

**Estudo de sistemas magnéticos utilizando
técnicas de grupos de renormalização
fenomenológicos**

Daniele Alves Dias

Tese apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS
GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do título de
doutor em ciências.

Orientador: Prof. Dr. João Antônio Plascak (UFMG)

Co-Orientador: Prof. Dr. José Cândido Xavier (UFU)

Departamento de Física - ICEx - UFMG

Novembro de 2013

Agradecimentos

Ao Prof. Plascak pela orientação e por ser um exemplo profissional e pessoal. Por não ter desistido de mim quando até eu mesma já tinha desanimado.

Ao Prof. José Candido que contribui diretamente no trabalho desenvolvido.

Aos membros da banca.

À minha família, que sempre me ajudou e deu suporte. Em especial à minha mãe que, do seu jeito brincalhão, proporcionou momentos alegres ao meu dia a dia, e à meu pai que, do seu jeito sério, sempre me cobrou postura profissional sem perder o carinho.

Ao Ricardo, por ter me ajudado a não desistir e pelo apoio, sempre. Em especial, pelos últimos dois anos nos quais temos dividido nossos dias.

Aos amigos do DF, Medeirão, Carlitos, Diego, Baiano, Regiane, entre outros, que proporcionaram momentos mais leves e descontraídos no corredor do doutorado.

Ao programa de Pós-Graduação em Física pela oportunidade.

Aos professores e funcionários do DF, em especial, à Shirley pelo carinho e dedicação durante estes muitos anos de convivência.

À CNPq pela bolsa.

Resumo

As propriedades termodinâmicas de modelos de spins na rede foram estudadas utilizando-se técnicas de grupo de renormalização fenomenológicos. Foram estudados os modelos de Blume-Capel de spin-1 e de Baxter-Wu com spin-1 e spin-3/2. O diagrama de fases do modelo de Blume-Capel diluído de spin-1 em uma rede cúbica simples foi estudo pela técnica do grupo de renormalização de campo médio em aproximação de pares. A temperatura crítica em função da concentração de sítios desocupados e do campo cristalino foi obtida. Considerando interações de troca e supertroca entre átomos de Fe este modelo foi aplicado a liga FeAl para descrever suas propriedades termodinâmicas. Estudamos também o modelo de Baxter-Wu de spin-1 e 3/2 com campo cristalino através do grupo de renormalização de escalonamento finito, sendo o cálculo dos autovalores de sua matriz de transferência utilizado a fim de descrever seu diagrama de fases. Estimativas de temperaturas de transição de primeira e segunda ordem foram feitas, bem como estimativas de pontos multicríticos, expoentes críticos e carga central, esses dois últimos encontrados para diversos valores de campos cristalinos. A regra de fases de Gibbs foi utilizada para se verificar a concordância da mesma com diagramas de fases descritos na literatura, bem como a concordância com os diagrama obtidos nesse trabalho. Por se tratar de sistemas magnéticos foi necessário levar-se em conta as simetrias adicionais presentes nos Hamiltonianos tratados.

Abstract

The thermodynamic properties of spin models on the lattice have been studied by employing phenomenological renormalization group techniques. The spin-1 Blume-Capel model and the spin-1 and spin-3/2 Baxter-Wu model have been treated. The Blume Capel model with spin-1, in its diluted version, on the simple cubic lattice has been studied by using the mean field renormalization group in the pair approximation. We have obtained the critical temperature as a function of the vacant sites concentration as well a function of the crystal field anisotropy. We consider exchange e superexchange interactions between Fe atoms induced by Al atoms and applied this model to FeAl alloys to describe its thermodynamics properties. We also studied the spin-1 and 3/2 Baxter-Wu model in a crystal field by employing the finite size renormalization group approach. The eigenvalues of the transfer matrix have been computed in order to get the corresponding phase diagram. Estimates of the first- and second-order transition temperatures have been obtained, as well as multicritical points, critical exponents and central charges, the latter two being obtained for some values of the crystal field. The Gibbs phase rule has been used to check the consistency of the phase diagram of some magnetic models, including those treated in this work. In this case it is necessary to take into account the symmetries carried by the magnetic Hamiltonians.

Índice

| | |
|--|-----------|
| Agradecimentos | i |
| Resumo | ii |
| 1 Introdução | 1 |
| 2 Fenômenos Críticos | 5 |
| 2.1 Fluidos simples | 5 |
| 2.2 Sistemas Magnéticos | 7 |
| 2.3 Expoentes críticos | 8 |
| 3 Modelos estudados | 13 |
| 3.1 Modelo de Ising | 13 |
| 3.2 Modelo de Heisenberg | 14 |
| 3.3 Modelo de Blume-Capel | 15 |
| 3.4 Modelo de Baxter-Wu | 19 |
| 3.5 Modelo de Baxter-Wu com campo cristalino | 21 |
| 4 Métodos utilizados | 24 |
| 4.1 Construção de Kadanoff e grupo de renormalização (GR) | 25 |
| 4.2 Hipótese de escala de tamanho finito | 29 |
| 4.3 Grupo de renormalização de campo médio | 34 |
| 4.4 Grupo de renormalização de escalonamento de tamanho finito | 37 |
| 5 O modelo Blume-Capel diluído na aproximação GRCM e aplicação a liga Fe-Al | 45 |
| 5.1 Rede Cúbica Simples | 47 |
| 5.2 Aplicação a Liga FeAl | 50 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5.3 | Conclusões | 54 |
| 6 | Aplicação ao modelo Baxter-Wu com campo cristalino | 55 |
| 6.1 | Modelo Baxter-Wu | 55 |
| 6.2 | Resultados para spin $S = 1$ | 56 |
| 6.3 | Resultados para spin $S = 3/2$ | 64 |
| 6.4 | Conclusões | 70 |
| 7 | Regra de fases de Gibbs generalizada | 72 |
| 7.1 | Regra de fase de Gibbs para fluidos | 72 |
| 7.1.1 | Fases críticas | 74 |
| 7.2 | Regra de fase de Gibbs para sistemas magnéticos | 77 |
| 7.2.1 | Modelo de Ising | 78 |
| 7.2.2 | Modelo de Blume-Capel | 78 |
| 7.2.3 | Modelo de Baxter-Wu com campo cristalino | 81 |
| 7.3 | Conclusões | 84 |
| 8 | Considerações finais | 86 |
| A | Método de Lanczos | 89 |
| | Referências | 92 |

Capítulo 1

Introdução

O estudo das transições de fases data da descoberta do calor específico e do calor latente por Joseph Black por volta de 1762 na Escócia [1], embora esses estudos não tenham sido feitos da maneira como os tratamos hoje. Por outro lado, o grande marco dos chamados fenômenos críticos veio com Charles Cagniard de la Tour em 1822, na França [1], e posteriormente com Thomas Andrews em 1869 [2], na Irlanda, com a descoberta do ponto crítico. Três anos após, Van der Waals [3] propôs a sua teoria onde generaliza a equação de estado dos gases ideais para obter o comportamento do fluido perto do ponto crítico. Uma maneira elegante de se obter as fases sólidas, líquidas e gasosas presentes em diagramas pressão-temperatura para fluidos simples e compostos, foi desenvolvida mais tarde por Gibbs, onde a sua denominada *regra de fases* [4] é capaz de prever as existências de linhas de coexistências, linhas e pontos triplos, pontos críticos, etc.

Embora os trabalhos iniciais tivessem sido mais voltados a fluidos, Pierre Curie [5] notou uma semelhança muito grande entre esses e os sistemas magnéticos. Inicia-se então a era das transições de fases e fenômenos críticos que culmina com a sua completa descrição através da teoria de grupo de renormalização proposta por Wilson [6, 7].

Mais especificamente, com relação a materiais magnéticos, puros ou diluídos, sabe-se que eles exibem muitos fenômenos interessantes e seus estudos são ainda de grande interesse, tanto para teóricos como para experimentais [8, 9]. Em particular, esse interesse quanto às impurezas provém não somente da dificuldade de se encontrar na natureza sistemas completamente puros, como também da dificuldade de se obter amostras puras em laboratório. Materiais magnéticos, por exemplo, podem conter im-

perfeições nas redes cristalinas, ou mesmo outros elementos não magnéticos, e essas impurezas, de forma geral, alteram o diagrama de fases e podem alterar o comportamento crítico desses sistemas.

Concomitantemente aos estudos experimentais, vários modelos teóricos foram sugeridos na tentativa de descrever as propriedades termodinâmicas exibidas por esses sistemas. Sem dúvida, o modelo mais importante é o chamado modelo de Ising, proposto por Lenz ao seu então estudante de doutorado Ising em 1925 [9,10]. Nesta linha, vários modelos foram propostos, tais como os modelos de Heisenberg, Blume-Capel e Baxter-Wu, os quais serão discutidos, de forma resumida, mais abaixo.

Do ponto de vista teórico, poucos modelos propostos possuem soluções analíticas exatas e, por este motivo, várias técnicas aproximadas são usadas para tentar estudá-los, desde aproximações do tipo campo médio, expansões em séries, grupo de renormalização, até simulações de Monte Carlo (ver, por exemplo, [8,11]). Como se pode notar, estes métodos podem ser completamente analíticos, quando possível, ou estritamente numéricos.

As técnicas aproximadas que serão utilizadas nesse trabalho constam de grupos de renormalização no espaço real do tipo fenomenológicas, especificamente o grupo de renormalização de campo médio (GRCM) [12] e o de escalonamento de tamanho finito (GREF) proposto por Nightingale [13], juntamente com ideias de invariância conforme [14--17]. Trataremos de blocos finitos de um e dois sítios com relação ao GRCM, e tiras infinitas de largura finita no caso do GREF.

Dentre os materiais magnéticos chamados desordenados (por conterem diluidores ou outros átomos magneticamente diferentes) as ligas compostas por Fe são muito estudadas, pois podem apresentar diversos comportamentos de interesse dependendo dos elementos que constituem o composto. Em particular, foi encontrado experimentalmente na liga de FeAl, que será discutida neste trabalho, um comportamento anômalo em seu diagrama de fases. Para explicar este comportamento tentou-se usar os modelos de Ising spin-1/2 [18--20] e Heisenberg quântico [21], utilizando técnicas variacionais de Bogoliubov, operador diferencial e grupo de renormalização. Esta anomalia, porém, não foi ainda completamente entendida.

Neste trabalho faremos, inicialmente, um estudo teórico do comportamento crítico do modelo de Blume-Capel (BC) de spin-1 [22,23] diluído usando um método baseado em aproximações de campo médio associado ao grupo de renormalização [12,24,25].

Nesse caso os cálculos foram realizados em uma rede cúbica simples para uma comparação com resultados da literatura. O modelo BC foi, anteriormente, aplicado nas ligas ternárias FeNiMn e FeAlMn, obtendo-se resultados muito melhores quando comparados com os obtidos por outros métodos [26] e utilizando-se o modelo de Ising usual. Tendo isso como motivação, aplicamos então o mesmo modelo a liga de FeAl e os resultados obtidos serão comparados com os resultados experimentais já conhecidos.

Por outro lado estudaremos também o modelo de Baxter-Wu (BW) de spin-1 na presença de um campo cristalino. O modelo BW foi tratado inicialmente por Wood, Griffiths e Merlini [27, 28] no início da década de 70 e sua solução analítica foi obtida para o caso de spin-1/2 por Baxter e Wu em 1973 [29], encontrando uma transição contínua com a mesma temperatura crítica do modelo de Ising para a rede quadrada com expoentes críticos diferentes, porém iguais aos do modelo de Potts de 4-Estados [30]. Quando se acrescenta a anisotropia da rede, um comportamento semelhante ao modelo BC aparece. Para spins inteiros os diagramas de fases dependem da anisotropia de forma muito semelhantes, porém, enquanto que para o modelo BC o ponto tricrítico (ponto em que três fases se tornam iguais) é bem conhecido e aceito, para o modelo BW a existência de um ponto multicrítico ainda não é um consenso e sua localização no diagrama de fases ainda não está bem definida. Este ponto foi descrito por Costa, Xavier e Plascak em 2004 [31, 32] para spin-1 usando métodos de escala de tamanho finito e o grupo de renormalização, mas as redes utilizadas foram ainda muito pequenas, devido a dificuldades computacionais. Desta forma, iremos verificar a existência deste ponto e determiná-lo de forma mais precisa usando tiras de larguras maiores que as anteriores. Além do mais, o diagrama de fases para spins semi-inteiros ainda não é conhecido para esse modelo. Portanto, utilizando o mesmo método aplicado ao spin-1, estudaremos o modelo BW spin-3/2 na presença de um campo de anisotropia a fim de verificar se o seu diagrama de fases é ou não semelhante ao do correspondente modelo BC. Neste último temos uma linha de transição de primeira ordem que termina em um ponto crítico terminal duplo.

Como discutido acima, a regra de fases de Gibbs já foi amplamente aplicada em sistemas fluidos [3, 33], mas ainda pouco se conhece sobre a sua aplicabilidade em sistemas magnéticos. Sendo assim, iremos tentar uma generalização da mesma no intuito de melhor entender a relação entre os campos de sistemas magnéticos e o número

correspondente de fases que aparecem nesses modelos, bem como a coexistência entre essas fases.

Em suma, o nosso propósito é estudar o comportamento crítico de sistemas magnéticos, puros e diluídos, utilizando as técnicas simples e poderosas do grupo de renormalização de campo médio e do grupo de renormalização de escalonamento de tamanho finito. Para isso, faremos no Capítulo 2 uma breve discussão qualitativa do que acontece próximo a um ponto de transição contínua, dentro de um tratamento geral de fluidos e magnetos, bem como uma discussão da regra de fases de Gibbs. No Capítulo 3 faremos uma descrição qualitativa dos modelos estudados. Os métodos empregados serão discutidos no Capítulo 4, e utilizados para descrever o modelo Blume-Capel diluído no Capítulo 5, bem como sua aplicação a liga FeAl, e o modelo de Baxter-Wu no Capítulo 6. No Capítulo 7 discutiremos a regra de fases de Gibbs generalizada, aplicada a modelos magnéticos. Por último, no Capítulo 8 apresentamos algumas conclusões gerais.

Capítulo 2

Fenômenos Críticos

Faremos, nesse capítulo, uma breve revisão sobre os fenômenos críticos baseado no capítulo 2 da dissertação de mestrado realizada em 2009 [34].

2.1 Fluidos simples

A Fig. 2.1(a) mostra as regiões das três fases da matéria (sólido, líquido e gasoso) no caso de uma substância simples no diagrama pressão-temperatura (pT). Cada ponto nas curvas representa duas fases coexistindo no equilíbrio. O ponto triplo, no encontro das três curvas de coexistência, é aquele em que as três fases coexistem.

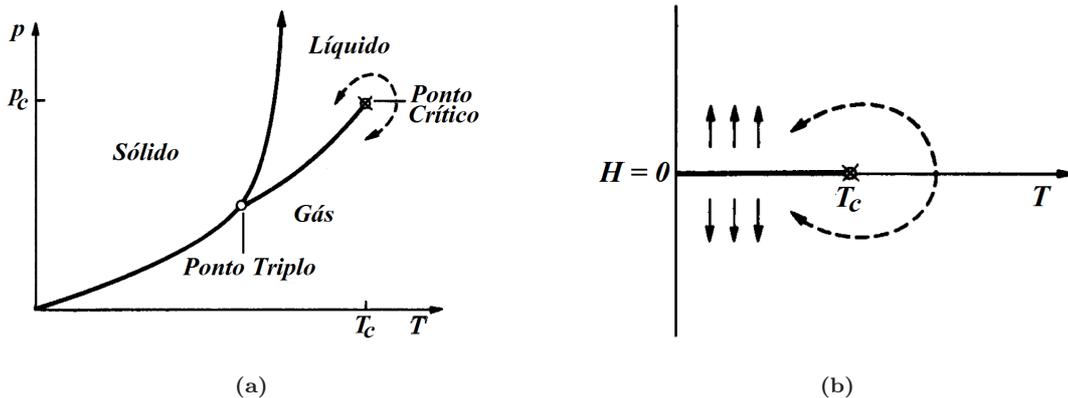


Figura 2.1: Diagrama de fases (a) no plano pT para um fluido simples, e (b) no plano HT para um magneto. Figura retirada de [35].

A curva de coexistência entre a fase líquida e gasosa não se estende infinitamente,

parando em um ponto. Este é chamado de ponto crítico, que possui coordenadas bem definidas dadas por (T_c, p_c) . A partir deste ponto a fase líquida pode ser convertida em gasosa continuamente, não existindo diferença fundamental entre elas. Acredita-se que não exista um segundo ponto crítico, entre a fase sólida e líquida.

Quando consideramos o diagrama de fases nos planos $p\rho$ e ρT , onde ρ é a densi-

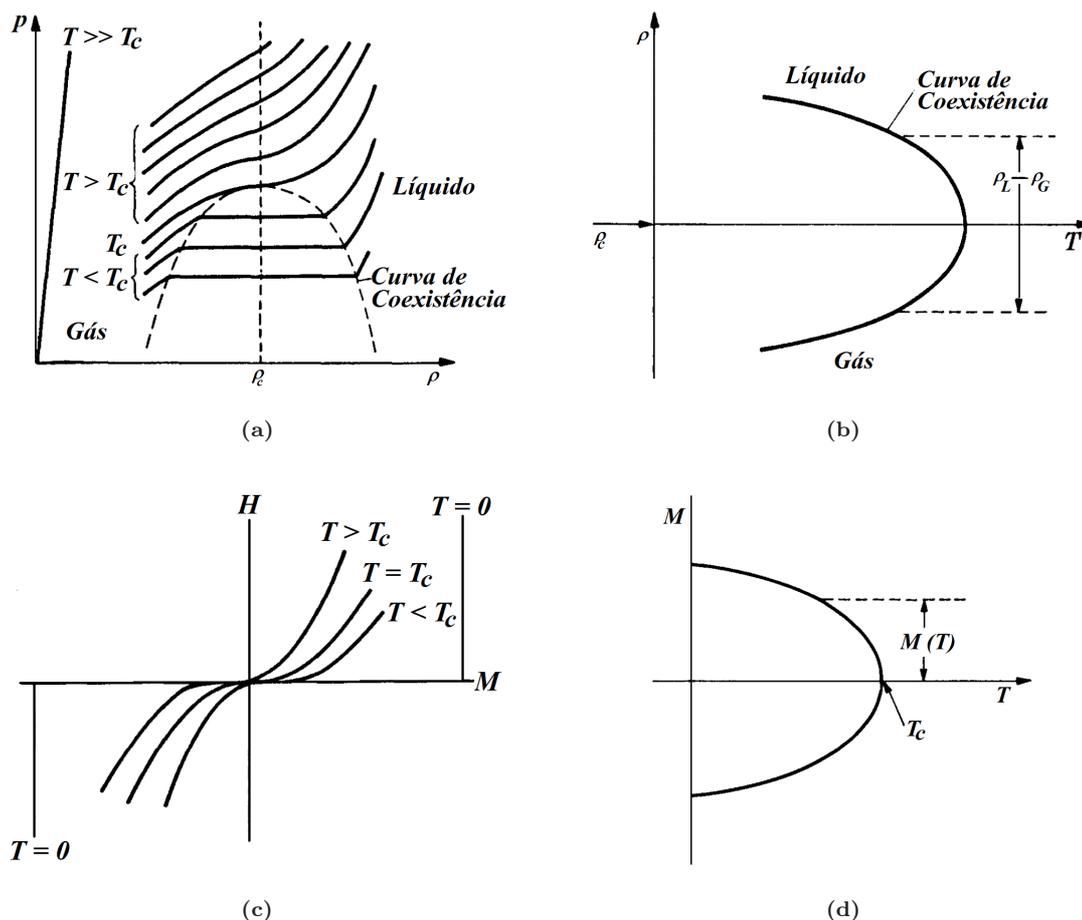


Figura 2.2: *Projeção nos planos (a) $p\rho$ e (b) ρT , onde o comportamento de gás ideal é observado para $T \gg T_c$. Projeção nos planos (c) HM e (d) MT . Figura retirada de [35].*

dade do fluido, Fig. 2.2 (a) e (b), podemos observar que as isothermas aproximam-se de retas a temperaturas muito altas, obedecendo a equação de gás ideal. Desta forma, podemos concluir que a deformação da curva, a medida que T diminui, é consequência da interação entre as moléculas. Outra característica interessante é a existência de uma grande diferença entre a densidade na fase líquida e na gasosa, ρ_L e ρ_G , para

$T < T_c$, sendo que esta descontinuidade vai a zero a medida que T tende a T_c . A diferença $\rho_L - \rho_G$ é o chamado parâmetro de ordem para o líquido-gás. Por causa dessa descontinuidade na densidade, e também na entropia devido ao calor latente, onde ambas são derivadas primeiras do potencial termodinâmico, essa transição de fases é chamada de primeira ordem, ou descontínua. No caso do ponto crítico, a densidade, e também a entropia, são contínuas, porém a compressibilidade (proporcional a derivada segunda do potencial termodinâmico) é infinita, de modo que essa transição recebe o nome de transição de segunda ordem, ou contínua.

Com relação ao ponto crítico, Andrews, em 1869, publicou seus estudos sobre o dióxido de carbono [2], onde pela primeira vez ficou evidenciado uma característica muito peculiar desse ponto, ou seja, o fenômeno chamado opalescência crítica. O mesmo ocorre quando as flutuações da densidade do fluido possuem dimensões comparáveis ao comprimento de onda da luz, que acontece a temperaturas próximas a T_c . Desta forma, quando incidimos luz monocromática no fluido um forte espalhamento é observado.

2.2 Sistemas Magnéticos

Desde a antiguidade é conhecido que alguns materiais possuem propriedades magnéticas. Porém, somente a partir do início do século XX que o magnetismo foi interpretado, por Pierre Weiss [36], do ponto de vista qualitativo. Em 1907 Weiss desenvolveu uma teoria fenomenológica capaz de explicar qualitativamente materiais ferromagnéticos. Estes materiais possuem uma magnetização espontânea abaixo da temperatura de Curie (temperatura crítica - T_c), sendo que a mesma se anula para $T \geq T_c$, tornando-se assim um material paramagnético.

Quando atingimos a temperatura crítica dos materiais (por exemplo $T_c(Fe) = 770^\circ C$, $T_c(Ni) = 358^\circ C$) dizemos que o sistema sofre uma transição de fases magnética. Assim como para sistemas fluidos, em $T < T_c$ temos uma fase ordenada com menos simetria (ferromagnética) e com $T > T_c$ temos uma fase desordenada com mais simetria (paramagnética) - dizemos então que o sistema sofre uma quebra espontânea de simetria.

Existem, porém, outros materiais, como, por exemplo a hematita (Fe_2O_3) e os óxidos CoO e Cr_2O_3 , que na ausência de campo externo apresentam magnetização

total zero e não são propriamente paramagnéticos. Estes materiais são denominados antiferromagnéticos (AF) abaixo de uma dada temperatura, conhecida como temperatura de Néel (T_N). No estado AF os dipolos na rede cristalina interagem de tal forma a se orientarem antiparalelamente. Para temperaturas maiores que T_N os dipolos magnéticos se orientam de forma aleatória quebrando assim a ordem AF e se tornam paramagnéticos. A estrutura cristalina desses materiais é constituída por uma rede magnética que se divide, em sua forma mais simples, em duas sub-redes equivalentes (A e B). E, na ausência de campos externos temos $m_A = -m_B$ (m_A e m_B são as magnetizações das sub-redes *A-para cima* e *B-para baixo*). Porém, existem outros antiferromagnéticos que possuem estruturas mais complexas.

A analogia entre transições de fase magnéticas e fluidos é fácil de ser observada. Se aplicarmos uma pressão p num fluido a densidade do sistema aumenta, assim como a magnetização aumenta quando um campo H é aplicado num sistema ferromagnético. Desta forma, o par (H, M) é o análogo magnético ao par (p, ρ) para um fluido simples. Os planos HT , HM , e MT possuem regiões em que a análise discutida para os fluidos é totalmente aplicável. Basta olhar para as Figs. 2.1(b), 2.2(c) e (d) e perceber a semelhança entre os diagramas para os fluidos e para os magnetos. Neste caso, o parâmetro de ordem é a magnetização, ou seja, a partir do ponto crítico a magnetização se torna nula (o parâmetro de ordem é definido de tal forma que ele é zero acima da temperatura crítica e diferente de zero abaixo da temperatura crítica).

2.3 Expoentes críticos

O estudo de fenômenos críticos é cada vez mais centralizado na obtenção do conjunto de índices conhecidos como expoentes críticos [3, 35]. Estes expoentes servem para descrever o comportamento singular que certas grandezas termodinâmicas possuem ao redor do ponto crítico, como por exemplo, a Fig. 2.3. Esta figura mostra o comportamento crítico para o calor específico a volume constante do modelo de Ising de spin-1/2 exato e para várias aproximações. Nota-se que o calor específico, nesse caso, diverge na temperatura crítica. Outros exemplos disso são a compressibilidade e a capacidade térmica molar de sistemas fluidos, que crescem sem limites e divergem no ponto crítico. Essas singularidades são bem representadas quando escritas como função dos correspondentes desvios do ponto crítico como, por exemplo, $(T - T_c)$ e

$(p - p_c)$. Desta forma, os parâmetros de ordem mencionados nas duas primeiras seções deste capítulo, isto é $\psi = \Delta\rho = \rho_L - \rho_G$ e $\psi = M$ podem ser escritos como

$$\psi = \mathcal{B}(-\epsilon)^\beta [1 + B(-\epsilon)^\omega + \dots],$$

sendo \mathcal{B} e B constantes não universais, $\epsilon = (T - T_c)/T_c$, β é o expoente crítico

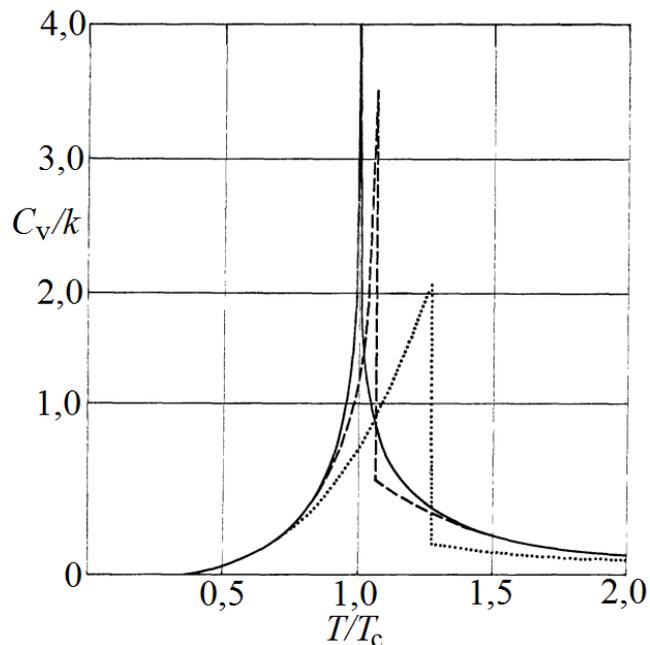


Figura 2.3: A curva sólida mostra o calor específico do modelo de Ising bidimensional, obtido pela solução exata de Onsager, a curva pontilhada obtido pela aproximação de Bethe e a curva tracejada obtido pela aproximação de Krammers-Wannier e Kikuchi. Figura retirada de [35].

correspondente do parâmetro de ordem e $\omega > 0$ é o expoente de correção de escala. Como os termos de correção de escala vão a zero quando $T \rightarrow T_c$, muito perto da transição temos

$$\Delta\rho \sim (-\epsilon)^\beta \quad \text{e} \quad M \sim (-\epsilon)^\beta. \quad (2.1)$$

O sinal de menos se deve ao fato de $\rho_L - \rho_G$ e M serem diferentes de zero somente para $T < T_c$ e a notação $a(x) \sim b(x)$ é utilizada para caracterizar o comportamento crítico, em que ambos a e b divergem ou ambos se anulam quando $x \rightarrow 0$.

Outra grandeza importante na caracterização da criticalidade em fluidos é a compressibilidade isotérmica ($K_T = \rho^{-1}(\partial\rho/\partial p)_T$) e em magnetos a susceptibilidade

isotérmica ($\chi_T = (\partial M / \partial H)_T$) sendo que ambas divergem no ponto crítico, ou seja, uma pequena variação na pressão (campo externo) gera uma variação infinita na densidade (magnetização). Admitimos que ao longo da isocórica ($\rho = \rho_c$) elas se comportem com

$$K_T \sim \begin{cases} (-\epsilon)^{-\gamma'} & [T < T_c, \rho = \rho_L(T) \quad \text{ou} \quad \rho = \rho_G(T)] \\ \epsilon^{-\gamma} & [T > T_c, \rho = \rho_c(T)] , \end{cases}$$

para fluidos e

$$\chi_T \sim \begin{cases} (-\epsilon)^{-\gamma'} & [T < T_c, H = 0] \\ \epsilon^{-\gamma} & [T > T_c, H = 0] , \end{cases}$$

para magnetos. Os correspondentes expoentes críticos γ e γ' não são necessariamente iguais.

Os expoentes para o calor específico, α' e α , são definidos pela relação

$$C_V \sim \begin{cases} (-\epsilon)^{-\alpha'} & [T < T_c, \rho = \rho_L(T) \quad \text{ou} \quad \rho = \rho_G(T)] \\ \epsilon^{-\alpha} & [T > T_c, \rho = \rho_c(T)] , \end{cases}$$

para fluidos e

$$C_H \sim \begin{cases} (-\epsilon)^{-\alpha'} & [T < T_c, H = 0] \\ \epsilon^{-\alpha} & [T > T_c, H = 0] , \end{cases}$$

para magnetos e, assim como anteriormente, α' e α não são necessariamente iguais.

Existem ainda os expoentes críticos do comprimento de correlação e da função correlação, a saber,

$$\xi \sim \begin{cases} (-\epsilon)^{-\nu'} & [T < T_c, H = 0] \\ \epsilon^{-\nu} & [T > T_c, H = 0] , \end{cases} \quad (2.2)$$

e

$$C(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad T = T_c, \quad (2.3)$$

sendo que ξ é o chamado comprimento de correlação, $C(r)$ é a função correlação de dois pontos distantes r (por exemplo, no caso magnético pode ser o valor médio do produto de dois spins estando separados pela distância r ou, no caso de fluidos, o valor médio do produto das densidades em dois locais diferentes separados por r), d é a dimensão da rede e ν e η são os correspondentes expoentes críticos.

Um outro expoente, δ , relaciona a variação de $p - p_c = \Delta p$ (e H , para magnetos) com $\rho - \rho_c$ (M) ao longo da isoterma crítica, ou seja, $\Delta p \sim |\rho - \rho_c|^\delta$ ($H \sim M^\delta$), com

$T = T_c$. É conveniente, entretanto, definir expoente crítico de uma forma mais geral. Assim, temos

$$\sigma = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\ln a(x)}{\ln x}, \quad (2.4)$$

sendo σ o expoente crítico associado a grandeza $a(x)$.

