinação do comportamento médio delas, para se chegar à termodinâmica do modelo.

2.1 Definição

As sequências aperiódicas são estruturas formadas por um conjunto de elementos ordenados (letras) $\alpha_1\alpha_2\alpha_3\dots\alpha_n$, construídas a partir de um alfabeto \mathcal{A} , onde $\alpha_j \in \mathcal{A}$, $\forall j \in \mathbf{N}$. Tais sequências são denominadas aperiódicas quando não forem formadas por subsequências que se repetem periodicamente.

Dentre os diversos métodos de se obter sequências aperiódicas determinísticas, trabalharemos com a regra de substituição que representaremos pela letra ζ . Podemos obter uma sequência aperiódica tão grande quanto quisermos aplicando n vezes essa regra em uma semente $\alpha \in \mathcal{A}$ como mostrado a seguir:

$$\overbrace{(\dots(\zeta(\zeta(\zeta(\alpha))))\dots)}^{n \text{ vezes}} \equiv \zeta^n(\alpha).$$

2.2 Matriz de substituição

Considerando um alfabeto \mathcal{A} com duas letras, por exemplo, A e B , podemos definir uma regra de substituição ζ :

$$\begin{aligned}\zeta(A) &\rightarrow A^\gamma B^\delta, \\ \zeta(B) &\rightarrow A^\mu B^\nu.\end{aligned}\tag{2.1}$$

Consideremos ainda $\gamma = \delta = \mu = 1$ e $\nu = 0$, obtendo assim:

$$\begin{aligned}\zeta(A) &\rightarrow AB, \\ \zeta(B) &\rightarrow A.\end{aligned}\tag{2.2}$$

Ao aplicarmos duas vezes a regra ζ em uma semente, por exemplo A , obtemos:

$$\zeta^2(A) = \zeta(\zeta(A)) = \zeta(AB) \equiv \zeta(A)\zeta(B) = ABA.\tag{2.3}$$

Assim, se continuarmos sucessivamente aplicando a regra ζ obtemos a seqüência:

$$\begin{aligned}\zeta^3(A) &= \zeta(\zeta^2(A)) = \zeta(A)\zeta(B)\zeta(A) \rightarrow ABAAB, \\ \zeta^4(A) &= \zeta(A)\zeta(B)\zeta(A)\zeta(A)\zeta(B) \rightarrow ABAABABA, \\ &\vdots\end{aligned}\tag{2.4}$$

Analisando as seqüências criadas anteriormente percebemos a seguinte característica:

$$\zeta^k(A) = \zeta^{k-1}(A)\zeta^{k-2}(A).\tag{2.5}$$

Para calcularmos a proporção das letras na seqüência após sucessivas aplicações da regra de substituição utilizamos a matriz de substituição definida por \mathcal{M} :

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} n_{\alpha_1}\zeta(\alpha_1) & n_{\alpha_1}\zeta(\alpha_2) & \dots \\ n_{\alpha_2}\zeta(\alpha_1) & n_{\alpha_2}\zeta(\alpha_2) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},\tag{2.6}$$

onde $\alpha_j \in \mathcal{A}$, $\forall j \in \mathbf{N}$ e $n_{\alpha_j}\zeta(\alpha_i)$ representa o número de letras α_j que aparecem na aplicação da regra ζ na letra α_i .

Considerando o alfabeto limitado a duas letras $\mathcal{A} = \{A, B\}$ a equação (2.6) se transforma em:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} n_A \zeta(A) & n_A \zeta(B) \\ n_B \zeta(A) & n_B \zeta(B) \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

E assim, utilizando o exemplo dado anteriormente na expressão (2.1), a matriz de substituição \mathcal{M} associada a esta regra de substituição é dada por:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} \gamma & \delta \\ \mu & \nu \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Queremos agora obter uma relação entre o número de letras A e B de sucessivas aplicações de uma regra de substituição. Para isso, utilizamos a matriz de substituição \mathcal{M} e as operações convencionais de matrizes como vemos a seguir:

$$\begin{pmatrix} n_A \zeta^{k+1}(\alpha) \\ n_B \zeta^{k+1}(\alpha) \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} n_A \zeta^k(\alpha) \\ n_B \zeta^k(\alpha) \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Observando que a equação (2.9) vale para todo $k \in \mathbf{N}$, podemos escrever

$$\begin{pmatrix} n_A \zeta^{k+1}(\alpha) \\ n_B \zeta^{k+1}(\alpha) \end{pmatrix} = \mathcal{M}^{k+1} \begin{pmatrix} n_A(\alpha) \\ n_B(\alpha) \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

O número de letras A e B pode ser obtido através das entradas dos vetores vistos na equação (2.10). Estes vetores por sua vez, podem ser representados por uma combinação linear de dois vetores linearmente independentes:

$$\begin{pmatrix} n_A(\alpha) \\ n_B(\alpha) \end{pmatrix} = c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2, \quad (2.11)$$

Escolhendo os vetores \mathbf{u}_1 e \mathbf{u}_2 como sendo os autovetores associados ao maior e o menor autovalor, respectivamente, e utilizando a equação (2.10) vemos que:

$$\begin{pmatrix} n_A \zeta^{k+1}(\alpha) \\ n_B \zeta^{k+1}(\alpha) \end{pmatrix} = \lambda_1^k c_1 \mathbf{u}_1 + \lambda_2^k c_2 \mathbf{u}_2, \quad (2.12)$$

onde λ_1 é o maior autovalor e λ_2 o menor.

Podemos obter o número de letras N após $k+1$ substituições simplesmente somando as componentes da equação (2.12):

$$N = n_A \zeta^{k+1}(\alpha) + n_B \zeta^{k+1}(\alpha) = \lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22}), \quad (2.13)$$

sendo u_{ij} a componente j do autovetor i .

Além de representarmos o crescimento da sequência através dos autovetores e autovalores podemos também escrever a fração de letras A e B na sequência no limite de infinitas aplicações da regra de substituição, respectivamente dadas por:

$$P_A \equiv \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_A \zeta^{k+1}(\alpha)}{N}, \quad (2.14)$$

$$P_B \equiv \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_B \zeta^{k+1}(\alpha)}{N}, \quad (2.15)$$

ou ainda,

$$P_A = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k c_1 u_{11} + \lambda_2^k c_2 u_{21}}{\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22})}, \quad (2.16)$$

$$P_B = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k c_1 u_{12} + \lambda_2^k c_2 u_{22}}{\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22})}. \quad (2.17)$$

Para $c_1 \neq 0$ e visto que $\lambda_1 > |\lambda_2|$ as equações (2.16) e (2.17) se resumem a:

$$P_A = \frac{u_{11}}{u_{11} + u_{12}}, \quad (2.18)$$

$$P_B = \frac{u_{12}}{u_{11} + u_{12}}. \quad (2.19)$$

2.3 Flutuação

Nas seções anteriores obtivemos grandezas que nos permitem definir o expoente de flutuação ω que, no contexto do critério de Harris-Luck [4][5], é determinante para mudanças do comportamento crítico de um sistema.

Vamos definir a flutuação de letras A como

$$g = |n_A \zeta^{k+1}(\alpha) - P_A N| \quad (2.20)$$

Desta forma a flutuação medirá a diferença entre o número de letras A obtidas a partir de k substituições e o número assintótico de letras A da sequência, $P_A N$.

Escrevendo a flutuação em termos de uma lei de potência

$$g \propto N^\omega, \quad (2.21)$$

podemos relacionar o expoente ω com os autovalores da matriz de substituição de uma sequência no limite assintótico de $k \gg 1$, substituindo as equações (2.13), (2.17) e (2.20) na (2.21):

$$\left| \lambda_2^k c_2 \left[u_{21} - \frac{u_{11}(u_{21} + u_{22})}{u_{11} + u_{12}} \right] \right| = \left[\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) + \lambda_2^k c_2 (u_{21} + u_{22}) \right]^\omega,$$

sendo que, com $c_1 \neq 0$ e $|\lambda_2| < \lambda_1$, obtemos no limite de $k \gg 1$

$$\left| \lambda_2^k c_2 \left[u_{21} - \frac{u_{11}(u_{21} + u_{22})}{u_{11} + u_{12}} \right] \right| = \left[\lambda_1^k c_1 (u_{11} + u_{12}) \right]^\omega. \quad (2.22)$$

Tomando o logaritmo em ambos os lados da (2.22)

$$k \ln |\lambda_2| + \ln \left| c_2 \left[u_{21} - \frac{u_{11}(u_{21} + u_{22})}{u_{11} + u_{12}} \right] \right| = \omega k \ln \lambda_1 + \omega \ln c_1 (u_{11} + u_{12}) \quad (2.23)$$

No limite de $k \rightarrow \infty$ obtemos de (2.23)

$$\omega = \frac{\ln |\lambda_2|}{\ln \lambda_1}. \quad (2.24)$$

2.4 Exemplos

Apresentaremos agora alguns exemplos de sequências aperiódicas obtidas por regras de substituição.

- Fibonacci

A sequência obtida na n -ésima aplicação desta regra de substituição é igual a soma

das duas seqüências imediatamente anteriores, como pode ser verificado na equação (2.4). Sua regra de substituição é dada por:

$$\begin{aligned}\zeta(A) &\rightarrow AB, \\ \zeta(B) &\rightarrow A.\end{aligned}\tag{2.25}$$

E sua matriz de substituição correspondente:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- Duplicação de período

O nome desta regra de substituição vem do fato de que a cada aplicação dobra-se o tamanho da seqüência. Tal regra consiste em:

$$\begin{aligned}\zeta(A) &\rightarrow AB, \\ \zeta(B) &\rightarrow AA.\end{aligned}\tag{2.26}$$

A matriz de substituição:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- Triplicação de período

Neste caso a cada aplicação da regra de substituição triplica-se o tamanho da seqüência.

$$\begin{aligned}\zeta(A) &\rightarrow ABB, \\ \zeta(B) &\rightarrow AAA.\end{aligned}\tag{2.27}$$

A respectiva matriz de substituição:

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Somente as duas últimas regras apresentadas, duplicação e triplicação de período foram utilizadas por nós no presente trabalho.

Outra seqüência estudada, conhecida como seqüência de Rudin-Shapiro, necessita de um alfabeto de quatro letras para ser construída:

- Rudin-Shapiro

$$\begin{aligned}
 \zeta(A) &\rightarrow AC, \\
 \zeta(B) &\rightarrow DC, \\
 \zeta(C) &\rightarrow AB, \\
 \zeta(D) &\rightarrow DB.
 \end{aligned}
 \tag{2.28}$$

Neste caso

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Podemos agrupar as características das matrizes citadas na tabela a seguir:

Sequência	λ_1	λ_2	P_A	ω
Fibonacci	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	$\frac{2}{1+\sqrt{5}}$	-1
Duplicação de período	2	-1	$\frac{2}{3}$	0
Triplicação de período	3	-2	$\frac{3}{5}$	0,63
Rudin-Shapiro ¹	2	$\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

Tabela 1: Parâmetros característicos das sequências aperiódicas citadas.

¹Rudin-Shapiro de duas letras, onde $C = A$ e $D = B$ (após formada a sequência); λ_1 e λ_2 são os dois maiores autovalores.

Ainda que o cálculo dos expoentes críticos não seja o objetivo deste trabalho citamos que estas diferentes sequências são responsáveis por vários fenômenos observados na criticalidade dos modelos em mecânica estatística. Entre estes fenômenos, chamamos a atenção para uma mudança do tipo de lei de escala de grandezas termodinâmicas na criticalidade: ao invés da típica lei de potência, observa-se um comportamento chamado de log-periódico para algumas sequências. Isto pode ser explicado a partir de argumentos de grupo de renormalização exato [6]. Este fenômeno está intimamente ligado à maneira na qual estas sequências crescem a cada aplicação das suas respectivas regras de substituição.

Note que, como já foi comentado, não aplicaremos o critério de Harris-Luck [5] na rede de Bethe. Entretanto, interpretaremos os valores do expoente ω mostrados na Tab. 1, como uma indicação de que a flutuação cresce quando se vai da sequência de Fibonacci para a de duplicação de período e desta para a de Rudin-Shapiro.

O critério de Harris-Luck classifica as perturbações causadas por inomogeneidades nas interações de um sistema em relevante, irrelevante ou marginal. A perturbação é relevante se modificar a classe de universalidade dos expoentes críticos deste sistema; irrelevante quando não e marginal quando a aperiodicidade leva a um comportamento não universal, com alguns expoentes podendo variar continuamente com a amplitude da perturbação[7].

De acordo com este critério, a relevância de uma dada sequência aperiódica está ligada ao expoente ϕ dado por:

$$\Phi = 1 - d_a \nu_0 (1 - \omega). \quad (2.29)$$

onde d_a é a dimensão da rede na qual a aperiodicidade está atuando, ν_0 é o expoente crítico do comprimento de correlação do modelo puro e ω é o expoente de flutuação.

A perturbação é relevante quando o expoente $\Phi > 0$, é irrelevante quando $\Phi < 0$ e marginal quando $\Phi = 0$.

3 Rede de Bethe

Apresentaremos aqui a definição da rede de Bethe com algumas de suas características e a formulação do modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) [8] com interação entre primeiros vizinhos na rede de Bethe. Abordaremos ainda a aproximação de Bethe e o cálculo da temperatura crítica do ferromagneto, nesta aproximação.

3.1 Definição

Considere o grafo construído da seguinte maneira: comece com um ponto central 0 e adicione z pontos, todos conectados a 0 . Nomeie este primeiro grupo de z pontos de camada 1 . Agora crie a camada 2 , tomando cada ponto na camada 1 e conectando $z-1$ novos pontos a ele. Procedendo iterativamente desta maneira, construa as camadas $3, 4, \dots, n$. Isto resultará num grafo análogo ao mostrado na Fig. 3.1:

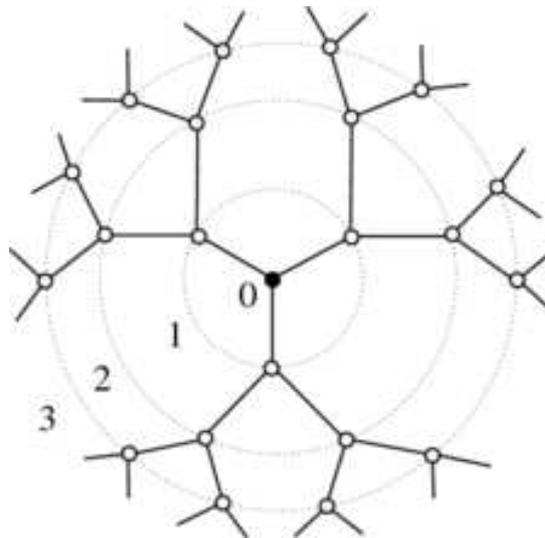


Figura 3.1: Árvore de Cayley com número de coordenação $z = 3$ e 4 camadas.

Há $z(z-1)^{n-1}$ pontos na camada n e o número total de pontos no grafo com n camadas é:

$$1 + \frac{z[(z-1)^n - 1]}{z-2}. \quad (3.1)$$

Nós chamaremos os pontos na camada n de pontos de borda. Eles são especiais pois cada um deles tem somente 1 vizinho, enquanto que todos os outros pontos interiores têm z vizinhos. Tal grafo não contém circuitos fechados e é conhecido como árvore de Cayley. Do nosso ponto de vista isto pode ser pensado como uma “rede” regular com número de coordenação z , isto é, z vizinhos por sítio, ignorando-se os sítios de borda.

Normalmente a razão entre o número de sítios de borda e o número de sítios no interior de uma rede regular é desprezível no limite termodinâmico de um sistema grande. Aqui não, pois ambos os números crescem exponencialmente com $(z-1)^n$. Para superar este problema consideremos somente propriedades locais de sítios profundamente localizados no grafo, isto é, infinitamente distante da borda no limite $n \rightarrow \infty$. Tais sítios são todos equivalentes, com número de coordenação z . Assim, as grandezas calculadas nos sítios com estas características são grandezas calculadas na rede de Bethe.

Colocando de outra maneira, se nós construirmos um modelo BEG numa árvore de Cayley completa, a função de partição \mathcal{Z} conteria contribuições dos sítios profundamente localizados no grafo e dos sítios de borda. A contribuição destes últimos não é negligenciável, principalmente no limite termodinâmico. Em vez disso, consideraremos somente a contribuição em \mathcal{Z} dos sítios profundamente localizados no grafo, isto é, aqueles da rede de Bethe [9].

3.2 Dimensionalidade

Considere qualquer rede regular e faça m_1 ser o número de primeiros vizinhos por sítio, m_2 o número de segundos vizinhos, m_3 o número de terceiros vizinhos, etc. Assim $c_n = 1 + m_1 + m_2 + m_3 + \dots + m_n$ é o número de sítios com n passos de um dado sítio. Para redes hipercúbicas é fácil ver que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln c_n}{\ln n} = d, \quad (3.2)$$

onde d é a dimensionalidade da rede.

A relação 3.2 é também verdadeira para todas as redes regulares de duas e três dimensões e pode ser considerada como uma definição de dimensionalidade d . Agora retornando a considerar a rede de Bethe onde neste caso c_n é dado por 3.1. Substituindo esta expressão em 3.2 obtemos:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln \left\{ \frac{z[(z-1)^n - 1]}{(z-2)} \right\}}{\ln n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln[z(z-1)^n - 1] - \ln(z-2)}{\ln n}, \quad (3.3)$$

Como $(z-1)^n \gg 1$, para $z > 2$ temos:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln[z(z-1)^n] - \ln(z-2)}{\ln n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln z + n \ln(z-1) - \ln(z-2)}{\ln n} = \infty. \quad (3.4)$$

Portanto, neste sentido, a rede de Bethe é de dimensão infinita.

3.3 Relações de recorrência

Apresentaremos agora os cálculos do modelo BEG na rede de Bethe, com interações entre primeiro vizinhos, para chegarmos às relações de recorrência da magnetização e do momento de quadrupolo parciais que foram utilizadas para a obtenção dos diagramas de fases apresentados no Cap. 5.

Iniciamos pela função de partição:

$$\mathcal{Z} = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \sum_{s_3} \dots \sum_{s_n} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (3.5)$$

onde $\{s\}$ indica que a soma é realizada sobre todos os microestados possíveis, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta.

Dada a hamiltoniana do modelo BEG temos:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{s\}} e^{\beta (J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^2 s_j^2 - D \sum_i s_i^2)}, \quad (3.6)$$

onde $s_{i,j} = 0, \pm 1$ e $\langle i, j \rangle$ indica que a soma é realizada sobre todos os sítios primeiros vizinhos. Consideremos a rede de Bethe cujo spin central é nomeado de camada $n+1$, os primeiros vizinhos ligados a ele de camada n , a próxima camada de $n-1$ e assim sucessivamente como podemos ver na Fig. 3.2.

Para facilitar o cálculo da função de partição definiremos as funções de partição par-

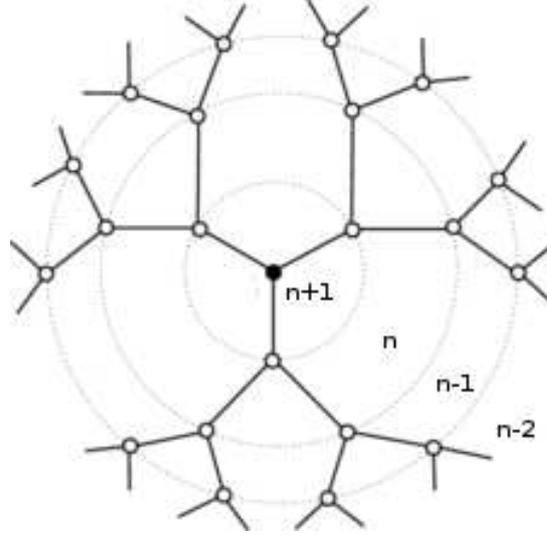


Figura 3.2: Rede de Bethe com spin central e as camadas nomeadas.

ciais $\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)}$, $\mathcal{Z}_{n+1}^{(0)}$ e $\mathcal{Z}_{n+1}^{(-)}$ com spin central $+1$, 0 e -1 respectivamente.

Consequentemente temos:

$$\mathcal{Z}_{n+1} = \mathcal{Z}_{n+1}^{(+)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(0)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(-)}. \quad (3.7)$$

Considerando o spin central $s_i = 0$ e a hamiltoniana do sistema, vemos que sua contribuição é neutra (igual a 1 pois $e^0 = 1$). Sendo assim obtemos a primeira relação de recorrência entre a função de partição do spin central em relação às funções de partição parciais da camada seguinte:

$$\mathcal{Z}_{n+1}^{(0)} = \left[\mathcal{Z}_n^{(+)} + \mathcal{Z}_n^{(0)} + \mathcal{Z}_n^{(-)} \right]^z. \quad (3.8)$$

Calcularemos a seguir a contribuição que envolve as interações do spin central com o campo cristalino e com os seus primeiros vizinhos s_j , que são as extremidades dos z ramos da rede de Bethe, conectados ao spin central.

Esse termo é dado por:

$$\mathcal{Z}_{s_c, s_j} = e^{\beta(Js_c s_j + Ks_c^2 s_j^2 - Ds_c^2)} \quad (3.9)$$

Seja o spin central $s_c = 1$. Analisando cada uma das três possibilidades de seus vizinhos s_j , chegamos a:

$$\mathcal{Z}_{s_c=1, s_j=1} = e^{\beta(J+K-D)} \quad (3.10)$$

$$\mathcal{Z}_{s_c=1, s_j=0} = e^{-\beta D} \quad (3.11)$$

$$\mathcal{Z}_{s_c=1, s_j=-1} = e^{\beta(-J+K-D)} \quad (3.12)$$

Considerando as equações 3.10, 3.11 e 3.12, e os z primeiros vizinhos do spin central, temos que:

$$\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)} = e^{-\beta D} \left[e^{\beta(J+K)} \mathcal{Z}_n^{(+)} + \mathcal{Z}_n^{(0)} + e^{\beta(-J+K)} \mathcal{Z}_n^{(-)} \right]^z. \quad (3.13)$$

Analogamente, se o spin central for $s_c = -1$, teremos:

$$\mathcal{Z}_{s_c=-1, s_j=1} = e^{\beta(-J+K-D)} \quad (3.14)$$

$$\mathcal{Z}_{s_c=-1, s_j=0} = e^{-\beta D} \quad (3.15)$$

$$\mathcal{Z}_{s_c=-1, s_j=-1} = e^{\beta(J+K-D)} \quad (3.16)$$

Considerando as equações 3.14, 3.15 e 3.16, bem como os z primeiros vizinhos do spin central, temos que:

$$\mathcal{Z}_{n+1}^{(-)} = e^{-\beta D} \left[e^{\beta(-J+K)} \mathcal{Z}_n^{(+)} + \mathcal{Z}_n^{(0)} + e^{\beta(J+K)} \mathcal{Z}_n^{(-)} \right]^z. \quad (3.17)$$

Considerando os z primeiros vizinhos: Levando-se em conta que a partir da camada n computa-se $(z-1)$ primeiros vizinhos e que tal diferença se anula no limite de cordenação infinita ($z \rightarrow \infty$), temos as relações de recorrências das funções de partição parciais resumidas:

$$\mathcal{Z}_{n+1}^{(0)} = \left[\mathcal{Z}_n^{(+)} + \mathcal{Z}_n^{(0)} + \mathcal{Z}_n^{(-)} \right]^{(z-1)}. \quad (3.18)$$

$$\mathcal{Z}_{n+1}^{(\pm)} = e^{-\beta D} \left[e^{(\pm\beta J + \beta K)} \mathcal{Z}_n^{(+)} + \mathcal{Z}_n^{(0)} + e^{(\mp\beta J + \beta K)} \mathcal{Z}_n^{(-)} \right]^{(z-1)}, \quad (3.19)$$

onde $\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)}$ refere-se aos sinais superiores e $\mathcal{Z}_{n+1}^{(-)}$ aos sinais inferiores em \pm e \mp .

Definimos agora a magnetização parcial m_{n+1} e o momento de quadrupolo parcial q_{n+1} como sendo:

$$m_{n+1}, q_{n+1} = \frac{\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)} \mp \mathcal{Z}_{n+1}^{(-)}}{\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(0)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(-)}}, \quad (3.20)$$

onde m_{n+1} refere-se ao sinal $-$ e q_{n+1} ao $+$ do numerador.

Trabalhando a definição anterior chegamos facilmente às seguintes equações:

$$\frac{\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)}}{\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(0)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(-)}} = \frac{m_{n+1} + q_{n+1}}{2}, \quad (3.21)$$

$$\frac{\mathcal{Z}_{n+1}^{(0)}}{\mathcal{Z}_{n+1}^{(+)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(0)} + \mathcal{Z}_{n+1}^{(-)}} = 1 - q_{n+1}, \quad (3.22)$$

$$\frac{\mathcal{L}_{n+1}^{(-)}}{\mathcal{L}_{n+1}^{(+)} + \mathcal{L}_{n+1}^{(0)} + \mathcal{L}_{n+1}^{(-)}} = \frac{q_{n+1} - m_{n+1}}{2}. \quad (3.23)$$

Substituindo as equações 3.18, 3.19 em 3.20 e utilizando as equações acima, obtemos:

$$m_{n+1}, q_{n+1} = \frac{R_n \mp Q_n}{R_n + 1 + Q_n}, \quad (3.24)$$

onde m_{n+1} refere-se ao sinal $-$ e q_{n+1} ao $+$ do numerador e $R_n = R(m_n, q_n)$ e $Q_n = Q(m_n, q_n)$ são dadas por:

$$R_n, Q_n = e^{-\beta D} \left\{ 1 - q_n + \frac{1}{2} \left[e^{\pm\beta J + \beta K} (m_n + q_n) + e^{\mp\beta J + \beta K} (q_n - m_n) \right] \right\}^{(z-1)}, \quad (3.25)$$

onde R_n refere-se aos sinais superiores e Q_n aos sinais inferiores em \pm e \mp .

Trabalhando R_n temos:

$$R_n = e^{-\beta D} \left\{ 1 - q_n + \frac{1}{2} \left[e^{\beta J + \beta K} (m_n + q_n) + e^{-\beta J + \beta K} (q_n - m_n) \right] \right\}^{(z-1)}, \quad (3.26)$$

$$= e^{-\beta D} \left\{ 1 - q_n + \frac{1}{2} \left[q_n \left(e^{\beta J + \beta K} + e^{-\beta J + \beta K} \right) + m_n \left(e^{\beta J + \beta K} - e^{-\beta J + \beta K} \right) \right] \right\}^{(z-1)}, \quad (3.27)$$

$$= e^{-\beta D} \left\{ 1 - q_n + \frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(-)}}{\mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(0)} + \mathcal{L}_n^{(-)}} \left(e^{\beta J + \beta K} + e^{-\beta J + \beta K} \right) + \frac{\mathcal{L}_n^{(+)} - \mathcal{L}_n^{(-)}}{\mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(0)} + \mathcal{L}_n^{(-)}} \left(e^{\beta J + \beta K} - e^{-\beta J + \beta K} \right) \right] \right\}^{z-1}, \quad (3.28)$$

$$= e^{-\beta D} \left[1 - \left(\frac{\mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(-)}}{\mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(0)} + \mathcal{L}_n^{(-)}} \right) + \left(\frac{e^{\beta J + \beta K} \mathcal{L}_n^{(+)} + e^{-\beta J + \beta K} \mathcal{L}_n^{(-)}}{\mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(0)} + \mathcal{L}_n^{(-)}} \right) \right]^{z-1}, \quad (3.29)$$

$$R_n = e^{-\beta D} \left[\frac{e^{\beta J \beta K} \mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(0)} + e^{-\beta J \beta K} \mathcal{L}_n^{(-)}}{\mathcal{L}_n^{(+)} + \mathcal{L}_n^{(0)} + \mathcal{L}_n^{(-)}} \right]^{(z-1)}, \quad (3.30)$$

$$R_n = \frac{\mathcal{L}_{n+1}^{(+)}}{\mathcal{L}_{n+1}^{(0)}}. \quad (3.31)$$

Tratando Q_n de maneira semelhante chegamos ao seguinte resultado:

$$Q_n = \frac{\mathcal{L}_{n+1}^{(-)}}{\mathcal{L}_{n+1}^{(0)}}. \quad (3.32)$$

Substituindo as equações 3.31 e 3.32 em 3.24 obtemos:

$$m_{n+1}, q_{n+1} = \frac{R_n \mp Q_n}{R_n + 1 + Q_n} = \frac{\mathcal{L}_{n+1}^{(+)} \mp \mathcal{L}_{n+1}^{(-)}}{\mathcal{L}_{n+1}^{(+)} + \mathcal{L}_{n+1}^{(0)} + \mathcal{L}_{n+1}^{(-)}}, \quad (3.33)$$

que é a definição dada em 3.20 e onde m_{n+1} refere-se ao sinal $-$ e q_{n+1} ao $+$ do numerador em \mp . Analisaremos agora as equações R_n e Q_n no limite de coordenação infinita ($z \rightarrow \infty$, $J \rightarrow 0$, $K \rightarrow 0$, $zK, zJ \rightarrow$ valores fixos).

Da equação 3.25 podemos facilmente chegar a:

$$R_n, Q_n = e^{-\beta D} \left\{ 1 - q_n + e^{\beta K} [q_n \cosh(\beta J) \pm m_n \sinh(\beta J)] \right\}^{(z-1)}, \quad (3.34)$$

onde a equação de R_n considera o sinal $+$ e a de Q_n o $-$ em \pm .

Tomando a expansão em Taylor dos termos da equação anterior temos:

$$e^{\beta K} \approx 1 + \beta K + O[(\beta K)^2] + \dots, \quad (3.35)$$

$$\cosh(\beta J) \approx 1 + O[(\beta J)^2] + \dots, \quad (3.36)$$

$$\sinh(\beta J) \approx \beta J + O[(\beta J)^3] + \dots, \quad (3.37)$$

$$R_n, Q_n \approx e^{-\beta D} \{ 1 - q_n + (1 + \beta K) [q_n \pm m_n \beta J] \}^z. \quad (3.38)$$

$$R_n, Q_n \approx e^{-\beta D} (1 - q_n + q_n \pm m_n \beta J + q_n \beta K \pm m_n \beta^2 JK)^z. \quad (3.39)$$

Como $J, K \rightarrow 0$, JK tem O^2 portanto podemos desprezar o termo $m_n \beta^2 JK$. Assim:

$$R_n, Q_n \approx e^{-\beta D} [1 + \beta (q_n K \pm m_n J)]^z, \quad (3.40)$$

onde a equação de R_n considera o sinal $+$ e a de Q_n o $-$ em \pm .

Fazendo a seguinte alteração de variáveis: $d = \frac{D}{zJ}$, $t = \frac{1}{\beta zJ}$ e $k = \frac{K}{J}$ temos:

$$R_n, Q_n \approx e^{\frac{-d}{t}} \left[1 + \left(\frac{q_n k \pm m_n}{zt} \right) \right]^z. \quad (3.41)$$

Analizando o termo entre colchetes temos:

$$\left[1 + \frac{q_n k \pm m_n}{zt} \right]^z = \left[1 + \frac{1}{\frac{zt}{q_n k \pm m_n}} \right]^z = \left\{ \left[1 + \frac{1}{\frac{zt}{q_n k \pm m_n}} \right]^{\frac{zt}{q_n k \pm m_n}} \right\}^{\frac{q_n k \pm m_n}{t}}, \quad (3.42)$$

como temos $z \rightarrow \infty$, $J \rightarrow 0$, $K \rightarrow 0$, zK , $zJ \rightarrow$ valor fixo:

$$\frac{zt}{q_n k \pm m_n} = \frac{z}{\beta z J (q_n \frac{K}{J} \pm m_n)} \rightarrow \infty. \quad (3.43)$$

Lembrando a relação do número neperiano:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{x}\right)^x \rightarrow e. \quad (3.44)$$

Concluimos que:

$$R_n, Q_n \approx e^{\frac{-d}{t}} \left[1 + \left(\frac{q_n k \pm m_n}{zt}\right)\right]^z \approx e^{\frac{-d}{t}} e^{\frac{q_n k \pm m_n}{t}} \approx e^{\frac{-d + q_n k \pm m_n}{t}}, \quad (3.45)$$

onde a equação de R_n considera o sinal $+$ e a de Q_n o $-$ em \pm .

Da equação 3.33 temos:

$$m_{n+1}, q_{n+1} = \frac{R_n \mp Q_n}{R_n + 1 + Q_n} \approx \frac{e^{\frac{-d + q_n k + m_n}{t}} \mp e^{\frac{-d + q_n k - m_n}{t}}}{e^{\frac{-d + q_n k + m_n}{t}} + 1 + e^{\frac{-d + q_n k - m_n}{t}}}, \quad (3.46)$$

$$m_{n+1}, q_{n+1} \approx \frac{e^{\frac{-d + q_n k}{t}} \left[e^{\frac{m_n}{t}} \mp e^{\frac{-m_n}{t}} \right]}{e^{\frac{-d + q_n k}{t}} \left[e^{\frac{m_n}{t}} + e^{\frac{d - q_n k}{t}} + e^{\frac{-m_n}{t}} \right]}, \quad (3.47)$$

onde m_{n+1} refere-se ao sinal $-$ e q_{n+1} ao $+$ do numerador em \mp . Finalmente, rearranjando m_{n+1} e q_{n+1} obtemos:

$$m_{n+1} = \frac{2 \sinh\left(\frac{m_n}{t}\right)}{2 \cosh\left(\frac{m_n}{t}\right) + e^{\frac{(d - q_n k)}{t}}}, \quad (3.48)$$

$$q_{n+1} = \frac{2 \cosh\left(\frac{m_n}{t}\right)}{2 \cosh\left(\frac{m_n}{t}\right) + e^{\frac{(d - q_n k)}{t}}}, \quad (3.49)$$

onde $d = \frac{D}{zJ}$, $t = \frac{1}{\beta z J}$ e $k = \frac{K}{J}$.

3.4 Aproximação de Campo Médio

Vários métodos de aproximação foram largamente utilizados por muitos anos antes de qualquer resultado exato em modelos bidimensionais se tornarem disponíveis. A aproximação mais simples, conhecida como de ordem zero, foi utilizada por Bragg e Williams [10] no tratamento de transições ordem-desordem em ligas. Foi introduzido aí pela primeira

vez o conceito de ordem de longo alcance e com um ferramental matemático relativamente simples conseguiu se mostrar as características principais dos resultados experimentais.

A temperatura de Curie foi caracterizada pelo desaparecimento do ordenamento de longo alcance e associada à singularidade do calor específico. A forma da singularidade prevista não estava totalmente de acordo com o experimento principalmente pela queda do calor específico a zero acima da temperatura de Curie.

Em 1935 Bethe introduziu uma melhora desta aproximação, usualmente conhecida como de primeira ordem, contabilizando o ordenamento de curto alcance assim como o de longo alcance. A curva do calor específico derivada dessa aproximação não vai a zero acima da temperatura de Curie e sim há um pequeno prolongamento, ficando assim mais próximo do resultado experimental.

3.4.1 Aproximação de campo médio do tipo Curie-Weiss

A primeira tentativa de calcular em detalhe as propriedades de um ferromagneto foi feita em 1907 por Pierre Weiss [11] que postulou a existência de um grande “campo efetivo”. Usando esta hipótese Weiss conseguiu reproduzir as mais importantes características físicas de um magneto: a existência da temperatura de Curie, com magnetização espontânea abaixo desta temperatura e a forma da curva da susceptibilidade magnética acima da temperatura de Curie. Entretanto a origem do campo interno não foi discutida em detalhe e assim uma formulação estatística em termos das interações atômicas não foi possível. Em 1925 Ising tentou chegar a tal formulação embora a forma da interação que ele tomou foi um tanto quanto empírica. Em 1928 Heisenberg deu um tratamento quântico das forças atômicas e devido a isso explicou claramente a origem do campo interno. Ele mostrou em uma primeira aproximação que a interação atômica é proporcional ao produto escalar dos vetores operadores de spin dos átomos em questão.

Tanto no modelo de Ising como no de Heisenberg é correto afirmar que qualquer átomo da rede está submetido a um campo interno proveniente das interações com átomos vizinhos. O campo entretanto não é estacionário e sim flutuante assim como os átomos vizinhos alternando suas orientações. A teoria de Weiss ou de campo médio equivale a trocar este campo flutuante pelo seu valor médio, e nos referimos a uma aproximação deste tipo como de ordem zero desde que suas propriedades não dependam de nenhum modo de detalhes da estrutura da rede. Espera-se que esta estrutura torne-se cada vez melhor com o aumento do número de vizinhos interagindo com um dado átomo, portanto diminuindo a importância das flutuações.

3.4.2 Aproximação de Bethe

A aproximação de Bethe [12] calcula exatamente a interação de um dado spin com seus primeiros vizinhos e usa a aproximação de campo médio para calcular as interações entre esses vizinhos e os outros spins da rede. Tomemos como exemplo a rede parcialmente representada pela Fig. 3.3, que é uma aproximação do modelo de Ising na rede quadrada cuja energia de interação é dada por:

$$\mathcal{H}_q = - \sum_{j=1}^q J \sigma_{0z} \sigma_{jz} - mH \sigma_{0z} - mH_1 \sum_{j=1}^q \sigma_{jz}, \quad (3.50)$$

onde $\sigma = \pm 1$, σ_0 é o spin central, H é o campo magnético externo que atua no spin central e H_1 o campo adicional que atua nos demais spins.

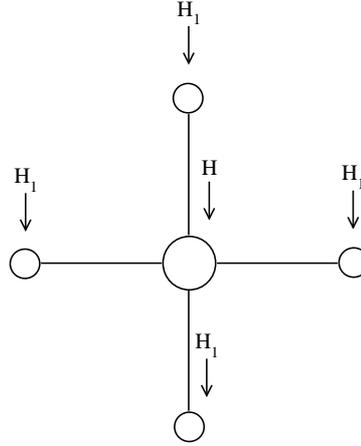


Figura 3.3: *Cluster* com spin central e seus q primeiros vizinhos na aproximação de Bethe.

A função de partição deste *cluster* elementar é dada por:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_q &= \mu^{-1/2} (\mu_1^{-q/2} z^{-q/2} + C_1 \mu_1^{-q/2+1} z^{-q/2+1} + C_2 \mu_1^{-q/2+2} z^{-q/2+2} + \dots) \\ &\quad + \mu^{1/2} (\mu_1^{q/2} z^{-q/2} + C_1 \mu_1^{q/2-1} z^{-q/2+1} + C_2 \mu_1^{q/2-2} z^{-q/2+2} + \dots) \\ &= \mu^{-1/2} (\mu_1^{-1/2} z^{-1/2} + \mu_1^{1/2} z^{1/2})^q + \mu^{1/2} (\mu_1^{1/2} z^{-1/2} + \mu_1^{-1/2} z^{1/2})^q \dots \end{aligned} \quad (3.51)$$

onde $\mu = e^{(-2mH/kT)}$, $\mu_1 = e^{(-2mH_1/kT)}$, $z = e^{(-2J/kT)}$. O campo médio H_1 é determinado pela condição de consistência em que a probabilidade de um spin apontar para cima ou

para baixo é a mesma para o spin central ou para qualquer outro spin. Assim:

$$\mu \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \mathcal{Z}_q = \frac{\mu_1}{q} \frac{\partial}{\partial \mu_1} \ln \mathcal{Z}_q \quad (3.52)$$

Aplicando 3.52 em 3.51 e após algumas simplificações temos:

$$\frac{\mu_1}{\mu} = \left(\frac{\mu_1 + z}{1 + \mu_1 z} \right)^{q-1} \quad (3.53)$$

Na ausência de um campo magnético ($\mu = 1$), $H_1 = 0$ é sempre solução. Para descobrir se a solução diferente de zero existe para H_1 , transformamos 3.53 em:

$$\frac{\tanh[mH_1/(q-1)kT]}{\tanh(mH_1/kT)} = \tanh(J/kT) \quad (3.54)$$

A Fig. 3.4 apresenta a forma de $\tanh(\eta/q-1)/\tanh \eta$ que vai de $1/(q-1)$ para $\eta = 0$ e tende a 1 para $\eta = \infty$. Portanto, para qualquer temperatura T satisfazendo:

$$\tanh(J/kT) < 1/(q-1) \quad (3.55)$$

não há solução diferente de zero para H_1 . Para todas as outras temperaturas as soluções de H_1 diferentes de zero são dadas pela intersecção da curva na Fig. 3.4 com a linha $y = \tanh(J/kT)$. Assim, a temperatura de Curie é dada por:

$$\tanh(J/kT_c) = 1/(q-1), \quad kT_c/qJ = -\frac{2/q}{\ln(1-2/q)} \quad (3.56)$$

que é o mesmo resultado encontrado para o ferromagneto de Ising da rede de Bethe [13].