Houve uma época em que muitos pesquisadores acreditavam que todos os materiais possuíam o mesmo conjunto de expoentes. De fato, isso ocorre com as teorias de van der Waals, campo molecular e Landau, em sua forma original, as quais dão os mesmos valores para cada expoente crítico e, por isso, são conhecidas como teorias clássicas. Porém, assim como as temperaturas críticas variam de material para material, notou-se que o mesmo ocorre com os expoentes. Assim, as teorias clássicas falham na descrição dos sistemas próximos a transição de fase de segunda ordem. No entanto, os expoentes críticos não são totalmente diferentes em todos os sistemas. Descobriu-se que eles são os mesmos dentro de uma determinada classe, que são designadas por classes de universalidade de comportamento crítico. Os parâmetros que identificam uma determinada classe de universalidade são determinados por i) a dimensão da rede cristalina, ii) a dimensão do parâmetro de ordem, iii) o alcance das interações, e iv) podemos também considerar as simetrias do hamiltoniano.

Podemos ainda notar que nem todos os expoentes críticos são independentes. Existem desigualdades que relacionam certos expoentes. Uma destas desigualdades pode ser obtida analisando o calor específico para sistemas magnéticos.

Os calores específicos a campo magnético constante, C_H , e magnetização constante, C_M , são dados por

$$C_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H \quad \text{e} \quad C_M = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_M,$$

sendo que, através das relações de Maxwell, podem se relacionar como se segue

$$C_H - C_M = T \left\{ \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right\}^2 / \chi_T.$$

Como C_M deve ser sempre positivo a equação acima se torna uma desigualdade

$$C_H \geq T \left\{ \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_H \right\}^2 / \chi_T \quad \longrightarrow \quad \alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2, \quad (2.5)$$

sendo que a última relação foi obtida considerando a eq. (2.4), $C_H \sim (-\epsilon)^{-\alpha'}$, $\chi_T \sim (-\epsilon)^{-\gamma'}$ e $(\partial M/\partial T)_H \sim (-\epsilon)^{\beta-1}$. Esta é conhecida como a desigualdade de

Rushbrooke e várias outras desigualdades podem ser obtidas da mesma forma. Outros exemplos seriam as desigualdades de Buckingham-Gunton, abaixo

$$d \frac{(\delta - 1)}{(\delta + 1)} \geq 2 - \eta \quad \text{e} \quad \frac{d\gamma'}{2\beta + \gamma'} \geq 2 - \eta ,$$

desigualdades que relacionam o expoente crítico da função correlação, η , com os expoentes térmicos, δ , β e γ' , e a dimensão do sistema, d .

Em muitos trabalhos, teóricos e experimentais, nota-se que estas desigualdades são satisfeitas como igualdades. Existe uma técnica bem sucedida neste sentido, que introduziremos no Capítulo 4, chamada teoria de escala, mostrando que as igualdades são satisfeitas nesses casos.

Capítulo 3

Modelos estudados

Para se tratar teoricamente um sistema magnético devemos considerar Hamiltonianos que levem em conta várias contribuições de aspectos físicos distintos. De forma geral, um Hamiltoniano efetivo para descrever a física de baixas energias de sistemas magnéticos pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_Z + \mathcal{H}_d , \quad (3.1)$$

sendo que \mathcal{H}_t representa a energia de troca, \mathcal{H}_a o termo de anisotropia, \mathcal{H}_Z o termo resultante do efeito Zeeman, causado pela presença de um campo externo e \mathcal{H}_d é resultante da interação dipolar. O último termo é de extrema importância em sistemas magnéticos por ser uma interação de longo alcance e, em muitos casos, o responsável pelo surgimento de domínios, porém é, em geral, muito pequeno quando comparado aos outros e iremos, portanto, desprezar sua contribuição matemática nos Hamiltonianos a seguir.

Neste capítulo descreveremos então os modelos de interesse ao nosso trabalho, tomando como princípio básico a eq. (3.1), bem como apresentaremos os diagramas de fases resultantes dos mesmos, quando conhecidos.

3.1 Modelo de Ising

Como já mencionado no Capítulo 1, um dos modelos mais conhecidos no estudo de sistemas magnéticos é o modelo de Ising. Este modelo foi proposto por Lenz, em 1920, e resolvido em uma dimensão por Ising, em 1925 [10], e analiticamente por Onsager, em 1944 [37], para uma rede bidimensional. Neste modelo, spins em uma

rede cristalina possuem uma interação de curto alcance e são variáveis aleatórias que podem assumir os valores de ± 1 . O Hamiltoniano do modelo de Ising é dado por

$$\mathcal{H}_I = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (3.2)$$

sendo J a interação de troca, H o campo magnético externo e σ_i a variável de spin. A primeira soma se estende sobre pares de primeiros vizinhos numa rede de N sítios. O solução unidimensional obtida por Ising não apresenta transição de fases, enquanto que a solução obtida por Onsager, na ausência de campo externo, apresenta magnetização espontânea, encontrando, finalmente, uma transição de fases contínua. O conjunto de expoentes críticos correspondentes a essa solução, os quais descrevem o comportamento de algumas grandezas físicas perto da criticalidade, discordam dos valores obtidos por teoria de campo médio e van der Waals, e mesmo resultados experimentais, embora a solução de Onsager seja reproduzida e confirmada.

3.2 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg é um outro modelo bastante estudado. Os momentos magnéticos aparecem como operadores de spin, na forma de um produto escalar e o alinhamento do spin com o campo magnético pode também ser levado em conta. Segundo esse modelo, a dinâmica de spin para um ferromagneto a campo nulo é descrita pelo seguinte Hamiltoniano

$$\mathcal{H}_H = - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_{ij}^x \sigma_i^x \sigma_j^x + J_{ij}^y \sigma_i^y \sigma_j^y + J_{ij}^z \sigma_i^z \sigma_j^z), \quad (3.3)$$

sendo J_{ij}^μ a componente $\mu = x, y, z$ da interação efetiva entre pares de spins vizinhos. O modelo de Heisenberg se reduz ao modelo de Ising quando a interação em uma das direções é muito superior as outras, tornando as desprezíveis. Inicialmente o modelo foi estudado considerando-se baixas temperaturas, mas nos anos 60 percebeu-se que o modelo é uma boa aproximação para sistemas quânticos em temperaturas perto da crítica. A versão clássica do modelo de Heisenberg em uma dimensão foi resolvido por Fisher, em 1964 [38].

3.3 Modelo de Blume-Capel

Introduziremos agora o modelo de Blume-Capel proposto por Blume [22] e Capel [23] em 1966, separadamente. Este é um outro modelo de bastante interesse [39] e se trata de uma generalização do modelo de Ising. Ele considera a energia do sistema como uma função da interação entre os spins vizinhos, do campo externo e da anisotropia. Discutiremos o seu diagrama de fases para spin-1 e spin-3/2.

O modelo para spin-1 pode ser encontrado em um trabalho desenvolvido por Griffiths em 1970 [40], já o diagrama de fases para spin-3/2 só foi completamente entendido em 2003 [41]. Resultados para spins maiores podem ser encontrados em [42], sendo que cálculos aproximados para um valor geral de σ foram feitos usando a teoria de campo médio baseado na desigualdade de Bogoliubov. Seu Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H}_{BC} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i + D \sum_{i=1}^N \sigma_i^2, \quad (3.4)$$

sendo D o termo de anisotropia cristalina e $\sigma_i = \pm 1, 0$, como foi proposto originalmente. Note que se $\sigma_i = \pm 1$ recupera-se o modelo de Ising-1/2, pois o último termo seria apenas uma constante.

Este modelo possui solução exata para dimensão $d = 1$ e não apresenta transição de fases em temperaturas finitas para quaisquer valores de spin ou D . Para dimensões maiores somente foram encontradas soluções aproximadas e o comportamento qualitativo do diagrama de fases para esses casos será dado para spin-1 e spin-3/2, como já mencionado.

spin-1

Para spin-1 ($\sigma = \pm 1$ e 0), $H = 0$ e dimensão d é fácil observar que

- $D \rightarrow -\infty$ somente os estados $\sigma = \pm 1$ são populados, equivalendo ao modelo de Ising-1/2, com uma transição de segunda ordem dada em um certo valor $T_c^{I-1/2}$.
- $D = 0$ temos o modelo de Ising-1, com uma transição de segunda ordem em T_c^{I-1} .

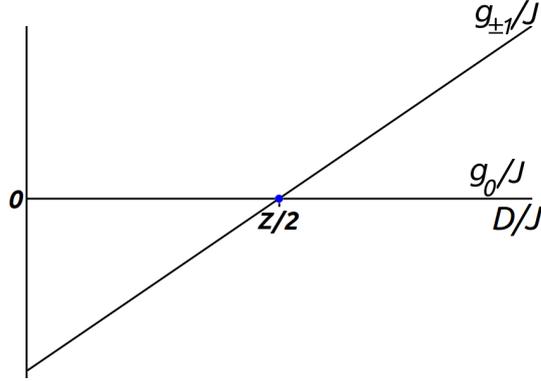


Figura 3.1: Energia livre por partícula g/J em função da anisotropia do sistema D/J para $spin-1$ em $T = 0$.

- $D \rightarrow \infty$ o sistema tende a um limite paramagnético, pois o estado de menor energia é com $\sigma = 0$.

Em T e $H = 0$ todos os spins estarão ou no estado $+1$, ou no -1 ou no estado 0 , sendo a energia livre de Gibbs dada por

$$G = \langle \mathcal{H}_{BC} \rangle = -JN \frac{z}{2} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle + ND \langle \sigma_i^2 \rangle, \quad (3.5)$$

sendo que N é o número de sítios, $z = 2d$ é o número de correlação e d a dimensão. Note que em $T = 0$ a energia livre de Gibbs e a energia interna do sistema coincidem, ambos podem ser obtidos calculando a média térmica do Hamiltoniano. A energia livre por spin em, g , para cada um dos estados pode ser facilmente observada como

$$g_0 = 0 \quad \text{e} \quad \frac{g_{\pm 1}}{J} = -\frac{z}{2} + \frac{D}{J}. \quad (3.6)$$

A Fig. 3.1 mostra o comportamento de g/J em função de D/J . A energia livre por partícula para $\sigma = 0$ é uma reta coincidente com o eixo D/J , enquanto que para $\sigma = \pm 1$ é uma reta crescente que cruza o eixo (portanto a reta g_0) no ponto $D/J = z/2$. Como a estabilidade do sistema em $T = 0$ é dada quando o mesmo se encontra no estado de menor energia, podemos concluir que para $D/J < z/2$ o sistema se encontrará nos estados -1 ou $+1$ (o sistema coexiste nesses estados), para $D/J = z/2$ o sistema coexistirá nos estados -1 , $+1$ e 0 e para $D/J > z/2$ o sistema se encontrará no estado 0 .

O diagrama de fases tridimensional $(\frac{D}{J}, \frac{k_B T}{J}, H)$ pode ser visto na Fig. 3.2. No plano $(\frac{D}{J}, \frac{k_B T}{J})$ podemos ver que para $D/J < z/2$ e baixas temperaturas duas fases

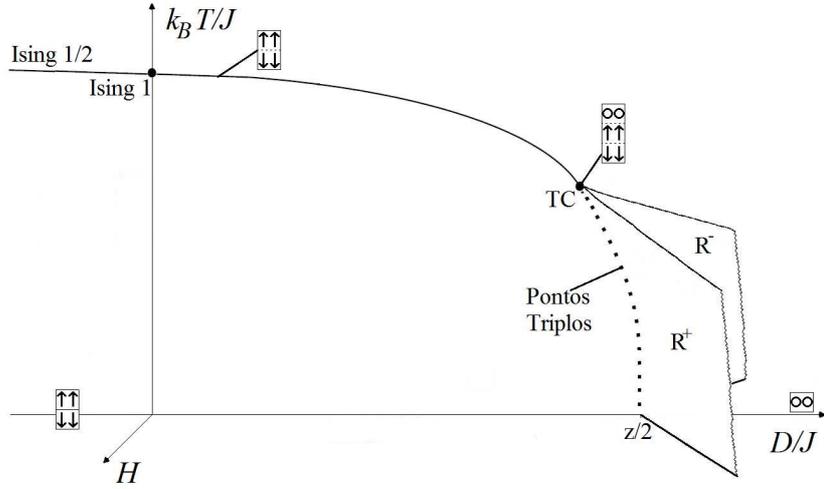


Figura 3.2: Diagrama de fases tridimensional esquemático do modelo de Blume-Capel para spin-1. As duas asas R^+ e R^- são superfícies de transições de primeira ordem.

ordenadas opostas coexistem, a medida que aumentamos T chegamos as linhas de transição, a partir dessa linha o sistema se torna paramagnético. Ora a transição é de segunda ordem (linha contínua) e as duas fases se tornam indistinguíveis, ora é de primeira ordem (linha pontilhada - formada por pontos triplos) e as três fases coexistem (incluindo $\sigma = 0$). A linha contínua é separada da pontilhada por um ponto em que as três fases são indistinguíveis, este é conhecido como ponto tricrítico (TC). Para $H \neq 0$ os estados com magnetizações negativas e positivas são desacoplados e o diagrama apresenta duas abas simétricas, as superfícies R^\pm . Na superfície R^+ (R^-) somente os estados com magnetizações positivas e nulas (negativas e nulas) podem ser encontrados. Os dois estados são coexistentes nas superfícies, enquanto que são indistinguíveis nas linhas que limitam superiormente as mesmas.

spin-3/2

Para spins semi-inteiros uma análise similar pode ser feita. Portanto, para spin-3/2 ($\sigma = \pm 3/2$ e $\pm 1/2$), por exemplo, com $H = 0$ e dimensão d teremos

- Para $D \rightarrow -\infty$ somente os estados $\sigma = \pm 3/2$ serão populados, reduzindo-se, assim, a um modelo de Ising com dois estados, com uma transição de segunda ordem em $T_c^{3/2}$.

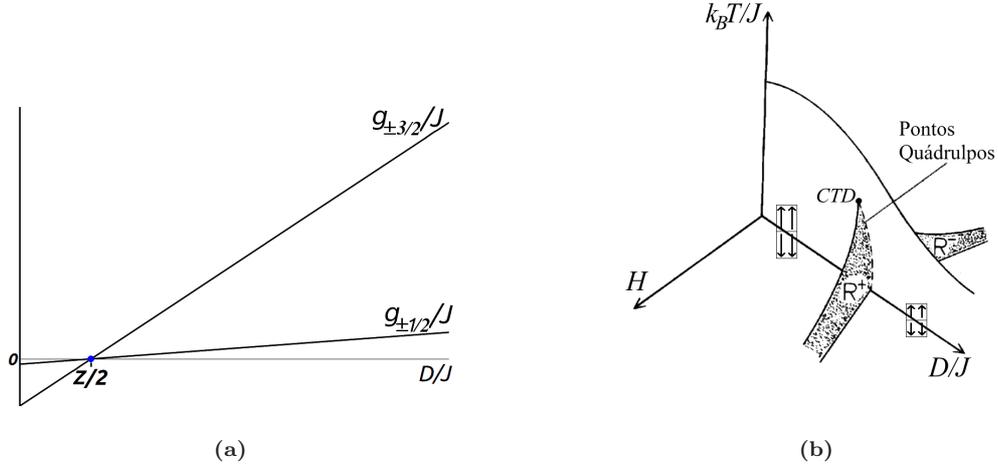


Figura 3.3: (a) Esboço da energia livre por spin g/J em função da anisotropia do sistema D/J para spin-3/2 em $T = 0$. (b) Diagrama de fases qualitativo para spin-3/2.

- $D = 0$ temos o modelo de Ising-3/2, com uma transição de segunda ordem em $T_c^{I-3/2}$.
- $D \rightarrow \infty$ o sistema se reduz ao modelo de Ising-1/2, com transição de segunda ordem em $T_c^{I-1/2}$.

As energias livres por spin a $T = 0$ para os estados $\pm 1/2$ e $\pm 3/2$ são dadas por

$$\frac{g_{\pm 1/2}}{J} = \frac{1}{4} \left(-\frac{z}{2} + \frac{D}{J} \right) \quad \text{e} \quad \frac{g_{\pm 3/2}}{J} = \frac{9}{4} \left(-\frac{z}{2} + \frac{D}{J} \right). \quad (3.7)$$

O comportamento da energia livre por spin em função da anisotropia pode ser visto na Fig. 3.3 (a). A interseção das duas curvas, conhecido como ponto quádruplo, ocorre com o mesmo valor de D encontrado para spin-1 ($D/J = z/2$), porém a partir deste ponto o sistema não se torna paramagnético, como no caso anterior. Este ponto divide duas regiões ferromagnéticas. Para baixos valores de T e $D/J < z/2$ o sistema coexistirá nos estados $\pm 3/2$ uma vez que neste limite temos $g_{\pm 3/2} < g_{\pm 1/2}$, enquanto que para $D/J > z/2$ coexistirá nos estados $\pm 1/2$ ($g_{\pm 3/2} > g_{\pm 1/2}$). Na Fig. 3.3(b) pode-se perceber que em $D/J = z/2$ inicia-se uma linha de transição de primeira ordem (linha de pontos quádruplos - $g_{\pm 3/2} = g_{\pm 1/2}$) que termina em um ponto crítico terminal duplo (CTD), ponto onde duas fases críticas coexistem ($\langle \sigma \rangle_{+3/2} = \langle \sigma \rangle_{+1/2}$ e, conseqüentemente, $\langle \sigma \rangle_{-3/2} = \langle \sigma \rangle_{-1/2}$), sendo que $\langle \sigma \rangle_\tau$ significa a magnetização do

sistema que em $T = 0$, todos os spins se encontram no estado τ . A linha contínua representa a transição de fases de segunda ordem. Assim como no caso anterior, quando tivermos $H \neq 0$ duas asas simétricas com superfícies de coexistência de fases aparecerão, e possuem descrições parecidas com as dadas anteriormente.

3.4 Modelo de Baxter-Wu

Com a intenção de se criar um modelo de interação magnética que não possuísse simetria por inversão dos spins, criou-se o modelo de Baxter-Wu (BW) [29, 43]. Este

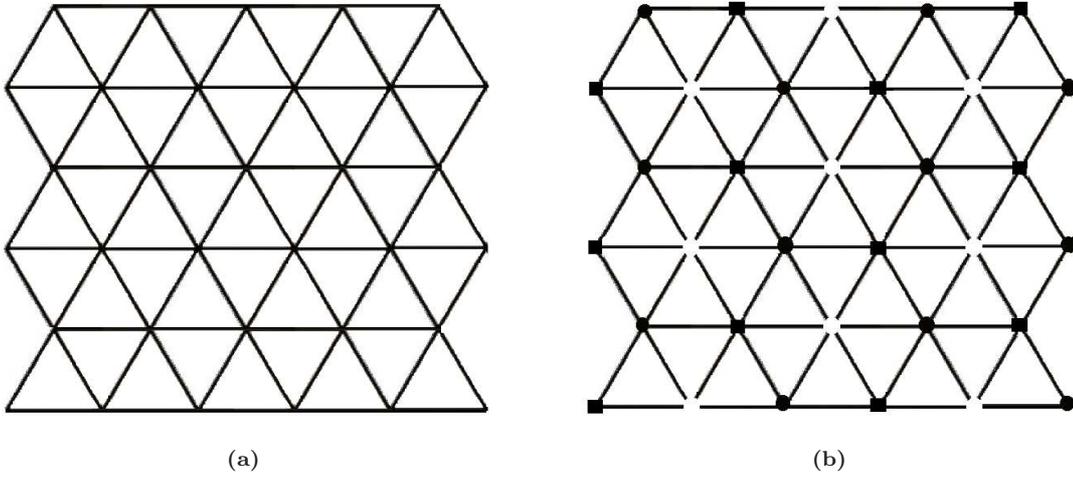


Figura 3.4: (a) Rede triangular que descreve o modelo BW. (b) Sub-redes que formam a mesma: círculos cheios, círculos vazios e quadrados cheios.

modelo é bidimensional e descrito por uma rede cristalina triangular, como pode ser visto na Fig. 3.4 (a), e seu Hamiltoniano contém a interação entre os três spins que formam os vértices de cada triângulo, podendo ser escrito como

$$\mathcal{H}_{BW} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - H \sum_i \sigma_i . \quad (3.8)$$

Assim como nos modelos anteriores, J é a interação de troca e a soma ocorre sobre todos os spins vizinhos que formam os triângulos da rede, com $\sigma_i = \pm 1$. Novamente consideraremos o campo externo nulo, $H = 0$, caso em que o modelo pode ser exatamente solúvel.

A rede original é formada por três sub-redes triangulares, A (círculos cheios), B (círculos vazios) e C (quadrados cheios), Fig. 3.4 (b), sendo que cada sítio da sub-rede

interage somente com spins das outras sub-redes. O estado fundamental de Baxter-Wu é quatro vezes degenerado em $T = 0$, sendo um estado ferromagnético, com todos os spins para cima, e os outros três ferrimagnéticos, com duas sub-redes com spins para baixo e a outra com spin para cima, como ilustrado na Fig. 3.5. Apesar do

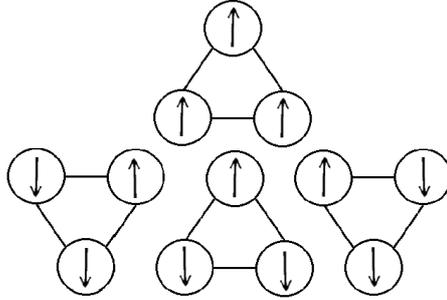


Figura 3.5: Arranjos elementares dos quatros estados fundamentais do modelo BW a temperatura nula. Note que o vértice superior do triângulo para cima e o vértice inferior do triângulo para baixo correspondem a mesma sub-rede, sendo, portanto, equivalentes.

sistema não apresentar simetria por inversão de spins, ele fica invariante por inversão dos spins de duas sub-redes quaisquer. O parâmetro de ordem deste sistema pode ser descrito por

$$m = \sqrt{\frac{m_A^2 + m_B^2 + m_C^2}{3}}, \quad (3.9)$$

sendo m_A , m_B e m_C as magnetizações das respectivas sub-redes. Observe que a inversão de apenas uma sub-rede é equivalente a usar J negativo, portanto, podemos considerar, sem perda de generalidade, somente o caso em que a constante de interação é positiva, descrevendo completamente o modelo.

Diversos trabalhos teóricos foram desenvolvidos sobre o modelo BW spin-1/2, como trabalhos baseados em grupo de renormalização [44], Monte Carlo e grupo de renormalização de Monte Carlo [45–47] para modelos puros ou diluídos. Mais recentemente, destacamos o estudo do modelo pelo método de escalonamento de tamanho finito e invariância conforme [16, 17, 48], mostrando que o modelo de BW apresenta a mesma classe de universalidade do comportamento crítico do modelo de Potts de 4-estados em uma rede bidimensional. Os resultados mais recentes, capazes de determinar a distribuição crítica do parâmetro de ordem [49] e da avaliação de BW puro e diluído por meio do algoritmo de Wang-Landau [50], tratam de uma análise de escala

de tamanho finito. Todos resultados concordam com a existência de uma criticalidade no modelo com expoentes na mesma classe de universalidade do comportamento crítico do modelo de Potts de 4-estados.

3.5 Modelo de Baxter-Wu com campo cristalino

O modelo BW na presença de um campo de anisotropia é uma extensão fenomenológica do modelo original para o comportamento multicrítico, que é observado quando se considera um campo cristalino no sistema (extensão análoga à feita ao modelo de Ising para se obter o modelo BC). Desta forma, seu Hamiltoniano é descrito por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j,k \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - H \sum_i \sigma_i + D \sum_i \sigma_i^2, \quad (3.10)$$

sendo que D é o campo cristalino. A semelhança da equação acima com a eq. (3.4) pode ser vista de forma direta, sendo assim, espera-se que o modelo BW tenha uma mudança no diagrama de fases semelhante à do modelo BC, descrito na seção 3.3. Note que para spin-1/2 o campo cristalino só altera o valor da energia por uma constante.

No modelo BC spin-1 o comportamento multicrítico é apresentado em um ponto tricrítico, ponto que separa uma linha de transição de primeira ordem de uma linha de segunda ordem, ou seja, marca o fim da coexistência das três fases do sistema. Já no modelo BC spin-3/2 a linha de coexistência das quatro fases tem o seu fim em um ponto crítico terminal duplo (CTD), sendo que a linha crítica e a linha de transição de primeira ordem não se conectam. O comportamento multicrítico vem sendo estudado por, pelo menos, meio século, sendo que a descrição dos fenômenos tricríticos podem ser vistos na referência [41]. Sabe-se que os expoentes tricríticos diferem dos críticos, mas para dimensões $d \geq 3$ são iguais aos clássicos. Em analogia ao modelo BC, espera-se que o campo cristalino produza efeitos similares ao diagrama de fases do modelo BW com spin- S .

No modelo BW spin-1 espera-se a existência de um ponto pentacrítico, presença esta conjecturada em [48], que, assim como no caso BC, separa a linha de primeira ordem da linha de segunda. Porém, para o modelo BW spin-3/2 pouco se conhece.

O interesse no estudo deste modelo deve-se a descrição precisa do diagrama de fases do mesmo, dando continuidade ao trabalho teórico realizado em 2004 por Costa,

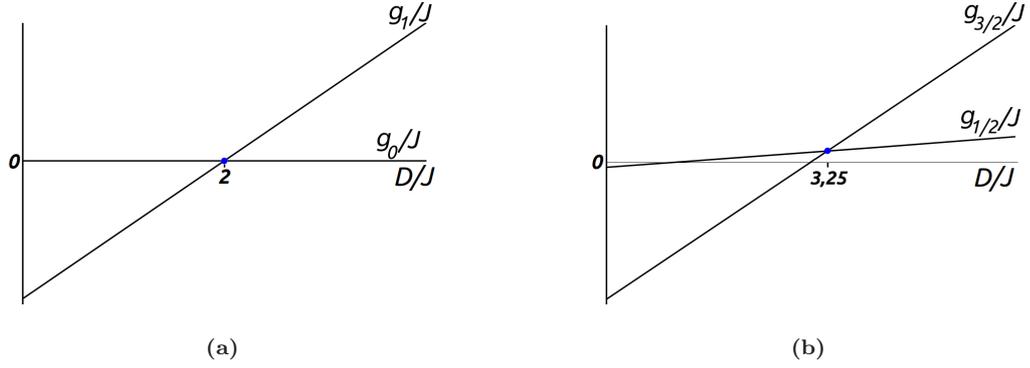


Figura 3.6: Esboço da energia livre por spin g/J em função da anisotropia do sistema D/J para (a) spin-1 e (b) spin-3/2, em $T = 0$.

Xavier e Plascak [31, 32]. Porém, apenas com argumentos termodinâmicos, podemos descrever qualitativamente a fenomenologia do diagrama de fases do modelo. No limite de temperatura nula, para campo externo nulo, a energia será

$$\langle \mathcal{H} \rangle_{\sigma_A, \sigma_B, \sigma_C} = -2JN \langle \sigma_A \sigma_B \sigma_C \rangle + D \frac{N}{3} \langle \sigma_A^2 + \sigma_B^2 + \sigma_C^2 \rangle, \quad (3.11)$$

sendo σ_A , σ_B e σ_C spins vizinhos de sub-redes diferentes. Note que como se trata de uma rede triangular o sistema será, necessariamente, bidimensional. Para spin-1 a equação acima resulta em

$$g_0 = 0 \quad \text{e} \quad \frac{g_1}{J} = -2 + \frac{D}{J},$$

sendo que g_1 é a energia livre dos 4 estados descritos na Fig. 3.5 para $\sigma = \pm 1$. Desta forma, para $D < 2J$, ver Fig. 3.6 (a), o sistema coexistirá nos quatro estados fundamentais descritos para o modelo BW spin-1/2 na seção 3.10, ou seja, coexistência do estado ferromagnético com os outros três estados ferrimagnéticos. Já para $D > 2J$ o estado que minimiza a energia livre é o que tem magnetização nula, com todos os spins no estado zero. Em $D = 2J$ teremos uma transição de fases descontínua onde o estado ferromagnético, os três estados ferrimagnéticos e o estado com magnetização nula coexistem. Por outro lado, com valores de campo cristalino cada vez mais decrescente $D \rightarrow -\infty$ o modelo BW spin-1 fica equivalente ao modelo BW de dois estados original e espera-se, portanto, a linha de transição contínua entre os quatro estados e a fase paramagnética, semelhante ao observado no modelo BC.

Para spin-3/2 temos

$$\frac{g_{3/2}}{J} = -\frac{3^3}{4} + \frac{9D}{4J} \quad \text{e} \quad \frac{g_{1/2}}{J} = -\frac{1}{4} + \frac{1D}{4J},$$

sendo que g_μ é a energia livre dos estados ferro e ferrimagnéticos com $\sigma = \pm\mu$. Portanto, para $D/J < 3,25$, ver Fig. 3.6 (b), o sistema coexistirá nesses estados com $\sigma = \pm 3/2$ e para $D/J > 3,25$ o sistema também coexistirá nesses estados, porém com $\sigma = \pm 1/2$. Quando $D/J = 3,25$ teremos a coexistência dessas oito fases, com uma transição descontínua. E, por fim, quando $D \rightarrow \pm\infty$ o modelo BW spin-3/2 ficará equivalente ao modelo BW de dois estados, com magnetizações diferentes para D 's nos limites positivos e negativos, e espera-se a existência de uma linha de transição contínua entre essas quatro fases e o estado paramagnético.

Faremos então um estudo mais detalhado do diagrama de fases do modelo BW a fim de descobrir se, assim como no modelo BC, existe o ponto pentacrítico para spin-1 e iremos verificar a existência, ou não, do ponto crítico terminal (CT) para spin-3/2 e se o seu diagrama possui alguma semelhança com o de BC spin-3/2.

Nos próximos capítulos introduziremos o método baseado no modelo de campo médio utilizado para aplicar o modelo BC a liga FeAl, bem como o método de escalonamento finito utilizado para descrever o diagrama de fases do modelo BW spin-1 e 3/2, ambos associados a técnica do grupo de renormalização.

Capítulo 4

Métodos utilizados

O formalismo do grupo de renormalização (GR) tem como conceito básico a redução dos graus de liberdade do Hamiltoniano, através de relações recursivas, mantendo o sistema inalterado. Em cada passo, uma fração muito grande de graus de liberdade é eliminada sendo que os efeitos dessa dizimação são transferidos para um Hamiltoniano efetivo. Portanto, a ação de se obter um novo Hamiltoniano \mathcal{H}' com reduzidos graus de liberdade a partir de um antigo \mathcal{H} é chamada de transformação de grupo de renormalização. Este formalismo foi proposto por Wilson nos anos 70 [6, 7] e é usado nos dias de hoje como uma das estratégias básicas para se resolver problemas fundamentais em mecânica estatística. Podemos vê-lo como uma extensão e implementação de uma ideia fenomenológica desenvolvida na década de 60 por Kadanoff [51].