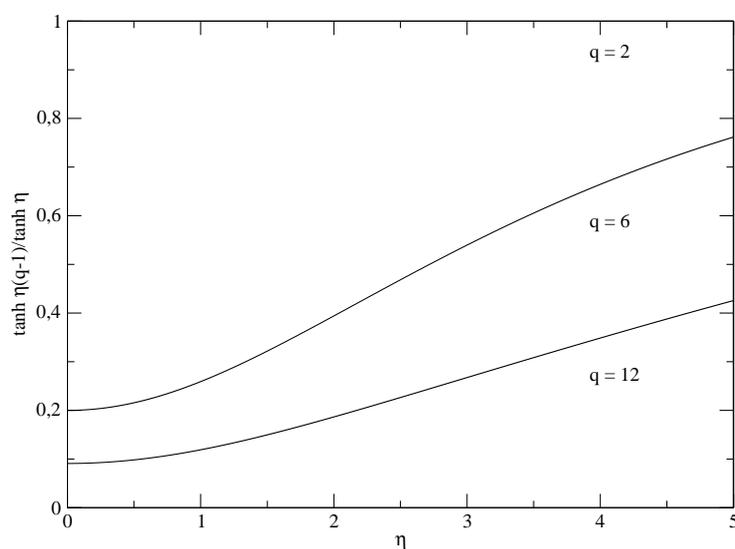


Figura 3.4: Condição de existência da magnetização espontânea na aproximação de Bethe. Quando $\tanh(J/kT) < 1/(q-1)$ não há solução não nula para η ; quando $\tanh(J/kT) > 1/(q-1)$ tem-se a solução não nula ($\eta = mH_1kT$).

4 *Aproximação de Campo Médio para o modelo de Blume-Emery-Griffiths*

4.1 Introdução

Nossa intenção neste capítulo é apresentar os diagramas de fases multicríticos obtidos por Hoston e Berker [3] para o modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG) (com acoplamento biquadrático repulsivo e interação entre primeiros vizinhos) na aproximação de campo médio, utilizando a desigualdade de Bogoliubov [14]

O modelo BEG [8] [15] é a maior generalização possível do modelo de Ising de spin 1, com interação entre primeiros vizinhos e simetria de inversão, com hamiltoniana

$$-\beta \mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^2 s_j^2 - \Delta \sum_i s_i^2 \quad (4.1)$$

composta, respectivamente, pela interação bilinear J , interação biquadrática K e termo de campo cristalino Δ . Na equação 4.1, os spins $s_i = 0, \pm 1$ estão em cada sítio i da rede, tendo cada um z vizinhos mais próximos e $\langle i, j \rangle$ representa a soma sobre todos os pares de primeiros vizinhos.

O estudo apresentado é uma teoria de campo médio, baseado na desigualdade de Gibbs para a energia livre [16],

$$F \leq Tr \rho \mathcal{H} + \beta^{-1} Tr \rho \ln \rho, \quad (4.2)$$

onde ρ é qualquer matriz densidade aceitável (isto é, Hermitiana, não negativa e normalizada). O lado direito da inequação é minimizado para a mais geral matriz densidade que é fatorada em matrizes densidade de sítio único, permitindo a quebra de simetria de

sub-rede. As fases resultantes são caracterizadas por *quatro* parâmetros de ordem:

$$M_A = \langle s_i \rangle_A, \quad M_B = \langle s_i \rangle_B, \quad Q_A = \langle s_i^2 \rangle_A, \quad Q_B = \langle s_i^2 \rangle_B, \quad (4.3)$$

onde A e B referem-se as duas sub-redes (tais distinções somente aparecerão quando a simetria de sub-rede for quebrada). É esperada que a teoria clássica de campo médio seja válida em altas dimensões, ou, pelo menos, seja uma boa aproximação. De conexões feitas com o modelo de Potts antiferromagnético de 3 estados, veremos adiante que novas estruturas multicríticas devem ocorrer em três dimensões ($d = 3$).

4.2 Diagramas de fases

Reproduziremos aqui os diagramas de fases (Figs. 4.1 a 4.9) [3] obtidos no espaço $(\frac{T}{zJ})$ versus o potencial químico $(\frac{\Delta}{zJ})$, para diferentes valores de $\frac{K}{J}$ e lembramos que, para uma maior comodidade do leitor, alguns destes diagramas serão rerepresentados no Cap. 5. Na Fig. 4.1, $\frac{K}{J} = 5$, vemos que a linha crítica termina num ponto crítico terminal E , sobre uma linha de transição de primeira ordem, que, por sua vez, termina num ponto crítico C . A fase ferromagnética f é caracterizada pela magnetização $M_A = M_B \neq 0$. A fase desordenada d exibe configurações densa e diluída, coexistindo no segmento de maiores temperaturas da linha de transição de primeira ordem.

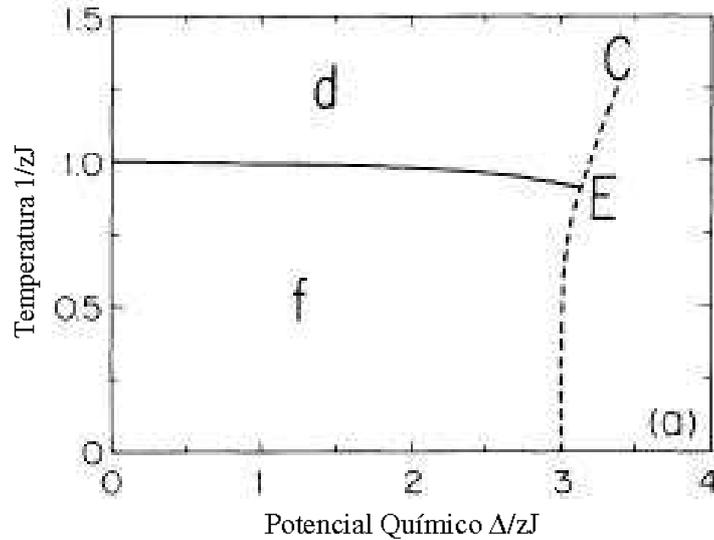


Figura 4.1: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 5$. A linha de primeira ordem (tracejada) termina no ponto crítico C e a linha crítica (contínua) termina no ponto crítico terminal E . A fase ferromagnética f é caracterizada por $M_A = M_B \neq 0$ e a desordenada d apresenta magnetização nula.

A Fig. 4.2 apresenta o diagrama de fases para $\frac{K}{J} = 3$, onde temos um ponto tricrítico T no encontro da linha crítica com uma transição de primeira ordem. Ocorre também um ponto triplo R e um ponto crítico C .

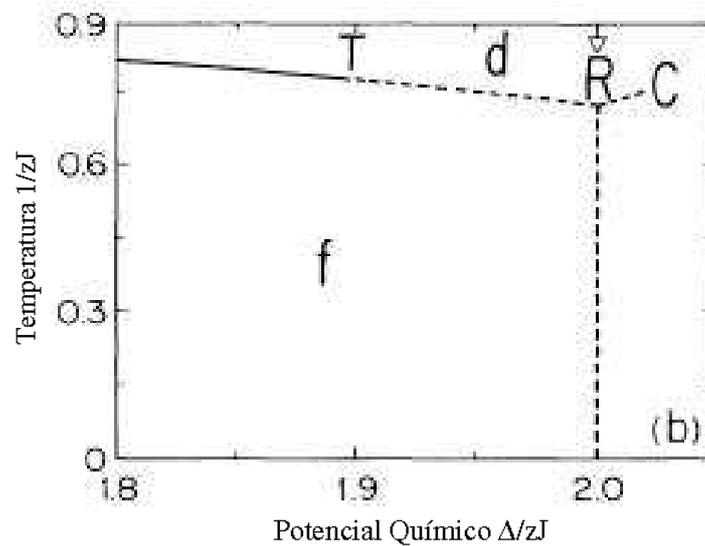


Figura 4.2: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 3$, com um ponto tricrítico (T), um triplo (R) e outro crítico (C).

Já na Fig. 4.3, no diagrama de fases para $\frac{K}{J} = 0$, temos somente o encontro da linha crítica com a linha de transição de primeira ordem num ponto tricrítico T , ambas separando a fase ferromagnética da desordenada.

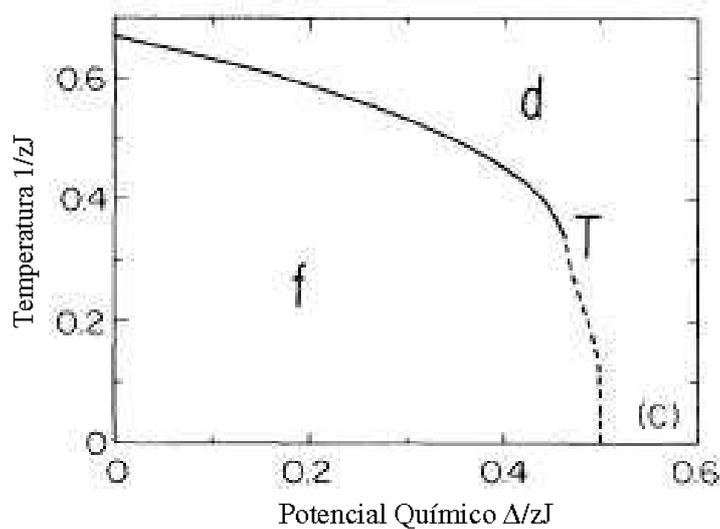


Figura 4.3: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 0$. Ponto tricrítico T no encontro entre a linha crítica e a transição de primeira ordem.

Os próximos seis diagramas de fases foram obtidos para valores negativos da constante $\frac{K}{J}$. O diagrama de fases tricrítico desenvolve uma topologia de reentrância dupla, como vemos na Fig. 4.4 para $\frac{K}{J} = -0,15$. Ao baixar a temperatura mantendo constante o campo cristalino, uma sequência desordenada-ferromagnética-desordenada-ferromagnética de fases foi encontrada. Esta topologia termina em um ponto de quarta ordem, ocorrendo no limite de estabilidade da tricriticalidade, $\frac{K}{J} = \frac{1}{\sqrt{10}} - \frac{1}{2} \approx -0,18$.

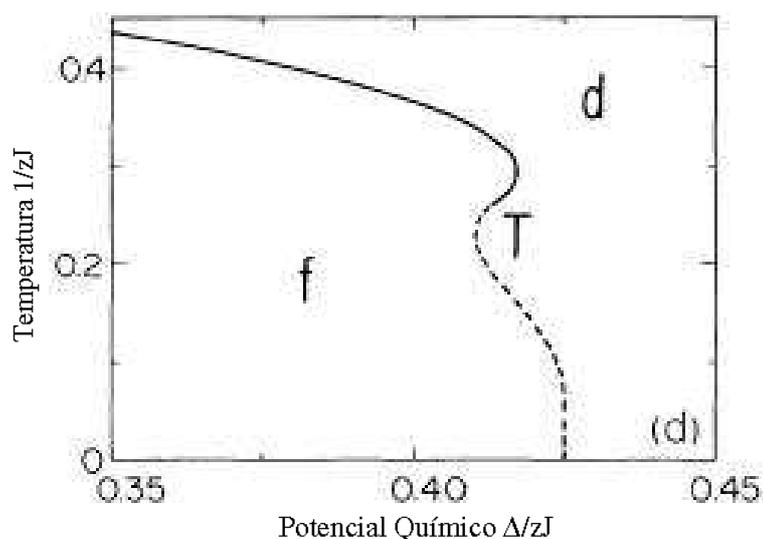


Figura 4.4: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = -0,15$, com uma reentrância dupla próxima ao ponto tricrítico T .

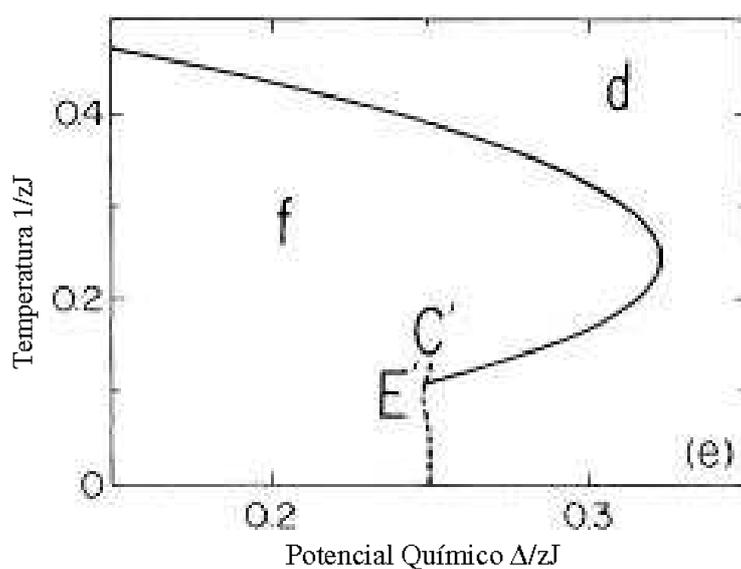


Figura 4.5: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = -0,5$, com um ponto crítico terminal E' e um ponto crítico C' inserido na fase ferromagnética.

Para $\frac{1}{\sqrt{10}} - \frac{1}{2} > \frac{K}{J} > -1$ (Fig. 4.5) ocorre um ponto crítico terminal E' e, inserida na fase ferromagnética, um segmento da linha de transição de primeira ordem, terminando num ponto crítico C' . Assim, neste caso, a fase ferromagnética exibe configurações coexistindo no segmento de altas temperaturas da linha de transição de primeira ordem. Estas fases de coexistentes, quatro ao todo, quando a magnetização para cima e para baixo é contabilizada, são as fases que tornam-se mutualmente críticas no ponto de quarta ordem mencionado anteriormente. Distingue-se essa estrutura interna ponto crítico-ponto crítico terminal da externa ponto crítico-ponto crítico terminal pelos valores maiores e positivos de $\frac{K}{J}$.

Com $\frac{K}{J}$ se aproximando de -1 , essa estrutura interna colapsa em direção a temperatura zero e assim desaparece em $\frac{K}{J} = -1$. Para esse valor de $\frac{K}{J}$ uma linha crítica reentrante alcança a temperatura zero (Fig. 4.6) no ponto Z , que, como um ponto crítico caracterizado por flutuações a temperatura zero, deve estar numa classe de universalidade diferente daqueles pontos da linha crítica que nele termina.

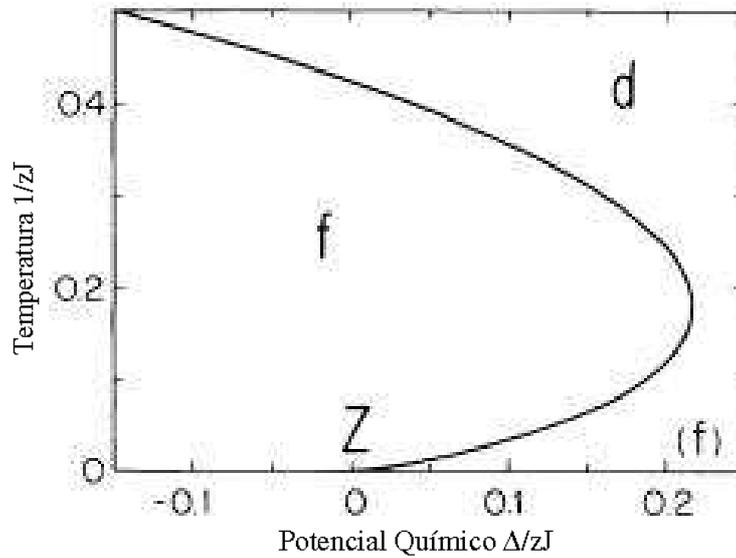


Figura 4.6: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ com a variável $\frac{K}{J} = -1$.

Para $\frac{K}{J} < -1$, duas novas fases ordenadas aparecem. A fase ferrimagnética [17] é caracterizada pela ocorrência de duas magnetizações de sub-redes diferentes e não nulas:

$$0 \neq M_A \neq M_B \neq 0, \quad Q_A \neq Q_B. \quad (4.4)$$

A fase antiquadrupolar [17] tem quebra de simetria de sub-rede, porém magnetização

nula:

$$M_A = M_B = 0, \quad Q_A \neq Q_B. \quad (4.5)$$

Assim, para $-1 > \frac{K}{J} > -3$, as fases ferromagnética f e antiquadрупolar a são separadas da fase desordenada por duas linhas críticas que se encontram no ponto bicrítico [18] B , como podemos ver na Fig. 4.7. Por sua vez, a fase antiquadрупolar é separada das fases de magnetização não nula pela linha de primeira ordem que termina no ponto bicrítico. As fases ferromagnética f e ferrimagnética i são separadas por outra linha crítica que termina no ponto crítico terminal E'' sobre a linha de primeira ordem. Os pontos de temperatura zero (S) ($\frac{1}{zJ} = 0$), ($\frac{\Delta}{zJ} = \frac{K}{J} + 1$) e ($\frac{K}{J} \leq -1$), onde as três fases ordenadas se encontram, são pontos de alta degenerescência, a saber, estado ferromagnético saturado ($M_A = Q_A = M_B = Q_B = 1$), estado antiquadрупolar ($Q_A = 1, M_A = M_B = Q_B = 0$) e o estado macroscópico ferrimagnético ($M_A = Q_A = 1, \frac{1}{2} < M_B = Q_B < 1$) minimizam a energia livre de campo médio.

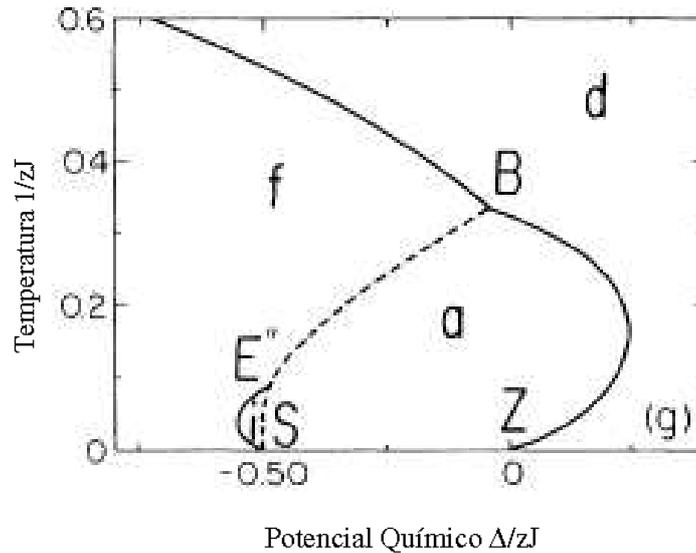


Figura 4.7: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = -1,5$. Surgimento de duas novas fases: a ferrimagnética i e a antiquadрупolar a .

Com $\frac{K}{J}$ tendendo a -3 , o ponto crítico terminal se aproxima do ponto bicrítico e em $\frac{K}{J} = -3$ esses dois pontos se fundem, como vemos na Fig. 4.8. Uma nova topologia multicrítica é encontrada ao redor do ponto A , onde três linhas críticas e uma de primeira ordem se encontram. A linha de transição de primeira ordem ocorre a um campo cristalino constante (e a linha crítica de baixa temperatura alcança o ponto A verticalmente). De fato, na região $\frac{K}{J} = -3, \frac{\Delta}{zJ} = -2$, em que se encontra a linha de primeira ordem, o modelo BEG se reduz ao modelo de Potts antiferromagnético de três estados [19]:

Para $\frac{K}{J} < -3$, um ponto tetracrítico M aparece no encontro de quatro linhas críticas diferentes como pode ser visto na Fig. 4.9. A linha crítica ferrimagnética-antiquadrupolar termina, a baixa temperatura, em outro ponto tricrítico T'' , além do qual a transição passa a ser de primeira ordem. Assim, esse ponto tricrítico está totalmente inserido em fases ordenadas. Finalmente, com $\frac{K}{J}$ mais negativo, o ponto tricrítico T'' move-se para temperaturas mais baixas e a região antiquadrupolar para temperaturas mais altas.

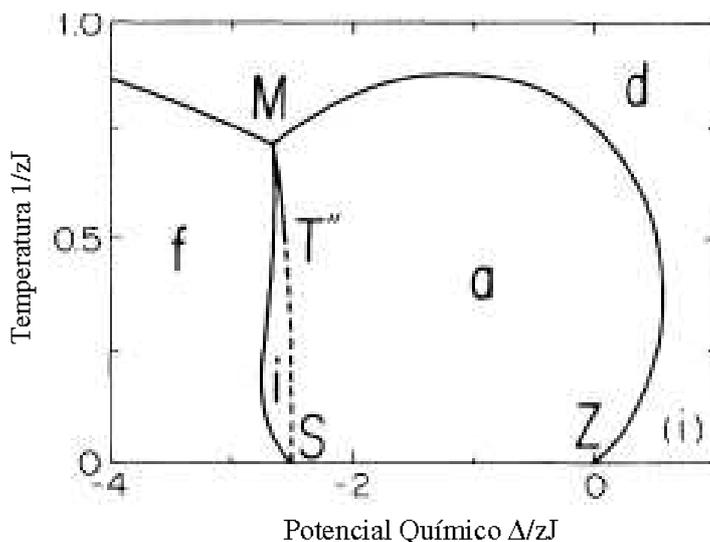


Figura 4.9: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = -3,5$. A confluência de quatro linhas críticas origina o ponto tetracrítico M , e tem o ponto tricrítico T'' inserido na fase ordenada.

Vemos assim, que uma grande variedade de transições de fases surgem ao introduzirmos uma interação biquadrática negativa no modelo.

5 Diagramas de Fases, Resultados e Discussões

5.1 Introdução

Apresentaremos nesta seção os diagramas de fases obtidos numericamente para o modelo BEG puro e com diferentes tipos de sequências aperiódicas, para várias relações r entre as interações. A hamiltoniana do modelo Blume-Emery-Griffiths é dada por: $\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^2 s_j^2 + D \sum_i s_i^2$ onde $s_i = \pm 1, 0$, $J_{ij} = J_A, J_B$ e $\langle i, j \rangle$ representa as interações entre os primeiros vizinhos, na rede de Bethe, no limite de coordenação infinita ($z \rightarrow \infty$, $J_{ij}, K \rightarrow 0$ e zJ_{ij}, zK finitos).

Obtemos o mapa bidimensional para a magnetização parcial m_{n+1} e para o momento de quadrupolo parcial q_{n+1} da $(n+1)$ -ésima camada em função de m_n e q_n :

$$m_{n+1} = \frac{2 \sinh\left(\frac{m_n}{t_{ij}}\right)}{2 \cosh\left(\frac{m_n}{t_{ij}}\right) + \exp\left(\frac{D - Kzq_n}{k_B T}\right)} \quad (5.1)$$

$$q_{n+1} = \frac{2 \cosh\left(\frac{m_n}{t_{ij}}\right)}{2 \cosh\left(\frac{m_n}{t_{ij}}\right) + \exp\left(\frac{D - Kzq_n}{k_B T}\right)} \quad (5.2)$$

onde $k_B \equiv \text{const. de Boltzmann}$, $T \equiv \text{temp. absoluta}$ e $t_{ij} = \frac{k_B T}{zJ_{ij}}$.

Inicialmente estudamos o caso puro, $J_A = J_B = J$, iterando o mapa bidimensional acima 100.000 vezes por ponto, com passos de 0,01 nas variáveis D e T , partindo de condições iniciais arbitrárias para m_n e q_n , determinando assim os diagramas de fases $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ para diferentes valores de $\frac{K}{J}$.

De maneira similar, obtivemos os diagramas de fases com aperiodicidade gerada por duplicação de período. Nestes casos o número de iterações implementadas foi de 2^{18} vezes por ponto, que é o tamanho da sequência aperiódica criada. Para aqueles obtidos por triplicação de período o número de iterações foi de 3^{12} , com passos de 10^{-4} nas variáveis

D e T em ambos os casos.

Para os casos aperiódicos, utilizamos diversos valores de $r = \frac{J_B}{J_A} - 1$, que é um parâmetro que nos evidencia que não diferentes são as duas interações existentes na sequência aperiódica. Os valores de $\frac{K}{J_A}$ utilizados são os mesmos que Hoston e Berker utilizaram, para que pudéssemos comparar os resultados.

5.2 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = 5$

5.2.1 Caso puro ($r = 0$)

Primeiramente, é importante lembrarmos que a fase paramagnética ou desordenada P é caracterizada pela magnetização parcial nula e pelo momento de quadrupolo parcial não nulo ($m^* = 0, q^* \neq 0$). As fases paramagnéticas P_1 e P_2 , apresentadas na Fig. 5.1, possuem momentos de quadrupolo parciais que se aproximam de 1 e de 0, respectivamente. Já a fase ferromagnética ou ordenada F possui magnetização e momento de quadrupolo parciais não nulos ($m^* \neq 0, q^* \neq 0$).

O diagrama de fases apresentado na Fig. 5.1 foi obtido numericamente para o caso puro, onde todas as interações entre os spins primeiros vizinhos têm a mesma intensidade. Comparando-o com o diagrama da Fig. 5.3, obtido por Hoston e Berker [3] para $\frac{K}{J} = 5$, podemos verificar a equivalência que há entre os dois.

Existe uma linha de transição de primeira ordem entre os limites de estabilidade das fases P_2 , P_1 e F na Fig. 5.1, não obtida por não ser de interesse do nosso trabalho, que equivale à linha de transição de primeira ordem apresentada na Fig. 5.3. Portanto, é como se, *grosso modo*, esta última tivesse se aberto nos limites de estabilidade da Fig. 5.1, dando origem às regiões de coestabilidade $P_1 + P_2$, acima do ponto crítico terminal E e $F + P_2$ na região inferior do diagrama.

Além disso, observamos uma pequena região de coestabilidade entre as fases $F + P_2 + P_1$ abaixo da região $P_1 + P_2$ e que está ampliada na Fig. 5.2.

A região de coestabilidade $P_1 + P_2$ da Fig. 5.1 está demarcada pelos limites de estabilidade da fase P_2 , da fase P_1 e da fase F . Ao iterarmos o mapa bidimensional dado por (5.1) e (5.2) num ponto desta região, verificamos que a magnetização parcial m_n torna-se nula independentemente das condições iniciais m_0 e q_0 com as quais começamos a iteração. Já o momento de quadrupolo q_n possui dois atratores distintos com momentos de quadrupolos q_1 e q_2 , constantes, que dependem diretamente das condições iniciais de iteração m_0 e

q_0 . Isso nos mostra que a fase P_1 é definida pelo atrator $(m^*, q^*) = (0, q_1)$ e a fase P_2 por $(m^*, q^*) = (0, q_2)$.

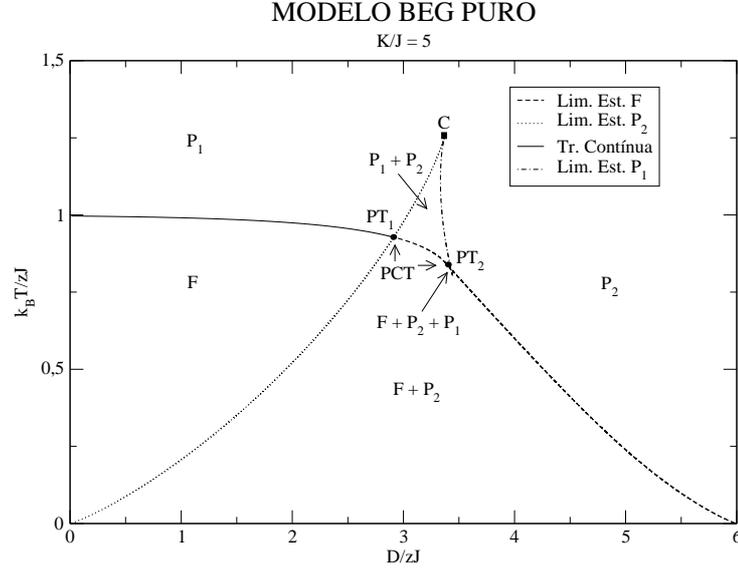


Figura 5.1: Diagrama de fases $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 5$ no modelo puro. F representa a fase ferromagnética, P_1 e P_2 as fases paramagnéticas existentes, $P_1 + P_2$ representa a região de coestabilidade entre as duas fases paramagnéticas, $F + P_2$ a região de coestabilidade entre a fase ferromagnética F e a fase paramagnética P_2 . $F + P_2 + P_1$ representa a uma pequena região de coestabilidade, C representa o ponto crítico e PT_1 , PT_2 são os pontos entre os quais se encontra o ponto crítico terminal PCT . Além disso, a linha pontilhada representa o limite de estabilidade da fase P_2 , a tracejada o limite de estabilidade da fase F , a contínua representa a transição contínua $F - P_1$ e a linha pontilhada-tracejada representa o limite de estabilidade da fase P_1 .

Na fase paramagnética P_1 , onde os valores de D são menores, os atratores dos momentos de quadrupolo parciais q_1 são próximos de 1 e a minimização da energia privilegia os spins $s = \pm 1$. Já na fase paramagnética P_2 , em que os valores de D são maiores, os atratores dos momentos de quadrupolo parciais q_2 são próximos de 0 e a minimização da energia se dá para $s = 0$. Para valores extremos de $\frac{D}{zJ}$, temos: $\frac{D}{zJ} \rightarrow -\infty$, $q \rightarrow 1$ e $\frac{D}{zJ} \rightarrow \infty$, $q \rightarrow 0$.

Por outro lado, em qualquer ponto da região de coestabilidade $F + P_2$, que está demarcada pelos limites de estabilidade da fase P_2 e da fase F , obtem-se dois atratores dependentes das condições iniciais m_0 e q_0 : um com $m^* = 0$ e $q^* \neq 0$ que caracteriza a fase P_2 e outro com $m^* \neq 0$ e $q^* \neq 0$ que caracteriza a fase F .

O ponto crítico C da Fig. 5.1 é o término dos limites de estabilidade das fases P_2 e P_1 e corresponde ao ponto C do diagrama de fases da Fig. 5.3. Na linha tracejada entre os pontos PT_1 e PT_2 encontra-se um ponto crítico terminal PCT , que é o fim da transição

contínua $F - P_1$ e que corresponde ao ponto E da Fig. 5.3. Se utilizássemos a energia livre das fases P_1 , P_2 e F determinaríamos exatamente onde se localiza o ponto PCT . No entanto, este não é o foco do nosso trabalho, estamos interessados em como o diagrama de fases do modelo se modifica na presença de aperiodicidade nas interações e, neste caso, não temos a energia livre do modelo com aperiodicidade.

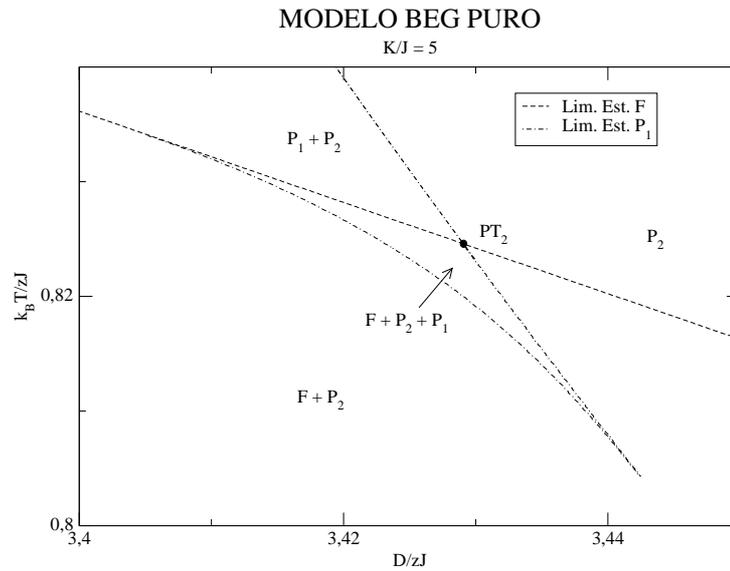


Figura 5.2: Ampliação da região de coestabilidade $F + P_2 + P_1$ do diagrama de fases $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 5$ no modelo puro.

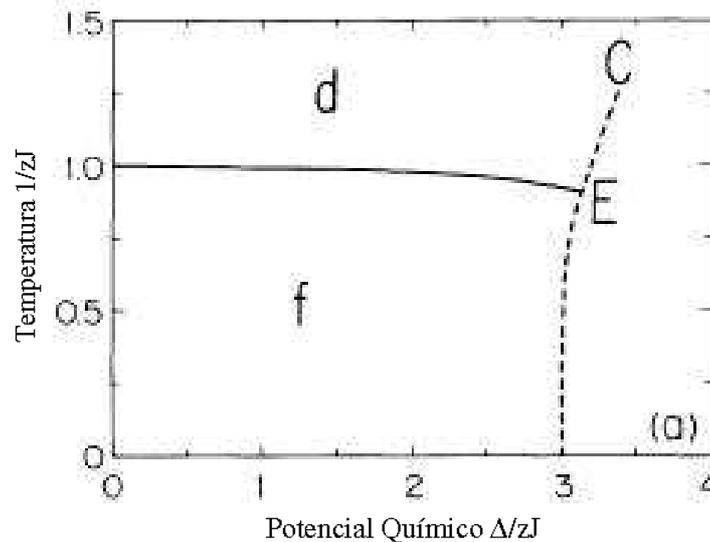


Figura 5.3: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 5$ apresentado por Hoston e Berker [3] onde f representa a fase ferromagnética, d a fase paramagnética, C representa o ponto crítico e E o ponto crítico terminal. A linha tracejada representa a transição de primeira ordem e a linha contínua a transição contínua.

5.2.2 Caso aperiódico: duplicação de período

Nesta parte do trabalho, introduzimos a aperiodicidade criada pela sequência aperiódica chamada duplicação de período na iteração do mapa bidimensional, para diferentes valores da variável r , a fim de determinarmos a influência dessas interações aperiódicas nas linhas de transição de fases.

O diagrama de fases da Fig. 5.4 foi obtido numericamente com $r = -0,5$, ou seja, $J_B = \frac{J_A}{2}$, que significa enfraquecer as ligações entre os spins. Podemos notar que as temperaturas críticas da linha de transição $F - P_1$ são menores do que no caso puro ($r = 0$) da Fig. 5.1.

Conseqüentemente temos uma diminuição da região ferromagnética F e da região de coestabilidade $F + P_2$ com um aumento da região de coestabilidade $P_1 + P_2$, entretanto a localização do ponto C do diagrama de fases não é afetada com a diminuição do valor de r . Percebemos também uma pequena diminuição na região de coestabilidade $F + P_2 + P_1$ em relação ao caso puro, como podemos ver comparando a Fig. 5.5 com a Fig. 5.2.

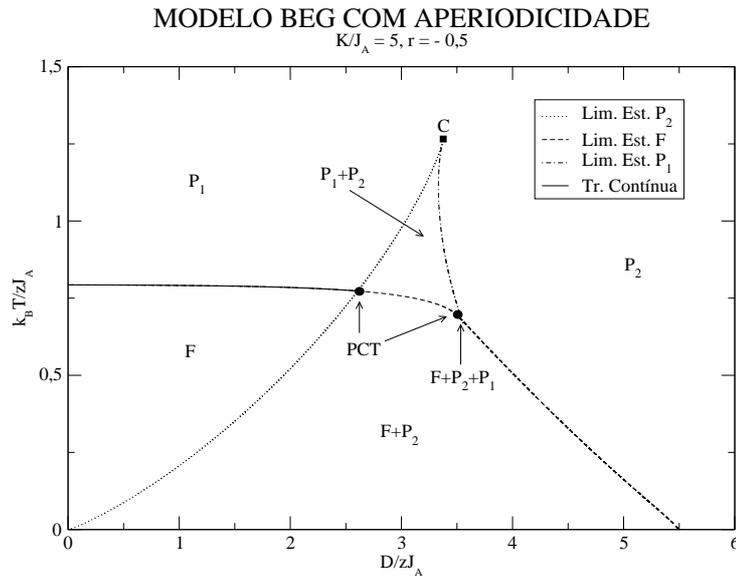


Figura 5.4: Diagrama $\frac{k_B T}{z_A}$ versus $\frac{D}{z_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = -0,5$. Diminuição da região F , das regiões de coestabilidade $F + P_2$ e $F + P_2 + P_1$; e o aumento da região de coestabilidade $P_1 + P_2$, são algumas das conseqüências do enfraquecimento das interações J_B entre os spins.

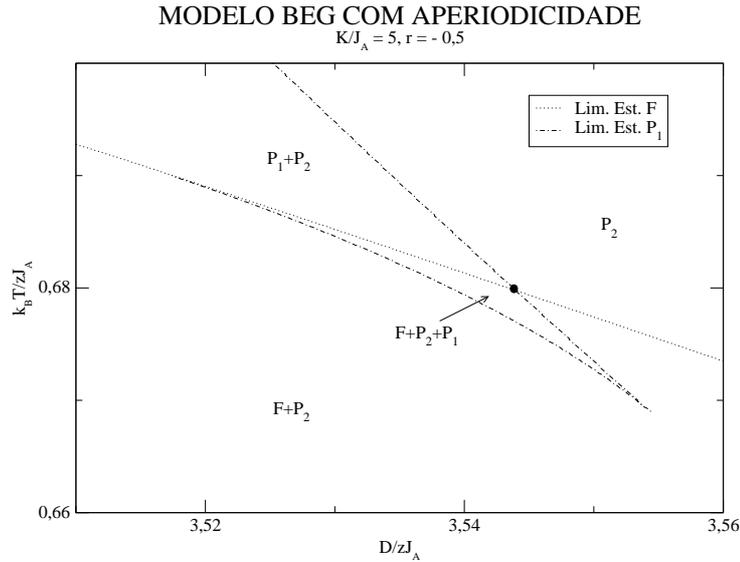


Figura 5.5: Ampliação da região de coestabilidade $F + P_2 + P_1$ do diagrama de fases $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 5$ e $r = -0,5$.

Na Fig. 5.6 apresentamos o diagrama de fases obtido numericamente para $r = 2,0$ que equivale tornar as interações mais fortes ($J_B = 3J_A$). Isso faz com que as temperaturas críticas das transições contínuas agora sejam elevadas, o que aumenta as regiões F , $F + P_2$ e $F + P_2 + P_1$. Já a região de coestabilidade $P_1 + P_2$ diminui, como podemos verificar ao compararmos o diagrama de fases da Fig. 5.6 com o da Fig. 5.1.

Ainda analisando estes dois diagramas de fases, percebemos que o limite de estabilidade da fase paramagnética P_2 permanece fixo ao variarmos r . O motivo para esta invariância é que para a magnetização nula, as relações de recorrências (5.1) e (5.2) independem de r . Já a extensão do limite de estabilidade da fase paramagnética P_1 em relação a P_2 pode ser maior ou menor dependendo do valor de r . Este diagrama de fases é qualitativamente equivalente ao obtido para o caso puro com $\frac{K}{J} = 3$.

No diagrama de fases da Fig. 5.7, obtido numericamente para $r = 3,8$, evidenciamos o quase desaparecimento da região de coestabilidade $P_1 + P_2$ devido ao fortalecimento das interações entre os spins. Ressaltamos o aparecimento de uma região de coestabilidade $F + P_1$ e um ponto tricrítico PTC , que é aquele onde termina a transição contínua e começa a transição de primeira ordem.

De maneira empírica, determinamos o valor de r para o qual a região de coestabilidade $P_1 + P_2$ desaparece completamente, e obtivemos numericamente o diagrama de fases utilizando este valor ($r = 4,914$). Aqui também temos o ponto tricrítico PTC mostrado na Fig. 5.8, que é equivalente ao diagrama do caso puro com $\frac{K}{J} = 0$ (Fig. 5.14).

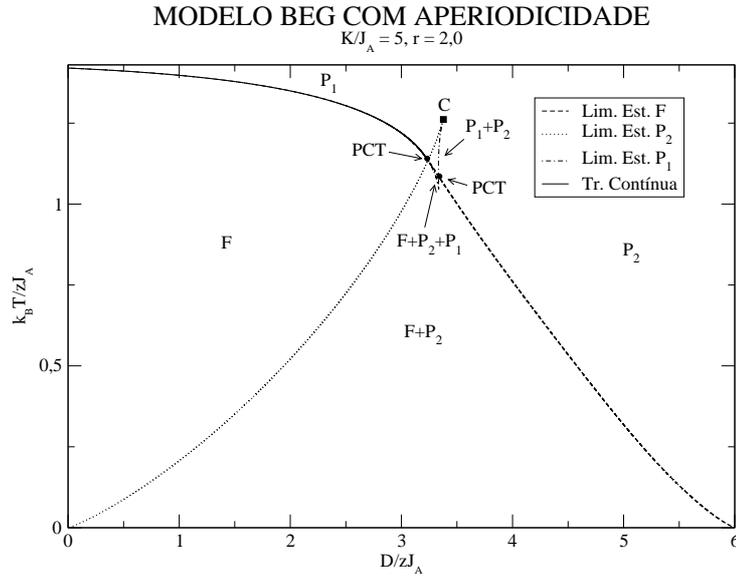


Figura 5.6: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 2,0$. O fortalecimento das interações entre os spins eleva a temperatura crítica da transição contínua e o limite de estabilidade da fase F . Assim, há um aumento das regiões F , $F + P_2$, $F + P_2 + P_1$ e consequente diminuição de $P_1 + P_2$.

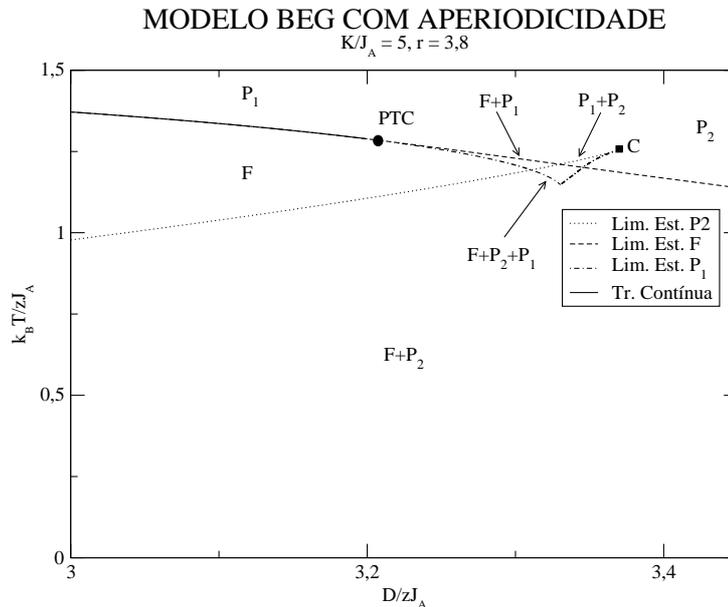


Figura 5.7: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 3,8$. O fortalecimento das interações diminui drasticamente a região de coestabilidade $P_1 + P_2$. Aumenta a região de coestabilidade $F + P_2 + P_1$ e faz surgir outra região de coestabilidade: $F + P_1$.