Algumas informações gerais sobre o comportamento crítico de sistemas podem ser obtidas por aproximações fenomenológicas do grupo de renormalização. Nestas aproximações o comportamento crítico de um modelo de rede infinita é obtido, quantitativamente, por hipóteses de escala de tamanho finito com a determinação exata de alguns parâmetros físicos para o sistema reduzido (finito), sistema este que depende fortemente da geometria do sistema. Considerando, por exemplo, uma rede hipercúbica, duas geometrias de particular interesse seriam, um sistema finito com todas as direções consistindo de uma rede hipercúbica de tamanho L ($L \times L \times L$), ou um sistema finito em uma direção, de tamanho L , e infinito nas outras direções ($L \times \infty \times \infty$), este último merece uma análise mais cuidadosa, pois, além de ser mais trabalhoso, o próprio sistema finito pode apresentar um ponto crítico. Entre estes formalismos fenomenológicos há o grupo de renormalização de campo médio

(GRCM) [52, 53] e o grupo de renormalização de escalonamento finito [13].

4.1 Construção de Kadanoff e grupo de renormalização (GR)

Em 1966, Kadanoff apresentou um argumento heurístico que providenciava um suporte intuitivo à hipótese da teoria de escala. Como ilustração, consideraremos o modelo de Ising

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i ,$$

onde a equação acima descreve o Hamiltoniano já discutido no Capítulo 3, para apresentar o argumento introduzido por Kadanoff.

Perto da temperatura crítica o comprimento de correlação do sistema torna-se muito grande em comparação ao parâmetro de rede a , formando grandes grupos de spins bastante correlacionados. Desta forma, podemos considerar que o sistema se divide em várias células com spins que tendem a se alinhar, em sua grande maioria, para cima ou para baixo.

A construção de Kadanoff consiste em considerar que essas células (em algumas referências chamadas de blocos de spins) possuem dimensão ℓa , contendo ℓ^d spins altamente correlacionados, como indicado na Fig. 4.1 para um sistema bidimensional,

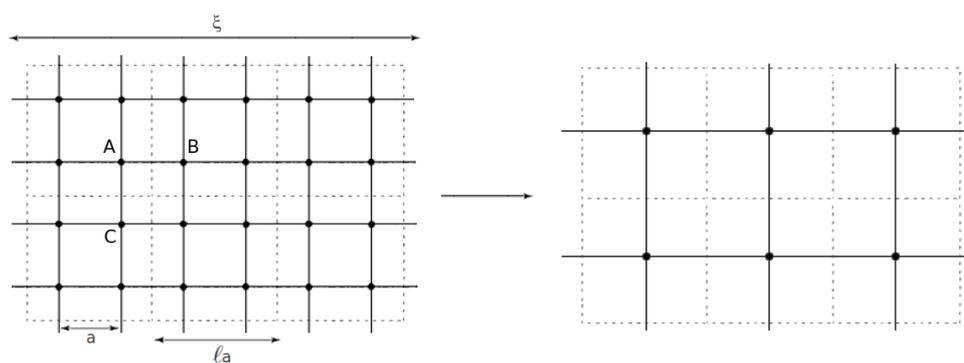


Figura 4.1: Divisão de uma rede bidimensional, originalmente com $N = 24$ spins, em células quadradas de lado ℓa , onde a é o parâmetro de rede e, neste caso, $\ell = 2$, resultando em outra rede bidimensional com $N' = N/\ell^d = 6$ spins.

onde ℓ é medido em unidades de a e com $a \ll \ell a \ll \xi$. Sendo assim, podemos associar a cada célula uma nova variável de spin, Θ_α , com $\alpha = 1, 2, 3, \dots, N/\ell^d$, tal que $\Theta_\alpha = \pm 1$ para qualquer α , porém com novos parâmetros J' e H' . Vamos ainda supor que o Hamiltoniano do sistema transformado possa ser escrito de forma semelhante ao do sistema original que, para o exemplo que estamos considerando, seria

$$\mathcal{H}' = -J' \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} \Theta_\alpha \Theta_\beta - H' \sum_{\alpha=1}^{N'} \Theta_\alpha ,$$

onde a primeira soma é feita entre os primeiros vizinhos (α e β), a segunda é feita sobre todos os novos sítios N' e lembrando que esta equivalência só é válida no limite crítico, ou seja, $\epsilon \rightarrow 0$. Como J define a temperatura crítica, a mudança de J para J' implica em uma mudança de ϵ para ϵ' . Para assegurar a equivalência dos sistemas original e transformado a função de partição deve ser preservada, ou seja,

$$\mathcal{Z}_N(\mathcal{H}) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta E_i} = \sum_{\{\Theta_\alpha\}} e^{-\beta E'_\alpha} = \mathcal{Z}_{N'}(\mathcal{H}') , \quad (4.1)$$

onde $N' = N/\ell^d$ é o número de spins do sistema transformado, $\{\sigma_i\}$ representa a soma sobre todos os estados possíveis do sistema original e $\{\Theta_\alpha\}$ a soma sobre todos os estados do sistema transformado. Como a energia livre é proporcional ao logaritmo da função partição, teremos então

$$G(\epsilon', H') = G(\epsilon, H) . \quad (4.2)$$

Dividindo-se ambos os lados por N e usando $N' = \frac{N}{\ell^d}$ teremos

$$\frac{G(\epsilon, H)}{N} = \ell^{-d} \frac{G(\epsilon', H')}{N'} \quad \longrightarrow \quad g(\epsilon, H) = \ell^{-d} g(\epsilon', H') , \quad (4.3)$$

onde a última igualdade é conhecida como regra da homogeneidade e o fator de escala ℓ é um efeito da diminuição de graus de liberdade de um sistema infinito.

As ideias de Kadanoff, apesar de serem de extrema importância, são apenas hipóteses *ad hoc* e algumas delas um pouco fracas. Blocos de spins, por exemplo, geralmente tem interações mais complicadas que, apenas, interações entre primeiros vizinhos. Para o exemplo bidimensional apresentado na Fig. 4.1 podemos perceber que ambos os sítios B e C interagem com o A , é razoável, então, esperar que o bloco em que B pertence interaja com o de C , providenciando interação entre segundos

vizinhos.

Utilizando, porém, essas ideias podemos introduzir a teoria do GR, até mesmo para o modelo de Ising unidimensional, que não apresenta transição de fases para temperaturas não nulas [25, 54, 55]. Na ausência de campo externo e considerando condições de contorno periódicas, a função de partição, Z , será dada por

$$Z(K, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta J(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \dots + \sigma_{N-1}\sigma_N + \sigma_N\sigma_{N+1})},$$

onde $\beta = 1/k_B T$ e $\sigma_{N+1} = \sigma_1$. A primeira ideia do GR é remover finitos graus de liberdade da função partição, para isso iremos reescrevê-la como

$$Z(K, N) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3)} e^{K(\sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_5)} \dots,$$

onde $K = \beta J$ é a constante de acoplamento. Somando sobre todos os spins pares, teremos

$$Z(K, N) = \sum_{\{\sigma_1, \sigma_3, \dots\}} \{e^{K(\sigma_1 + \sigma_3)} + e^{-K(\sigma_1 + \sigma_3)}\} \times \{e^{K(\sigma_3 + \sigma_5)} + e^{-K(\sigma_3 + \sigma_5)}\} \dots$$

Ao fazermos essas somas alguns graus de liberdade são removidos. Um segundo passo importante é escrever esta função de partição, parcialmente somada, de modo que tenha a mesma forma de uma função partição para o modelo de Ising com $N/2$ spins e uma constante de acoplamento K' , diferente do K inicial. Devemos ter, então

$$\begin{aligned} Z(K, N) &= \sum_{\{\sigma_1, \sigma_3, \dots\}} \{e^{K(\sigma_1 + \sigma_3)} + e^{-K(\sigma_1 + \sigma_3)}\} \times \{e^{K(\sigma_3 + \sigma_5)} + e^{-K(\sigma_3 + \sigma_5)}\} \dots \\ &= [f(K)]^{N/2} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K' \sum_{i=1}^{N/2} \sigma_i \sigma_{i+1}} = [f(K)]^{N/2} Z(K', N/2), \end{aligned}$$

com a reescala dada por

$$e^{K(\sigma + \sigma')} + e^{-K(\sigma + \sigma')} = f(K) e^{K' \sigma \sigma'},$$

para todo $\sigma, \sigma' = \pm 1$. Se esta reescala é possível, teremos então um conjunto de relações recursivas (neste caso, apenas uma) para as quais podemos calcular a energia livre $g(K', N')$ partindo de um sistema com outra constante K . Para determinar as quantidades K' e $f(K)$, notamos que se $\sigma = \sigma'$, então

$$e^{2K} + e^{-2K} = f(K) e^{K'}.$$

Já se $\sigma = -\sigma'$, teremos

$$2 = f(K)e^{-K'} ,$$

resultando em

$$\begin{aligned} K' &= \frac{1}{2} \ln \cosh(2K) , \\ f(K) &= 2 \cosh^{1/2}(2K) . \end{aligned} \tag{4.4}$$

Sendo $\ln Z = Ng(K)$, e lembrando que $g(K)$ é intensiva, portanto não depende do tamanho do sistema, teremos

$$\ln Z(K, N) = \frac{N}{2} \ln f(K) + \ln Z(K', N/2) ,$$

que resulta em

$$g(K') = 2g(K) - \ln[2\sqrt{\cosh(2K)}] ,$$

ou, de forma mais geral para um sistema de dimensão d ,

$$g(K') = h(K) + \ell^d g(K) . \tag{4.5}$$

As eqs. (4.39) e (4.5) são conhecidas como equações do GR e são equações que mapeiam $(K, H) \rightarrow (K', H')$. Note que a nova constante de acoplamento K' é sempre menor que K no caso das relações para o modelo de Ising unidimensional.

É importante notar que as eqs. (4.1) e, conseqüentemente, (4.2) indicam a equivalência na forma funcional destes parâmetros termodinâmicos, ou seja, se tivermos, por exemplo, $G(K, H) = \cosh(K + H)$, teremos então $G(K', H') = \cosh(K' + H')$. Já as eqs. acima mostram como se obter as relações recursivas, através das transformações do GR.

Com a construção de Kadanoff o parâmetro de rede muda para $a' = \ell a$, o que implica num aumento de ℓ na escala de comprimento. Como o comprimento de correlação pode ser medido em unidades do parâmetro de rede, uma vez que estamos interessados em saber o número de sítios correlacionados, encontramos

$$\xi' = \frac{\xi}{\ell} , \tag{4.6}$$

equação que relaciona o comprimento de correlação de dois sistemas com graus de liberdade diferentes. Portanto, se o sistema estiver longe do ponto crítico, a medida que o transformamos, o sistema se afastará ainda mais da criticalidade (pois haverá uma diminuição em ξ'), já se o sistema estiver no ponto crítico não haverá variações

em ξ , que é infinito, e as equações recursivas não variam mais K . Neste ponto, acharemos $K' = K = K^*$, que recebe o nome de ponto fixo e determina a temperatura de transição.

De uma forma geral, o grupo de renormalização para um Hamiltoniano $\mathcal{H}(\vec{K})$, tal que $\vec{K} = (K_1, K_2, \dots)$ representa todas as interações do sistema (por exemplo, $K_1 = \beta J$ é a interação entre primeiros vizinhos, $K_2 = \beta H$ é a interação com o campo magnético, etc) pode ser resumido nos seguintes passos

- i.* Dado um certo Hamiltoniano \mathcal{H} , obtém-se um outro \mathcal{H}' através de uma transformação R que reduz alguns graus de liberdade do sistema original

$$\mathcal{H}' = R\mathcal{H} . \quad (4.7)$$

- ii.* Esta transformação modifica o conjunto de interações de K_i para K'_i , de forma que

$$K'_i = f_i(\vec{K}) , \quad (4.8)$$

define um conjunto de relações de recorrência.

- iii.* A transformação deve ser repetida diversas vezes

$$\mathcal{H}' = R\mathcal{H} , \quad \mathcal{H}'' = R\mathcal{H}' , \dots \quad (4.9)$$

até se alcançar um ponto fixo.

Para sistemas mais complexos podemos considerar aglomerados finitos de spins e calcular analiticamente, ou numericamente, dependendo da complexidade do sistema, certas quantidades P' s e obter, através de hipóteses de escala de tamanho finito (como será discutido a seguir), o comportamento crítico desses sistemas. Este tipo de aproximação, como já mencionados anteriormente, caracteriza os chamados grupos de renormalização fenomenológicos.

4.2 Hipótese de escala de tamanho finito

Para descrevermos a hipótese de escala de tamanho finito introduziremos, primeiramente, a teoria de escala, que é dada no limite termodinâmico.

Teoria de escala

Esta teoria foi formulada, de forma clara e coerente, na década de 60, por Domb e Hunter [56], e Widom [57, 58]; mais referências podem ser vistas em [35, cap. 11]. Esta é uma teoria fraca, uma vez que se baseia em simples considerações concernentes a forma geral dos potenciais termodinâmicos na criticalidade, sem a determinação de seus expoentes críticos.

Como pode ser visto na eq. (2.2), o comprimento de correlação pode ser escrito como

$$\xi \sim |\epsilon|^{-\nu}, \quad (4.10)$$

sendo que o módulo em ϵ é usado para generalizar a discussão tanto para $T \rightarrow T_c^+$, quanto para $T \rightarrow T_c^-$. Sendo assim, considera-se que na região da criticalidade o potencial termodinâmico seja dado por uma parte regular $G_0(\epsilon, H)$, que não interessa no estudo de transição de fases, e uma parte singular $G_s(\epsilon, H)$, que contém as anomalias observadas. Temos então

$$G(\epsilon, H) = G_0(\epsilon, H) + G_s(\epsilon, H).$$

A hipótese de escala consiste em considerar que a parte singular deste potencial seja uma função homogênea generalizada, desta forma, podemos escrever

$$\lambda g_s(\epsilon, H) = g_s(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_H} H), \quad (4.11)$$

sendo que g_s é a energia livre de Gibbs por sítio e λ é um fator de escala arbitrário. É importante notar que a intenção da hipótese de escala não é especificar os parâmetros a_ϵ e a_H , pois, como já foi dito, esta teoria não determina os valores dos expoentes críticos.

De forma geral, qualquer quantidade P , obtida por uma derivação da energia livre acima, seria dada por

$$P \sim |\epsilon|^{-\sigma}, \quad (4.12)$$

sendo que σ é o expoente crítico específico da grandeza P . Por exemplo, para a magnetização

$$\lambda^{a_H} \frac{\partial g_s(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_H} H)}{\partial(\lambda^{a_H} H)} \Big|_T = \lambda \frac{\partial g_s(\epsilon, H)}{\partial H} \Big|_T, \\ \lambda^{a_H} m(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda m(\epsilon, H) \quad \rightarrow \quad m(\epsilon, 0) = (-\epsilon)^{\frac{1-a_H}{a_\epsilon}} m(-1, 0) \sim |\epsilon|^\beta, \quad (4.13)$$

sendo que escolhemos $\lambda = (-1/\epsilon)^{-1/a_\epsilon}$ e usamos $H = 0$, pois nosso interesse é o comportamento crítico, portanto, devemos ter em mente que $\epsilon \rightarrow 0$. Desta forma, podemos escrever o expoente crítico da magnetização em função dos parâmetros a_ϵ e a_H resultando em

$$\beta = (1 - a_H)a_\epsilon . \quad (4.14)$$

Similarmente, podemos obter para outras grandezas termodinâmicas a dependência de seus expoentes críticos com estes parâmetros. Sendo $\chi_T = (\partial M/\partial H)_T$

$$\lambda^{2a_H} \chi_T(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda \chi_T(\epsilon, H) ,$$

e considerando $H = 0$ e $\lambda = (-1/\epsilon)^{1/a_\epsilon}$, teremos

$$\chi_T(\epsilon, 0) = (-\epsilon)^{(1-2a_H)/a_\epsilon} \chi_T(-1, 0) \sim |\epsilon|^{-\gamma'} ,$$

logo

$$\gamma' = \frac{2a_H - 1}{a_\epsilon} = -2\beta + \frac{1}{a_\epsilon} . \quad (4.15)$$

Se diferenciarmos o potencial de Gibbs duas vezes com relação a temperatura, mantendo H constante, teremos o calor específico, pois $C_H = (\partial E/\partial T)_H = -T(\partial^2 G/\partial T^2)_H$, logo

$$\lambda^{2a_\epsilon} C_H(\lambda^{a_\epsilon} \epsilon, \lambda^{a_H} H) = \lambda C_H(\epsilon, H) ,$$

de novo, fazendo $H = 0$ e $\lambda = (-1/\epsilon)^{1/a_\epsilon}$, e lembrando que $C_H \sim |\epsilon|^{\alpha'}$, teremos

$$\alpha' = 2 - \frac{1}{a_\epsilon} . \quad (4.16)$$

Utilizando a equação acima juntamente com as eqs. (4.14) e (4.15) obteremos

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 , \quad (4.17)$$

que idêntica a eq. (2.5), mas nesse caso temos uma igualdade.

Hipótese de escala de tamanho finito

Por outro lado, um sistema finito poderá não apresentar uma singularidade real em temperaturas diferentes de zero e o comportamento crítico de suas grandezas termodinâmicas devem ser analisados de forma mais cuidadosa.

Para o caso em que o comprimento de correlação do sistema infinito ξ_∞ for muito menor que o comprimento do sistema finito, L , ($L/\xi_\infty \gg 1$), esperamos não observar efeitos significativos de tamanho de finito, ou seja, o sistema finito se comporta como um sistema no limite termodinâmico, pois ξ_∞ não será limitado por L . Neste caso, os spins internos, distantes da fronteira, se comportarão como os de uma rede infinita. Porém, quando $L/\xi_\infty \ll 1$ os efeitos de tamanho finito manifestam-se nas grandezas termodinâmicas, já que o longo alcance da correlação é limitado pelo tamanho do sistema L . Isto acontece quando o sistema de tamanho limitado L encontra-se próximo da temperatura crítica T_c do sistema infinito.

Podemos calcular, para um L finito, uma quantidade termodinâmica P , quantidade esta que dependerá da geometria do sistema e da temperatura, logo

$$P = P_L(\epsilon) .$$

Como os efeitos de tamanho finito se fazem presentes dependendo da razão L/ξ_∞ , esperamos que a grandeza P obedeça a relação abaixo [59, 60]

$$\frac{P_L(\epsilon)}{P_\infty(\epsilon)} = f\left(\frac{L}{\xi_\infty(\epsilon)}\right) . \quad (4.18)$$

Esta relação é a hipótese de escala de tamanho finito, sendo $\xi_\infty \sim |\epsilon|^{-\nu}$ e $P_\infty \sim |\epsilon|^{-\sigma}$ o comprimento de correlação e a grandeza física P , respectivamente, no limite termodinâmico. Portanto, para $\epsilon \ll 1$,

$$P_L(\epsilon) \sim |\epsilon|^{-\sigma} f\left(\frac{L}{\xi_\infty(\epsilon)}\right) . \quad (4.19)$$

No limite de $L \rightarrow \infty$, com ϵ fixo, teremos P_L se aproximando de P_∞ , portanto $f(x) \rightarrow 1$, sendo que $x = \frac{L}{\xi_\infty(\epsilon)}$. Porém, quando $\epsilon \rightarrow 0$, com L finito e fixo, não observaremos transição de fases e $P_L(\epsilon)$ é não singular em T_c , podemos supor então

$$f(x) \begin{cases} \rightarrow 1 & x \rightarrow \infty \\ \sim \left(\frac{L}{\xi_\infty}\right)^z & x \rightarrow 0 . \end{cases} \quad (4.20)$$

Sendo assim, no limite da criticalidade para o sistema finito, teremos

$$P_L(\epsilon) \sim |\epsilon|^{-\sigma} \left(\frac{L}{\xi_\infty}\right)^z \sim |\epsilon|^{-\sigma} \left(\frac{L}{|\epsilon|^{-\nu}}\right)^z = |\epsilon|^{-\sigma+z\nu} L^z . \quad (4.21)$$

Como P_L deve ser finito, obtemos $z = \sigma/\nu$ resultando em

$$P_L(\epsilon) \sim L^{\sigma/\nu} = L^\phi , \quad (4.22)$$

sendo que $\phi = \sigma/\nu$ é a chamada dimensão anômala da quantidade P . Podemos, então, escrever uma forma equivalente a eq. (4.18), e mais conveniente, que será utilizada no desenvolvimento do GRCM e do GREF

$$P_L(\epsilon) = L^\phi h(L^y \epsilon) .$$

Quando $\epsilon \rightarrow 0$ e L é finito e fixo, temos $g(x) = \text{const.}$, recaindo no caso (4.22), já quando $L \rightarrow \infty$ e ϵ é fixo, $P_L(\epsilon)$ deve permanecer finito, sendo assim, a função $h(x)$ pode ser escrita como

$$h(x) \begin{cases} \rightarrow \text{const.} & x \rightarrow 0 \\ \sim (L^y |\epsilon|)^\omega & x \rightarrow \infty . \end{cases} \quad (4.23)$$

Portanto, no limite termodinâmico teremos

$$P_L(\epsilon) \sim L^{\sigma/\nu} L^{y\omega} |\epsilon|^\omega = L^{\sigma/\nu + y\omega} |\epsilon|^\omega \longrightarrow P_L(\epsilon) \sim |\epsilon|^\omega ,$$

sendo que consideramos $\omega = -\sigma/y\nu$. Comparando com a eq. (4.12) e lembrando que a equação acima foi obtida tomando $L \rightarrow \infty$, temos $\omega = -\sigma$, o que nos leva a $y = 1/\nu$. Assim a hipótese de escala de tamanho finito para uma variável toma a forma

$$P_L(\epsilon) = L^\phi h(L^{1/\nu} \epsilon) , \quad (4.24)$$

o que nos dá a dependência da grandeza P em função da temperatura e do tamanho do sistema.

Esta hipótese possui a importante característica de possibilitar a construção de relações de recorrência construídas através de grandezas físicas para sistemas de tamanhos L e L' , sendo que $P_{L'}(\epsilon') = L'^\phi g(L^{1/\nu} \epsilon')$. Lembrando que no ponto crítico $\epsilon = \epsilon' = 0$ teremos

$$\frac{P_L}{L^\phi} = \frac{P_{L'}}{L'^\phi} = h(0) . \quad (4.25)$$

É evidente que a precisão destas relações de recorrência se encontra na geometria dos sistemas finitos que serão usados para se obter P_L e $P_{L'}$. Entretanto, percebe-se que tais técnicas são aplicáveis a pequenos sistemas, com poucos graus de liberdade, porém, em muitos sistemas, será necessário a utilização de aproximações numéricas para se aumentar a precisão do método.

Finalmente, uma generalização da hipótese de escala (4.24) para modelos que apresentem um campo externo é dada por

$$P(\epsilon, H, L) = \ell^\phi P(\ell^{1/\nu} \epsilon, \ell^{y_H} H, \ell^{-1} L) , \quad (4.26)$$

sendo que o sub-índice visto em (4.24), que representa a dependência de P com o tamanho do sistema, é visto acima como uma variável e ℓ é um fator de escala qualquer. Por exemplo, para $\ell = L/L'$, $H = 0$ e tomando $\ell^{1/\nu}\epsilon = \epsilon'$ recuperamos a eq. (4.25). É interessante notar também a semelhança da eq. (4.26) com a eq. (4.3), obtida pela construção de Kadanoff com $P = g$, $\phi = -d$, $\ell^{1/\nu}\epsilon = \epsilon'$ e $\ell^{y_H}H = H'$.

Obviamente, para cada quantidade P diferente utilizada, diferentes abordagens serão obtidas. Um dos primeiros e mais precisos procedimentos foi proposto por Nightingale [13], calculando o comprimento de correlação para redes consistindo de tiras infinitas com larguras finitas. Posteriormente, ideias de campo médio foram utilizadas na obtenção de equações similares. Esses grupos fenomenológicos serão discutidos na próxima secção.

4.3 Grupo de renormalização de campo médio

No GRCM consideraremos dois aglomerados finitos com N e N' spins interagentes, tal que $N' < N$. Os spins que se encontram em torno destes aglomerados geram campos b_1 e b_2 , respectivamente, e podem ser vistos como a magnetização efetiva dos demais spins da rede infinita e comportam-se como campos de quebra de simetria em cada aglomerado. As magnetizações por sítio, $m_N(\vec{K}, H; b)$ e $m_{N'}(\vec{K}', H'; b')$, podem ser computadas exatamente através de

$$m_N(\vec{K}, H; b) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\text{Tr}(\sigma_i e^{-\beta \mathcal{H}_N})}{\text{Tr}(e^{-\beta \mathcal{H}_N})}, \quad (4.27)$$

sendo que o traço é feito sobre o ensemble definido pelo Hamiltoniano do aglomerado $\mathcal{H}_N(\vec{K}, H; b)$ e σ_i é o operador de spin correspondente. Uma expressão similar é obtida para o aglomerado com N' sítios.

Ao invés de, simplesmente, igualar a magnetização por spin de cada aglomerado ao campo de quebra de simetria, o GRCM assume que estas magnetizações são relacionadas através da relação de escala dada pela derivada com relação a H da eq. (4.3)

$$m_{N'}(\vec{K}', H') = \ell^{d-y_H} m_N(\vec{K}, H), \quad (4.28)$$

sendo que o fator de reescala ℓ pode ser definido como

$$\tilde{\ell} = \left(\frac{N}{N'} \right)^{1/d}, \quad (4.29)$$

de acordo com a construção de Kadanoff. Como a eq. (4.28) deve ser válida para sistemas próximos do ponto crítico, a magnetização para cada aglomerado finito deve ser muito pequena. Esta condição é alcançada ao fazermos $b \ll 1$ e $b' \ll 1$, bem como, $H \ll 1$ e $H' \ll 1$, uma vez que um sistema finito não possui magnetização espontânea. A eq. (4.28) pode, então, ser expandida como

$$f_{N'}(\vec{K}')b' + g_{N'}(\vec{K}')H' = \ell^{d-y_H} f_N(\vec{K})b + \ell^{d-y_H} g_N(\vec{K})H, \quad (4.30)$$

onde

$$\begin{aligned} f_{N'}(\vec{K}') &= \left. \frac{\partial m_{N'}(\vec{K}', H'; b')}{\partial b'} \right|_{H'=0, b'=0} ; & f_N(\vec{K}) &= \left. \frac{\partial m_N(\vec{K}, H; b)}{\partial b} \right|_{H=0, b=0} , \\ g_{N'}(\vec{K}') &= \left. \frac{\partial m_{N'}(\vec{K}', H'; b')}{\partial H'} \right|_{H'=0, b'=0} ; & g_N(\vec{K}) &= \left. \frac{\partial m_N(\vec{K}, H; b)}{\partial H} \right|_{H=0, b=0} . \end{aligned} \quad (4.31)$$

Como b e b' também são vistos como magnetização e são bem pequenos, eles devem obedecer a mesma relação de escala, portanto

$$b' = \ell^{d-y_H} b. \quad (4.32)$$

Pelas eqs. (4.30) e (4.32), temos

$$f_{N'}(\vec{K}') = f_N(\vec{K}), \quad (4.33)$$

obtido ao se igualar os coeficientes de b' , e

$$g_{N'}(\vec{K}')H' = \ell^{d-y_H} g_N(\vec{K})H, \quad (4.34)$$

obtido ao se igualar os termos de campo externo. Perceba que a função g , neste caso, está relacionada a derivada do parâmetro de ordem com relação aos campos, e não a energia livre de Gibbs por spin. A eq. (4.33), que não depende de expoente algum, é interpretada como a relação recursiva das constantes \vec{K} do GRCM comum, enquanto que a eq. (4.34) é usada para se estimar o expoente crítico magnético y_H .

Esta técnica foi desenvolvida para Hamiltonianos com apenas um parâmetro (ou constante de acoplamento). Voltaremos nossa atenção, agora, para o caso em que o Hamiltoniano apresenta mais do que um parâmetro. Neste caso é claro que a criticidade não fica completamente definida através da relação recursiva unidimensional

como a dada na eq. (4.33). Um caso particular seria o bidimensional, descrito por $\vec{K} = (K_1, K_2)$, que é o mais tratado na literatura, como, por exemplo, para sistemas descritos por Hamiltonianos como o de Blume-Capel

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i + D \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 ,$$

sendo $\vec{K} = (\beta J, \beta D)$. Este modelo possui duas constantes de acoplamento, porém apenas um parâmetro de ordem. Então, devemos calcular para o sistema finito com N sítios o parâmetro de ordem $\mathcal{O}_1 = \mathcal{O}_1(\vec{K}, b, \delta)$ e uma variável não crítica $\mathcal{O}_2 = \mathcal{O}_2(\vec{K}, b, \delta)$, sendo b o campo conjugado ao parâmetro de ordem e δ é o campo conjugado a variável \mathcal{O}_2 , que, no caso do modelo BC, podemos considerar o momento de quadrupolo. Como a criticalidade só ocorre a campo nulo, podemos considerar $H = 0$ sem perda de generalidade.

Perto da transição apenas \mathcal{O}_1 e b são pequenos, portanto

$$\mathcal{O}_1 = \left. \frac{\partial \mathcal{O}_1(\vec{K}, b, \delta)}{\partial b} \right|_{b=0} b = F_1(\vec{K}, \delta) b , \quad (4.35)$$

$$\mathcal{O}_2 = \mathcal{O}_2(\vec{K}, b = 0, \delta) = F_2(\vec{K}, \delta) . \quad (4.36)$$

Similarmente, para um aglomerado menor

$$\mathcal{O}'_1 = \left. \frac{\partial \mathcal{O}'_1(\vec{K}', b', \delta')}{\partial b'} \right|_{b'=0} b' = F'_1(\vec{K}', \delta') b' , \quad (4.37)$$

$$\mathcal{O}'_2 = \mathcal{O}'_2(\vec{K}', b' = 0, \delta') = F'_2(\vec{K}', \delta') . \quad (4.38)$$

De acordo com o GRCM comum, temos

$$F_1(\vec{K}, \delta) = F'_1(\vec{K}', \delta') , \quad (4.39)$$

que, apesar de não depender de nenhum expoente ou fator de escala, depende dos campos adicionais δ e δ' .

No estudo do modelo de Ising antiferromagnético [61] foi proposto que δ e δ' seriam auto consistentes, exigindo que $\mathcal{O}_2 = \delta$ e $\mathcal{O}'_2 = \delta'$. Resultados razoáveis, especialmente no valor de K_c , foram obtidos. Porém, quando a mesma técnica foi aplicada ao modelo BC [62], os resultados obtidos não foram consistentes com os esperados, incluindo uma transição de fases a temperatura não nula para o modelo unidimensional.

Uma escolha diferente, e igualmente intuitiva, para a dependência da variável não crítica com o tamanho foi proposta e aplicada com sucesso por Plascak e Sá Barreto [63]. Como a variável tem sua dependência com o tamanho não governada pela teoria de escala de tamanho finito, assumiremos um grupo de renormalização de forma que $\delta = \delta'$ e $\mathcal{O}_2 = \mathcal{O}'_2$, ou

$$F_2(\vec{K}, \delta) = F'_2(\vec{K}', \delta'). \quad (4.40)$$

Desta forma, pode-se obter $\delta = \delta'$ em função de \vec{K} e \vec{K}' e substituir na eq. (4.39) para, através da relação recursiva, encontrar-se o ponto fixo. Este GR provou-se mais eficiente que campo médio, apesar de ser baseado no mesmo e possuir os mesmos expoentes críticos.

Esta técnica foi, e continua sendo, aplicada a uma grande variedade de modelos e resultados muito bons já foram obtidos, mesmo quando se usa os aglomerados mais simples possíveis, como, $N' = 1$ e $N = 2$. Este método será aplicado, no Capítulo 5, ao modelo BC diluído com interações entre segundos vizinhos em uma rede cúbica simples e em seguida a liga FeAl.

4.4 Grupo de renormalização de escalonamento de tamanho finito

O GREF, assim como o GRCM, consiste em um grupo de renormalização fenomenológico aplicado, neste caso, a sistemas reduzidos com tiras infinitas de diferentes larguras L e L' , com $L > L'$. Para entendermos melhor o método consideraremos sua aplicação ao modelo BW definido numa tira de largura finita L e comprimento N (sendo que tomaremos o limite $N \rightarrow \infty$) dado pelo Hamiltoniano abaixo

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + D \sum_{k=1}^L \sum_{i=1}^N (\sigma_i^k)^2, \quad (4.41)$$

sendo $\sigma_i = \{-S, -(S-1), \dots, S-1, S\}$ as componentes do spin- S no i -ésimo sítio, com $S \geq 1$, a soma do primeiro termo feita sobre primeiros vizinhos que definem um triângulo da rede e a do segundo termo feita sobre todos os spins de todas as linhas do sistema reduzido de largura L . Note, portanto, que o sobrescrito k na segunda soma

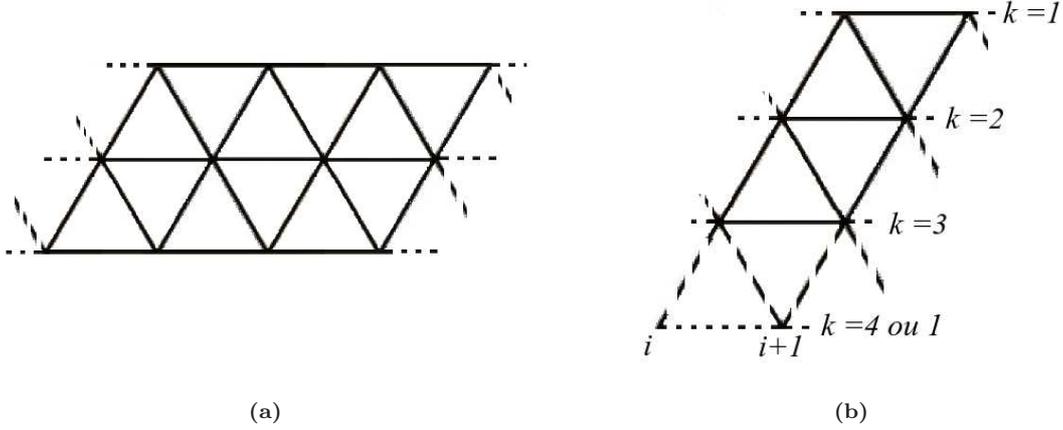


Figura 4.2: (a) Rede para o sistema de tamanho reduzido $L = 3$ e (b) spins interagentes de colunas adjacentes.

indica a linha correspondente de cada spin e N é o número de spins de uma mesma linha. Neste modelo temos que considerar tiras infinitas com larguras múltiplas de 3, isto é, $L = L' + 3$, a fim de preservar a invariância do hamiltoniano (4.41) sob a inversão de todos os spins em quaisquer duas sub-redes. Desta forma, a menor rede possível é obtida com $L = 3$ (Fig. 4.2). Neste caso o hamiltoniano (4.41) pode ser escrito como $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_{i,i+1}$, com

$$\mathcal{H}_{i,i+1} = -J \sum_{k=1}^3 \sigma_i^k \sigma_{i+1}^{k+1} (\sigma_{i+1}^k + \sigma_i^{k+1}) + \frac{D}{2} \sum_{k=1}^3 [(\sigma_i^k)^2 + (\sigma_{i+1}^k)^2] , \quad (4.42)$$

sendo que os subíndices i e $i + 1$ indicam que são spins pertencentes a colunas adjacentes. Note que a linha 4 equivale a linha 1, o que é consequência das condições de contorno periódicas na vertical e pode ser visualizado na Fig. 4.2(b). Adotamos também condições periódicas de contorno na horizontal.

A função de partição será dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \sum_i \mathcal{H}_{i,i+1}} = \sum_{\{\eta\}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\eta_1, \eta_2}} e^{-\beta \mathcal{H}_{\eta_2, \eta_3}} \dots e^{-\beta \mathcal{H}_{\eta_N, \eta_1}} \\ &= \sum_{\{\eta\}} \mathbf{T}_{\eta_1, \eta_2} \mathbf{T}_{\eta_2, \eta_3} \dots \mathbf{T}_{\eta_N, \eta_1} , \end{aligned} \quad (4.43)$$

sendo que $\{\sigma\}$ representa que a soma é feita sobre todos os estados possíveis de cada spin, $\{\eta\}$ que a soma é feita sobre todos os estados possíveis de cada coluna e $\beta = 1/k_B T$. Definimos \mathbf{T} como a matriz de transferência de dimensão $n \times n$. Seus

elementos são os pesos de Boltzmann gerados pelas configurações dos spins de colunas adjacentes, por exemplo, $\{\eta_i\}$ e $\{\eta_{i+1}\}$, dados por

$$\mathbf{T}_{\eta_i, \eta_{i+1}} = e^{K \sum_{k=1}^3 [\sigma_i^k \sigma_{i+1}^{k+1} (\sigma_i^{k+1} + \sigma_{i+1}^k) - \frac{d}{2} (\sigma_i^k)^2 - \frac{d}{2} (\sigma_{i+1}^k)^2]} . \quad (4.44)$$

Perceba que $K = \beta J = t^{-1}$ e $d = D/J$. Como cada spin pode estar em $2S + 1$ estados diferentes e cada coluna possui 3 spins, logo $(2S + 1)^3$ possibilidades, a dimensão de \mathbf{T} é obtida com $n = (2S + 1)^3$. Podemos simplificar a função de partição realizando as somas para os valores possíveis de cada coluna separadamente, primeiramente, de η_2 , em seguida η_3, \dots, η_N e, por fim, η_1 , resultando em

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{\eta_1, \eta_3, \eta_4, \dots, \eta_N\}} \left[\sum_{\{\eta_2\}} \mathbf{T}_{\eta_1, \eta_2} \mathbf{T}_{\eta_2, \eta_3} \cdots \mathbf{T}_{\eta_N, \eta_1} \right] \\ &= \sum_{\{\eta_1, \eta_4, \dots, \eta_N\}} \left[\sum_{\{\eta_3\}} (\mathbf{T}^2)_{\eta_1, \eta_3} \mathbf{T}_{\eta_3, \eta_4} \cdots \mathbf{T}_{\eta_N, \eta_1} \right] = \cdots = \sum_{\{\eta_1\}} \sum_{\{\eta_N\}} (\mathbf{T}^{N-1})_{\eta_1, \eta_N} \mathbf{T}_{\eta_N, \eta_1} \\ &= \sum_{\{\eta_1\}} (\mathbf{T}^N)_{\eta_1, \eta_1} = \text{Tr}(\mathbf{T}^N) . \end{aligned} \quad (4.45)$$

De forma geral, a matriz de transferência \mathbf{T} do hamiltoniano (4.41), com largura vertical L , terá sua dimensão dada por $n = (2S + 1)^L$, e seus coeficientes serão obtidos por

$$\mathbf{T}_{\eta_i, \eta_{i+1}} = e^{K \sum_{k=1}^L [\sigma_i^k \sigma_{i+1}^{k+1} (\sigma_i^{k+1} + \sigma_{i+1}^k) - \frac{d}{2} (\sigma_i^k)^2 - \frac{d}{2} (\sigma_{i+1}^k)^2]} , \quad (4.46)$$

e a função de partição é determinada por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= [\Lambda_L^1(K, d)]^N + [\Lambda_L^2(K, d)]^N + \cdots + [\Lambda_L^n(K, d)]^N \\ &= \Lambda_L^1(K, d)^N \left[1 + \frac{[\Lambda_L^2(K, d)]^N}{[\Lambda_L^1(K, d)]^N} + \cdots + \frac{[\Lambda_L^n(K, d)]^N}{[\Lambda_L^1(K, d)]^N} \right] , \end{aligned} \quad (4.47)$$

sendo $\Lambda_L^i(K, d)$ é o i -ésimo autovalor da matriz de transferência, que depende dos valores de K e d , e o sub-índice indica que o sistema possui largura L . Esses autovalores serão orientados em ordem decrescente, da seguinte forma

$$\Lambda_L^1(K, d) > \Lambda_L^2(K, d) > \cdots > \Lambda_L^n(K, d) .$$

Como esse modelo trata de tiras infinitas, temos $N \rightarrow \infty$ e a eq. (4.47) se reduz a

$$\mathcal{Z} = \Lambda_L^1(K, d)^N .$$

Até aqui vimos como obter a matriz de transferência de um sistema reduzido de largura L , usando o modelo BW como exemplo. Iremos, agora, investigar os autovalores e autovetores da matriz \mathbf{T} para discutirmos suas interpretações físicas. Lembramos que a discussão a seguir é completamente geral e se aplica a qualquer modelo com matriz de transferência \mathbf{T} .

Denotaremos $\{|u_L^1\rangle, |u_L^2\rangle, |u_L^3\rangle, \dots, |u_L^n\rangle\}$ como o conjunto de autovetores normalizados correspondentes aos autovalores $\Lambda_L^1, \Lambda_L^2, \Lambda_L^3, \dots, \Lambda_L^n$ que formam uma base completa da matriz de transferência, tal que, $\mathbf{T}|u_L^i\rangle = \Lambda_L^i|u_L^i\rangle$. Quaisquer estados $|\alpha\rangle$ e $|\gamma\rangle$ das colunas podem ser escritos como uma combinação linear desses autovetores, logo

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |u_L^i\rangle \quad \text{e} \quad |\gamma\rangle = \sum_{i=1}^n \gamma_i |u_L^i\rangle,$$

sendo que as constantes α_i e γ_i podem ser reais ou complexas.

A probabilidade de que a coluna 1 esteja no estado $|\alpha\rangle$ desde que a coluna j esteja no estado $|\gamma\rangle$ será dada por

$$P(|\alpha\rangle_1 | |\gamma\rangle_j) = \frac{\sum_{\{\eta\}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\alpha\eta_2}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\eta_2\eta_3}} \dots e^{-\beta\mathcal{H}_{\eta_{j-1}\gamma}} e^{-\beta\mathcal{H}_{\gamma\eta_{j+1}}} \dots e^{-\beta\mathcal{H}_{\eta_N\alpha}}}{\mathcal{Z}}, \quad (4.48)$$

logo

$$P(|\alpha\rangle_1 | |\gamma\rangle_j) = \frac{(\mathbf{T}^r)_{\alpha\gamma} (\mathbf{T}^{N-r})_{\gamma\alpha}}{\mathcal{Z}},$$

sendo $r = j - 1$ a distância entre o sítio 1 e j . Utilizando a notação de bra e ket, teremos

$$P(|\alpha\rangle_1 | |\gamma\rangle_j) = \frac{\langle\alpha|\mathbf{T}^r|\gamma\rangle\langle\gamma|\mathbf{T}^{N-r}|\alpha\rangle}{\mathcal{Z}},$$

sendo

$$\langle\alpha|\mathbf{T}^r|\gamma\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i^* \langle u_L^i | \mathbf{T}^r \sum_{j=1}^n \gamma_j |u_L^j\rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_i^* (\Lambda_L^i)^r \gamma_j \langle u_L^i | u_L^j \rangle,$$

resultando em

$$\langle\alpha|\mathbf{T}^r|\gamma\rangle = \sum_{i=1}^n (\Lambda_L^i)^r \alpha_i^* \gamma_i,$$

e, de forma análoga

$$\langle\gamma|\mathbf{T}^{N-r}|\alpha\rangle = \sum_{j=1}^n (\Lambda_L^j)^{N-r} \gamma_j^* \alpha_j.$$

Portanto, teremos, no numerador da eq. (4.48)

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \mathbf{T}^r | \gamma \rangle \langle \gamma | \mathbf{T}^{N-r} | \alpha \rangle &= \sum_{i=1}^n (\Lambda_L^i)^r \alpha_i^* \gamma_i \sum_{j=1}^n (\Lambda_L^j)^{N-r} \alpha_j^* \gamma_j \\
&= [(\Lambda_L^1)^r \alpha_1^* \gamma_1 + (\Lambda_L^2)^r \alpha_2^* \gamma_2 + \dots] [(\Lambda_L^1)^{N-r} \alpha_1 \gamma_1^* + (\Lambda_L^2)^{N-r} \alpha_2 \gamma_2^* + \dots] \\
&= \alpha_1^2 \gamma_1^2 (\Lambda_L^1)^N + \alpha_1^* \gamma_1 \alpha_2 \gamma_2^* (\Lambda_L^1)^r (\Lambda_L^2)^{N-r} + \alpha_1 \gamma_1^* \alpha_2^* \gamma_2 (\Lambda_L^1)^{N-r} (\Lambda_L^2)^r + \alpha_2^2 \gamma_2^2 (\Lambda_L^2)^N + \dots \\
&= (\Lambda_L^1)^N \left[\alpha_1^2 \gamma_1^2 + \alpha_1^* \gamma_1 \alpha_2 \gamma_2^* \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right)^{N-r} + \alpha_1 \gamma_1^* \alpha_2^* \gamma_2 \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right)^r + \alpha_2^2 \gamma_2^2 \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right)^N + \dots \right],
\end{aligned}$$

no limite de $N \rightarrow \infty$ ficamos com

$$\langle \alpha | \mathbf{T}^r | \gamma \rangle \langle \gamma | \mathbf{T}^{N-r} | \alpha \rangle = (\Lambda_L^1)^N \left[\alpha_1^2 \gamma_1^2 + \alpha_1 \gamma_1^* \alpha_2^* \gamma_2 \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right)^r + \alpha_1 \gamma_1^* \alpha_3^* \gamma_3 \left(\frac{\Lambda_L^3}{\Lambda_L^1} \right)^r + \dots \right].$$

Note que estamos interessados em saber como a coluna 1 interfere na coluna j mesmo que muito distantes, portanto r deverá ser grande o suficiente para que o cálculo de probabilidades tenha sentido. Desta forma podemos desprezar outros termos da soma acima, resultando em

$$P(|\alpha\rangle_1 | |\gamma\rangle_j) = \alpha_1^2 \gamma_1^2 + \alpha_1 \gamma_1^* \alpha_2^* \gamma_2 \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right)^r. \quad (4.49)$$

A probabilidade de uma coluna qualquer estar no estado $|\alpha\rangle$, neste limite, é $P(|\alpha\rangle) = \alpha_1^2$, logo a função correlação, $C(r) = P(|\alpha\rangle_1 | |\gamma\rangle_j) - P(|\alpha\rangle_1)P(|\gamma\rangle_j)$ é dada por

$$C(r) = \alpha_1 \gamma_1^* \alpha_2^* \gamma_2 \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right)^r.$$

O comprimento de correlação ξ é definido como o comprimento para o qual a função correlação cai por $1/e$, logo, se escrevermos $C(r) = C_0 e^{-r/\xi}$, teremos

$$C_0 e^{-r/\xi} = \alpha_1 \gamma_1^* \alpha_2^* \gamma_2 \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right)^r \longrightarrow \ln C_0 - \frac{r}{\xi} = \ln(\alpha_1 \gamma_1^* \alpha_2^* \gamma_2) + r \ln \left(\frac{\Lambda_L^2}{\Lambda_L^1} \right),$$

o que resulta em

$$\xi_L(K, d) = \left[\ln \left(\frac{\Lambda_L^1(K, d)}{\Lambda_L^2(K, d)} \right) \right]^{-1}. \quad (4.50)$$

No caso de tiras infinitas de larguras L e L' pode-se calcular a relação entre os comprimentos de correlação ξ_L e $\xi_{L'}$ utilizando a relação (4.25)

$$\frac{\xi_{L'}(K')}{L'} = \frac{\xi_L(K)}{L} \longrightarrow \frac{\xi_L(K')}{L} = \frac{\xi_{L+3}(K)}{L+3}, \quad (4.51)$$

com o fator de escala, nesse caso, dado por $\ell = L/L' > 1$. Da eq. (4.51) obtém-se, para cada valor de d e L , estimativas do ponto crítico $K' = K = K_c$. O correspondente expoente crítico do comprimento de correlação ν pode ser obtido considerando que $K' = f(K)$ e expandindo essa função em torno de K_c

$$K' = f(K_c) + \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K_c} (K - K_c) + \dots ,$$

e como $f(K_c) = K_c$ é o ponto fixo, teremos

$$K' - K_c = \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K_c} (K - K_c) + \dots .$$

próximo da criticalidade os outros termos da soma se tornam desprezíveis e, analisando a eq. (4.26), teremos

$$\epsilon' = \left. \frac{dK'}{dK} \right|_{K_c} \epsilon \longrightarrow \frac{dK'}{dK} = \ell^{1/\nu} ,$$

portanto

$$\nu = \frac{\ln \ell}{\ln(dK'/dK)} , \quad (4.52)$$

sendo que a derivada pode ser obtida facilmente, no caso de tiras infinitas, através de métodos numéricos. Este é o método mais comumente utilizado por físicos estatísticos para se obter o expoente ν .

A classe de universalidade do comportamento crítico pode também ser obtida utilizando-se a maquinária da teoria conforme de campos (veja por exemplo o “yellow book”, [64]). Para se obter, por exemplo, os expoentes ν e η , onde o segundo é expoente crítico da função correlação $C(r)$ - eq. (2.3) -, devemos utilizar a equação que descreve a dimensão de escala a seguir

$$x^N(n, p) = \frac{N}{\pi\sqrt{3}} \ln \left(\frac{\Lambda_{1,0}(N)}{\Lambda_{n,p}(N)} \right) ,$$

sendo que $x^N(n, p)$ está relacionado ao n -ésimo autovalor no setor de momento p , N é a largura das tiras e $\Lambda_{1,0}(N)$ é o maior autovalor da matriz de transferência. Esta equação pode ser melhor entendida em [31].

Neste trabalho estamos interessados no setor de momento $p = 0$ e, para manter a notação utilizada anteriormente, reescreveremos a equação acima como

$$x^L(n) = \frac{L}{\pi\sqrt{3}} \ln \left(\frac{\Lambda_L^1}{\Lambda_L^n} \right) , \quad (4.53)$$

sendo que $x(2) = \eta/2$ e $x(3) = 2 - 1/\nu$. A carga central c , a qual rotula as possíveis classe de universalidade de comportamento crítico de sistemas quânticos unidimensionais (ou equivalentemente sistemas clássicos bidimensionais), é determinada a partir das correções de tamanho finito do maior autovalor da matriz de transferência. Essas correções relacionam-se com a carga central da seguinte forma [14, 15]

$$\frac{\ln \Lambda_L^1}{L} = \epsilon_\infty + \frac{\pi c v_s}{6L^2} + \mathcal{O}(L^{-3}), \quad (4.54)$$

sendo ϵ_∞ o valor de $\left(\frac{\ln \Lambda_L^1}{L}\right)_{L \rightarrow \infty}$ no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$ e $v_s = \sqrt{3}/2$ uma constante não universal. Da equação acima, vemos que um possível modo de se obter a anomalia conforme é através da relação

$$c_{L,L+3} = \frac{12}{\sqrt{3}\pi} \left(\frac{\ln \Lambda_1(L+3)}{L+3} - \frac{\ln \Lambda_1(L)}{L} \right) \times \left(\frac{1}{(L+3)^2} - \frac{1}{L^2} \right)^{-1}, \quad (4.55)$$

calculado em $K_c(d)$. Valores extrapolados c_∞ podem ser obtidos do comportamento de $c_{L,L+3}$ para vários L por [65]

$$c_{L,L+3}(\delta) = c_\infty - a \left(L^{-w} + (L+3)^{-w} \right) \times \left(L^{-2} + (L+3)^{-2} \right)^{-1}, \quad (4.56)$$

onde a é uma constante não universal e w é a dimensão dominante associada às correções de escala. Adotamos aqui o valor $w = 4$, que corresponde ao expoente de correção de escala exato do modelo BW puro.

Pontos multicríticos, por sua vez, são determinados de uma maneira heurística, que tem se mostrado muito eficaz em outros modelos semelhantes. Nesse caso, resolvemos a equação (4.51) simultaneamente para três redes de tamanhos diferentes [32, 66--68]

$$\frac{\xi_L(K_m, d_m)}{L} = \frac{\xi_{L+3}(K_m, d_m)}{L+3} = \frac{\xi_{L+6}(K_m, d_m)}{L+6}, \quad (4.57)$$

sendo K_m e d_m os valores de K e d no ponto multicrítico. Note que na equação acima temos somente um par (K_m, d_m) que localiza, de maneira unívoca, o ponto multicrítico.

Com relação às transições de primeira ordem, sua determinação envolve uma análise, também heurística, dos autovalores da matriz de transferência. No caso do presente modelo, para spins inteiros, na linha de primeira ordem temos uma coexistência de cinco fases, sendo uma ordenada ferromagneticamente, três ordenadas ferromagneticamente, e uma com magnetização nula, portanto, no limite termodinâmico

($L \rightarrow \infty$), os cinco primeiros autovalores deveriam ser iguais, uma vez que essas cinco fases coexistem. Consequentemente, para uma dada tira de largura L obtem-se, para cada valor de d , a temperatura onde a diferença correspondente ao quinto e o maior autovalores seja mínima

$$\Delta_5(K, d) = \Lambda_L^1(K, d) - \Lambda_L^5(K, d) , \quad (4.58)$$

e esta será caracterizada como a temperatura de transição de primeira ordem.

De forma análoga, para spins semi-inteiros, temos oito fases coexistindo na linha de primeira ordem, sendo que a temperatura de transição será, então, onde a diferença entre o oitavo e o primeiro autovalores seja mínima

$$\Delta_8(K, d) = \Lambda_L^1(K, d) - \Lambda_L^8(K, d) . \quad (4.59)$$

Uma extrapolação desses pontos no limite $L \rightarrow \infty$ nos fornece uma estimativa da linha de transição de primeira ordem. Esse método foi aplicado e testado com sucesso no modelo de BC [69--71].

Quanto ao processo de diagonalização numérica da matriz de transferência usa-se o método de Lanczos para matrizes não hermitianas, como é o presente caso, ver Apêndice A. Larguras maiores podem ser consideradas ao se usar a simetria translacional do modelo para bloco diagonalizar a matriz inicialmente. No presente modelo, devido a restrições de memória e tempo de computação fomos limitados a largura das tiras $L = 12$ para $S = 1$ e $L = 9$ para $S = 3/2$. Este método é uma ferramenta muito poderosa uma vez que usa do grupo de renormalização fenomenológico finito em apenas uma das dimensões, enquanto que na outra, é infinito. Ele tem sido aplicado de forma muito efetiva em outros modelos encontrando resultados muito bons [71]. O aplicaremos ao modelo BW para $L = 3, 6, \dots$, bem como, o método de invariância conforme, que será apresentado no Capítulo 6.

Capítulo 5

O modelo Blume-Capel diluído na aproximação GRCM e aplicação a liga Fe-Al

O modelo BC possui o diagrama de fases bem conhecido, e já foi discutido no Capítulo 3. Portanto, iremos obter aqui as propriedades termodinâmicas aproximadas deste modelo utilizando o GRCM quando uma diluição é acrescentada ao mesmo e considerando interações entre primeiros e segundos vizinhos, induzida pela diluição. Os resultados obtidos foram publicados em [72].

O Hamiltoniano proposto para este sistema pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \varepsilon_i \varepsilon_j \sigma_i \sigma_j + D \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \sigma_i^2, \quad (5.1)$$

sendo J_1 a interação de troca, J_2 a interação de supertroca, D o campo cristalino, $\sigma_i = \pm 1, 0$ a variável de spin e $\varepsilon_i = 1$ ou 0 quando o sítio está ocupado por um átomo magnético, ou não, respectivamente. A primeira soma é feita sob todos os pares de primeiros vizinhos - $\langle ij \rangle$, enquanto a segunda é feita sob todos os pares de segundos vizinhos - $\langle\langle ij \rangle\rangle$. Considerando que um sítio pode estar, ou não, ocupado por um átomo magnético independente dos outros sítios, a distribuição de probabilidades de ε_i será dada por

$$P(\varepsilon_i) = p\delta(\varepsilon_i - 1) + q\delta(\varepsilon_i), \quad (5.2)$$

sendo p a concentração de sítios de átomos magnéticos, e $q = 1 - p$ a concentração de sítios de átomos não magnéticos (ou impurezas).

Afim de aplicar o GRCM consideraremos sistemas com aglomerados de 1 e 2 sítios. Portanto, o Hamiltoniano para o aglomerado de 1 sítio será

$$\mathcal{H}_1 = -\varepsilon_1 \sigma_1 \left(J_1 \sum_{j=1}^z \varepsilon_j b_1 + J_2 \sum_{j=1}^{z'} \varepsilon_j b_1 \right) + \varepsilon_1 \sigma_1^2 (D - \delta_1 z p), \quad (5.3)$$

sendo $z = 2d$ o número de coordenação para redes hipercúbicas e z' o número de segundos vizinhos. Os campos b_1 e δ_1 são os conjugados da magnetização, m_1 , e do momento de quadrupolo, q_1 , respectivamente, sendo que os dois últimos são dados por

$$\begin{aligned} m_1 &= \langle \langle \sigma_1 \rangle_1 \rangle_c = \int \prod_{i=1}^N d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \frac{\text{Tr} \sigma_1 e^{-\beta \mathcal{H}_1}}{Z_1}, \\ q_1 &= \langle \langle \varepsilon_1 \sigma_1^2 \rangle_1 \rangle_c = \int \prod_{i=1}^N d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \frac{\text{Tr} \varepsilon_1 \sigma_1^2 e^{-\beta \mathcal{H}_1}}{Z_1}, \end{aligned} \quad (5.4)$$

sendo que $\langle \dots \rangle_1$ denota a média térmica no aglomerado de 1 sítio e $\langle \dots \rangle_c$ a média configuracional. No limite de $T \rightarrow T_c$, $m_1 \simeq 0$, assim como $b_1 \simeq 0$, e como discutido no Capítulo 4, teremos

$$m_1 = \frac{2z p^2 e^{-\beta(D-\delta_1 z p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta_1 z p)}} (K_1 + \alpha q K_2) b_1, \quad (5.5)$$

$$q_1 = \frac{2p e^{-\beta(D-\delta_1 z p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta_1 z p)}}, \quad (5.6)$$

sendo $\beta = 1/k_B T$, $K_1 = \beta J_1$, $K_2 = \beta J_2$ e α o número de segundos vizinhos que tenham um mesmo sítio como vizinho. Perceba que $\alpha \neq z'$. Por exemplo, para uma rede quadrada a diluição induzirá uma interação de supertroca com outros dois sítios, ou seja, $\alpha = 2$. Para uma rede cúbica simples $\alpha = 3$ e assim por diante. Em geral, para uma rede hipercúbica teremos $\alpha = d$.

De forma análoga, teremos para um aglomerado de 2 sítios

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 &= -J_1 \varepsilon_1 \varepsilon_2 \sigma_1 \sigma_2 - (\varepsilon_1 \sigma_1 + \varepsilon_2 \sigma_2) \left(J_1 \sum_{j=1}^{z-1} \varepsilon_j b_2 + J_2 \sum_{j=1}^{z'} \varepsilon_j b_2 \right) \\ &+ (\varepsilon_1 \sigma_1^2 + \varepsilon_2 \sigma_2^2) (D - \delta_2 (z-1)p), \end{aligned} \quad (5.7)$$

o que resulta em

$$\begin{aligned} m_2 &= \frac{2(z-1)p^3 (e^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p)} + 2e^{K_1-2\beta(D-\delta_2(z-1)p)})}{1 + 4e^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p)} + 4e^{-2\beta(D-\delta_2(z-1)p)} \cosh(K_1)} (K_1 + \alpha q K_2) b_2 \\ &+ \frac{2(z-1)p^2 q e^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p)}} \left[K_1 + \alpha q K_2 + \frac{\alpha}{z-1} K_2 \right] b_2, \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$q_2 = \frac{2p^2(e^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p}) + 2e^{-2\beta(D-\delta_2(z-1)p}) \cosh(K_1))}{1 + 4e^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p}) + 4e^{-2\beta(D-\delta_2(z-1)p}) \cosh(K_1)} + \frac{2pqe^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta_2(z-1)p)}}. \quad (5.9)$$

Usando as relações de escala $m_1 = \ell^\theta m_2$, $b_1 = \ell^\theta b_2$ e $q_1 = q_2$, $\delta_1 = \delta_2 = \delta$, encontramos

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\beta(D-\delta zp)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta zp)}} \frac{z}{z-1} &= \frac{p(e^{-\beta(D-\delta(z-1)p}) + 2e^{K_1-2\beta(D-\delta(z-1)p)})}{1 + 4e^{-\beta(D-\delta(z-1)p}) + 4e^{-2\beta(D-\delta(z-1)p}) \cosh(K_1)} \\ &+ \frac{qe^{-\beta(D-\delta(z-1)p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta(z-1)p)}} \left[1 + \frac{\alpha\eta}{(z-1)(1+\alpha q\eta)} \right], \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\beta(D-\delta zp)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta zp)}} &= \frac{p(e^{-\beta(D-\delta(z-1)p}) + 2e^{-2\beta(D-\delta(z-1)p}) \cosh(K_1))}{1 + 4e^{-\beta(D-\delta(z-1)p}) + 4e^{-2\beta(D-\delta(z-1)p}) \cosh(K)} \\ &+ \frac{qe^{-\beta(D-\delta(z-1)p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-\delta(z-1)p)}}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

sendo $\eta = J_2/J_1$. Note que a dependência na dimensão e topologia da rede só aparece nos valores z e α . Resolvendo numericamente as eqs. acopladas (5.10) e (5.11) podemos obter a temperatura crítica como função dos parâmetros do Hamiltoniano.