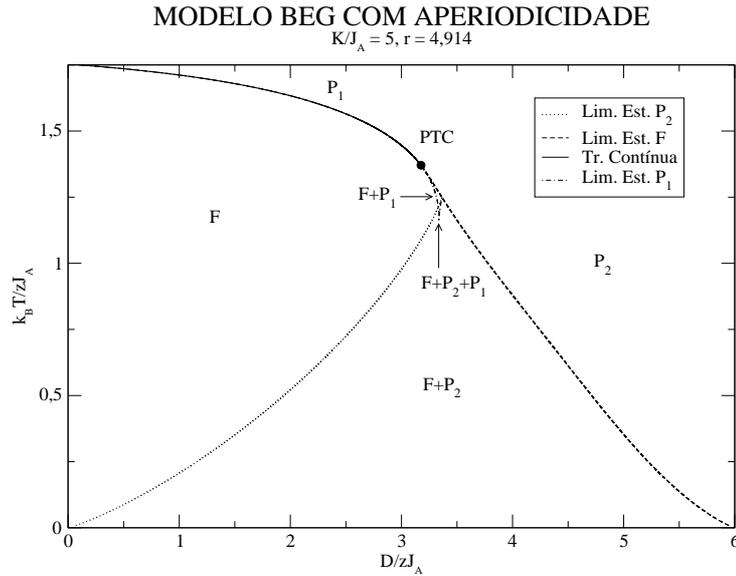


Figura 5.8: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 4,914$. Neste caso não há mais a região de coestabilidade $P_1 + P_2$.

5.2.3 Caso aperiódico: triplicação de período

Lembramos neste momento, que as características e os detalhes para a obtenção das sequências aperiódicas por duplicação e triplicação de período podem ser vistos no Cap.2.

Na Fig. 5.9 apresentamos, para efeito de comparação, um diagrama de fases obtido numericamente com aperiodicidade por duplicação e outro por triplicação de período, ambos para $r = 1,0$. Podemos perceber uma pequena diferença entre os dois diagramas de fases sugerindo que, para valores de D menores, as interações entre os spins são mais fortes para a aperiodicidade por triplicação do que para duplicação de período. Surpreendentemente observamos o efeito contrário para valores de D maiores. No entanto não podemos concluir como varia a linha de primeira ordem por não termos a expressão da energia livre.

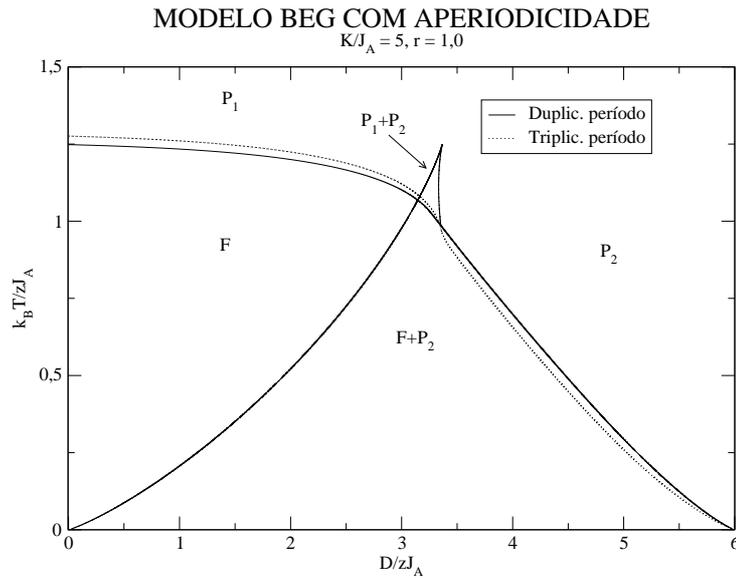


Figura 5.9: Diagrama $\frac{k_B T}{z_A}$ versus $\frac{D}{z_A}$ com aperiodicidade por duplicação e triplicação de período, ambos com $r = 1,0$.

5.3 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = 3$

5.3.1 Caso puro ($r = 0$)

Na Fig. 5.10 apresentamos o diagrama de fases obtido para o caso puro com $\frac{K}{J} = 3$ e notamos que o fato de diminuirmos a constante de acoplamento biquadrática K fez com que a região de coestabilidade $P_1 + P_2$ diminuisse consideravelmente. Verificamos ainda que o diagrama de fases apresentado a seguir é muito semelhante ao anteriormente apresentado na Fig. 5.7 ($\frac{K}{J_A} = 5$ e $r = 3,8$) nos sugerindo que o aumento das interações entre os spins equivale a enfraquecermos $\frac{K}{J}$.

Para efeito de comparação, apresentamos na Fig. 5.11 o diagrama obtido por Hoston e Berker [3] para $\frac{K}{J} = 3$. T representa o ponto tricrítico, que marca o fim da linha de transição contínua e o início da transição de primeira ordem, C é o ponto crítico no final de uma das linhas de transição de primeira ordem e R o ponto triplo no encontro das três linhas de transição de primeira ordem. A fase ferromagnética é representada por f e a fase paramagnética por d .

Similarmente ao que foi descrito na comparação entre os diagramas de fases das Figs. 5.1 e 5.3, podemos considerar *grosso modo* que as linhas de transição de primeira ordem da Fig. 5.11 se dividem em dois limites de estabilidade no diagrama de fases que obtivemos. A linha de transição de primeira ordem que termina no ponto crítico C se duplica originando a região de coestabilidade $P_1 + P_2$ por nós encontrada. Já a linha de transição de primeira

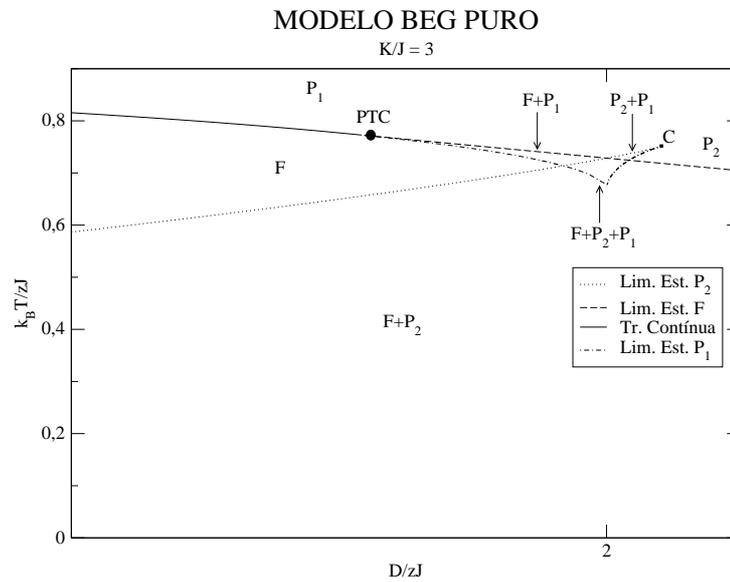


Figura 5.10: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ onde as iterações entre os spins têm a mesma intensidade e a região de coestabilidade $P_1 + P_2$ apresenta-se bastante reduzida.

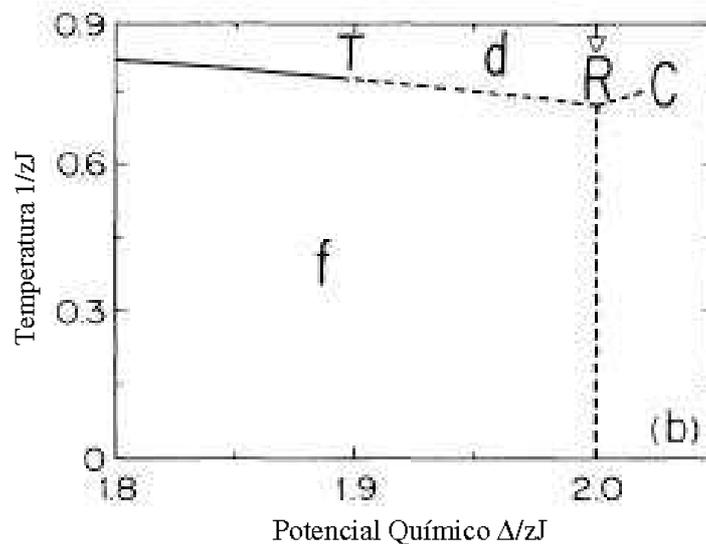


Figura 5.11: Diagrama $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 3$ apresentado por Hoston e Berker [3] onde f representa a fase ferromagnética, d a fase paramagnética, C representa o ponto crítico, T o ponto tricrítico e R o ponto triplo. As linhas tracejadas representam transições de primeira ordem e a linha contínua representa transições contínuas.

ordem que tem seu início no ponto tricrítico T corresponde à região de coestabilidade de $F + P_1$. Por outro lado a linha de primeira ordem vertical corresponde à região de coestabilidade $F + P_2$.

5.3.2 Caso aperiódico: duplicação de período

O diagrama da Fig. 5.12 foi obtido numericamente, com aperiódicidade dada por duplicação de período com $r = -0,9$. Ele evidencia que o enfraquecimento das interações entre os spins equivale a utilizarmos valores de $\frac{K}{J_A}$ maiores. Podemos perceber tal semelhança topológica comparando o diagrama de fases da Fig. 5.12 com o apresentado anteriormente na Fig. 5.1 para $\frac{K}{J} = 5$.

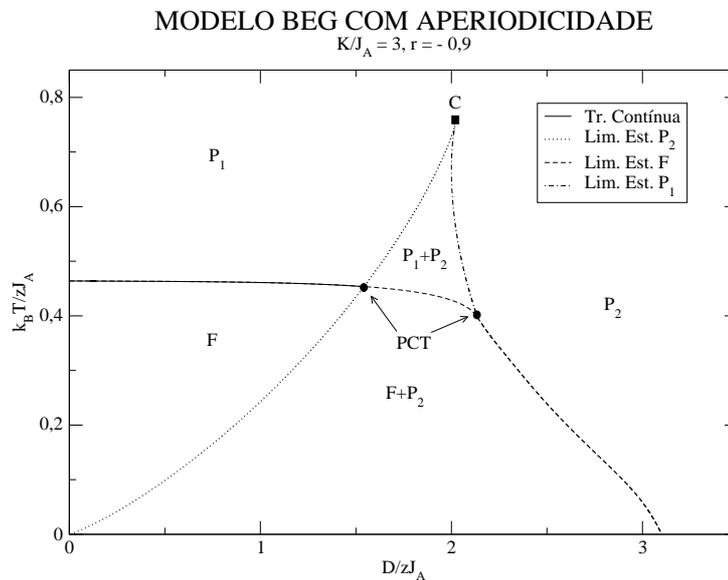


Figura 5.12: Diagrama $\frac{k_B T}{z_A}$ versus $\frac{D}{z_A}$ com aperiódicidade por duplicação de período e $r = -0,9$. O enfraquecimento das interações equivale a valores de $\frac{K}{J_A}$ maiores.

Por outro lado, o fortalecimento das interações entre os spins por meio de r maiores provoca uma elevação da temperatura crítica da transição contínua e do limite de estabilidade da fase ferromagnética, o que diminui a região de coestabilidade $P_1 + P_2$.

Verificamos empiricamente que para r igual ou superior a $0,177$, a região de coestabilidade $P_1 + P_2$ desaparece completamente, como pode ser visto no diagrama de fases da Fig. 5.13, obtido numericamente. Neste caso o valor de r para obter o diagrama de fases desta figura é bem menor do que seu equivalente para $\frac{K}{J_A} = 5$ (Fig. 5.8).

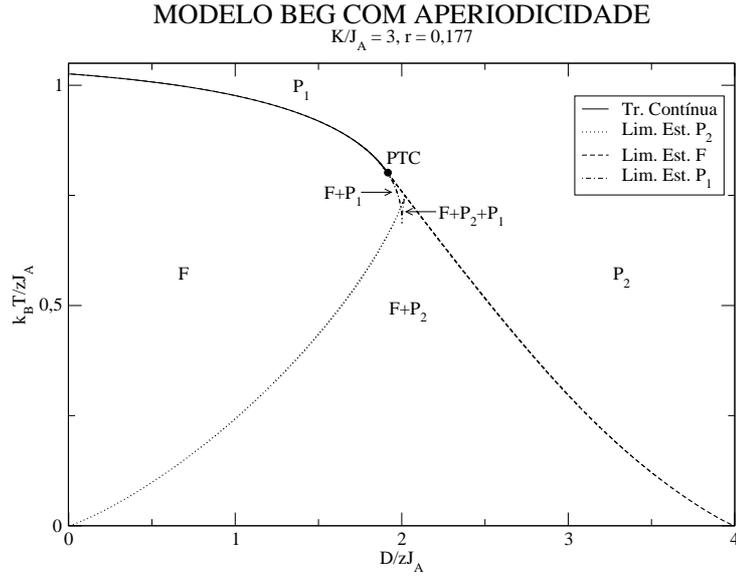


Figura 5.13: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 0,177$. O fortalecimento das interações destrói a região de coestabilidade $P_1 + P_2$.

5.4 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = 0$

5.4.1 Caso puro ($r = 0$)

No diagrama de fases da Fig. 5.14, obtido numericamente para $\frac{K}{J_A} = 0$ no caso puro, percebemos a ocorrência de uma fase ferromagnética F , de uma única fase paramagnética P e de uma região de coestabilidade entre essas duas últimas $F + P$, além de um ponto tricrítico representado por PTC .

Ao anularmos as interações biquadráticas K da hamiltoniana do modelo BEG apresentada anteriormente, estamos na verdade tratando do conhecido modelo Blume-Capel. Para efeito de comparação rerepresentamos na Fig. 5.15 o diagrama de fases obtido por Hoston e Berker [3] para $\frac{K}{J} = 0$. Podemos perceber a similaridade entre os dois ao pensarmos que a linha de transição de primeira ordem na Fig. 5.15 dá origem aos limites de estabilidade das fases paramagnética e ferromagnética, a partir do ponto tricrítico PTC na Fig. 5.14, e conseqüentemente a ocorrência da região de coestabilidade $F + P$.

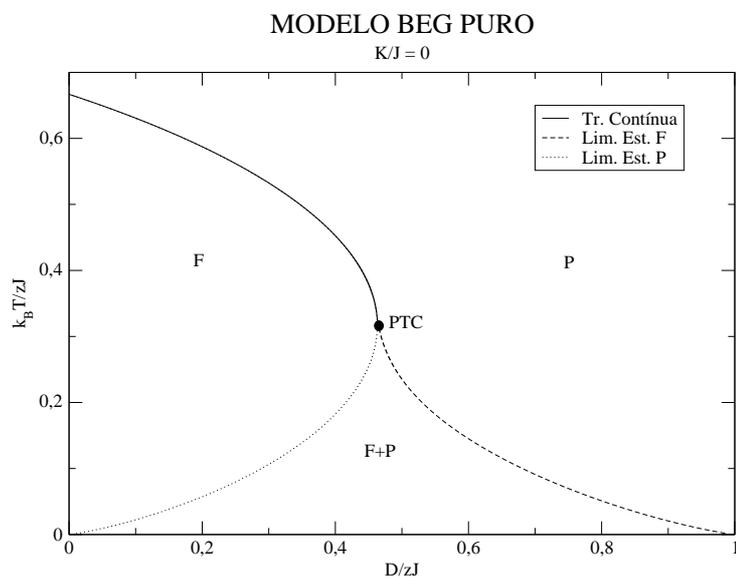


Figura 5.14: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ onde todas as interações têm a mesma intensidade. Temos aqui somente 3 regiões distintas: uma paramagnética P , uma ferromagnética F e outra de coestabilidade entre essas duas últimas $F + P$.

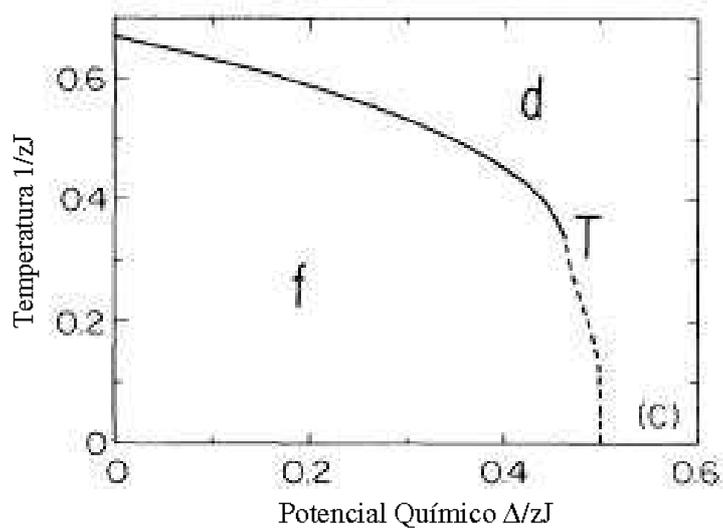


Figura 5.15: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = 0$. O ponto tricrítico T é o encontro entre a linha crítica e a linha de transições de primeira ordem.

5.4.2 Caso aperiódico: duplicação de período

A Fig. 5.16 apresenta o diagrama de fases obtido numericamente com aperiódicidade por duplicação de período e $r = 1,0$. Notamos um pequeno aumento da região ferromagnética F em relação ao diagrama de fases para caso puro da Fig. 5.14, devido ao aumento da temperatura crítica da transição contínua provocado pelo fortalecimento das interações entre os spins.

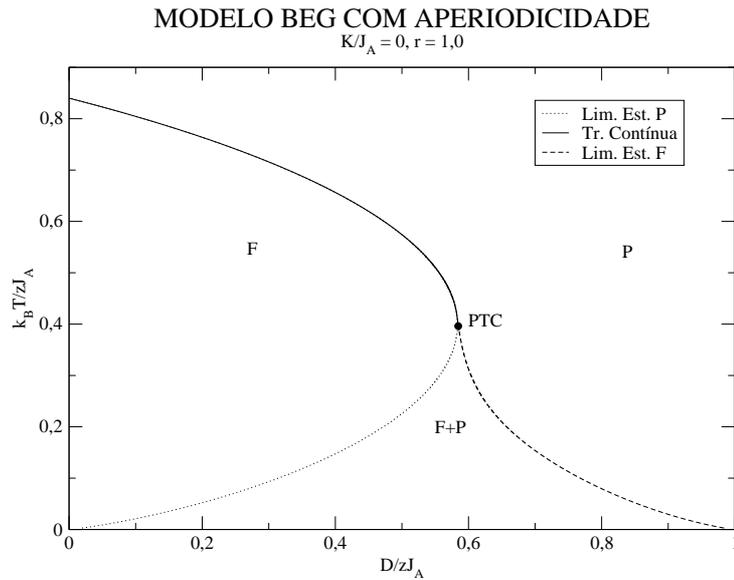


Figura 5.16: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ_A}$ versus $\frac{D}{zJ_A}$ com aperiódicidade por duplicação de período e $r = 1,0$. Pequeno aumento da região F em relação ao caso puro.

Comparando o diagrama de fases anterior com o diagrama de fases da Fig. 5.8, para $\frac{K}{J_A} = 5$ e $r = 4,914$, e o da Fig. 5.13, para $\frac{K}{J_A} = 3$ e $r = 0,177$, percebemos mais uma vez semelhanças entre eles, nos confirmando que o aumento da intensidade das interações entre os spins equivale a utilizarmos valores de $\frac{K}{J_A}$ menores.

Na Fig. 5.17 apresentamos seis diagramas de fases obtidos numericamente para diferentes valores de r . Percebemos que, para interações mais fracas ($r < 0$), o limite de estabilidade da fase ferromagnética altera a sua forma e diminui drasticamente a região de coestabilidade $F + P$. Para $r \gg 0$ temos uma reentrância no limite de estabilidade da fase ferromagnética como podemos ver para $r = 6,0$.

Verificamos ainda que para valores positivos de r os limites de estabilidade da fase paramagnética e da fase ferromagnética se concentram entre $\frac{D}{zJ_A} = 0$ e $\frac{D}{zJ_A} = 1$, respectivamente, à $T = 0$. Para valores negativos de r , também à $T = 0$, o limite de estabilidade da fase paramagnética continua sendo $\frac{D}{zJ_A} = 0$. Já o limite de estabilidade da fase ferromagnética vai assumindo valores menores de $\frac{D}{zJ_A}$ quanto mais negativo o valor de r , tendendo

a zero para valores de r muito negativos.