5.1 Rede Cúbica Simples

Para uma rede cúbica simples (cs), temos $z = 6$ e $\alpha = 3$ e consideraremos $J_1 = J$. Faremos, inicialmente, $\eta = 0$ e, em seguida, $\eta = 0, 5$. Desta forma, as eqs. (5.10) e (5.11) podem ser reescritas como

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\beta(D-6\delta p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-6\delta p)}} \frac{6}{5} &= \frac{p(e^{-\beta(D-5\delta p)} + 2e^{K-2\beta(D-5\delta p)})}{1 + 4e^{-\beta(D-5\delta p)} + 4e^{-2\beta(D-5\delta p)} \cosh(K)} \\ &+ \frac{qe^{-\beta(D-5\delta p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-5\delta p)}} \left[1 + \frac{3\eta}{5(1+3q\eta)} \right], \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} \frac{e^{-\beta(D-6\delta p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-6\delta p)}} &= \frac{p(e^{-\beta(D-5\delta p)} + 2e^{-2\beta(D-5\delta p)} \cosh(K))}{1 + 4e^{-\beta(D-5\delta p)} + 4e^{-2\beta(D-5\delta p)} \cosh(K)} \\ &+ \frac{qe^{-\beta(D-5\delta p)}}{1 + 2e^{-\beta(D-5\delta p)}}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

O comportamento da temperatura crítica reduzida ($t_c = k_B T_c/J$), para $\eta = 0$, como uma função do campo cristalino reduzido ($d = D/J$) e da concentração da diluição q

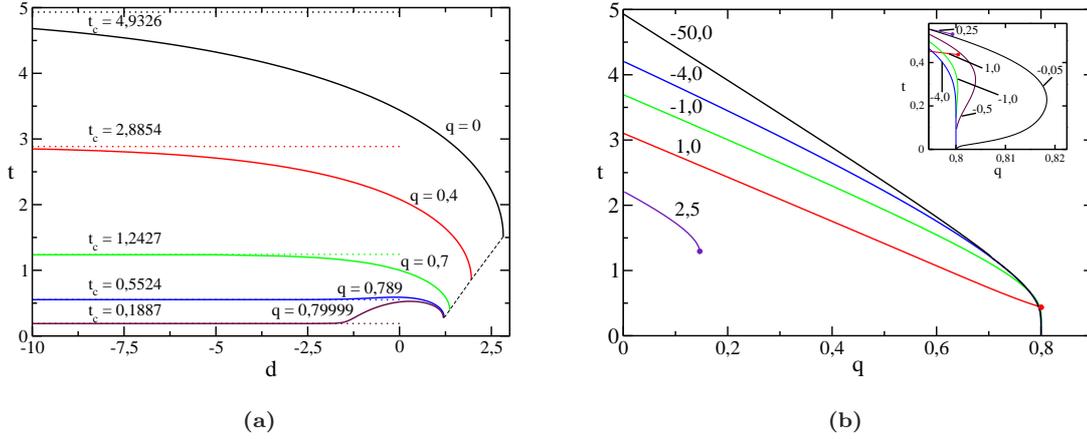


Figura 5.1: Temperatura crítica reduzida (t_c) para uma rede cs , com $\eta = 0$, como função de (a) campo cristalino d para diversos valores de q e (b) concentração q , quando valores especiais d são selecionados, nesta figura encontra-se em destaque a região onde o comportamento reentrante e o ponto tricrítico são observados.

podem ser vistos na Fig. 5.1.

A Fig. 5.1 (a) mostra a temperatura crítica reduzida, uma linha de transição de segunda ordem, como uma função do campo cristalino reduzido para diversos valores da concentração q . No limite de $d \rightarrow -\infty$ o modelo corresponde ao modelo de Ising diluído de spin-1/2 com a temperatura crítica, para o método utilizado aqui, dada por

$$(t_c)^{-1} = \frac{1}{2} \ln \frac{p(z-1) + 1}{p(z-1) - 1}. \quad (5.14)$$

As linhas horizontais pontilhadas na Fig. 5.1 (a) correspondem as temperaturas críticas reduzidas obtidas através da equação acima. A concentração crítica correspondente é $p_c = 1/(z-1)$ [73], que resulta em $q_c = 0,8$, para $z = 6$. Pode-se perceber que a medida que aumentamos q este limite assintótico é atingido para valores maiores de d . Para $q = 0$ temos o modelo BC puro, o aumento da diluição aumenta a desordem do sistema resultando em temperaturas de transição cada vez menores, como consequência, o ponto tricrítico é uma função decrescente de q . Entretanto, para $0,789 \lesssim q < 0,8$, um comportamento diferente é observado, a temperatura crítica reduzida começa a aumentar com d e, em seguida, decresce novamente alcançando o ponto tricrítico. Este comportamento resulta em um fenômeno de reentrância quando se constrói um gráfico da temperatura crítica reduzida em função dos sítios vazios, que pode ser visto na Fig. 5.1 (b). Este fenômeno ocorre para $-1,2 \leq d < 0$ e foi

observados para os modelos com spin-3/2 [74, 75]. Para $d = -50$ a curva $t \times q$ é aproximadamente igual a obtida pela eq. (5.14).

O resultado correspondente para $\eta = 0,5$ pode ser visto na Fig. 5.2 e é simi-

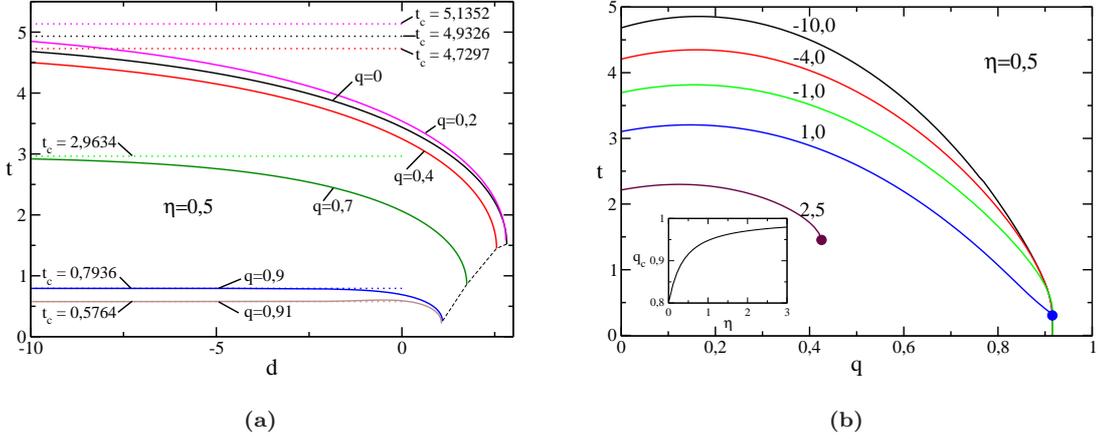


Figura 5.2: Temperatura crítica reduzida (t_c) para uma rede cs, com $\eta = 0,5$, como função de (a) d para diversos valores de q e (b) q , para alguns valores de d , em destaque nesta figura, pode se observar q_c como uma função de η .

lar ao da Fig. 5.1. A principal diferença é que para pequenos valores de q , onde a temperatura crítica aumenta com q . O limite de $d \rightarrow -\infty$ vai agora para o caso de spin-1/2 tratado em [19]. Portanto, percebe-se que quando a concentração de íons não magnéticos aumenta, a temperatura também aumenta, como uma consequência da interação de supertroca induzida. Somente quando a concentração é alta o suficiente a temperatura decresce. Apesar disto, o comportamento geral é similar ao obtido com $\eta = 0$, especialmente por causa da reentrância observada próxima da concentração crítica. É observado também que q_c possui uma dependência com a interação J_2 , que pode ser obtida tirando-se o limite da temperatura indo a zero nas eqs. (5.10) e (5.11)

$$q_c = \frac{\alpha\eta - 1 + \sqrt{(\alpha\eta + 1)^2 - 4\alpha\eta/(z - 1)}}{2\alpha\eta}, \quad (5.15)$$

sendo que para a rede cs, com $\eta = 0,5$, resulta em $q_c = 0,9157$. É importante notar que q_c não depende do campo cristalino.

5.2 Aplicação a Liga FeAl

As ligas de FeAl (bem como ligas FeMn e outras ligas ternárias) foram exaustivamente estudadas não só por apresentarem propriedades magnéticas muito interessantes, mas também por poderem ser descritas por diversos modelos estatísticos, como o de Ising e Heisenberg. Estas ligas podem possuir diferentes fases magnéticas e estruturais, sendo que as fases estruturais dependem do tratamento térmico a que são submetidas (ver, por exemplo, a tese de doutorado de Perez Alcazar [76]).

No caso particular da liga $\text{Fe}_{1-q}\text{Al}_q$, sua estrutura cristalina é cúbica de corpo centrado. Na faixa de $0 \leq q \leq 0,18$, sendo q a concentração de Al (ou seja, para concentrações de Al menores que 18%), estas ligas são ferromagnéticas e desordenadas estruturalmente, significando que cada sítio da rede pode estar, indistintamente, ocupado por átomos de Al ou Fe, independente do tratamento térmico. Quando temperadas desde $T \geq 800^\circ\text{C}$ (ou seja, resfriadas rapidamente) ou trabalhadas a frio (sem tratamento térmico) elas também são totalmente desordenadas e ferromagnéticas na faixa de $0 \leq q \leq 0,5$ (esta concentração já foi estendida para 0,65). Por outro lado, dependendo das concentrações de Fe e Al e do tratamento térmico para $T \simeq 750^\circ\text{C}$, estas ligas são ordenadas estruturalmente, ou seja, se considerarmos que a rede cúbica de corpo centrado pode ser dividida em duas sub-redes cúbicas simples, enquanto uma sub-rede sempre tem átomos de Fe a outra sempre terá seus sítios ocupados por átomos de Fe ou Al. A Fig. 5.3 mostra, esquematicamente, as estruturas ordenadas e desordenadas dessas ligas.

Próximo de $q = 0,3$, as ligas na fase ordenada são ferromagnéticas e apresentam uma queda brusca na magnetização até $q = 0,4$, para depois cair lentamente até 0 em $q = 0,5$, [77], um comportamento pouco estranho se pensarmos que o agente diluidor Al se trata de um elemento que não possui momento magnético. Em uma tentativa de explicar este comportamento anômalo Sato e Arrot [77,78] propuseram um modelo onde consideraram a presença de uma interação de troca (*exchange*) ferromagnética entre primeiros vizinhos Fe-Fe, e uma interação de supertroca (*superexchange*) antiferromagnética entre átomos de Fe separados por átomos de Al (Fe-Al-Fe). Este modelo, entretanto, prediz que a baixas temperaturas deve haver uma transição de fase ferro-antiferromagnética, o que não é observado experimentalmente. Por outro lado, Shiga [79] propôs a existência de uma fase vidro de spin (*spin glass*) como estado

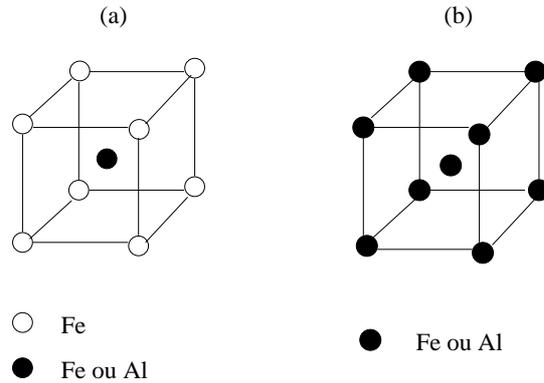


Figura 5.3: *Distribuição de átomos Fe e Al nas ligas de FeAl com rede cúbica de corpo centrado, vista como duas sub-redes cúbicas simples. Em (a) a distribuição na estrutura ordenada onde os átomos de Al podem ocupar sítios de apenas uma das sub-redes, com concentração máxima de 50%; em (b) a distribuição na estrutura desordenada onde todos os sítios podem ser ocupados por átomos de Al, concentração máxima de 100%.*

perto da região anômala, que foi testada teoricamente, [80,81] e obteve resultados que concordavam com os experimentais.

Contrário as ligas na fase ordenada, as ligas desordenadas não apresentam este comportamento anômalo na fase desordenada. Porém, a temperatura de transição em função da concentração q , para pequenas proporções de Al, é praticamente constante e só decai a partir de $q \geq 0.1$. Essa constância na temperatura de transição (ou pelo menos um decaimento muito suave), é também não esperada se levarmos em conta o agente diluidor Al. Tal comportamento também é dito anômalo (porém diferente daquele das ligas ordenadas estruturalmente) e carece de uma explicação teórica.

O primeiro modelo proposto para descrever as propriedades magnéticas dessas ligas na fase desordenada [18] foi baseado no modelo de Ising diluído, utilizando a aproximação variacional baseada na desigualdade de Bogoliubov, em que se considerou que a interação de troca deveria ser dependente da concentração de Al uma vez que o parâmetro de rede desses compostos aumenta à medida que a concentração de Al aumenta, Fig. 5.4. Embora qualitativamente o diagrama de fases e a magnetização em função da temperatura e concentração, obtidas aproximadamente, estivessem em acordo com os dados experimentais, a maior discrepância reside justamente na declividade da linha de transição de fases ferromagnética-paramagnética do diagrama de

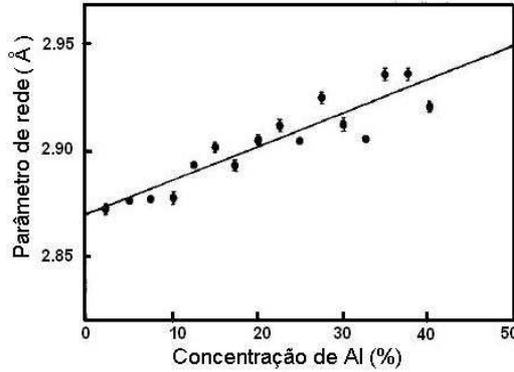


Figura 5.4: *Varição do parâmetro de rede em função da concentração de Al. Figura retirada de [77].*

fases para baixas concentrações de Al. Na verdade, modelos teóricos diluídos mostram uma declividade muito bem definida, e diferente de zero, à medida que $q \rightarrow 0$ [8]. Em trabalhos posteriores [19, 20], os autores acrescentaram ao modelo interações de supertroca entre segundos vizinhos induzida pela diluição Al, sendo que a mesma também dependia de q . A curva teórica obtida para o diagrama de fases nesses casos estão em melhor acordo com os dados experimentais, apesar da região anômala ainda ser ligeiramente diferente da curva experimental.

Os trabalhos desenvolvidos anteriormente foram feitos por aproximações no modelo de Ising, enquanto o modelo BC ainda não foi usado para descrever essa liga. Como para sistemas de spin $1/2$ o termo \mathcal{H}_a do Hamiltoniano descrito na eq. (4.12) é apenas uma constante, modelos para spin maior seriam mais adequados para esta liga, uma vez que esses magnetos devem apresentar anisotropia cristalina. Além do mais, espera-se que o spin do ferro nesses compostos não seja $1/2$. Portanto, a anisotropia deverá introduzir um diagrama de fases mais rico para valores de spins discretos [42]. Tendo isso em mente, aplicaremos o método do grupo de renormalização de campo médio (GRCM) ao modelo BC diluído para descrever a liga FeAl considerando interações de supertroca.

Como a estrutura cristalina da liga FeAl é cúbica de corpo centrada (ccc), teremos $z = 8$ e $\alpha = 3$. E ainda, sabendo que um aumento na concentração de Al causa um aumento linear no parâmetro de rede, Fig. 5.4, teremos

$$J_1(q) = J(1 - Lq) , \quad (5.16)$$

e

$$J_2(q) = J(A - Bq)(C - q) , \quad (5.17)$$

sendo que L , A , B e C são parâmetros teóricos a serem ajustados, assim como o campo cristalino D . Resolvendo numericamente as eqs. (5.10) e (5.11), com as considerações acima, encontramos a curva teórica para a temperatura crítica em

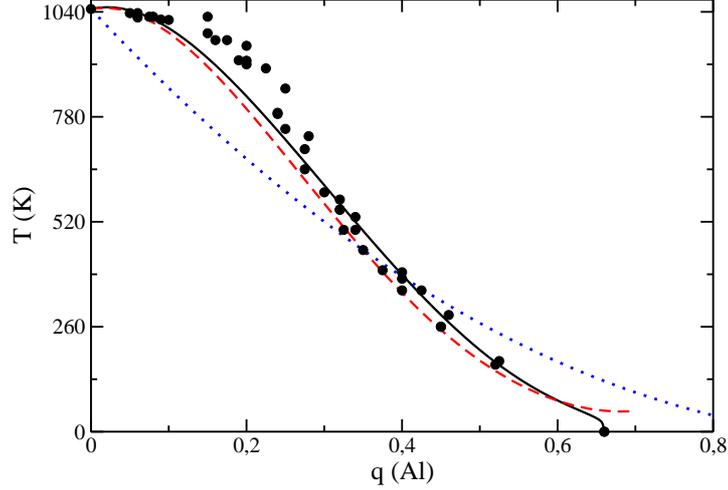


Figura 5.5: Temperatura crítica em função da concentração de Al obtida pelo método GRCM com os parâmetros dados no texto (linha cheia). Os dados experimentais são os círculos, a linha pontilhada é o ajuste obtido pela aproximação de Bogoliubov no modelo de Ising sem interação de supertroca [18] e a linha tracejada obtida com interação de supertroca [19]

função da concentração de Al (q). Os dados experimentais (círculos) e a linha teórica (linha cheia) obtida por este método, usando $D = -10$, $L = 0,85$, $A = 2,33$, $B = 2,9$ e $C = 0,35$ podem ser vistos na Fig. 5.5. Nesta figura também se encontram os ajustes obtidos nos trabalhos anteriores (linha pontilhada [18] e linha tracejada [19]), a título de comparação. Usando estes parâmetros teóricos encontramos $t_c = 6,3441$ quando $q = 0$, o que está de acordo com resultados obtidos por expansões em séries para uma rede ccc, $t_c = 6,35$. Como $k_B = 8,617 \times 10^{-5} \text{eV/K}$ e a temperatura crítica experimental para o sistema puro é $T_c = 1040\text{K}$, obtivemos $J = 0,014\text{eV}$.

Apesar L e A terem valores diferentes dos obtidos no ajuste anterior [19] ($L = 0,95$ e $A = 2,2$), o valor da interação de troca é comparável ($J = 0,013\text{eV}$) e os valores de B e C são os mesmos. Como pode-se perceber nesta Figura o diagrama de fases são quase da mesma qualidade para aproximações no modelo de Ising, ou Blume-Capel,

porém os resultados obtidos agora para maiores valores de q estão em melhor acordo. Os resultados dos trabalhos de [18,19] para $q > 0,8$ não foram explicitados aqui, uma vez que nesta faixa de q a estrutura não é mais ccc e estas técnicas não são mais adequadas. As concentrações críticas para os métodos anteriores são $q_c = 0,83$ sem interação de supertroca e $q_c = 0,98$ com interação de supertroca.

5.3 Conclusões

Neste capítulo, utilizamos o grupo de renormalização de campo médio no estudo do modelo de Blume-Capel de spin-1 diluído em redes hipercúbicas, considerando interação entre segundos vizinhos induzidas por elemento não magnético. O diagrama foi bem caracterizado mostrando como a diluição interfere na temperatura de transição. Como era de se esperar, para $\eta = 0$, a medida que a diluição aumenta observa-se uma diminuição na temperatura crítica, uma vez que esta diluição atrapalha a interação entre spins vizinhos. Porém quando $\eta \neq 0$, a diluição atrapalha a interação entre primeiros vizinhos, mas induz a interação entre segundos, logo, para baixos valores de q , observamos um aumento na temperatura de transição. No limite de $d \rightarrow -\infty$ recuperamos o modelo de dois estados e observamos que a concentração crítica q_c não depende dos valores de d , característica prevista teoricamente. O comportamento reentrante observado na Fig. 5.1 (b) é uma característica típica de campo médio, sendo que não temos evidências de que este fenômeno realmente ocorra, um método mais preciso é necessário para comprovar sua existência.

O estudo deste modelo foi motivado para tentarmos explicar o comportamento crítico da liga Fe-Al, uma vez que este modelo descreveu de forma razoável o comportamento de outras ligas. Neste caso, observa-se interações de supertroca entre átomos de Fe separados por átomos de Al, Fe-Al-Fe, sendo que essas interações possuem dependência com a concentração de Al. A aproximação aqui utilizada, empregando o modelo BC diluído, nos forneceu dados capazes de ajustar uma curva experimental para o diagrama de fases, temperatura reduzida em função da concentração de Al (q), e obtivemos resultados razoáveis, porém não tão bons quanto esperávamos. Observamos que a curva que melhor se ajustou aos dados experimentais da liga tinha um valor de d muito negativo, indicando que o próprio modelo de Ising fosse suficiente para descrevê-la.

Capítulo 6

Aplicação ao modelo Baxter-Wu com campo cristalino

O diagrama de fases do modelo BC de spin-1 é bem estabelecido (seção 3.3) e, sabe-se que, para dimensões $d \geq 2$, a fase ordenada ferromagnética é separada da desordenada paramagnética por uma linha de transição. Esta linha possui uma característica bastante interessante, uma vez que o ponto tricrítico a divide em duas. Para campo cristalino D menor que o do ponto tricrítico a linha de transição é de segunda ordem, enquanto que para D maior a linha é de primeira ordem. Em especial, spins inteiros e semi-inteiros possuem diferentes diagramas de fases, como foi previsto por modelos de Blume-Capel utilizando-se técnicas de campo médio [42], invariância conforme [16,17] e simulações de Monte Carlo. Em analogia ao modelo BC decidimos investigar, nesse caso, a influência do valor do spin no diagrama de fases do modelo BW com campo cristalino.

6.1 Modelo Baxter-Wu

Como já mencionado em capítulos anteriores o Hamiltoniano do modelo BW na presença de um campo cristalino é

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k + D \sum_i \sigma_i^2 .$$

Note que o modelo BW de spin-1/2 é recuperado no limite de $D \rightarrow -\infty$, pois somente os estados $\sigma_i = \pm S$ são acessíveis.

Assim como no modelo BC, o modelo BW com campo cristalino apresenta o mesmo tipo de competição entre as fases ordenada ($\langle\sigma\rangle \neq 0$) e desordenada ($\langle\sigma\rangle = 0$), mediada pelo campo cristalino. Desta forma é razoável esperar que para ambos os modelos o diagrama de fases seja similar, porém com diferentes classes de comportamentos críticos. Tal tipo de competição também aparece no modelo de Potts de q -estados diluído [82]. Como o modelo BW e o de Potts de 4-estados possuem os mesmos expoentes críticos (veja, por exemplo, [29]) e sabendo que a diluição no modelo de Potts de 4-estados possui o mesmo efeito do campo cristalino no modelo BW, podemos esperar que o diagrama de fases e o comportamento crítico de ambos sejam os mesmos. Baseado no estudo do grupo de renormalização, Nienhuis *et al.* [82] indicaram que o modelo de Potts de 4-estados diluído possui um diagrama de fases similar ao do modelo BC, ou seja, existe mudança de segunda para primeira ordem na linha de transição para spins inteiros. Os expoentes críticos, entretanto, são os mesmos do modelo de Potts de 4-estados puro. Por outro lado, Kinzel *et al.* [83] supuseram um comportamento diferente para o modelo BW na presença de um campo cristalino utilizando métodos baseados em teoria de escala de tamanho finito. Estes autores consideraram que a mudança no expoente crítico térmico ao longo da linha de transição é um indício de que somente para o modelo de BW puro ($D \rightarrow -\infty$) deve ocorrer a transição de segunda ordem.

A fim de estudar de forma mais detalhada o diagrama de fases deste modelo, e verificar a existência do ponto multicrítico, daremos continuidade ao trabalho desenvolvido por Costa, Xavier e Plascak, em 2004 [31, 32], onde usaremos o grupo de renormalização fenomenológico aplicado ao sistema reduzido consistindo de tiras infinitas de largura L , e, com argumentos de teoria de escala de tamanho finito, obter o ponto crítico em função do campo cristalino para vários valores de L . Neste caso, o comprimento de correlação será obtido através da matriz de transferência de cada sistema reduzido, como já foi discutido na seção 4.4.

6.2 Resultados para spin $S = 1$

Para spin-1 teremos uma matriz de transferência de ordem $3^L \times 3^L$, uma vez que $\sigma_i = \pm 1$ e 0 e usaremos a maior largura de tiras $L = 12$. Na figura 6.1 temos os

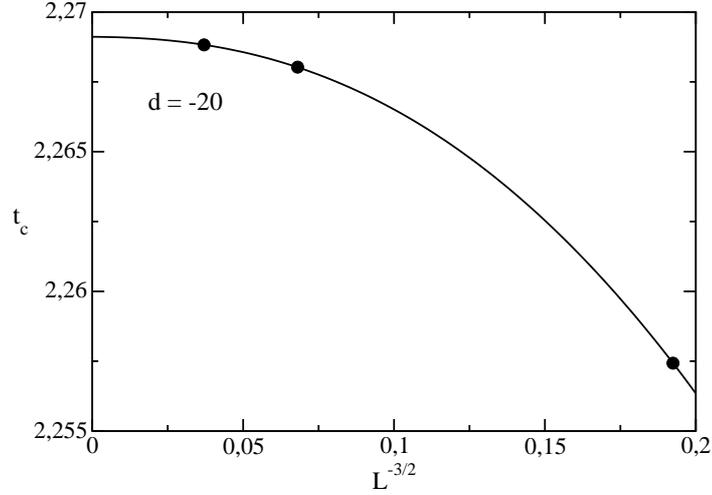


Figura 6.1: Temperatura reduzida $t_c = k_B T/J$ em função do tamanho $L^{-3/2}$ para $d = -20$. A linha contínua representa o melhor ajuste de acordo com a equação (6.3).

dados obtidos através da solução da equação (4.51) para três valores de $L = 3, 6, 9$ e $d = -20$. Como esse valor é muito grande e negativo, os resultados devem ser próximos do modelo de BW de spin-1/2. Uma extrapolação desses resultados pode ser feita utilizando correções de tamanho finito. Se considerarmos o limite termodinâmico teremos

$$\xi = \xi_0 \left| \frac{T - T_c^\infty}{T_c} \right|^{-\nu},$$

porém, para sistemas finitos, teremos, no máximo, $\xi = L$, portanto

$$\frac{L}{\xi_0} = \left| \frac{T_L - T_c^\infty}{T_c} \right|^{-\nu} \rightarrow T_c^L = T_c^\infty + AL^{-1/\nu}. \quad (6.1)$$

A equação acima só é válida para valores de L muito grandes, pois a criticalidade só ocorre em sistemas infinitos, sendo assim, para o nosso caso, em que L não é tão grande, devemos considerar correções de escalas dadas por

$$t_c(L) = t_c(L \rightarrow \infty) + AL^{-1/\nu} (1 + BL^{-(w-2)}), \quad (6.2)$$

com $\nu = 2/3$ e $w = 4$ [16], sendo as constantes A e B não universais. Em função de $L^{-1/\nu} = L^{-3/2}$ a equação acima pode ser escrita como

$$t_c(L) = t_c(L \rightarrow \infty) + AL^{-3/2} [1 + B(L^{-3/2})^{4/3}], \quad (6.3)$$

a qual é mais fácil de ser utilizada nos ajustes. De fato, com essa lei de escala para $d = -20$ resulta na temperatura reduzida $t_c(L \rightarrow \infty) = 2,26911$, que está muito próxima do valor exato no limite de $D \rightarrow -\infty$, $t_c = 2/\ln(\sqrt{2} + 1) = 2.26918\dots$. Ressaltamos que nas equações (6.2) e (6.3) levamos em conta correções de tamanho finito, pois o número de redes é bem pequeno nesse caso (devido ao fato de termos que considerar sempre L e $L + 3$).

As Figs. 6.2(a) e (b) mostram os resultados para $d = -1$ e $d = 0,66$, respectiva-

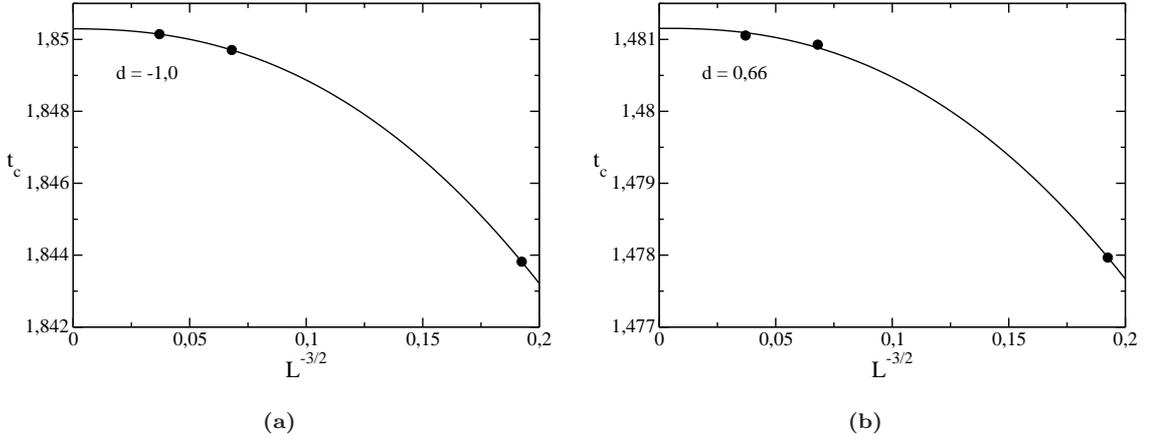


Figura 6.2: Temperatura reduzida $t_c = k_B T/J$ em função do tamanho $L^{-3/2}$ para (a) $d = -1$ e (b) $d = 0,66$. As linhas contínuas representam o melhor ajuste de acordo com a equação (6.3).

mente. As extrapolações são da mesma qualidade daquelas para d grande e negativo, sendo $t_c(L \rightarrow \infty) = 1,8503$ para $d = -1,0$ e $t_c(L \rightarrow \infty) = 1,48116$ para $d = 0,66$, as temperaturas são portanto menores à medida que d cresce, como esperado. Pode-se assim obter a linha de transição de segunda ordem para vários valores de d . Os resultados de $t_c(L)$, bem como as temperaturas extrapoladas, para alguns valores selecionados do campo cristalino, estão na Tab. 6.1.

Os pontos multicríticos (d_m, t_m) são obtidos quando a equação (4.57) é satisfeita. Isso foi estimado, inicialmente, de modo gráfico, quando temos as temperaturas $t_c(L)$ e $t_c(L + 3)$ na horizontal no gráfico de $t_c \times L^{-1/\nu}$, indicando que as mesmas possuem o mesmo valor. Em seguida, utilizamos o programa para obtê-las de forma mais precisa. Encontramos nesse caso $(d_m = 1,3089, t_m = 1,2225)$ com $L = 3$ (o mesmo valor obtido na referência [31]) e $(d_m = 0,890254, t_m = 1,4020)$ com $L = 6$.

As transições de primeira ordem são analisadas através da eq. (4.58). Os gráficos

Tabela 6.1: Temperatura de transição $t(L)$ para valores selecionados do campo cristalino d . Para $d \leq 0,890254$ os valores de $t(L)$ foram obtidos da eq. (4.51) com tiras de largura L e $L + 3$ (por isso não temos o valor de $t(L = 12)$). Para $d > 0,890254$ temos a temperatura correspondente ao valor do mínimo da diferença dada pela eq. (4.58). A penúltima linha mostra as extrapolações com tiras $L = 3, 6, 9$ e a última com tiras $L = 3, 6, 9, 12$. Em ambas, para $d \leq 0,890254$ usamos a eq. (6.3) e para $d > 0,890254$ a eq. (6.4).

| d | -10^a | -1^a | $0,890254^b$ | 1^c | $1,2^c$ | $1,7^c$ |
|----------------------|----------|----------|--------------|----------|----------|----------|
| $t(3)$ | 2,246498 | 1,843818 | 1,399776 | 1,496110 | 1,326260 | 0,910249 |
| $t(6)$ | 2,256769 | 1,849706 | 1,40196895 | 1,396648 | 1,283697 | 0,956023 |
| $t(9)$ | 2,257541 | 1,850146 | 1,40196897 | 1,375516 | 1,278119 | 0,962927 |
| $t(12)$ | --- | --- | --- | 1,367989 | 1,276324 | 0,964302 |
| $t(\infty) (3 - 9)$ | 2,2743 | 1,8597 | --- | 1,3617 | 1,2711 | 0,97022 |
| $t(\infty) (3 - 12)$ | 2,25781 | 1,85030 | --- | 1,3608 | 1,2718 | 0,96928 |

^a Transição contínua

^b Ponto Multicrítico

^c Transição descontínua

da Fig. 6.3 mostram o comportamento de $\Delta_5(K, d)$ para as tiras $L = 3, 6, 9$ e 12 em função do inverso da temperatura reduzida K para o valor $d = 1,7$. O mínimo em cada curva localiza a temperatura de transição de primeira ordem $t_1(L)$ para aquela rede. No caso de transições descontínuas, espera-se um comportamento de escala de tamanho finito do tipo [70]

$$t_1(L) = t_1(L \rightarrow \infty) + AL^{-2}, \quad (6.4)$$

sendo que o expoente 2 vem da dimensão da rede. Um ajuste dos dados obtidos na Fig. 6.3 em função da largura das tiras é mostrado na Fig. 6.4. A temperatura reduzida de primeira ordem extrapolada para $d = 1,7$ resulta em 0,96928. Outros valores da temperatura de transição de primeira ordem encontram-se na Tab. 6.1.

Com os dados acima podemos construir a linha de transição entre as fases ordenadas e a desordenada. A Fig. 6.5 mostra o diagrama de fases assim obtido. A caráter de ilustração, os dados obtidos para todos os valores de L , inclusive o limite termodinâmico, encontram-se nessa figura. É interessante notar que, nessa escala,

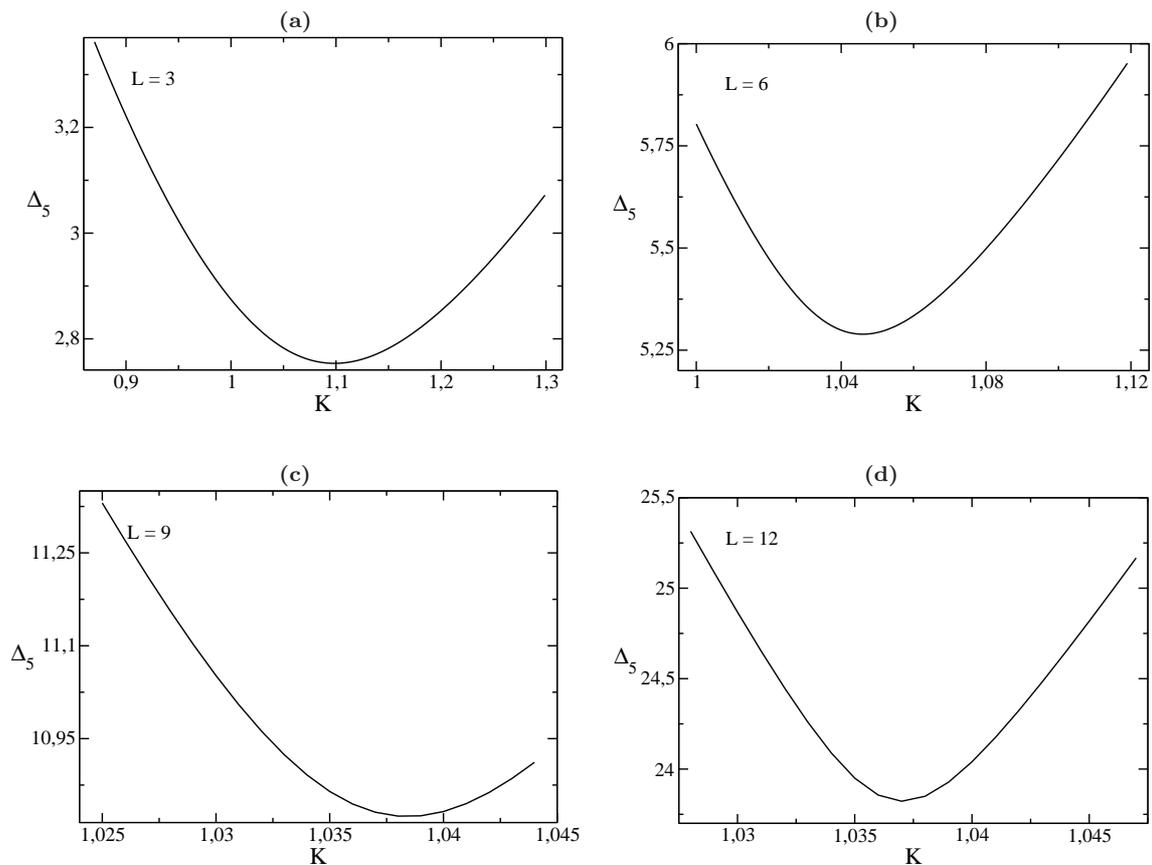


Figura 6.3: Δ_5 em função da temperatura reduzida $t^{-1} = K$ para (a) $L = 3$, (b) $L = 6$, (c) $L = 9$, e (d) $L = 12$. Esses resultados são para $d = 1, 7$.

as linhas usando tiras com larguras diferentes estão muito próximas entre si, e, até mesmo, próximas do valor extrapolado. Com exceção da variação da localização do ponto pentacrítico, o uso de tiras mais largas não mudou significativamente o diagrama de fases. A Fig. 6.6 mostra uma ampliação na escala de temperatura na região da transição de segunda ordem e também na região de transição de primeira ordem. Somente numa escala bem ampliada podemos notar as diferenças dos dados para diferentes larguras de tiras. A Fig. 6.7 mostra o diagrama de fases obtido somente no limite termodinâmico com as tiras até a largura $L = 12$. O limite de $t \rightarrow 0$ foi obtido teoricamente e acrescido aos diagramas de fases, uma vez que, numericamente, essa região é difícil de ser obtida.

Quanto a classe de universalidade do comportamento crítico, as Tabs. 6.2 e 6.3 mostram os valores obtidos pelas eqs. (4.52) e (4.53) para os expoentes críticos ν

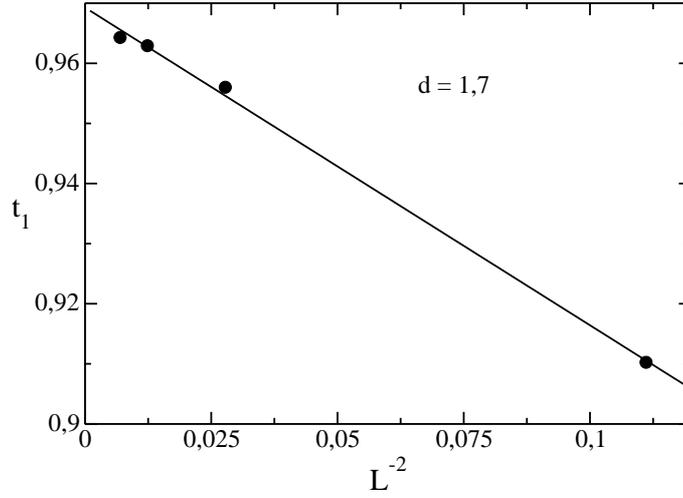


Figura 6.4: Temperatura reduzida de primeira ordem $t_1 = k_B T/J$ em função do tamanho L^{-2} para $d = 1,7$. A linha contínua representa o melhor ajuste de acordo com a equação (6.4).

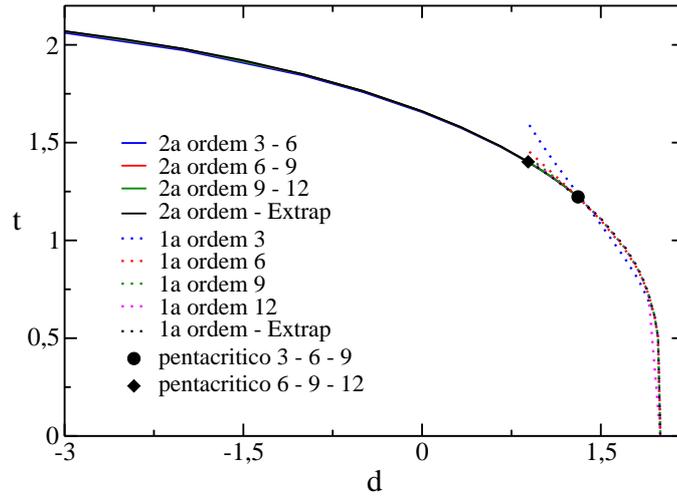


Figura 6.5: Temperatura crítica reduzida e de primeira ordem $t = k_B T/J$ em função do campo cristalino d para $spin-1$. As linhas contínuas representam as transições de segunda ordem, enquanto que as linhas pontilhadas representam as transições de primeira ordem. Os pontos cheios nos dão os pontos multicríticos.

e η para diversos valores de L . Percebe-se que para valores de d afastados do valor pentacrítico os valores dos expoentes são bem próximos de seus valores teóricos para este modelo, $\nu = 2/3$ e $\eta = 1/4$, porém, quando d se aproxima de 0,89 os valores de ν e η começam a sofrer variações indicando que a classe de universalidade do

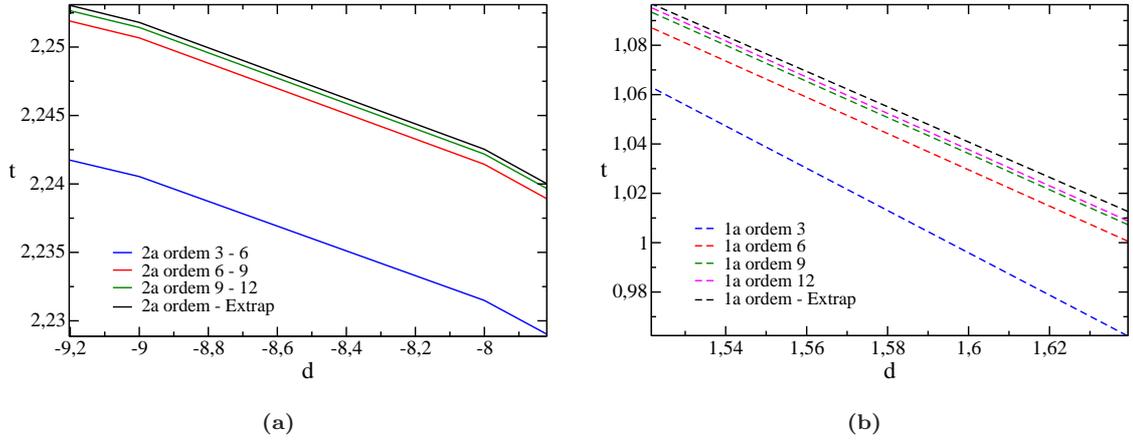


Figura 6.6: Temperatura crítica reduzida e de primeira ordem $t = k_B T/J$ em função do campo cristalino d numa região ampliada da transição de segunda ordem (a) e na transição de primeira ordem (b). Linhas contínuas representam as transições de segunda ordem, enquanto que as linhas pontilhadas representam as transições de primeira ordem.

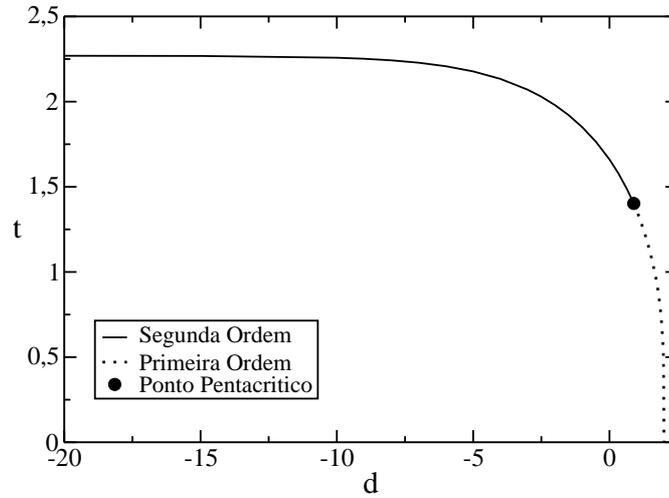


Figura 6.7: Diagrama de fases global do modelo de Baxter-Wu $spin-1$, no limite termodinâmico, obtido utilizando-se as tiras $L = 3, 6, 9$ e 12 .

comportamento multicrítico é diferente do comportamento crítico. Ao compararmos as duas tabelas percebemos que os valores obtidos pelos dois métodos para L 's grandes são bem próximos entre si, o que indica que, provavelmente, convergem para um mesmo ponto, porém podemos perceber que no ponto multicrítico a convergência para ν utilizando a eq. (4.52) não é clara, indicando que a eq. (4.53) é um método

Tabela 6.2: Estimativas de $\nu_{L,L+3}$ obtidas da eq. (4.52) para diferentes valores de L ao longo da linha de transição de segunda ordem.

| d | -20 | -10 | -1 | 0 | 0,890254 |
|--------------|----------|----------|----------|----------|-----------|
| $\nu_{3,6}$ | 0,682790 | 0,682783 | 0,674784 | 0,663104 | 0,629733 |
| $\nu_{6,9}$ | 0,670585 | 0,670580 | 0,663231 | 0,651452 | 0,613728 |
| $\nu_{9,12}$ | 0,668255 | 0,668251 | 0,660989 | 0,648794 | -0,125297 |

Tabela 6.3: Estimativas de ν_L e η_L obtidas através da eq.(4.53) para diferentes valores de L ao longo da linha de transição de segunda ordem.

| d | -20 | -10 | -1 | 0 | 0,890254 |
|-------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| ν_3 | 0,717227 | 0,717220 | 0,702090 | 0,681396 | 0,639194 |
| ν_6 | 0,673260 | 0,673256 | 0,665615 | 0,653738 | 0,622794 |
| ν_9 | 0,669334 | 0,669331 | 0,662102 | 0,650571 | 0,618802 |
| ν_{12} | 0,668122 | 0,668118 | 0,660986 | 0,649420 | 0,616406 |
| η_3 | 0,234583 | 0,234583 | 0,232765 | 0,229547 | 0,219436 |
| η_6 | 0,247226 | 0,247225 | 0,244681 | 0,240350 | 0,226417 |
| η_9 | 0,249000 | 0,248999 | 0,246354 | 0,241785 | 0,226417 |
| η_{12} | 0,249000 | 0,248999 | 0,246354 | 0,241785 | 0,226417 |

mais confiável. Note que $\eta_9 = \eta_{12}$ é consequência das eqs. (4.51) e (4.53) e do fato de termos usado $t_c = t_c^{9,12}$ para obtermos $x^9(1)$ e $x^{12}(1)$. Já a Tab. 6.4 mostra os valores da dimensão anômala obtidos através das relações (4.55) e (4.56) para alguns valores de campos cristalinos abaixo do ponto pentacrítico. Vemos que o valor de c é próximo de 1, o que indica que os expoentes críticos podem variar continuamente, e de acordo com a classe de universalidade do modelo de Potts de 4 estados. Porém, diferente do modelo de Blume-Capel onde há uma mudança brusca no valor de c no ponto tricrítico, e do próprio expoente crítico ν , nesse caso o valor de c perto do ponto pentacrítico parece não mudar muito, mesmo se considerarmos uma rede maior do que foi tratado anteriormente em [31].

Tabela 6.4: Estimativas de $c_{L,L+3}$ obtidas da eq. (4.55) para diferentes valores de L ao longo da linha de transição de segunda ordem, bem como as extrapolações obtidas de (4.56). Para as redes $L = 3, 6, 9$ temos a carga central para $d > 0, 890254$, pois nesse caso o ponto multicrítico localiza-se em $d = 1, 3089$.

| d | -10 | -1 | 0, 890254 | 1 | 1, 25 | 1, 3089 |
|---------------------|----------|----------|-----------|----------|----------|----------|
| $c_{3,6}$ | 0,938118 | 0,940783 | 0,952984 | 0,954302 | 0,955708 | 0,955047 |
| $c_{6,9}$ | 0,986393 | 0,986830 | 0,987463 | 0,986656 | 0,979695 | 0,975435 |
| $c_{9,12}$ | 0,994485 | 0,994627 | 0,993283 | --- | --- | --- |
| $c_\infty(3, 6)$ | 1,00196 | 1,00168 | 0,998582 | 0,997092 | 0,98743 | 0,982012 |
| $c_\infty(3, 6, 9)$ | 1,00166 | 1,00145 | 0,998397 | --- | --- | --- |

6.3 Resultados para spin $S = 3/2$

Nesse caso, a ordem da matriz de transferência é $4^L \times 4^L$, devido aos quatro estados de spin $\sigma_i = \pm 3/2, \pm 1/2$. Isso reduz a capacidade de se tratar tiras mais largas, de modo que a maior largura considerada será $L = 9$. Entretanto, como visto no caso do modelo com spin-1 na seção anterior, o aumento da tira para $L = 12$ não trouxe uma grande mudança nos resultados, de modo que esperamos obter dados também precisos com tiras até largura $L = 9$ nesse caso.

Como no modelo com spin-1, no limite $D \rightarrow -\infty$ teremos o modelo de BW

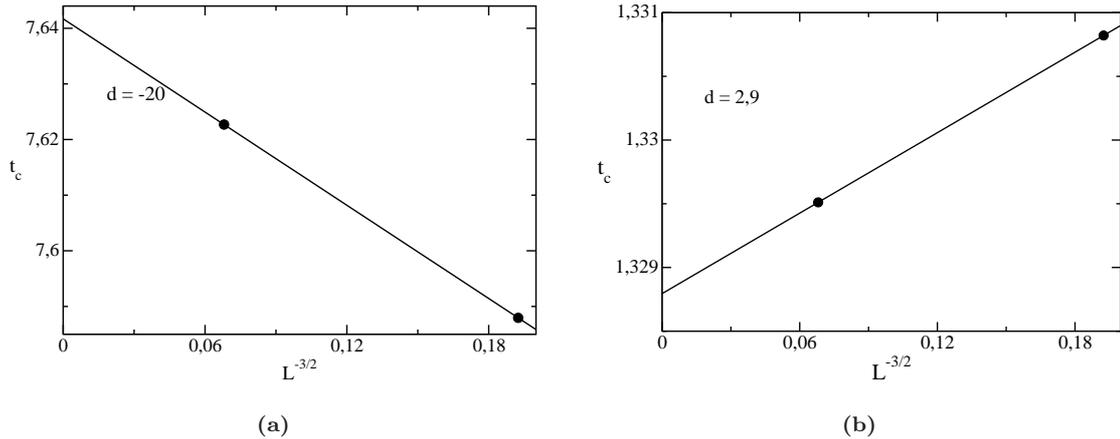


Figura 6.8: Temperatura reduzida $t_c = k_B T/J$ em função do tamanho $L^{-3/2}$ para (a) $d = -20$ e (b) $d = 2,9$. A linha contínua representa o melhor ajuste de acordo com a equação (6.5).

tipo spin-1/2, pois somente os estados $\pm 3/2$ são acessíveis. A temperatura crítica é dada nesse caso por $t_c(D \rightarrow -\infty) = k_B T_c / J' = 2 / \ln(\sqrt{2} + 1) = 2,26918\dots$, com J' dado agora por $J' = 3^3 J / 2^3$, ou seja, $t_c(D \rightarrow -\infty) = 7,65848\dots$, sendo J' a energia de interação para o modelo com $\sigma = \pm 1$. Por outro lado, para $D \rightarrow +\infty$ os possíveis estados são $\pm 1/2$, de maneira que teremos outro modelo tipo spin-1/2 com temperatura crítica dada por $J' = J / 2^3$, logo $t_c(D \rightarrow +\infty) = 0,28364\dots$. Assim, para o modelo com spin-3/2 teremos uma linha de transição de segunda ordem das fases ordenadas para a fase desordenada.

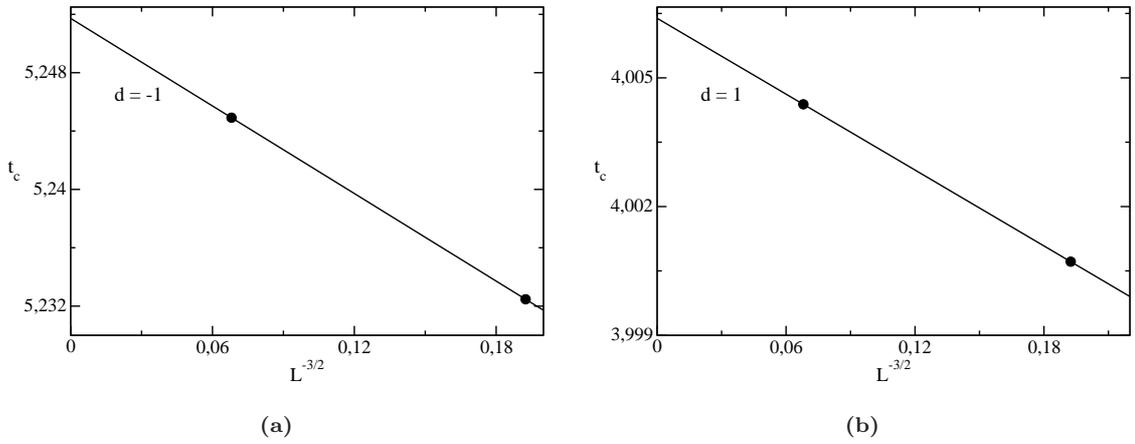


Figura 6.9: Temperatura reduzida $t_c = k_B T / J$ em função do tamanho $L^{-3/2}$ para (a) $d = -1$ e (b) $d = 1$. A linha contínua representa o melhor ajuste de acordo com a equação (6.5).

Os gráficos da Fig. 6.8 mostram as temperaturas críticas reduzidas obtidas da eq. (4.51) para $L = 3$ e $L = 6$ em função da largura das tiras, para $d = -20$ e $d = 2,9$, respectivamente. Uma extrapolação para $L \rightarrow -\infty$ resulta em $t_c = 7,64169$ para $d = -20$, que já está bem próximo do valor esperado para esse limite de campo cristalino grande e negativo. Por outro lado, para $d = 2,9$, temos $t_c = 1,32879$. Aqui, devido ao fato de termos somente dois pontos, estamos obtendo o limite termodinâmico considerando apenas a correção de escala de tamanho finito dominante dado diretamente por

$$t_c(L) = t_c(L \rightarrow \infty) + AL^{-3/2} . \quad (6.5)$$

Os gráficos da Fig. 6.9 mostram as temperaturas críticas reduzidas para $d = -1$ e $d = 1$, respectivamente. Dessa forma pode-se encontrar a linha de transição de

Tabela 6.5: *Temperatura crítica reduzida $t_c(L, L+3)$ para vários valores de campo cristalino d para o modelo com $spin-3/2$.*

| d | -10 | -1, 0 | 1, 0 | 2, 9 | 3, 0 |
|-------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $t_c(3, 6)$ | 7,255392 | 5,232470 | 4,000716 | 1,330821 | 1,055966 |
| $t_c(6, 9)$ | 7,284158 | 5,244916 | 4,004383 | 1,329511 | 1,179811 |
| $t_c^\infty(3-9)$ | 7,3331 | 5,2661 | 4,01063 | 1,32879 | 1,390650 |

segunda ordem que separa as fases ordenadas da fase desordenada. Alguns valores dessas temperaturas, em função do campo cristalino, estão listadas na Tab. 6.5, pode-se perceber da mesma que o ponto obtido com $d = 3, 0$ possui uma característica diferente quando comparado aos outros, isso se deve a problemas de convergências encontrados a partir do mesmo, sendo que para valores maiores o programa parou de convergir. A Fig. 6.10 mostra as linhas de segunda ordem em função do campo cristalino, bem como a extrapolação. A continuação da linha de segunda ordem para $d > 3$ foi obtida considerando o valor teórico de $t_c(D \rightarrow \infty) = 0,28364\dots$. Uma ampliação perto do ponto multicrítico pode ser vista na Fig. 6.11. Podemos notar, dessa última figura, que as linhas para $L = 3$ e $L = 6$ encontram-se no ponto ($d_o = 2,0620, t_o = 2,9145$), o que caracteriza a obediência da eq. (4.57). Isso significa que o modelo parece apresentar um ponto octocrítico, onde oito fases tornam-se iguais.

Para se ter uma ideia mais precisa desse ponto, devemos agora analisar a linha de transição de primeira ordem a baixas temperaturas utilizando a eq. (4.59). A Fig.

Tabela 6.6: *Temperatura de transição de primeira ordem reduzida $t_1(L)$ para vários valores de campo cristalino d para o modelo com $spin-3/2$.*

| d | 2, 0 | 2, 2 | 2, 4 | 2, 6 | 2, 8 |
|-------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $t_1(3)$ | 3,005621 | 2,687522 | 2,334812 | 1,990167 | 1,565411 |
| $t_1(6)$ | 2,996345 | 2,692225 | 2,377047 | 2,020529 | 1,580103 |
| $t_1(9)$ | 2,989984 | 2,712674 | 2,396817 | 2,026014 | 1,581528 |
| $t_1^\infty(3-9)$ | 2,99013 | 2,70697 | 2,39917 | 2,030560 | 1,58413 |

6.12 mostra os mínimos encontrados para $d = 2, 6$ e vários valores de L , bem como a extrapolação segundo a eq. (6.4) resultando em $t_1(L \rightarrow \infty) = 2,030560$. Na Tab. 6.6 encontramos os valores das temperaturas de transição de primeira ordem assim

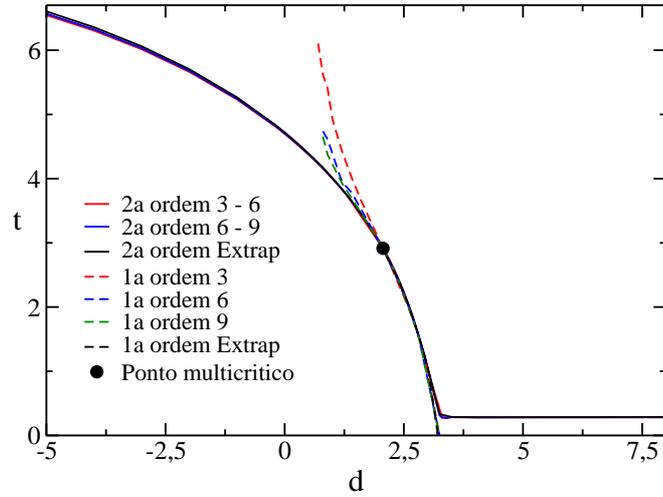


Figura 6.10: Temperatura crítica reduzida e de primeira ordem $t = k_B T / J$ em função do campo cristalino d para $\text{spin}-3/2$. As linhas contínuas representam as transições de segunda ordem, enquanto que as linhas pontilhadas representam as transições de primeira ordem. O ponto cheio nos dá o ponto multicrítico.

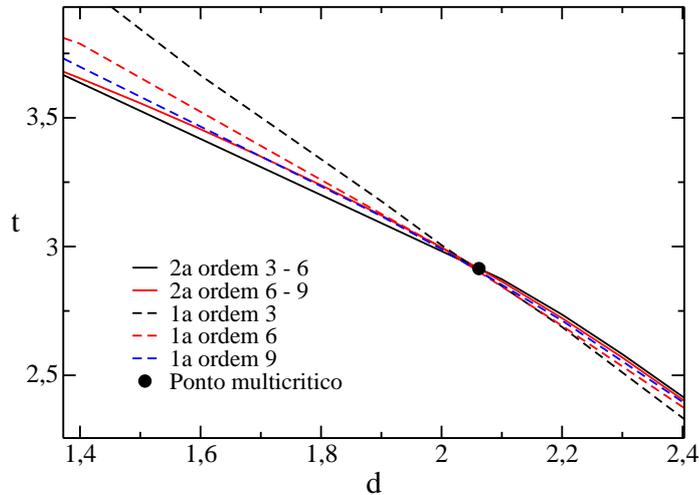


Figura 6.11: Região perto do ponto multicrítico ampliada da Fig. 6.10.

obtidas para outros valores de d . A linha de primeira ordem também encontra-se nas Fig. 6.10 e 6.11. Podemos notar que a linha de primeira ordem tende a terminar no ponto octocrítico, evidenciando assim a existência desse ponto multicrítico na linha de segunda ordem, contrário ao que se observa no modelo de Blume-Capel. A Fig. 6.13 mostra o diagrama de fases obtido no limite termodinâmico para o modelo de BW com $\text{spin}-3/2$.

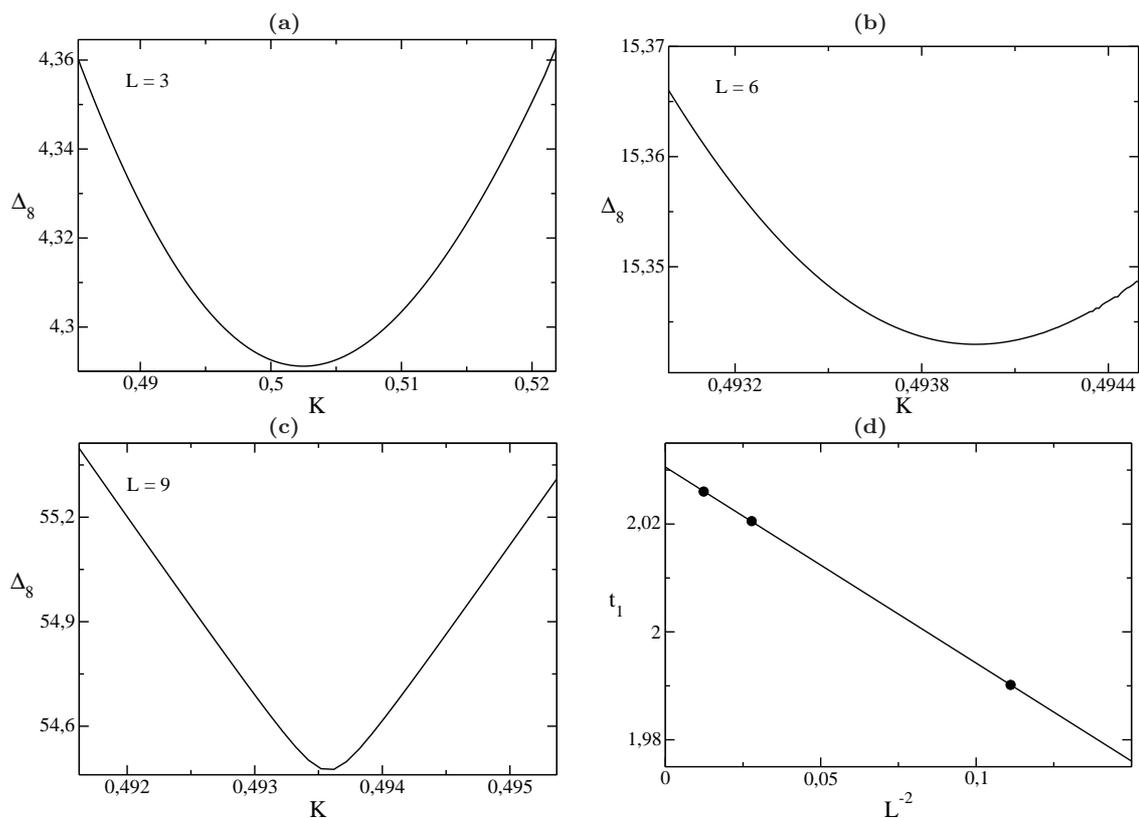


Figura 6.12: Δ_8 em função da temperatura reduzida $t^{-1} = K$ para (a) $L = 3$, (b) $L = 6$, (c) $L = 9$. Em (d) temos um ajuste de acordo com a equação (6.4). Esses resultados são para $d = 2, 6$.