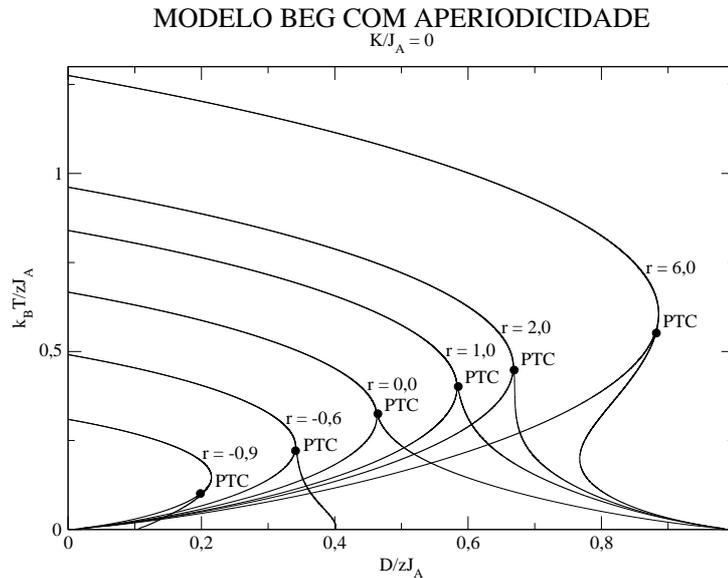


Figura 5.17: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e valores distintos de r . Tanto o enfraquecimento como o fortalecimento das interações provocam alterações na forma do limite de estabilidade da fase ferromagnética.

5.5 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -0,15$

5.5.1 Caso puro ($r = 0$)

Os diagramas de fases encontrados para $\frac{K}{J} = -0,15$ apresentam pequenas alterações em relação aos obtidos anteriormente para $\frac{K}{J} = 0$.

Ao compararmos as Figs. 5.14 e 5.18 percebemos que, para $\frac{K}{J} = -0,15$, ocorre uma contração de todo o diagrama, o que diminui as regiões ferromagnética F e de coestabilidade $F + P$, trazendo para baixo o ponto tricrítico PTC .

A seguir rerepresentamos o diagrama de fases obtido por Hoston e Berker [3] para $\frac{K}{J} = -0,15$. Percebemos que o diagrama de fases por nós obtido (Fig. 5.18) exibe a reentrância à temperaturas mais altas da Fig. 5.19 mas não mostra o formato da linha de primeira ordem à baixas temperaturas. A razão disso é que não conseguimos obter a expressão para a energia livre do modelo.

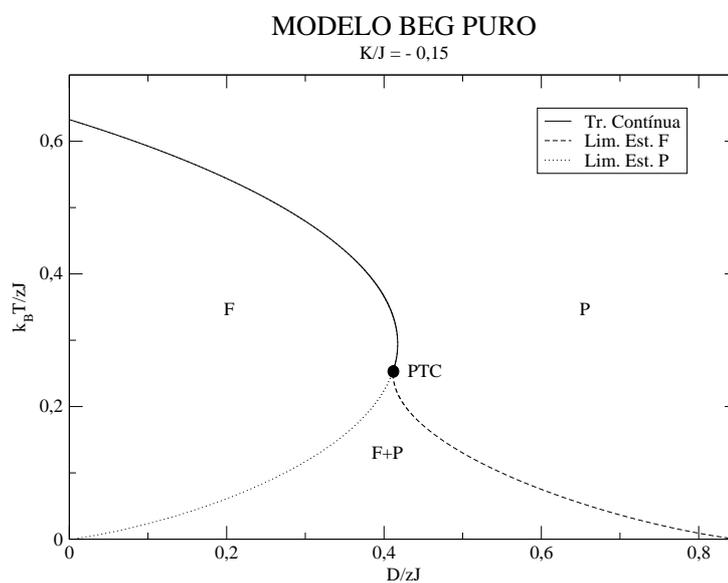


Figura 5.18: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = -0,15$, onde as iterações entre os spins são todas iguais.

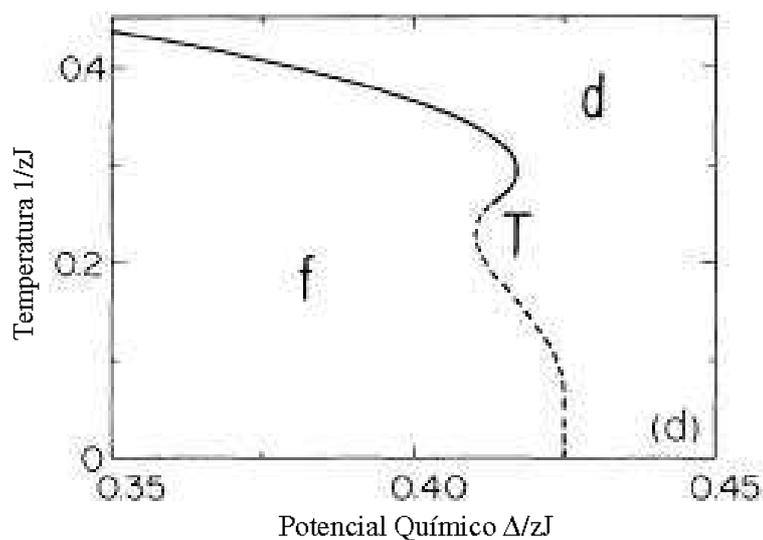


Figura 5.19: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J} = -0,15$, com uma reentrância dupla próxima ao ponto tricrítico T .

5.5.2 Caso aperiódico: duplicação de período

Percebemos que o aumento das interações entre os spins, dado por $r = 1,0$, provoca um aumento das regiões ferromagnética F e de coestabilidade $F + P$. As coordenadas $\frac{D}{zJ_A}$ e $\frac{k_B T}{zJ_A}$ do ponto tricrítico PTC também aumentam como pode ser visto na Fig. 5.20.

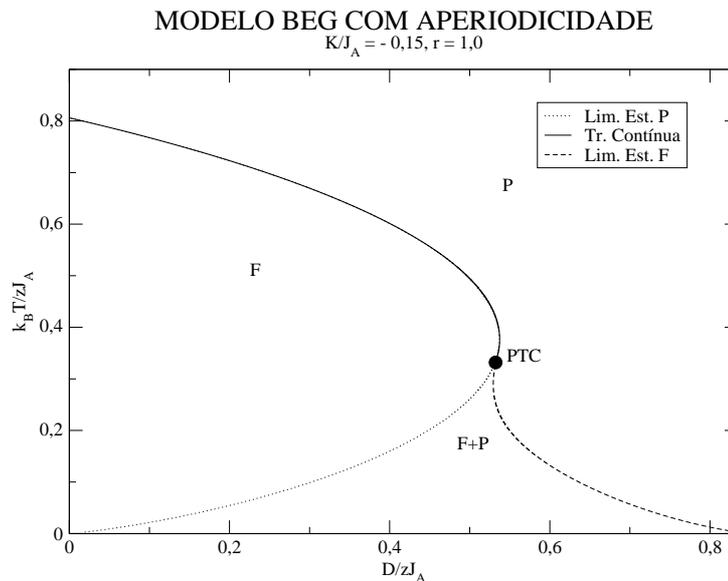


Figura 5.20: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ_A}$ versus $\frac{D}{zJ_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 1,0$.

Ao apresentarmos num mesmo diagrama os resultados obtidos para diferentes valores de r , percebemos o mesmo padrão encontrado na Fig. 5.17, para $\frac{K}{J} = 0$. Porém neste caso, para valores positivos de r , os limites de estabilidade da fase paramagnética e da fase ferromagnética se concentram entre $\frac{D}{zJ_A} = 0$ e próximos a $\frac{D}{zJ_A} = 0,8$, respectivamente, a $T = 0$, como podemos ver na Fig. 5.21.

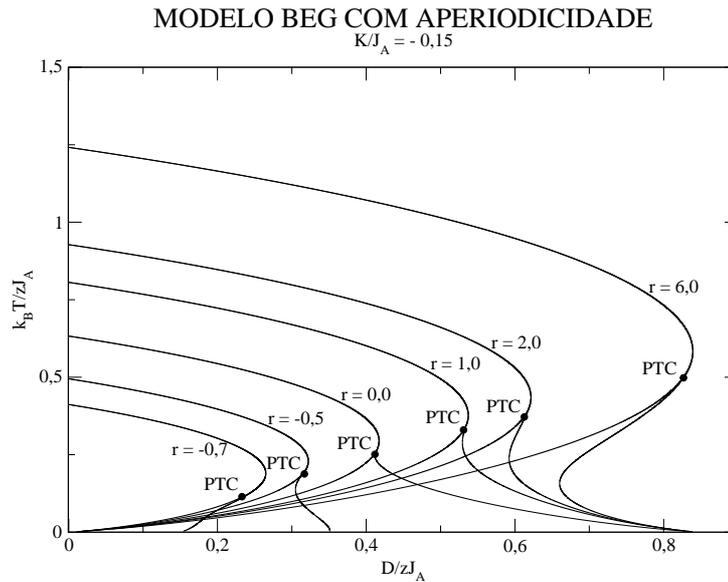


Figura 5.21: Diagrama $\frac{k_B T}{z_A}$ versus $\frac{D}{z_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e diversos valores de r . Para valores negativos de r , o limite de estabilidade da fase ferromagnética, à $T = 0$, tende a valores cada vez menores de $\frac{D}{z_A}$, quanto mais negativo for o valor de r .

5.6 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -0,5$

5.6.1 Caso puro ($r = 0$)

No diagrama de fases a seguir, obtido numericamente para $\frac{K}{J} = -0,5$, observamos uma região de coestabilidade entre duas fases ferromagnéticas $F_1 + F_2$, onde F_1 é caracterizada pelos atratores (m_1^*, q_1^*) de valores próximos a 1; e F_2 pelos atratores (m_2^*, q_2^*) de valores próximos a 0. Na extremidade final dos limites de estabilidade das fases F_1 e F_2 existe um ponto crítico C' .

Há uma outra região de coestabilidade $F_1 + P$ na parte inferior do diagrama de fases e também um ponto crítico terminal PCT , que se encontra em algum ponto da linha do limite de estabilidade da fase paramagnética P , como podemos ver representado pela seta \leftrightarrow na Fig. 5.22. Na Fig. 5.23 ampliamos a região próxima ao ponto crítico C' e a região de coestabilidade $F_1 + F_2$ da Fig. 5.22.

Já na Fig. 5.24 rerepresentamos o diagrama de fases obtido por Hoston e Berker [3] para $\frac{K}{J} = -0,5$ onde podemos perceber semelhanças com o diagrama de fases por nós obtido. A linha de transição de primeira ordem, a partir do ponto crítico C' na Fig. 5.24, dá origem aos limites de estabilidade da fase F_2 e F_1 e conseqüentemente às regiões de coestabilidade $F_1 + F_2$ e $F_1 + P$ na Fig. 5.22.

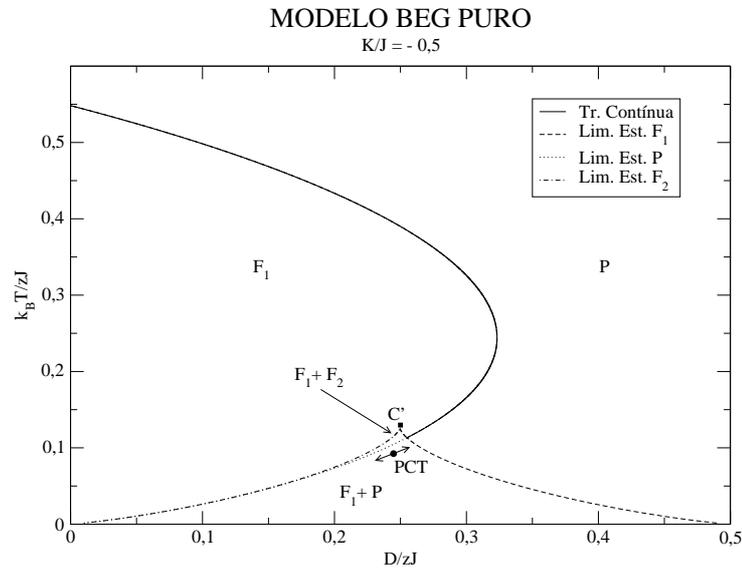


Figura 5.22: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ onde as iterações entre os spins têm a mesma intensidade. Aparece neste caso uma região de coestabilidade entre as duas fases ferromagnéticas F_1 e F_2 correspondente a uma linha de primeira ordem que termina num ponto crítico C' no interior da fase ferromagnética.

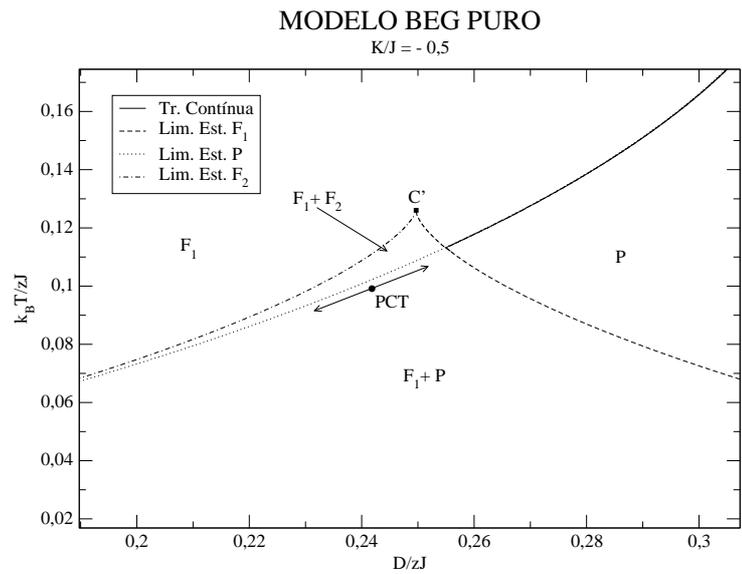


Figura 5.23: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ que evidencia a região próxima ao ponto crítico C' .

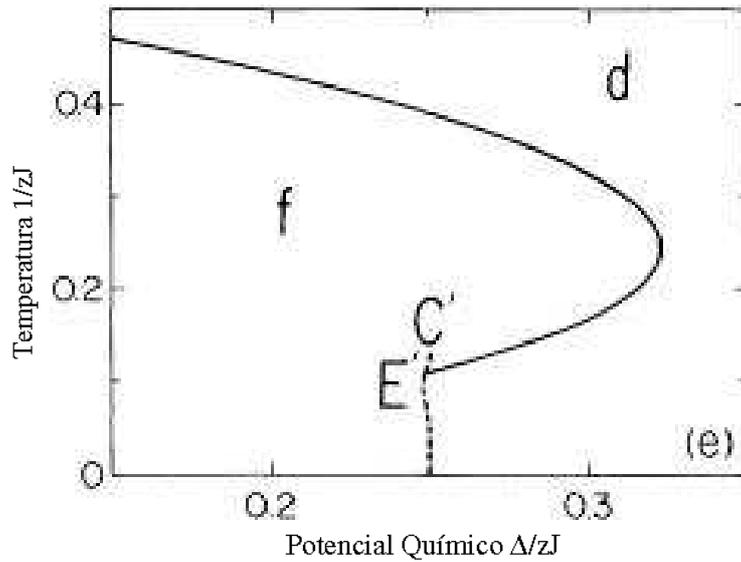


Figura 5.24: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ para $\frac{K}{J_A} = -0,5$, com um ponto crítico terminal E' e um ponto crítico C' no interior da fase ferromagnética f .

5.6.2 Caso aperiódico: duplicação de período

Na Fig. 5.25 apresentamos um diagrama de fases obtido numericamente para $r = 2,0$ onde verificamos que o fortalecimento das interações entre os spins aumenta a região ferromagnética F , acaba com a região de coestabilidade $F_1 + F_2$ e conseqüentemente com o ponto crítico C' . Além disso, o diagrama de fases torna-se semelhante aquele obtido para o caso puro para $\frac{K}{J_A} = -0,15$ (Fig. 5.18). Neste caso, o aumento das interações por meio de r maiores equivale a utilizarmos $\frac{K}{J_A}$ menores, em módulo.

Por outro lado, vemos no diagrama de fases obtido numericamente para $r = -0,3$ e apresentado na Fig. 5.26, que um leve enfraquecimento das interações entre os spins preserva a existência da região de coestabilidade $F_1 + F_2$ e diminui a região ferromagnética em relação ao caso $r = 0$. Ainda assim ocorre uma alteração significativa no limite de estabilidade da fase F_1 , que faz diminuir a região de coestabilidade $F_1 + P$.

Na Fig. 5.27 ampliamos a região de coestabilidade $F_1 + F_2$ e do ponto crítico C' da Fig. 5.26. O ponto crítico terminal PCT está localizado em algum ponto sobre a linha do limite de estabilidade da fase paramagnética P , representado pela seta \leftrightarrow e não determinado por nós por não termos a expressão da energia livre do sistema.

Para podermos melhor visualizar tais alterações provocadas por diferentes intensidades das interações entre os spins, aglutinamos os últimos resultados no diagrama de fases da Fig. 5.28.

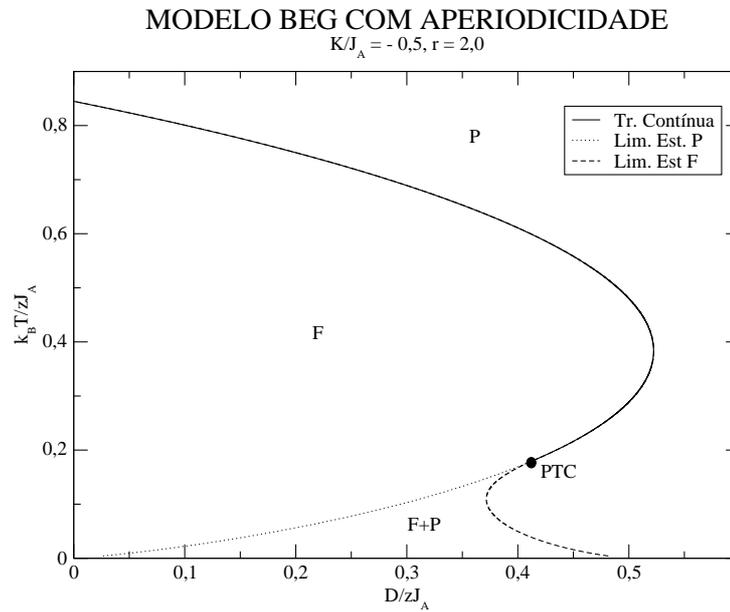


Figura 5.25: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 2,0$. O fortalecimento das interações acaba com a região de coestabilidade $F_1 + F_2$.

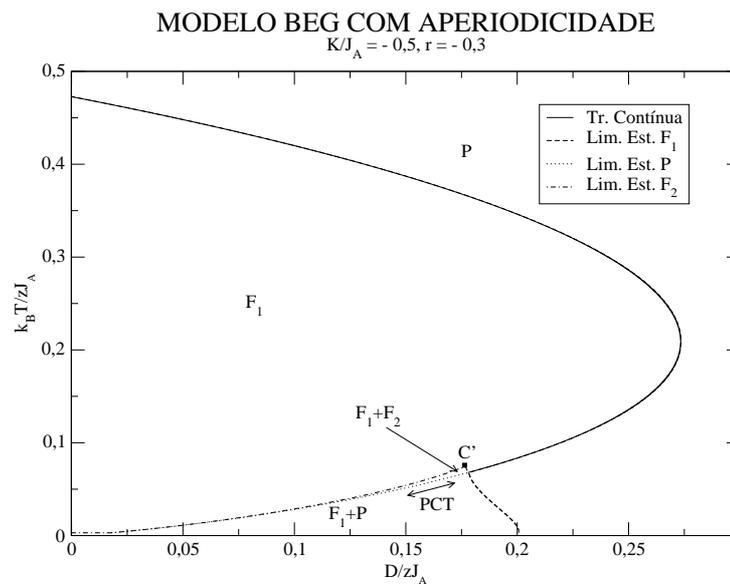


Figura 5.26: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = -0,3$. O enfraquecimento das interações altera o limite de estabilidade da fase F_1 .