A classe de universalidade do comportamento crítico pode também ser determinada pelos expoentes críticos, ν e η , e a carga central, c , obtidos através das eqs. (4.52) (4.53) e das relações (4.55) e (4.56), respectivamente. As Tabs. 6.7 e 6.8 mostram esses valores para alguns campos cristalinos, enquanto que a Fig. 6.14 mostra o gráfico de $c_{L,L+3}$ em função de d . Contrário ao que acontece no caso do modelo com spin-1, uma grande diferença é observada ao se aproximar do ponto multicrítico ($d_o = 2,0620$), tanto nos expoentes críticos, quanto na dimensão anômala. Essa grande mudança no valor da carga central é mais uma evidência da existência do ponto octocrítico, ao invés de um ponto crítico terminal duplo. Para $d > 2$ temos uma mudança considerável do expoente crítico η e de c , sendo que, quando $d \simeq 3$ η e $c \rightarrow 0$. Essas características são indícios que as curvas de primeira e segunda ordens são muito próximas entre si e os programas numéricos não são capazes de diferenciá-

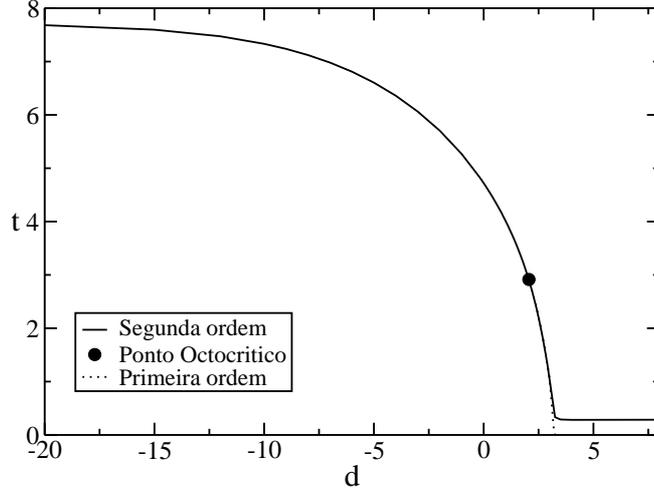


Figura 6.13: Diagrama de fases global do modelo de Baxter-Wu $spin-3/2$ no limite termodinâmico utilizando-se as tiras $L = 3, 6, 9$.

Tabela 6.7: Estimativas de $\nu_{L,L+3}$ obtidas pela eq. (4.52) para diferentes valores de L ao longo da linha de transição de segunda ordem, bem como estimativas de ν_L e η_L obtidas da eq. (4.53) para o modelo com $spin-3/2$.

| d | -10 | -1,0 | 1,0 | 2,0 | 3,0 |
|-------------|----------|----------|----------|----------|----------------------------|
| $\nu_{3,6}$ | 0,682402 | 0,661734 | 0,611204 | 0,507783 | 0,201486 |
| $\nu_{6,9}$ | 0,670262 | 0,650210 | 0,591534 | 0,452711 | --- |
| ν_3 | 0,716651 | 0,679905 | 0,623686 | 0,569025 | 0,500809 |
| ν_6 | 0,672976 | 0,652791 | 0,608914 | 0,550109 | 0,665046 |
| ν_9 | 0,669072 | 0,649635 | 0,603841 | 0,539510 | 0,789872 |
| η_3 | 0,23452 | 0,229217 | 0,213527 | 0,177210 | $0,503503 \times 10^{-2}$ |
| η_6 | 0,24713 | 0,239974 | 0,218462 | 0,160570 | $0,370687 \times 10^{-12}$ |
| η_9 | 0,24713 | 0,239974 | 0,218462 | 0,160570 | $0,304399 \times 10^{-8}$ |

las.

Podemos notar que, em geral, os dados obtidos para $d > d_o$ não são tão precisos quanto aos obtidos para $d < d_o$. As convergências das soluções da eq. (4.51) são prejudicadas na região de baixas temperaturas, desta forma não foi possível obter o valor para a temperatura crítica reduzida, t , para valores de $d > 3$, sendo que para $d = 3$ o resultado obtido não é muito confiável e a continuação da linha de segunda

Tabela 6.8: Estimativas de $c_{L,L+3}$ obtidas da eq. (4.55) e suas extrapolações correspondentes obtidas de (4.56) para o modelo com spin-3/2.

| d | -10 | -1,0 | 1,0 | 2,0 | 3,0 |
|-------------------|----------|----------|----------|----------|---------------------------|
| $c_{3,6}$ | 0,938222 | 0,944857 | 0,955199 | 0,919609 | $1,38073 \times 10^{-2}$ |
| $c_{6,9}$ | 0,986410 | 0,987472 | 0,985251 | 0,868953 | $9,29155 \times 10^{-6}$ |
| $c_{\infty}(3,6)$ | 1,00195 | 1,00121 | 0,994942 | 0,852618 | $-4,44019 \times 10^{-3}$ |

ordem na Fig. 6.13 foi obtida de forma teórica. Uma razão para isso pode ser que para baixas temperaturas críticas, as exponencias de energia se tornam muito grandes e numericamente mais difíceis de serem tratadas.

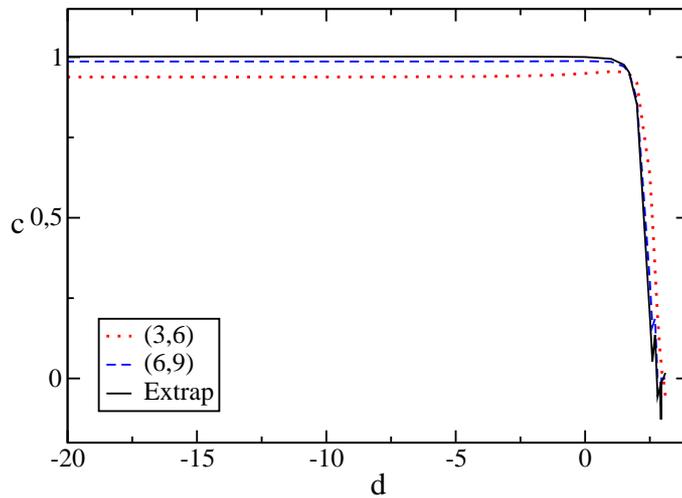


Figura 6.14: Carga central c utilizando-se as tiras $L = 3, 6, 9$ bem como a curva extrapolada.

6.4 Conclusões

Neste capítulo, utilizamos a teoria do grupo de renormalização, juntamente com argumento de escala de tamanho finito para estudarmos do modelo de Baxter-Wu com spin-1 e spin-3/2 com anisotropia cristalina. Utilizamos os tamanhos verticais $L = 3, 6, 9$ e 12 , no primeiro caso, e $L = 3, 6$ e 9 , no segundo, com o objetivo de determinar o diagrama de fases global dos modelos por meio da caracterização da transição de fases bem como avaliar a classe de universalidade dos mesmos. Por uma

dificuldade computacional não foi possível a utilização de redes maiores, dificultando os ajustes necessários na caracterização da transição de fases no limite termodinâmico.

Para o modelo BW de spin-1, cada spin que possui 3 estados de spin acessíveis (matrizes do tamanho $3^L \times 3^L$), fomos capazes de melhorar a descrição anteriormente feita por Costa, Xavier e Plascak [31,32], bem como obter com mais precisão o ponto pentacrítico. Ao aumentarmos o tamanho vertical máximo de $L = 9$ para $L = 12$ conseguimos obter um ponto pentacrítico mais confiável, mas, ainda assim, não fomos capazes de encontrá-lo no limite termodinâmico considerando as correções de tamanho finito por dificuldades computacionais. A linha de transição de primeira ordem foi obtida no limite termodinâmico através de um ajuste, onde foi considerado apenas o tamanho das redes. Já para a linha de transição de segunda ordem obtivemos o seu limite termodinâmico com as correções de tamanho finito e observamos que a linha obtida com $L = 9 - 12$ não se afastou de forma abrupta da obtida somente com $L = 6 - 9$, porém não podemos deixar de ressaltar a melhora dos resultados.

O modelo BW de spin-3/2 possui 4 estados acessíveis, desta forma possui uma matriz de transferência muito maior do que a do caso anterior ($4^L \times 4^L$) dificultando ainda mais a obtenção de resultados. Neste caso o tamanho vertical máximo foi de $L = 9$, porém, como no caso anterior, não observamos grandes variações de $L = 9$ para $L = 12$, acreditamos que as linhas de transição obtidas para o mesmo são razoáveis e descrevem de forma satisfatória a criticalidade do sistema, bem como sua classe de universalidade do comportamento crítico. Pouca coisa deste modelo era conhecido e acreditava-se que, assim como para o modelo BC, a linha de transição de primeira ordem iria terminar em um ponto crítico terminal quádruplo, mas, várias evidências levam a crer que isso não acontece. As linhas de segunda ordem para $L = 3 - 6$ e $6 - 9$ se cruzam em um mesmo ponto em que as linhas de primeira ordem parecem convergir. Característica muito interessante evidenciando a possível existência de um ponto octocrítico sobre a linha de segunda ordem. Neste caso a carga central c , assim como os expoentes críticos ν e η , apresentaram um comportamento anômalo nas proximidades do possível ponto octocrítico. Extensões a este trabalho podem ser realizados para obter o diagrama de fases de spins maiores, por exemplo, com $S = 2$.

Em ambos os modelos notamos que os expoentes críticos mudam, continuamente, ao longo da linha de transição de segunda ordem, comportamento plausível para modelos com $c = 1$.

Capítulo 7

Regra de fases de Gibbs generalizada

Nesse capítulo trataremos de investigar os diagramas de fases dos modelos estudados, bem como alguns outros modelos magnéticos tratados na literatura, sob o ponto de vista da regra de fase de Gibbs. Embora essa regra de fase tenha sido proposta para fluidos [33], ela pode ser generalizada para sistemas magnéticos, levando-se em conta as simetrias envolvidas no trato dos parâmetros de ordem e campos externos correspondentes. A ideia principal é tentar, de uma maneira bem geral, prever a topologia dos diagramas de fases desses sistemas mais ricos, principalmente quanto a existência de pontos multicríticos e de seus caracteres peculiares: por exemplo, se todas as fases coexistindo tornam-se idênticas ou se tornam-se pontos críticos terminais múltiplos.

7.1 Regra de fase de Gibbs para fluidos

Considere um sistema constituído por n componentes (como água, glicerina, CO_2 , etc.) sendo que ν fases distintas estão coexistindo numa dada temperatura T e pressão p (veja Fig. 7.1). Numa fase particular α , podemos especificar as frações molares η_i^α de cada componente i . Como T e p são os mesmos para todas as fases, será conveniente expressarmos os potenciais químicos μ_i^α de cada componente i na correspondente fase α em termos de T , p e das frações molares η_i^α . Assim temos

$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\alpha(T, p, \eta_1^\alpha, \eta_2^\alpha, \dots, \eta_{n-1}^\alpha), \quad (7.1)$$

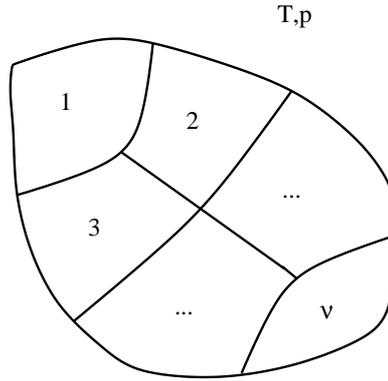


Figura 7.1: Numa dada temperatura T e pressão p temos ν fases coexistindo, sendo que em cada fase temos n componentes.

sendo que, por se tratar de fração molar, a fração do último componente designado por n é determinado por $\eta_n^\alpha = 1 - \sum_i^{n-1} \eta_i^\alpha$. Em princípio, as variáveis termodinâmicas necessárias para descrever esse sistema seriam, por exemplo, as próprias temperatura T e pressão p , mais as $n-1$ frações molares η_i^α de cada componente i na correspondente fase α . Isso resulta num número total de variáveis termodinâmicas (ou graus de liberdade termodinâmicos) dado por

$$f = 2 + \nu(n - 1) . \quad (7.2)$$

Entretanto, devido à coexistência das fases, o número de variáveis termodinâmicas, ou graus de liberdade termodinâmicos no presente caso, é menor do que o resultado mostrado na eq. (7.2). Por exemplo, para que as fases α e β coexistam é necessário que os potenciais químicos μ_i^α e μ_i^β sejam iguais, logo $\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta$ para $i = 1, 2, \dots, n$. Temos então n equações para essas duas fases. Como temos ν fases distintas, o número total de vínculos torna-se $n(\nu - 1)$. Então, o número de graus de liberdade termodinâmicos é dado finalmente por

$$f = 2 + \nu(n - 1) - n(\nu - 1) \quad \Rightarrow \quad f = 2 + n - \nu . \quad (7.3)$$

A equação acima descreve de maneira satisfatória o diagrama de fases de um fluido simples ($n = 1$) mostrado na Fig. 2.1(a), com os simples argumentos a seguir

- i.* para uma fase ($\nu = 1$) temos $f = 3 - 1 = 2$ graus de liberdade o que equivale a uma superfície;

ii. a coexistência entre duas fases ($\nu = 2$) implica em $f = 3 - 2 = 1$ grau de liberdade o que equivale a uma linha;

iii. três fases coexistindo ($\nu = 3$) nos leva a $f = 3 - 3 = 0$, ou seja, um ponto.

7.1.1 Fases críticas

Resta ainda a análise da criticalidade (região em que as fases tornam-se idênticas). No caso de duas fases coexistindo tornando-se uma fase crítica temos um vínculo a mais, por exemplo, as densidades do líquido e do gás tornando-se iguais, o que reduz o número de variáveis em uma unidade.

Em geral, quando estamos numa região de coexistência de ν fases e algumas delas tornam-se idênticas temos o comportamento crítico e, desta forma, acrescentamos vínculos ao espaço de fases e o número de graus de liberdade reduz-se a

$$f = 2 + n - \nu - \nu', \quad (7.4)$$

sendo que ν' é o número de vínculos que foram acrescentados como consequência da igualdade de fases. Perceba que, dependendo do número de componentes do sistema, podemos ter mais de duas fases tornando-se idênticas e para entender melhor o que acontece nessas situações usaremos os casos abaixo

i. Coexistência de duas fases

Este é o caso mais simples, uma vez que temos $\nu = 2$, Fig. 7.2 (a), e o



Figura 7.2: Diagramas que representam (a) a coexistência de duas fases e (b) essas duas fases tornando-se idênticas.

comportamento crítico ocorre apenas quando as duas fases tornam-se idênticas, Fig. 7.2 (b), resultando, necessariamente, em apenas mais um vínculo, $\nu' = 1$ (caracterizado pela linha pontilhada na Fig. 7.2). Logo, a fase crítica é caracterizada por $f = 2 + n - 2 - 1 = n - 1$ e verificamos que, até mesmo,

sistemas com apenas um componente ($n = 1$) podem apresentar um ponto crítico, em concordância total com o diagrama da Fig. 2.1(a).

ii. Coexistência de três fases

Para um sistema que possui três fases coexistindo, Fig. 7.3(a), temos $f =$

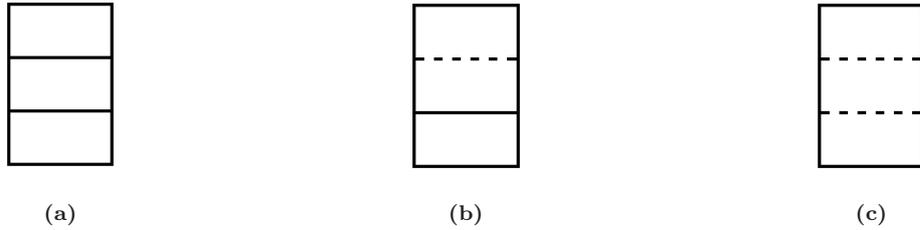


Figura 7.3: Diagramas que representam (a) a coexistência de três fases, (b) um par de fases tornando-se idênticos e (c) igualdade das três fases.

$2 + n - 3 = n - 1$. Caso duas dessas fases tornem-se idênticas, Fig. 7.3(b), acrescentamos mais um vínculo e $f = n - 2$ - o que é possível para fluidos com $n \geq 2$. Note que temos uma fase crítica coexistindo com uma fase não crítica e, portanto, uma fase (crítica terminal)¹. Caso as três fases tornem-se idênticas temos a fase tricrítica, Fig. 7.3(c), e um vínculo é acrescentado com relação a fase (crítica terminal)¹ resultando em $f = n - 3$ - o que só é possível para sistemas com $n \geq 3$.

iii. Coexistência de 4 fases

Quando um sistema que possui coexistência de quatro fases não apresenta o

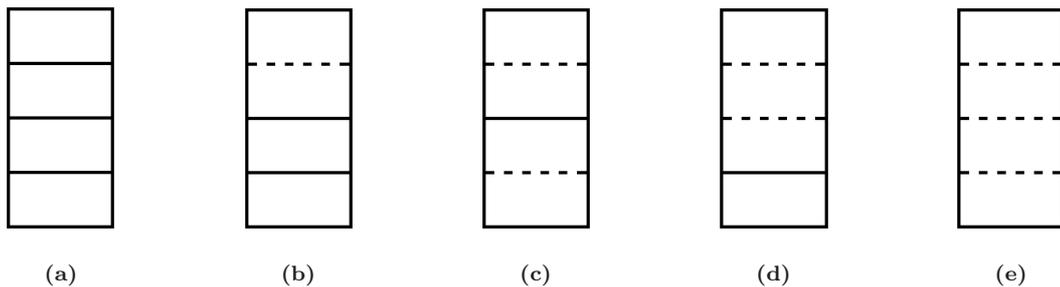


Figura 7.4: Diagramas que representam (a) a coexistência de quatro fases, (b) um par de fases tornando-se idênticos, (c) dois pares de fases tornando-se idênticos, (d) três dessas fases tornando-se idênticos e (e) a quatro fases tornando-se iguais.

comportamento crítico temos $f = n - 2$. A Fig. 7.4(b) representa uma fase

(crítica terminal)², ou seja, uma dupla de fases tornando-se iguais e coexistindo com duas fases não críticas. Para que isso aconteça é necessário o acréscimo de um vínculo e $f = n - 3$ - situação que pode ocorrer para fluidos com $n \geq 3$. Nas Figs. 7.4(c) e (d) temos, respectivamente, duas fases críticas coexistindo, ou fase crítica terminal dupla, e uma fase tricrítica coexistindo com uma fase não crítica, ou fase (tricrítica terminal)¹, que são equivalentes ao caso da Fig. 7.4(b) com um vínculo extra, logo $f = n - 4$ e só seria possível para fluidos com $n \geq 4$. E na Fig. 7.4(e) temos o ponto tetracrítico que ocorre apenas com $n \geq 5$, pois $f = n - 5$.

iv. Coexistência de cinco fases

Na Fig. 7.5 podemos ver algumas possibilidades para um sistema que possui

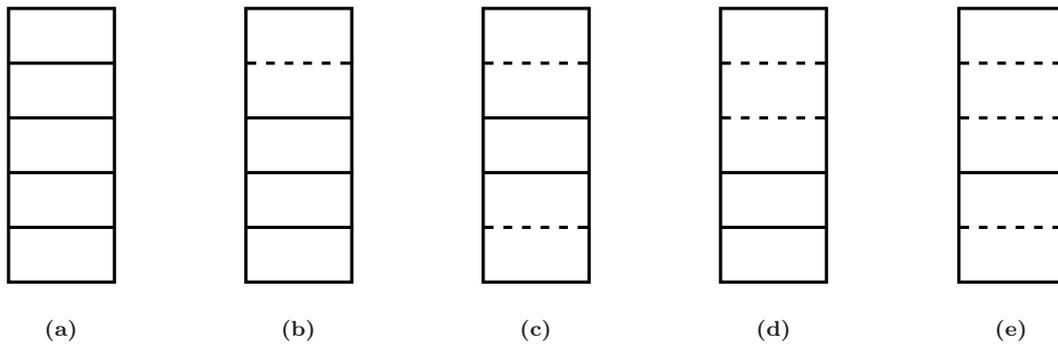


Figura 7.5: Diagramas que representam (a) a coexistência de cinco fases, (b) um par de fases tornando-se idênticos, (c) dois pares de fases tornando-se idênticos, (d) três dessas fases tornando-se idênticas e (e) uma dupla e uma trinca de fases tornando-se iguais e coexistindo entre si.

cinco fases coexistentes. Sem a criticalidade seus graus de liberdade são dados por $f = n - 3$ e suas fases representadas pela Fig. 7.5 (a). A primeira possibilidade seria a existência de uma fase (crítica terminal)³ que ocorre apenas com $n \geq 4$ uma vez que $f = n - 4$, Fig. 7.5(b). As Fig. 7.5 (c) e (d) são obtidas com o acréscimo de um vínculo da discutida anteriormente e caracterizam uma fase (crítica terminal dupla)¹ e uma fase (tricrítica terminal)², respectivamente, ambas ocorrem apenas com $n \geq 5$. E, por fim, temos uma fase crítica coexistindo com uma fase tricrítica que é caracterizada com $f = n - 6$ e só ocorre com $n \geq 6$. Note que existem outras possibilidades para um sistema com cinco fases

que não estão representadas no desenho, como uma fase (tetracrítica terminal)¹ e uma fase pentacrítica.

Se analisarmos com cuidado podemos perceber que, com relação ao sistema não crítico, cada par de fases que tornam-se idênticas acrescentam um vínculo ao sistema, cada trinca acrescenta dois vínculos, cada quadra acrescenta três vínculos, e assim por diante, logo, podemos dizer que

$$\nu' = m_2 + 2m_3 + 3m_4 + \dots,$$

sendo que m_2 é o número de pares de fases que tornam-se iguais, m_3 é o número de trinca de fases que tornam-se iguais e assim sucessivamente. Podemos dizer também que

$$\nu = m_1 + 2m_2 + 3m_3 + 4m_4 + \dots,$$

onde m_1 é o número de fases não críticas. Substituindo ν e ν' na eq. (7.4) encontramos

$$f = 2 + n - (m_1 + 3m_2 + 5m_3 + 7m_4 + \dots). \quad (7.5)$$

Esta é conhecida como regra de Zernike [84] e pode ser usada para se obter, de forma mais precisa, os graus de liberdades do sistema fluido e caracterizar qualitativamente o diagrama de fases do sistema de interesse.

7.2 Regra de fase de Gibbs para sistemas magnéticos

No caso de sistemas magnéticos a regra de fases de Gibbs pode ser generalizada através da eq. (7.4), ou seja

$$f = h + n - \nu - \nu', \quad (7.6)$$

onde agora a variável h designa o número de campos de quebra de simetria apresentado pelo modelo. Isso significa que devemos levar em conta nos casos magnéticos as propriedades de simetria dos parâmetros de ordem correspondentes, bem como os campos que quebram essas simetrias, diferente do caso dos fluidos onde não temos simetria alguma e podemos encontrar a eq. (7.5), que obtêm a regra de fases de forma mais direta. Vamos aqui nos restringir às variáveis temperatura e campos correspondentes, uma vez que a pressão somente irá incrementar em uma unidade (um eixo a

mais) os valores de f (espaço de fases). Nesse caso, o hamiltoniano do modelo determinará a simetria do parâmetro de ordem e o número de variáveis termodinâmicas necessárias para descrever o sistema.

7.2.1 Modelo de Ising

O hamiltoniano do modelo de Ising pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (7.7)$$

onde σ_i tem valor $S = 1/2, 1, 3/2, \dots$. O termo da interação de troca é incorporado na temperatura reduzida βJ , de modo que além de t , temos o campo externo H , ou seja, $h = 2$. Portanto, para $n = 1$ o número de graus de liberdade $f = 3 - \nu - \nu'$ é o mesmo do caso do fluido simples, onde o diagrama de fases da Fig. 2.1(b) fica totalmente determinado. No caso de $J < 0$ a situação é a mesma, uma vez que o magnetismo do sistema muda, mas continuamos com a mesma quantidade de campos, com H sendo definido pelo campo alternado (embora tal campo não possa ser normalmente gerado em laboratório). Lembrando que estes resultados independem da variável de spin- S .

7.2.2 Modelo de Blume-Capel

O hamiltoniano para spin geral S desse caso é dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i + D \sum_{i=1}^N \sigma_i^2, \quad (7.8)$$

sendo que temos o campo cristalino a mais. Aqui vemos que $h = 3$ e o diagrama de fases está imerso num espaço de campos tridimensional (veja Fig. 3.2 para o caso spin-1).

A regra de fases para a coexistência de fases implica, então, em $f = 4 - \nu$, onde

- i.* uma fase tem $f = 3$ graus de liberdade e está definida num volume desse diagrama de fases;
- ii.* duas fases coexistem com $f = 2$ e elas encontram-se numa superfície. Considere, por exemplo, a coexistência das fases com magnetizações inversas ($+m$ e

$-m$), devido a simetria do Hamiltoniano para campo externo nulo essas fases possuem a mesma energia livre de Gibbs por partícula, ou seja, $g_+ = g_-$, portanto a superfície de coexistência deve encontrar-se no plano $H = 0$ - o que é interessante, pois por argumentos puramente gerais tem-se uma região de localização da coexistência dessas duas fases, o que não acontece ao longo das asas mostradas na Fig. 3.2. Nestas duas asas temos a coexistência das fases com magnetização nula e positiva ($m = 0$ e $0 < m < 1$) em R^+ , e magnetização nula e negativa ($m = 0$ e $-1 < m < 0$) em R^- ;

iii. três fases coexistindo implica em $f = 1$, ou seja uma transição de primeira ordem consistindo de uma linha de pontos triplos, linha que pode ser observada na Fig. 3.2;

iv. quatro fases coexistindo daria, em princípio, o resultado $f = 0$, portanto, somente um ponto. Entretanto, ao se levar em conta a simetria do modelo (por exemplo, no caso de spin-3/2, veja Fig. 3.3) nota-se que se uma das fases ordenadas em $D/J < z/2$ coexistir com uma fase qualquer ordenada para $D/J > z/2$, automaticamente todas as outras fases também coexistem, uma vez que $g_{3/2} = g_{-3/2}$ e $g_{1/2} = g_{-1/2}$, de modo que temos a redução de somente um grau de liberdade com relação a $\nu = 2$ e não de 2 graus de liberdades como seria esperado para sistemas não magnéticos, fazendo com que na verdade $f = 1$, resultando também uma linha de pontos quádruplos;

v. não existiria a possibilidade de se ter cinco fases coexistindo nesse modelo sem considerações de simetria, pois, neste caso, teríamos $f = -1$. Porém, um caso em que isso é possível é o ponto especial $T = 0$ e $D/J = z/2$, pois teremos todas as fases com a mesma energia livre com apenas um vínculo a mais, com relação a $\nu = 3$ (para spins inteiros) ou 4 (para spins semi-inteiros), resultando em $f = 0$.

Na verdade, a solução de campo médio para esse modelo com spin geral não apresenta nenhum ponto de coexistência com mais de quatro fases a temperatura não nula.

A regra de fases para as regiões em que temos duas, ou mais, fases se tornando iguais é dada pela eq. (7.4), $f = 4 - \nu - \nu'$, portanto

i. duas fases tornando-se iguais implica em $f = 1$, e, na verdade, temos somente linhas críticas nesse modelo. Essas linhas podem ser vistas tanto na Fig. 3.2

quanto na 3.3, no plano $(D/J, k_B T/J)$ temos a linha crítica das fases com magnetizações não nulas, enquanto que nos planos com $H \neq 0$ as asas R^+ e R^- também terminam em linhas críticas;

ii. como já discutido, temos $f = 1$ para a coexistência de três fases, portanto poderíamos concluir que quando essas três fases tornam-se iguais teríamos $f = -1$, pois acrescentaríamos 2 vínculos a mais, porém não estamos levando em conta a simetria do sistema. A coexistência de três fases só ocorre quando as fases com magnetizações inversas, $+m$ e $-m$, tornam-se iguais a fase de magnetização nula, e para que isso aconteça só é necessário um vínculo a mais ($m = 0$), logo $f = 0$, que é realmente o caso do ponto tricrítico no modelo com spin $S = 1$ (e em todos os casos com spins inteiros);

iii. assim como o caso anterior para quatro fases tornarem-se iguais (em cima da linha crítica), ou apenas duas delas sobre a linha quádrupla, não teremos $f = -2$. No primeiro caso teremos $m_{+3/2} = 0$ que implicará que todas as outras magnetizações também se tornarão nulas, já, no segundo caso, teremos que $m_{3/2} = m_{1/2}$ que implicará em $m_{-3/2} = m_{-1/2}$, logo, apenas um vínculo para ambos os casos, de forma que teremos $f = 0$. Note que com argumentos de simetria, fica indeterminado a localização de um ponto tetracrítico ou um ponto crítico terminal duplo (resultados mais precisos de Monte Carlo mostram que o modelo com spin-3/2 tem na verdade o ponto CTD).

De forma geral, o ponto CTD é possível não apenas para spins semi-inteiros e isso pode ser observado ao se analisar a energia livre de Gibbs do Hamiltoniano do modelo BC. Generalizando a eq. (3.6) teremos, para spin- S e $T = 0$

$$\frac{g_{\pm\sigma}}{J} = -\sigma^2 \left(\frac{z}{2} - \frac{D}{J} \right),$$

sendo $\sigma = \{S, S - 1, \dots, 0\}$. Desta forma, no ponto especial $T = 0$ e $D/J = z/2$ a energia livre de todos os estados, inclusive $\sigma = 0$, serão iguais e este ponto possuirá a coexistência de todos os $2S + 1$ estados possíveis do Hamiltoniano, com apenas um vínculo a mais. Como temos, para qualquer valor de S , $f = 1$ quando $\nu = 3$ (4) para spins inteiros (semi-inteiros), a coexistência de $2S + 1$ não viola a regra de fases de Gibbs. Mas como isso implicaria na existência do ponto CTD para spins inteiros?