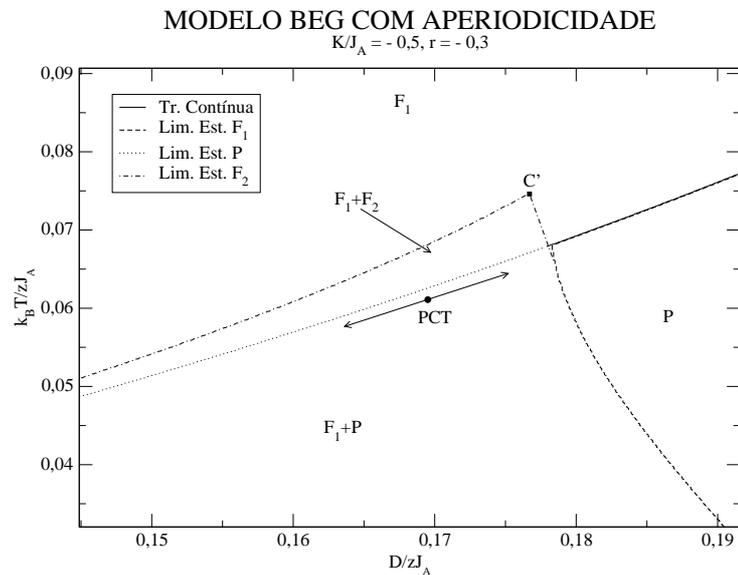


Figura 5.27: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = -0,3$. Ponto crítico terminal PCT , que se encontra em algum ponto da linha do limite de estabilidade da fase paramagnética P ,

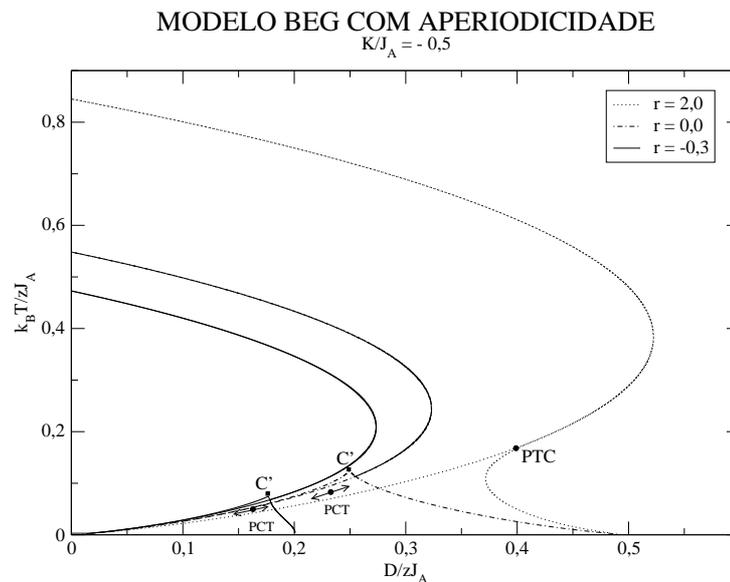


Figura 5.28: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação e diversos valores de r . Para $r = 2,0$ temos um ponto tricrítico PTC , para o caso puro e para $r = -0,3$ temos o ponto crítico terminal PCT .

5.6.3 Caso periódico AAB e aperiódico ($r = -0,8$)

Apresentamos a seguir dois diagramas de fases na mesma figura para efeito de comparação. O diagrama de fases aperiódico foi obtido com uma sequência por duplicação de período e $r = -0,8$, e o periódico, a partir de uma sequência periódica com módulo de repetição dado pelas letras *AAB*. Sabemos que em uma sequência infinita por duplicação de período temos uma proporção de $\frac{1}{3}$ de interações J_B , que é a mesma proporção das interações J_B na sequência periódica *AAB*.

Em ambos os diagramas de fases podemos notar a existência de uma região antiquadrupolar *AQ* onde a magnetização parcial é nula e a fase antiquadrupolar é dada por um ciclo 2: $(0, q_1^*)$, $(0, q_2^*)$, $(0, q_1^*)$, etc; e outra de coestabilidade $F + AQ$. Uma pequena diferença entre os dois diagramas ocorre no tamanho destas duas regiões. Para o caso aperiódico a região *AQ* é maior que o caso periódico, o inverso ocorre para a região $F + AQ$ como podemos ver na Fig. 5.29. Ressaltamos que este resultado não tem correspondência com os diagramas de fases apresentados por Hoston e Berker [3] portanto trata-se de um resultado inédito.

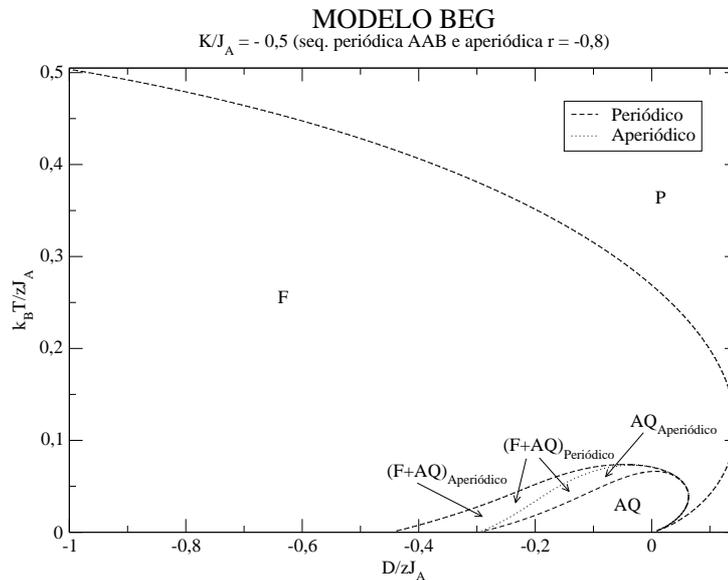


Figura 5.29: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e com uma sequência periódica do tipo *AAB*. A diferença entre ambos os diagramas está no tamanho das regiões *AQ* e $F + AQ$.

5.7 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -1$

5.7.1 Caso puro ($r = 0$)

No diagrama de fases obtido numericamente para $\frac{K}{J} = -1$ e apresentado na Fig. 5.30, há uma transição contínua separando as fases ferromagnética F e paramagnética P , assim como no obtido por Hoston e Berker [3] para o mesmo valor de $\frac{K}{J}$, como podemos comparar na Fig. 5.31.

Encontramos ainda uma região de coestabilidade $F + AQ$ inserida na região ferromagnética que não aparece no correspondente diagrama da Fig. 5.31. A fase antiquadrupolar AQ é caracterizada por magnetizações parciais de sub-rede nulas ($m_1^* = m_2^* = 0$) e momentos de quadrupolos parciais de sub-rede não nulos e diferentes entre si ($q_1^* \neq q_2^* \neq 0$). Ao analisarmos a hamiltoniana do modelo verificamos que no estado fundamental a energia livre da fase ferromagnética é menor que a da fase antiquadrupolar, para valores negativos de D .

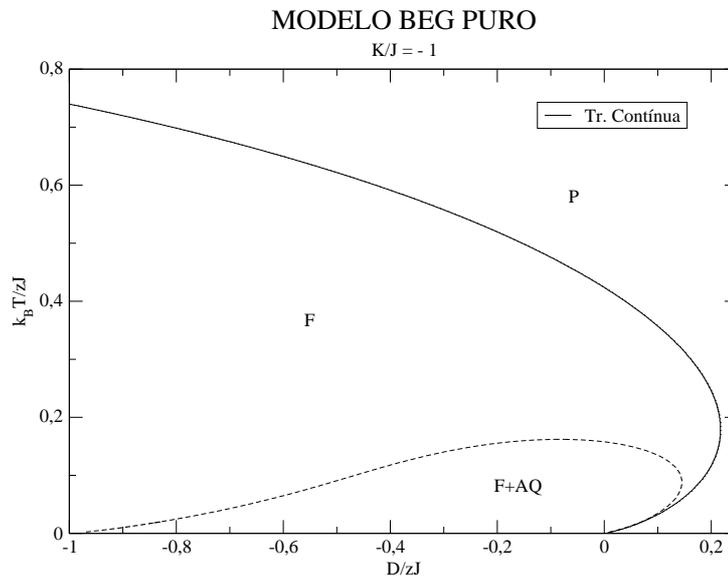


Figura 5.30: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ onde as iterações entre os spins têm a mesma intensidade. Ocorrência de uma região de coestabilidade $F + AQ$ onde provavelmente a fase antiquadrupolar é instável.

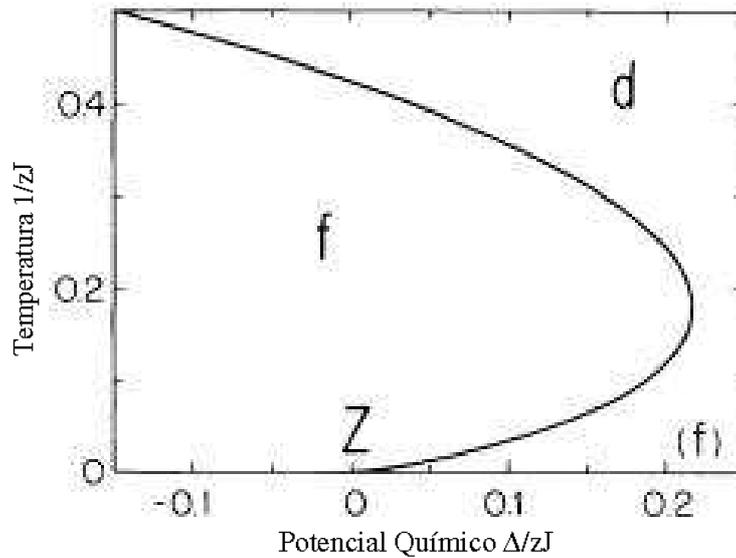


Figura 5.31: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ com a variável $\frac{K}{J} = -1$ onde Z é um ponto crítico de temperatura zero.

5.7.2 Caso aperiódico: duplicação de período

Apresentamos na Fig. 5.32 o diagrama de fases obtido numericamente para $r = -0,5$ onde temos, pela primeira vez em nosso trabalho, uma configuração ferrimagnética FI , na qual existe um atrator caracterizado por duas sub-redes com magnetizações parciais diferentes e momentos de quadrupolo parciais também diferentes: $((m_1^*, q_1^*)$ e (m_2^*, q_2^*)). Esta configuração se encontra na região de coestabilidade $FI + AQ$.

Observamos ainda uma região de coestabilidade entre as fases ferromagnética e anti-quadrupolar, representada por $F + AQ$, que corresponde a linha de primeira ordem entre a fase ferromagnética F e anti-quadrupolar AQ da Fig. 5.36 ($\frac{K}{J} = -1,5$), além da região $FI + AQ$ limitada à baixas temperaturas.

Mais uma vez, vemos que o enfraquecimento das interações entre os spins na rede de Bethe equivale a utilizarmos $\frac{K}{J}$ menores (e negativos), haja visto que para os diagramas de fases apresentados por Hoston e Berker [3] somente ocorrem as fases anti-quadrupolar e ferrimagnética para $\frac{K}{J} < -1,0$.

Pode-se notar na Fig. 5.32 que a região de coestabilidade $FI + AQ$ não está completamente delimitada em sua parte superior, pois para temperaturas maiores, a diferença entre as magnetizações parciais de sub-rede diminuem impossibilitando tal determinação.

Verificamos no diagrama de fases obtido numericamente para $r = 0,5$ e apresentado na Fig. 5.33 que o fortalecimento das interações entre os spins faz com que aumente a região

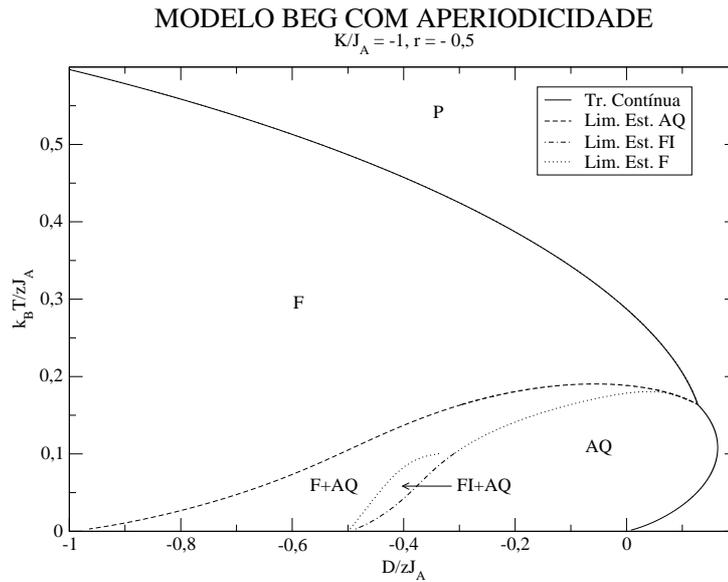


Figura 5.32: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = -0,5$. Surgimento de uma fase antiquadrupolar AQ pura além das regiões $F + AQ$ e $FI + AQ$.

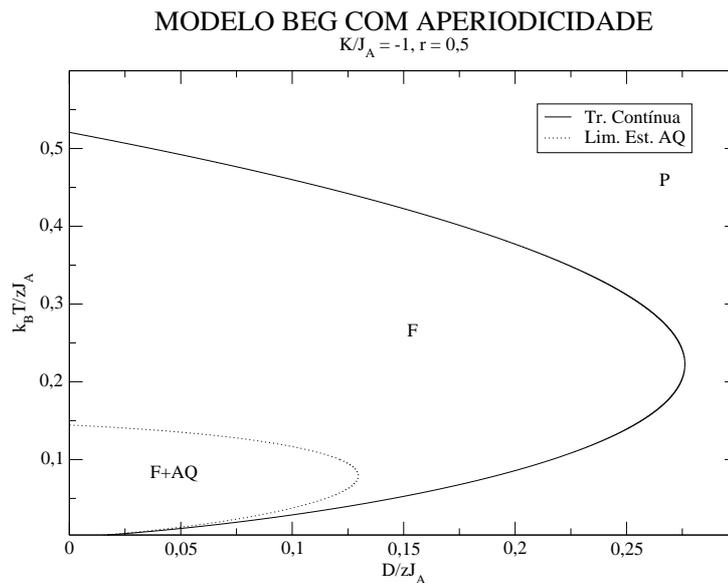


Figura 5.33: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 0,5$. Fortalecimento das interações aumenta a região ferromagnética F .

da fase ferromagnética F em comparação com o caso puro apresentado na Fig. 5.30.

5.7.3 Caso aperiódico: triplicação de período

Na Fig. 5.34 apresentamos, para efeito de comparação, um diagrama de fases obtido numericamente com aperiodicidade por duplicação e outro por triplicação de período, ambos para $r = 1,0$. Podemos perceber uma pequena diferença entre os dois diagramas

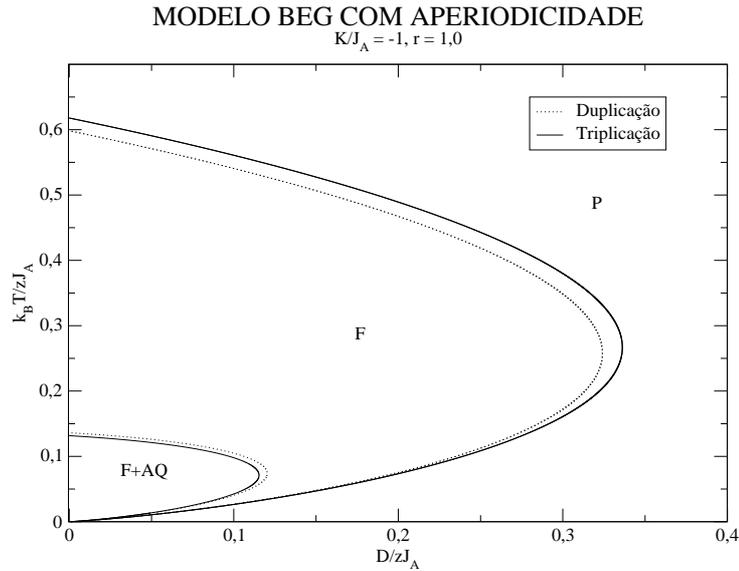


Figura 5.34: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ_A}$ versus $\frac{D}{zJ_A}$ com aperiodicidade por duplicação e triplicação de período e $r = 1,0$.

de fases provavelmente devido ao fato da interação média entre os spins ser mais forte na aperiodicidade por triplicação do que na duplicação de período. A fração da interação J_B na sequência dada por duplicação de período é de $\frac{1}{3}$, já na triplicação de período é de $\frac{2}{5}$.

5.8 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -1,5$

5.8.1 Caso puro ($r = 0$)

No diagrama de fases obtido numericamente para $\frac{K}{J} = -1,5$ e apresentado na Fig. 5.35, temos a ocorrência das regiões ferromagnética F , paramagnética P , antiquadrupolar AQ , da região de coestabilidade $F + AQ$ e da região $FI + AQ$ limitada à baixas temperaturas.

Temos ainda a ocorrência de um ponto bicrítico B que está localizado no encontro das linhas transição contínua ferromagnética-paramagnética, antiquadrupolar-paramagnética e dos limites de estabilidade das fases ferromagnética e antiquadrupolar.

Já na Fig. 5.36 rerepresentamos o diagrama obtido por Hoston e Berker [3] para $\frac{K}{J} = -1,5$ para efeito de comparação.

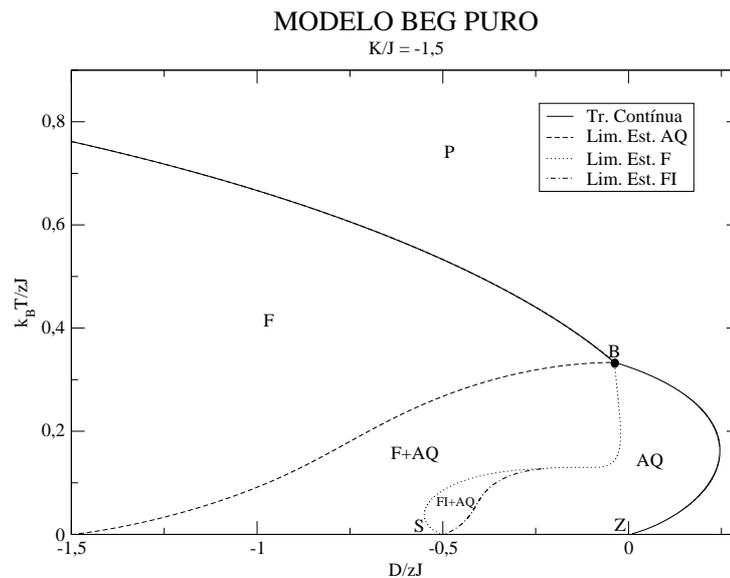


Figura 5.35: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ onde as iterações entre os spins têm a mesma intensidade. A região ferrimagnética *FI* aparece em coestabilidade com a região antiquadrupolar *AQ* na parte inferior do diagrama.

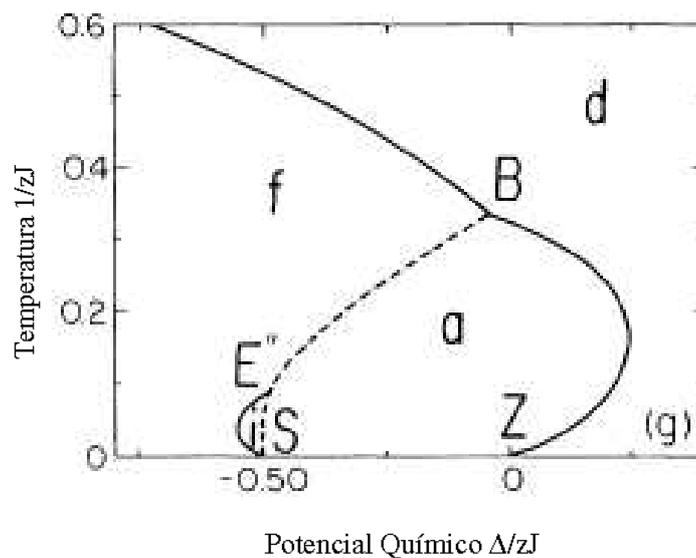


Figura 5.36: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ com a variável $\frac{K}{J} = -1,5$.

5.8.2 Caso aperiódico: duplicação de período

A Fig. 5.37 apresenta o diagrama de fases obtido numericamente para $r = 1,0$ onde vemos que o fortalecimento das interações entre os spins elevou levemente a linha de transição contínua entre as fases *F* e *P* e abaixou o ponto bicrítico *B*, em relação ao diagrama de fases do caso puro apresentado na Fig. 5.35. A região de coestabilidade *FI+AQ*, apesar de reduzida, também é verificada na parte inferior do diagrama.

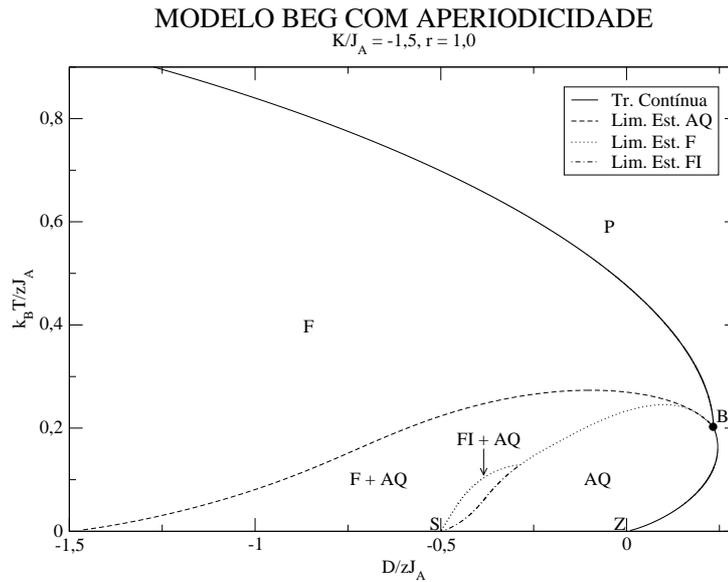


Figura 5.37: Diagrama $\frac{k_B T}{z_A}$ versus $\frac{D}{z_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 1,0$. Aumento das interações entre os spins diminuiu a região de coestabilidade $FI+AQ$.