Como temos várias fases coexistindo nesse ponto especial o diagrama de fases

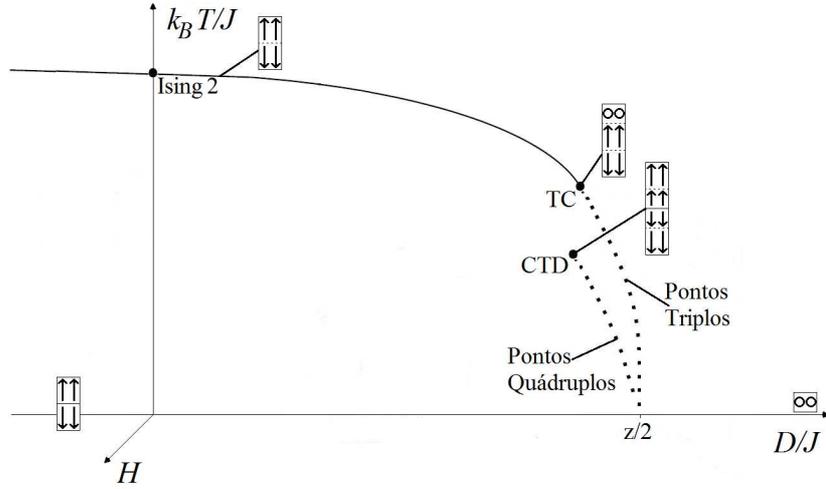


Figura 7.6: Diagrama de fases do modelo BC com spin-2, [42].

poderia apresentar mais de uma linha de transição de primeira ordem de forma que uma delas seria a linha coexistência de três fases (linha de pontos triplos) e terminaria no ponto TC e todas as outras seriam linhas de coexistência de quatro fases (linha de pontos quádruplos) que terminaria no ponto CTD ou, até mesmo, em um ponto tetracrítico. Um exemplo disso, isto é, a existência de um ponto CTD, acontece no digrama para spin-2 que pode ser visto na Fig. 7.6. Este diagrama apresenta, além de um ponto TC, onde as fases com magnetização $m_{\pm 2}$ e 0 coexistem, também um ponto CTD, onde as fases com magnetizações maiores ($m_{\pm 2}$) tornam-se iguais as fases com magnetizações menores ($m_{\pm 1}$). Neste diagrama, quando $T = 0$ e $D/J = z/2$, temos todas as fases coexistindo como discutido anteriormente. A existência do ponto tetracrítico deve ser estudada com cuidado mas nada impede que o mesmo ocorra para $S > 2$.

7.2.3 Modelo de Baxter-Wu com campo cristalino

Aqui, para spin geral S , o hamiltoniano¹ pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ijk \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k - \sum_{\ell=1}^4 \left(\sum_{\langle ijk \rangle} H_{\ell}^i \sigma_i + H_{\ell}^j \sigma_j + H_{\ell}^k \sigma_k \right) + D \sum_i \sigma_i^2, \quad (7.9)$$

¹Note que o modelo BW, sem o campo de anisotropia, possui a descrição do diagrama de fases muito semelhante a do modelo de Ising.

sendo que $\langle ijk \rangle$ indica que as somas se estendem sobre todos os vizinhos pertencentes aos triângulos da rede e temos agora quatro campos de quebra de simetria diferentes H_ℓ^μ , tal que, $\ell = 1, 2, 3$ e 4 indica o campo que atua no vértice do triângulo μ . O campo $H_1^i = H_1^j = H_1^k > 0$ é um campo uniforme, e os três outros alternados, com duas componentes para baixo e uma para cima, seguindo a ordem da Fig. 3.5. Esses campos externos, entretanto, não são todos independentes, pois um deles pode ser escrito como combinação linear dos outros, $H_1 = -(H_2 + H_3 + H_4)$, como ilustrado na Fig. 7.7.

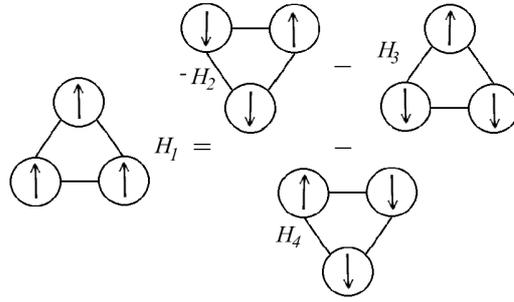


Figura 7.7: Ilustração dos campos H_1 , H_2 , H_3 e H_4 , bem como a combinação linear que resulta em H_1 .

Dessa forma, $h = 5$ e a regra de fases torna-se $f = 6 - \nu$. A situação é muito parecida com o modelo de Blume-Capel num espaço penta-dimensional. Uma, duas, três ou quatro fases, com $\nu = 1, 2, 3, 4$, coexistem com $f = 5, 4, 3, 2$ graus de liberdade, respectivamente.

- i. Vemos que quatro fases coexistem numa superfície, de maneira que para campos externos nulos o plano $(D/J, t)$ corresponde justamente à coexistência da fase ferromagnética com as três ferrimagnéticas (superfície de pontos quádruplos), descritas na seção 3.10.
- ii. Uma linha de coexistência de cinco fases torna-se possível para spin-1, e uma linha de coexistência de oito fases torna-se possível para spin-3/2, como foi visto no capítulo anterior.
- iii. Novamente aqui, o ponto pentacrítico é único e existe a possibilidade de se ter um ponto octocrítico ou crítico terminal quádruplo (CTQ), pelas mesmas considerações de simetria do modelo BC.

Pelos resultados do capítulo anterior vemos o aparecimento de um ponto octocrítico, diferente do modelo de Blume-Capel que apresenta o ponto CTD. Seria possível para esse modelo, assim como no caso BC, a existência de um ponto CTQ para spins inteiros, de forma que, para um mesmo diagrama de fases pudéssemos ter um ponto pentacrítico e vários outros CTQ's, dependendo do valor de S ?

Perceba que a regra de fases de Gibbs não impede que isso ocorra, porém se analisarmos o modelo com mais cuidado podemos chegar a conclusões interessantes. Se generalizarmos a eq. (3.11) a energia livre Gibbs por partícula para este modelo, com spin- S e $T = 0$, pode ser escrita como

$$\frac{g_\sigma}{J} = -\sigma^2 \left(2\sigma - \frac{D}{J} \right),$$

sendo $\sigma = \{S, S - 1, \dots, 0\}$. Note que essas são as energias livres para os estados ferro e ferrimagnéticos possíveis para este Hamiltoniano. Todas as energias livres para σ 's diferentes se cruzam em valores de D 's diferentes. Teremos então, para spins inteiros, em $T = 0$ e $D/J < 2S$, o sistema coexistindo nos estados ferro e ferrimagnéticos com $\sigma = S$, e em $D/J > 2S$, o sistema no estado de magnetização nula. No ponto $D/J = 2S$ e $T = 0$ teremos uma linha de primeira ordem que termina em um ponto pentacrítico. Já para spins semi-inteiros, em $T = 0$ e $D/J <$

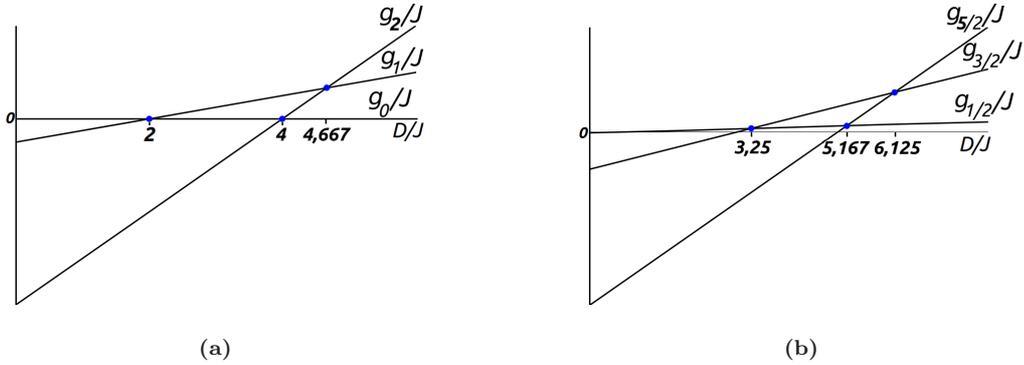


Figura 7.8: Esboço da energia livre por spin g/J em função da anisotropia do sistema D/J para (a) spin-2 e (b) spin-5/2, em $T = 0$, para o modelo BW.

$[(2S)^3 - 1]/[(2S)^2 - 1]$, o sistema coexistindo nos estados ferro e ferrimagnéticos com $\sigma = S$, e em $D/J > [(2S)^3 - 1]/[(2S)^2 - 1]$, coexistindo nos estados ferro e ferrimagnéticos com $\sigma = 1/2$ (sendo S , para os dois casos, o maior valor de σ possível). No ponto $D/J = [(2S)^3 - 1]/[(2S)^2 - 1]$ e $T = 0$ teremos uma linha

de primeira ordem que termina em um ponto octocrítico (o que foi obtido no cap. anterior, para spin-3/2) ou CTQ. As energias livres, em $T = 0$, para spin-2 e spin-5/2 estão ilustrados na Fig. 7.8.

Conjecturamos, então, que os diagramas de fases para spins inteiros serão iguais ao obtido no capítulo anterior para spin-1 e o diagrama para spins semi-inteiros serão iguais ao obtido também neste capítulo, embora a regra de fases de Gibbs permita a existência de um ponto nonótuplo para spins inteiros, uma vez que, para oito fases coexistindo temos $f = 1$ e uma outra fase poderia coexistir com apenas mais um vínculo. Este ponto apareceria, necessariamente, para spins inteiro em $T \neq 0$, sobre a linha de transição de primeira ordem.

A Tab. 7.1 apresenta os resultados dos graus de liberdade para os modelos de Ising, Blume-Capel e Baxter-Wu com campo cristalino.

Tabela 7.1: *Graus de liberdade f no caso dos sistemas magnéticos estudados no texto. Modelo de Ising (IS), Blume-Capel (BC) e modelo de Baxter-Wu com campo cristalino (BW). CT indica o ponto crítico terminal, que será duplo no caso do BC, e quádruplo no caso do BW.*

| | fases coexistindo | | | | | | fases iguais | | | | | |
|----|-------------------|---|----------------|----------------|----------------|----------------|--------------|----------------|----------------|----------------|----------------|-----|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 8 | 2 | 3 | 4 | 5 | 8 | CT |
| IS | 2 | 1 | 0 | --- | --- | --- | 0 | --- | --- | --- | --- | --- |
| BC | 3 | 2 | 1 ^a | 1 ^b | --- | --- | 1 | 0 ^a | 0 ^b | --- | --- | 0 |
| BW | 5 | 4 | 3 | 2 | 1 ^a | 1 ^b | 3 | 1 | 1 | 0 ^a | 0 ^b | 0 |

^a spin inteiro

^b spin semi-inteiro

7.3 Conclusões

Estudamos, neste capítulo, o comportamento crítico dos modelos magnéticos de Ising, Blume-Capel e Baxter-Wu através da regra de fases de Gibbs a fim de verificar a coerência destes estudos com os diagramas bem conhecidos na literatura para os modelos de Ising e Blume-Capel e os diagramas obtidos aqui para o modelo de Baxter-Wu. Verificamos que esta regra está em perfeito acordo com esses diagramas

e pode ser aplicada sem perda de generalidade para modelos de spins inteiros e semi-inteiros, porém, diferente do que foi discutido para fluidos, que tem a regra de fases completamente descrita pela eq. (7.5), sistemas magnéticos não são caracterizados por uma equação específica, uma vez que cada sistema possui uma simetria que deve ser analisada de forma particular.

Queríamos também verificar se esta regra diferencia os pontos multicríticos dos pontos terminais múltiplos. Da subseção 7.1.1 e da Tab. 7.1 vemos que, infelizmente, esta distinção não se faz pela regra de fases de Gibbs generalizada.

Capítulo 8

Considerações finais

No capítulo 5, estudamos o modelo de Blume-Capel de spin-1 diluído em redes hipercúbicas, considerando interação entre segundos vizinhos. Utilizamos o grupo de renormalização fenomenológico pela aproximação de campo médio com aglomerados de 1 e 2 spins. O diagrama foi bem caracterizado mostrando como a diluição interfere na temperatura de transição. Para $\eta = 0$, ou seja, sem interação de segundos vizinhos, a medida que a diluição aumenta observa-se uma diminuição na temperatura crítica, uma vez que esta diluição atrapalha a interação entre spins vizinhos. Porém para $\eta \neq 0$, a diluição atrapalha a interação entre primeiros vizinhos, mas induz a interação entre segundos, logo, para baixos valores de q , observamos um aumento na temperatura de transição. o modelo de dois estados foi recuperado no limite de $d \rightarrow -\infty$ e observamos que a concentração crítica q_c não depende dos valores de d , característica comprova o resultado teórico. O comportamento crítico da liga Fe-Al foi a motivação para o estudo deste modelo, uma vez que o mesmo descreveu de forma razoável o comportamento de outras ligas. Neste caso, observa-se interações de supertroca entre átomos de Fe separados por átomos de Al, Fe-Al-Fe, interações possuem dependência com a concentração de Al. A curva experimental para o diagrama de fases, temperatura reduzida em função da concentração de Al (q), desta liga foi ajustada com os dados obtidos por esta aproximação, aplicada ao modelo BC diluído. Observamos que a curva que melhor se ajustou aos dados experimentais da liga tinha um valor de d muito negativo, indicando que o próprio modelo de Ising fosse suficiente para descrevê-la.

O modelo de Baxter-Wu com spin-1 e spin-3/2 com campo cristalino foi estudado no capítulo 6, utilizamos o grupo de renormalização de escalonamento finito. Con-

sideramos os tamanhos verticais $L = 3, 6, 9$ e 12 , no primeiro caso, e $L = 3, 6$ e 9 , no segundo, para determinar o diagrama de fases dos modelos bem como para avaliar a classe de universalidade do comportamento crítico dos mesmos. Devido a dificuldades computacionais a utilização de redes maiores não foi possível, dificultando a obtenção do limite termodinâmico. Para o modelo BW de spin-1, cada spin possui 3 estados acessíveis e fomos capazes de melhorar a descrição anteriormente feita por Costa, Xavier e Plascak [31,32], bem como obter com mais precisão o ponto pentacrítico. Com aumento do tamanho vertical máximo de $L = 9$ para $L = 12$ fomos capazes de obter um ponto pentacrítico mais confiável, mas, ainda assim, não fomos capazes de encontrá-lo precisamente no limite termodinâmico considerando as correções de escala por dificuldades computacionais. A linha de transição de primeira ordem foi obtida no limite termodinâmico através de um ajuste, onde foi considerado apenas o tamanho das redes. Já para a linha de transição de segunda ordem obtivemos o seu limite termodinâmico com as correções de escala e observamos que a linha obtida com $L = 9 - 12$ não se afastou de forma abrupta da obtida somente com $L = 6 - 9$, porém não podemos deixar de ressaltar a melhora dos resultados. O modelo BW de spin-3/2 possui 4 estados de spin acessíveis, desta forma possui uma matriz de transferência muito maior do que a do caso anterior ($4^L \times 4^L$) dificultando ainda mais a obtenção de resultados. Neste caso o tamanho vertical máximo foi de $L = 9$, porém, como no caso anterior não observamos grandes variações de $L = 9$ para $L = 12$, acreditamos que as linhas de transição obtidas para o mesmo são razoáveis e descrevem de forma satisfatória a criticalidade do sistema, bem como sua classe de universalidade do comportamento crítico. Pouca coisa deste modelo era conhecido e acreditava-se que, assim como para o modelo BC, a linha de transição de primeira ordem iria terminar em um ponto crítico terminal quádruplo, mas, várias evidências levam a crer que isso não acontece. As linhas de segunda ordem para $L = 3 - 6$ e $6 - 9$ se cruzam em um mesmo ponto em que as linhas de primeira ordem parecem se convergir. Característica muito interessante evidenciando a possível existência de um ponto octocrítico sobre a linha de segunda ordem. Neste caso a carga central c apresentou um comportamento anômalo nas proximidades do possível ponto octocrítico, característica que não foi observada no caso BW de spin-1.

No capítulo anterior utilizamos a regra de fases de Gibbs para verificar sua coerência com os resultados encontrados na literatura e aqui para os modelos magnéticos

de Ising, Blume-Capel e Baxter-Wu. Verificamos que esta regra está em perfeito acordo com esses diagramas e pode ser aplicada sem perda de generalidade para modelos de spins inteiros e semi-inteiros e que a própria regra de fases possibilita a existência de pontos especiais com simetrias muito grandes. Queríamos também verificar se esta regra diferenciava os pontos multicríticos dos pontos terminais múltiplos, infelizmente, esta distinção não se faz possível.

Extensões a este trabalho podem ser realizados. Com relação as ligas FeAl podemos utilizar modelos melhores, aproximações mais sofisticadas, ou simplesmente aumentar a variável de spin- S e verificar se a região anômala será bem descrita. Já para o modelo BW podemos tentar descrever o que acontece com o diagrama de fases para $S = 2$, se será observado o ponto pentacrítico como conjecturado ou se aparecerão os pontos nonótuplo e CTQ como discutidos anteriormente (pontos que estariam em perfeito acordo com a regra de fases de Gibbs). Podemos também fazer um estudo mais detalhado do diagrama de fases do modelo BC com spin-2 e descrever o diagrama de fases para este modelo com spin-5/2, uma vez que temos conhecimento de resultados somente de campo médio.

Apêndice A

Método de Lanczos

Este Apêndice é uma breve revisão do algoritmo de Lanczos e está baseado na dissertação de mestrado de F. B. Ramos [85].

O método de Lanczos [86] é largamente utilizado quando se deseja calcular apenas os maiores autovalores ou, no caso de sistemas quânticos, os autoestados associados com as energias mais baixas. A ideia, por trás desse método, é simplesmente escrever a matriz original em termos de uma nova base que transforme a matriz original em uma matriz tridiagonal, ou seja, somente a diagonal principal e suas adjacentes possuem elementos não nulos. Esta técnica é extremamente útil quando as dimensões das matrizes a serem diagonalizadas forem da ordem de dezenas de milhões.

Abaixo ilustraremos o método considerando uma matriz Hermitiana. O procedimento para matrizes não hermitianas é similar, bastando levar em conta que os autoestados à esquerda e à direita são distintos.

Desejamos escrever uma matriz ou, de um modo mais geral, um operador hermitiano \hat{H} na forma tridiagonal

$$\hat{H}_{trid} = \begin{bmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ c_1 & a_1 & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_2 & b_3 & 0 \\ 0 & 0 & c_3 & a_3 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{bmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Definimos os estados da base de Lanczos por $|i\rangle$, $i = 0, 1, 2, \dots, n$, sendo n a dimensão¹ de \hat{H} . Escolhe-se, inicialmente, um estado arbitrário normalizado $|0\rangle^2$, isto é, $\langle 0|0\rangle = 1$. Portanto, a primeira linha da matriz tridiagonal definida na equação (A.1) pode ser escrita na forma

$$\hat{H}|0\rangle = a_0|0\rangle + b_1|1\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Como veremos, por construção, a matriz será hermitiana e os estados serão ortonormais. Então aplicando $\langle 0|$ na eq. (A.2), temos que

$$a_0 = \langle 0|\hat{H}|0\rangle. \quad (\text{A.3})$$

Temos também da eq. (A.2) que

$$|1\rangle = \frac{\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle}{b_1}. \quad (\text{A.4})$$

Calculando $\langle 1|1\rangle$, podemos ver que

$$\langle 1|1\rangle = \frac{\left(\langle 0|\hat{H} - \langle 0|a_0\right) \left(\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle\right)}{b_1^2}, \quad (\text{A.5})$$

e como $\langle 1|1\rangle = 1$, temos

$$b_1^2 = \left(\langle 0|\hat{H} - \langle 0|a_0\right) \left(\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle\right). \quad (\text{A.6})$$

Logo,

$$b_1 = \sqrt{\left(\langle 0|\hat{H} - \langle 0|a_0\right) \left(\hat{H}|0\rangle - a_0|0\rangle\right)}. \quad (\text{A.7})$$

Levando em conta agora a segunda linha da matriz tridiagonal temos

$$\hat{H}|1\rangle = c_1|0\rangle + a_1|1\rangle + b_2|2\rangle. \quad (\text{A.8})$$

Atuando $\langle 0|$ à esquerda da equação (A.8), notamos que

$$\langle 0|\hat{H}|1\rangle = c_1 = b_1^*. \quad (\text{A.9})$$

Aplicando agora $\langle 1|$ na equação (A.8), podemos escrever que

$$a_1 = \langle 1|\hat{H}|1\rangle. \quad (\text{A.10})$$

¹A dimensão é tipicamente da ordem de alguns milhões.

²Quando o estado arbitrário for “bem próximo” ao estado fundamental, serão necessárias poucas iterações para se obter a energia do estado fundamental [eqs. (A.13) - (A.15)].

Ainda da equação (A.8), temos

$$|2\rangle = \frac{\hat{H}|1\rangle - a_1|1\rangle - c_1|0\rangle}{b_2}. \quad (\text{A.11})$$

Potanto,

$$b_2 = \sqrt{(\langle 1|\hat{H} - \langle 1|a_1 - \langle 0|c_1)(\hat{H}|1\rangle - a_1|1\rangle - c_1|0\rangle)}. \quad (\text{A.12})$$

Generalizando

$$a_i = \langle i|\hat{H}|i\rangle, \quad (\text{A.13})$$

$$b_i = \sqrt{(\langle i-1|\hat{H}^2|i-1\rangle - 2c_{i-1}\langle i-1|\hat{H}|i-2\rangle - a_{i-1}^2 + c_{i-1}^2)}, \quad (\text{A.14})$$

$$c_i = b_i^*. \quad (\text{A.15})$$

Até aqui, foi mostrado apenas como é feita a mudança de base do Hamiltoniano. A primeira vista a mudança de base acima não tem utilidade, pois em princípio teremos que diagonalizar a matriz na nova base. Contudo, como o método de Lanczos é um método variacional, para determinar as energias mais baixas (ou os maiores autovalores de uma dada matriz), não é necessário diagonalizar a matriz original (com a dimensão do espaço de Hilbert). Podemos diagonalizar a hamiltoniana iterativamente, até que as energias de interesse sejam convergidas. Esta é a grande vantagem do método de Lanczos. Tipicamente, ao invés de diagonalizar a matriz original, de dimensão $n \sim 10^6$, para determinarmos a energia do estado fundamental, diagonalizamos uma matriz tridiagonal da ordem de 200.

Referências

- [1] Malte Henkel Bertrand Berche e Ralph Kenna, *J. Phys. Studies* **13**, 3001 (2009).
- [2] T. Andrews, *Phil. Trans. R. Soc.* **159**, 575 (1869).
- [3] Mário José de Oliveira, *Termodinâmica*, Editora Livraria da Física (São Paulo, 2005).
- [4] J. W. Gibbs, *Scientific Papers* (Dover, New York 1961).
- [5] C. Domb, *The Critical Point*, Taylor and Francis (London, 1996).
- [6] Kenneth G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [7] Kenneth G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).
- [8] R. B. Stinchcombe, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 7, Academic Press (London, 1983).
- [9] W. P. Wolf, *Braz. J. Phys.* **30**, 682 (2000).
- [10] E. Ising, *Z. Phys.* **31**, 253 (1925).
- [11] C. Domb e M. S. Green, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 1-6, London: Academic Press (1972-1976).
- [12] J. A. Plascak, W. Figueiredo e B. C. S. Grandi, *Braz. J. Phys.* **29**, 579 (1999).
- [13] M. P. Nightingale, *Physica A* **83**, 561 (1976).
- [14] H. W. J. Blote, J. L. Cardy e M. P. Nightingale, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 742 (1986).
- [15] I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 746 (1986).

- [16] F. C. Alcaraz e J. C. Xavier, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, L203 (1997).
- [17] F. C. Alcaraz e J. C. Xavier, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 2041 (1999).
- [18] G. A. Pérez Alcazar, J. A. Plascak e E. Galvão da Silva, *Phys. Rev. B* **34**, 1940 (1986).
- [19] J. A. Plascak, L. E. Zamora e G. A. Pérez Alcazar, *Phys. Rev. B* **61**, 3188 (2000).
- [20] D. A. Dias, J. Ricardo de Sousa e J. A. Plascak, *Phys. Lett. A* **373**, 3513 (2009).
- [21] M. Salazar, Ligia E. Zamora, G. A. Pérez Alcazar e J. A. Plascak, *Physica* **320**, 236 (2002).
- [22] M. Blume, *Phys. Rev.* **141**, 517 (1966).
- [23] H. W. Capel, *Physica* **32**, 966 (1966); **33**, 295 (1967); **37**, 423 (1967).
- [24] Luizdarcy de Matos Castro, *Grupo de renormalização de escala de tamanho finito para o modelo de Blume-Capel*, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, UFMG (1999).
- [25] Sílvio R. A. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, edusp (2005).
- [26] D. Peña Lara, G. A. Pérez Alcazar, Ligia E. Zamora e J. A. Plascak, *Phys. Rev. B* **80**, 014427 (2009).
- [27] D. W. Wood e H. P. Griffiths, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, L253 (1972).
- [28] D. Merlini, *Lett. Nuovo Cim.* **8**, 623 (1973).
- [29] R. J. Baxter e F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1294 (1973).
- [30] F. Y. Wu, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
- [31] M. L. M. Costa, J. C. Xavier e J. A. Plascak, *Phys. Rev. B* **69**, 104103 (2004).
- [32] M. L. M. Costa e J. A. Plascak, *Braz. J. Phys.* **34**, 419 (2004).
- [33] David Chandler, *Introduction to modern statistical mechanics*, Oxford University Press (New York, 1987).

- [34] Daniele Alves Dias, *Estudo analítico do diagrama de fases da liga Fe-Al através da técnica do operador diferencial*, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, UFMG (2009).
- [35] H. Eugene Stanley, *Introduction to phase transition and critical phenomena*, Oxford University Press (1971).
- [36] P. Weiss, J. Phys. Radium **4**, 661 (1907).
- [37] Lars Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [38] M. E. Fisher, J. Math. Phys. **5**, 944 (1964).
- [39] Adriana Teixeira Borges, *Aproximação de cadeia linear no modelo de Blume-Capel aplicado a cristais quase-unidimensionais*, Dissertação de Mestrado, Departamento de Física, UFMG (2005).
- [40] R. B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **24**, 715 (1970).
- [41] J. A. Plascak e D. R. Landau, Phys. Rev. E **67**, 015103 (2003).
- [42] J. A. Plascak, J. G. Moreira e F. C. Sá Barreto, Phys. Lett. A **173**, 360 (1993).
- [43] Maria Lúcia de Moraes Costa, *O modelo de Baxter-Wu Spin-1*, Tese de Doutorado, Departamento de Física, UFMG (2005).
- [44] M. N. Barber, J. Phys. A: Math. Gen. **9**, L171 (1976).
- [45] H. Fried, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 2545 (1992).
- [46] M. A. Novotny e D. P. Landau, Phys. Rev. B **32**, 3112 (1985).
- [47] M. A. Novotny e D. P. Landau, Phys. Rev. B **32**, 5874 (1985).
- [48] J. C. Xavier, *O modelo de Baxter-Wu*, Tese de Doutorado, Departamento de Física, UFMG (1999).
- [49] S. S. Martinos, A. Malakis e I. Hadjiagapiou, Physica A **331**, 182 (2004).
- [50] Nir Schreiber e Joan Adler, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 7253 (2005).
- [51] L. P. Kadanoff, Physics **2**, 263 (1966).

- [52] J. O. Indekeu, A. Maritan e A. L. Stella, *J. Phys. A: Math. Gen.* **15**, L291 (1982).
- [53] J. O. Indekeu, A. Maritan e A. L. Stella, *Phys. Rev. B* **35**, 305 (1987).
- [54] Paulo Roberto Colares Guimarães, *Dinâmica e termodinâmica do modelo de Ising a campo transversal com interação de segundos vizinhos*, Tese de Doutorado, Departamento de Física, UFMG (2002).
- [55] Kerson Huang, *Statistical mechanics*, John Wiley & Sons, Inc. (1987).
- [56] C. Domb e D. L. Hunter, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 1147 (1965).
- [57] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3892 (1965).
- [58] B. Widom, *J. Chem. Phys.* **43**, 3898 (1965).
- [59] M. E. Fisher e M. N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
- [60] M. N. Barber, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 8, Academic Press (1983).
- [61] P. A. Slotte, *J. Phys. A: Math. Gen.* **17**, L85 (1984).
- [62] O. F. A. Bonfim, *Physica A* **130**, 367 (1985).
- [63] J. A. Plascak e F. C. Sá Barreto, *J. Phys. A: Math. Gen.* **19**, 2195 (1986).
- [64] P. Di Francesco, P. Mathieu e D. Senechal, *Conformal Field Theory*, Springer - New York (1999).
- [65] F. C. Alcaraz, M. N. Barber e M. T. Batchelor, *Ann. Phys. (NY)* **182**, 280 (1988).
- [66] B. Derrida e H. J. Herrmann, *J. Physique* **44**, 1365 (1983).
- [67] H. J. Herrmann, *Phys. Lett. A* **100**, 256 (1984).
- [68] A. L. Malvezzi, *Braz. J. Phys.* **24**, 508 (1994).
- [69] F. C. Alcaraz, M. N. Barber e M. T. Batchelor, *Ann. Phys. (NY)* **182**, 280 (1988).

- [70] M. E. Fisher e A. N. Berker, Phys. Rev. B **26**, 2507 (1982).
- [71] J. C. Xavier, F. C. Alcaraz, D. Peña Lara e J. A. Plascak, Phys. Rev. B **57**, 11575 (1998).
- [72] D. A. Dias e J. A. Plascak, Phys. Lett. A **375**, 2089 (2011).
- [73] J. A. Plascak, Phys. Stat. Sol. B **120**, 215 (1983).
- [74] T. Kaneyoshi e M. Jaščur, Phys. Rev. B **173**, K37 (1992).
- [75] A. Bakkali, M. Kerouad e M. Saber, Phys. Stat. Sol. B **186**, 505 (1994).
- [76] German Antonio Pérez Alcazar, *Estudo das propriedades magnéticas e estruturais dos sistemas de ligas FeAl, FeMn e FeMnAl*, Tese de Doutorado, Departamento de Física, UFMG (1986).
- [77] A. Arrot e H. Sato, Phys. Rev. **114**, 1420 (1959).
- [78] H. Sato e A. Arrot, Phys. Rev. **114**, 1427 (1959).
- [79] M. Shiga e Y. Nakamura, J. Phys. Soc. Jpn. **40**, 5 (1976).
- [80] P. Shukla e M. Wortis, Phys. Rev. B **21**, 159 (1980).
- [81] G. S. Grest, Phys. Rev. B **21**, 165 (1980).
- [82] B. Nienhuis, A. N. Berker, E. K. Riedel e M. Schick, Phys. Rev. Lett. **43**, 737 (1979).
- [83] W. Kinzel, E. Domany e A. Aharony, J. Phys. A: Math. Gen. **14**, L417 (1981).
- [84] J. Zernike, Rec. Trav. Chim. **68**, 585 (1949).
- [85] F. B. Ramos, *As escadas de Heisenberg de N-Pernas*, Dissertação de Mestrado, Instituto de Física, UFU (2013).
- [86] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).