5.9 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -3$

5.9.1 Caso puro ($r = 0$)

No diagrama de fases obtido para $\frac{K}{J} = -3$ e apresentado na Fig. 5.38, percebemos que a região antiquadrupolar AQ é predominante em relação à região ferromagnética F . Ao compará-lo com o diagrama equivalente, obtido por Hoston e Berker [3], para $\frac{K}{J} = -3$ e rerepresentado na Fig. 5.39, fica evidente a semelhança entre ambos.

Vemos que a região ferrimagnética FI e as regiões de coestabilidade $FI+AQ$ e $F+AQ$ presentes na Fig. 5.38, correspondem à linha de primeira ordem existente entre as fases ferrimagnética e antiquadrupolar da Fig. 5.39. Temos ainda, a presença de um ponto multicrítico A que se dá no encontro de três linhas críticas e uma linha de primeira ordem.

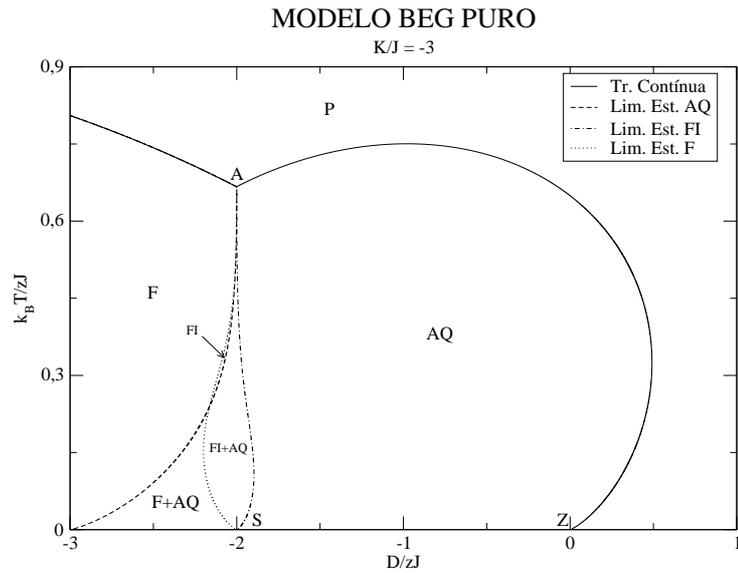


Figura 5.38: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ onde as iterações entre os spins têm a mesma intensidade. Predominância da região de coestabilidade AQ e uma pequena região ferrimagnética FI .

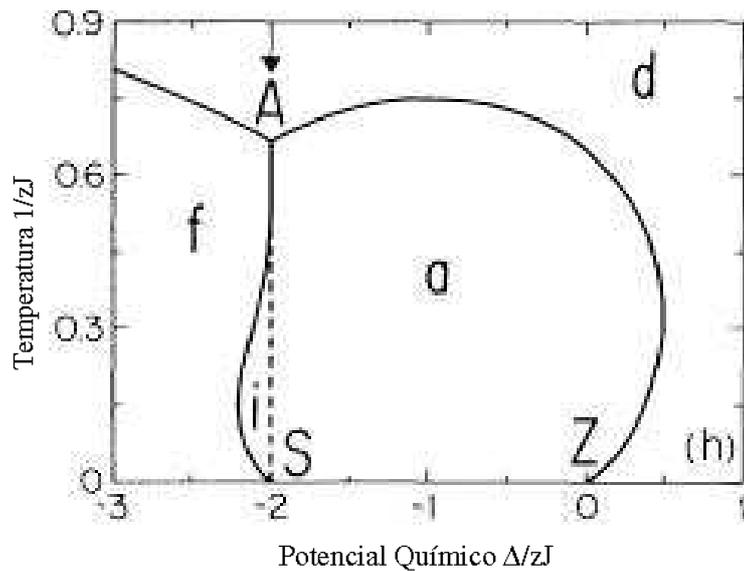


Figura 5.39: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ com a variável $\frac{K}{J} = -3$.

5.9.2 Caso aperiódico: duplicação de período

Na Fig. 5.40 apresentamos o diagrama de fases obtido numericamente por duplicação de período com $r = -0,8$. Percebemos que o enfraquecimento das interações abaixa a transição contínua entre as fases ferromagnética F e paramagnética P , conseqüentemente diminui a região ferrimagnética FI e aumenta a região antiquadrupolar AQ . As regiões

de coestabilidade $F + AQ$ e $FI + AQ$ ficam bastante reduzidas em relação ao caso puro apresentado na Fig. 5.38.

Alertamos que nos três diagramas a seguir (5.40, 5.41 e 5.42) a região ferrimagnética não está totalmente definida devido a diminuição da diferença entre as magnetizações parciais de sub-rede para temperaturas mais altas.

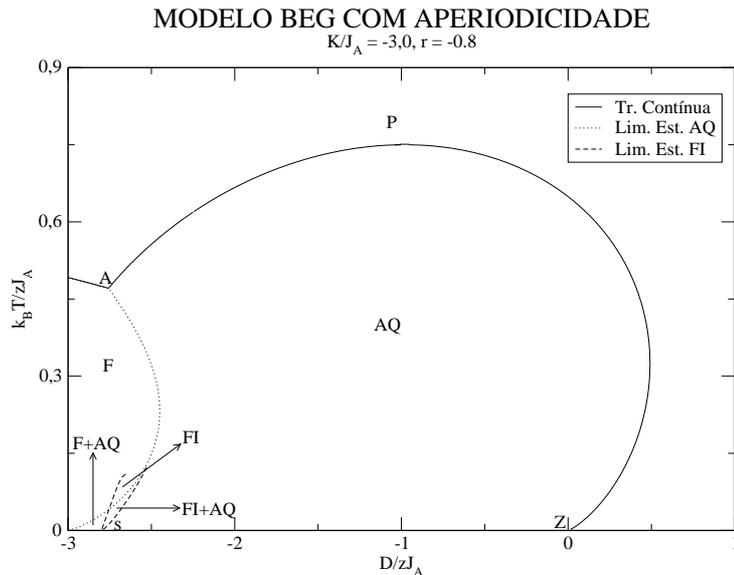


Figura 5.40: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = -0,8$. O enfraquecimento das interações entre os spins aumenta a região AQ e diminui as regiões F , $F + AQ$ e $FI + AQ$.

O diagrama de fases apresentado na Fig. 5.41 foi obtido numericamente para $r = 3,0$, que significa interações de troca mais fortes entre os spins da rede. Percebemos que a região ferromagnética F aumenta devido ao deslocamento dos limites de estabilidade da região antiquadrupolar e ferromagnética para a direita do diagrama.

Na Fig. 5.42 apresentamos alguns diagramas de fases, obtidos numericamente para valores distintos de r , para evidenciar como a variação das interações de troca entre os spins afeta as linhas do diagrama de fases.

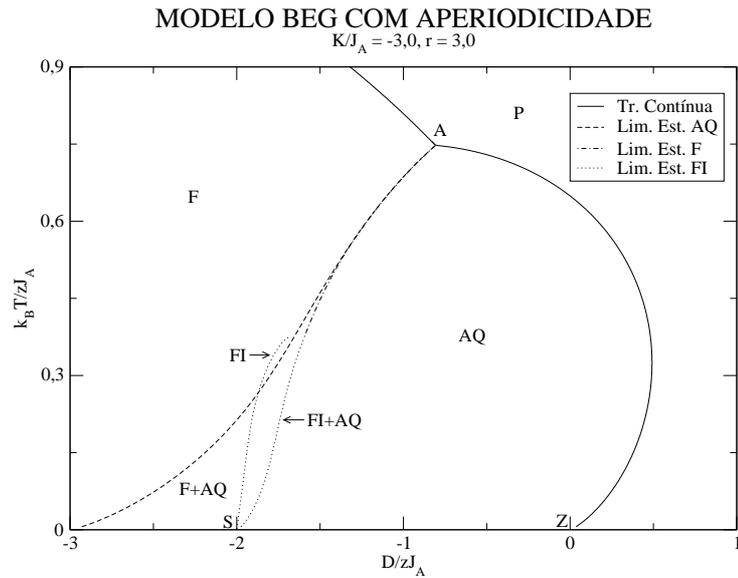


Figura 5.41: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 3,0$. O fortalecimento das interações reduz a região AQ e aumenta F .

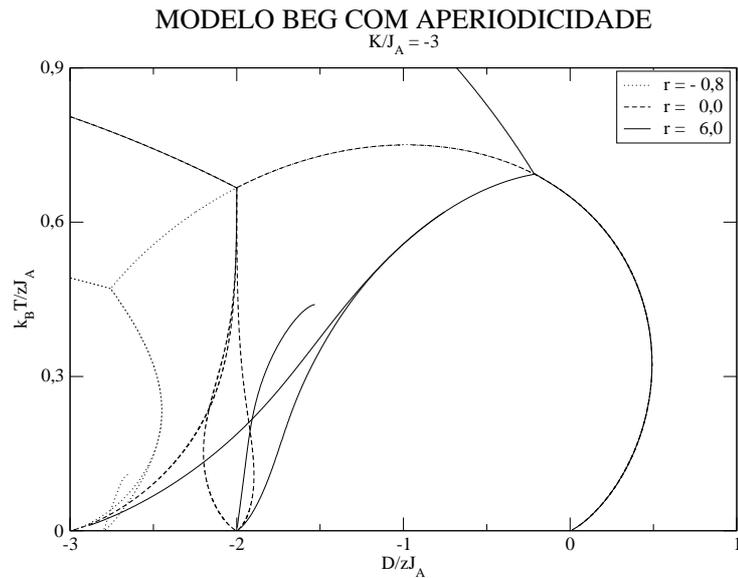


Figura 5.42: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período para valores distintos de r .

5.10 Modelo BEG na rede de Bethe com $\frac{K}{J_A} = -3,5$

5.10.1 Caso puro ($r = 0$)

O diagrama de fases apresentado na Fig. 5.43, obtido numericamente para interações de troca iguais entre os spins, tem a mesma estrutura do diagrama apresentado na Fig.

5.38 com pequenas diferenças estruturais.

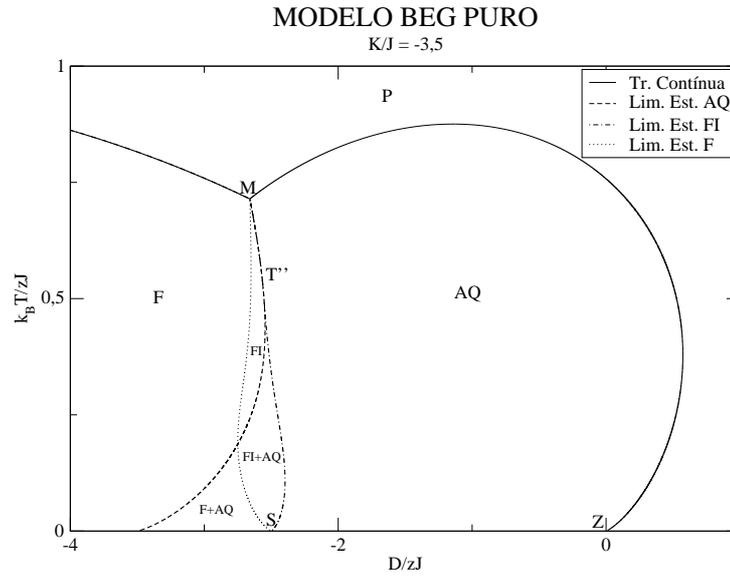


Figura 5.43: Diagrama $\frac{k_B T}{zJ}$ versus $\frac{D}{zJ}$ com interações de troca homogêneas entre os spins da rede.

Na Fig. 5.44 temos a representação do diagrama obtido por Hoston e Berker [3] para $\frac{K}{J} = -3,5$ para efeito comparativo.

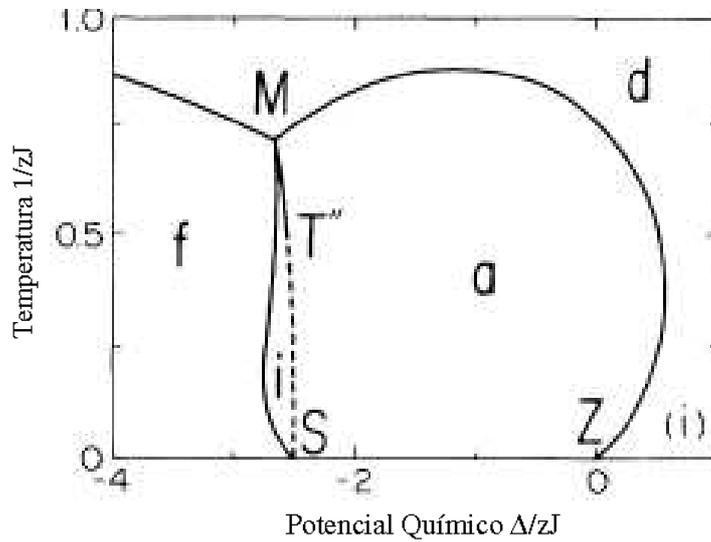


Figura 5.44: Diagrama de fases $\frac{T}{zJ}$ versus $\frac{\Delta}{zJ}$ com a variável $\frac{K}{J} = -3,5$.

5.10.2 Caso aperiódico: duplicação de período

A Fig. 5.45 apresenta o diagrama de fases obtido numericamente para $r = 1,0$. Percebe-se que o fortalecimento das interações eleva a linha de transição contínua, desloca o ponto tetracrítico M para a direita do diagrama, o que aumenta a região ferromagnética F .

As regiões ferrimagnética FI e $FI + AQ$ ficam reduzidas em relação ao caso puro apresentado na Fig. 5.43.

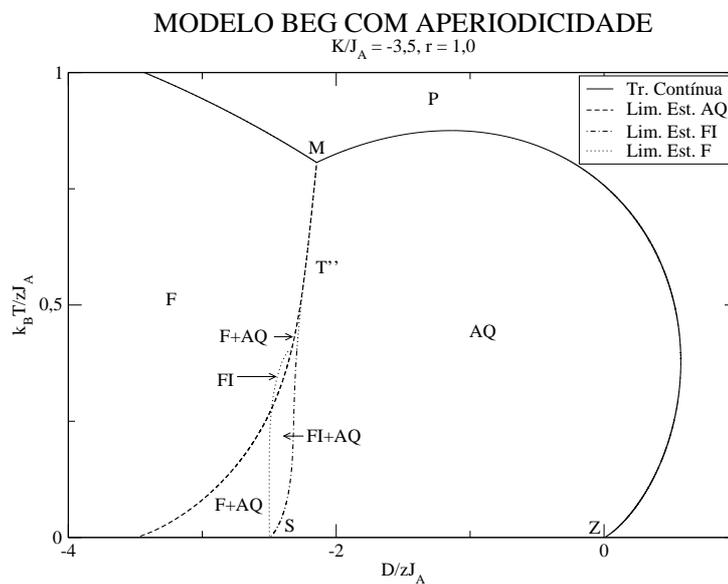


Figura 5.45: Diagrama $\frac{k_B T}{z J_A}$ versus $\frac{D}{z J_A}$ com aperiodicidade por duplicação de período e $r = 1,0$. O fortalecimento das interações entre os spins aumenta a região F .

6 *Conclusões e Perspectivas*

Conclusões

- Verificamos que a alteração da intensidade das interações de troca (variação de r) faz com que os diagramas de fases se aproximem da forma de outros obtidos para $\frac{K}{J}$ diferentes. Ao fortalecermos as interações, de certa forma, equivale a diminuirmos o parâmetro $\frac{K}{J}$. Por outro lado, o enfraquecimento das interações ($r < 0$) equivale a estarmos trabalhando com $\frac{K}{J}$ maiores.
- Percebemos que interações mais fracas ($r < 0$) diminuem as regiões de fases ordenadas, ocorrendo o efeito contrário com interações mais fortes ($r > 0$)
- Não encontramos diferenças significativas entre os diagramas obtidos com aperioidicidade por duplicação e triplicação de período, sugerindo que as diferenças que possam existir entre tais formas de aperioidicidades tenham efeito muito pequeno na topologia dos diagramas.
- Notamos que não há alteração dos limites de estabilidade das regiões P_1 e P_2 nos casos em que há duas regiões paramagnéticas, para diferentes intensidades das interações, ou seja, diferentes valores de r .
- Foram obtidos dois diagramas de fases novos, para $\frac{K}{J} = -0,5$ e $-1,0$, não encontrados na aproximação de Hoston e Berker [3].

Perspectivas

- Implementação do modelo para outras sequências aperiódicas como Fibonacci e Rudin-Shapiro;
- Estudo do efeito da aperioidicidade na interação K do modelo BEG;
- Estudo dos expoentes multicríticos do modelo.

Referências Bibliográficas

- [1] Vitaliy A. Shchukin and Dieter Bimberg. Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces. *Rev. Mod. Phys.*, 71:1125, 1999.
- [2] C A Ross. Electrodeposited multilayer thin films. *Annual Review of Materials Science*, 24:159, 1994.
- [3] William Hoston and A. Nihat Berker. Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 67:1027, 1991.
- [4] J. M. Luck. Critical behavior of the aperiodic quantum ising chain in a transverse magnetic field. *J. Stat. Phys*, 72:417, 1993.
- [5] J. M. Luck. A classification of critical phenomena on quasi-crystals and other aperiodic structures. *Europhys. Lett.*, 24:359, 1993.
- [6] Maicon S. Faria. Efeitos de aperiodicidade no comportamento crítico de modelos magnéticos na rede de Bethe. Master's thesis, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas, Universidade Federal de Santa Catarina, Brasil, 2006.
- [7] F. Iglói and L. Turban. Aperiodic Ising model on the Bethe lattice: Exact results. *Phys. Rev. E*, 78:031128, 2008.
- [8] M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths. Ising model for the λ transition and phase separation in $\text{He}_3 - \text{He}_4$ mixtures. *Phys. Rev. A*, 4:1071, 1971.
- [9] M.-S. Chen, J. Bonner, J. Nagle, and L. Onsager. Hopping of ions in ice. *J. Chem. Phys.*, 60:405, 1974.
- [10] W. L. Bragg and E. J. Williams. The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys. *Proc. Roy. Soc. London*, 145A:669, 1934.
- [11] P. Weiss. L'hypothèse du champ moléculaire et la propriété ferromagnétique. *J. Phys.*, 6:661, 1907.
- [12] Hans A. Bethe. Statistical theory of superlattices. *Proc. Roy. Soc. London*, 150A:669, 1935.
- [13] S. Katsura and M. Takizawa. Bethe lattice and the Bethe approximation. *Progress of Theoretical Physics*, 51:82, 1974.
- [14] Herbert B. Callen. *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, chapter 20, page 433. John Wiley and Sons, 1985.

-
- [15] A. N. Berker and M. Wortis. Blume-Emery-Griffiths-Potts model in two dimensions: Phase diagram and critical properties from a position-space renormalization group. *Phys. Rev. B*, 14:4946, 1976.
- [16] H. Falk. Inequalities of J. W. Gibbs. *Am. J. Phys*, 38:858, 1970.
- [17] H. H. Chen and P. M. Levy. Dipole and quadrupole phase transitions in spin-1 models. *Phys. Rev. B*, 7:4267, 1973.
- [18] M. Tanaka and T. Kawabe. Spin-one Ising model including biquadratic interaction with positive coupling constant. *J. Phys. Soc. Jpn*, 54:2194, 1985.
- [19] O modelo de Potts *ferromagnético* de três estados, por outro lado, é obtido para $k/J = 3$, $\Delta/zJ = 2$ (veja ref. [15]). Este subespaço está contido na Fig. 4.2.
- [20] A. N. Berker and L. P. Kadanoff. Ground-state entropy and algebraic order at low temperatures. *J. Phys. A*, 13:259, 1980.
- [21] J. R. Banavar, G. S. Grest, and D. Jasnow. Ordering and phase transitions in antiferromagnetic Potts models. *Phys. Rev. Lett.*, 45:1424, 1980.
- [22] J. R. Banavar, G. S. Grest, and D. Jasnow. Antiferromagnetic Potts and Ashkin-Teller models in three dimensions. *Phys. Rev. B*, 25:4639, 1982.
- [23] Y. Ueno, G. Sun, and I. Ono. Interface approach to phase transitions and ordering by Monte Carlo simulations and its applications to three-dimensional antiferromagnetic Potts models. *Phys. Rev. E*, 44:9271, 1991.