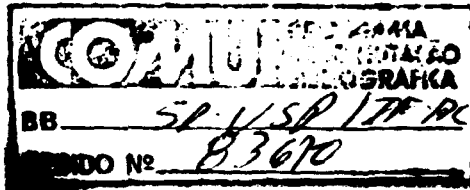


INIS-BR - 1368

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA



SOBRE A NATUREZA DA TRANSIÇÃO DE FASES  
EM MODELOS DE ISING COMPRESSÍVEIS



ANDRÉ TSUTOMU OTA

Dissertação apresentada ao  
Instituto de Física da USP  
para obtenção do título de  
Mestre em Ciências.

SÃO PAULO  
1 985

## R E S U M O

O fenômeno da transição de fases é analisado em um modelo de Ising ferromagnético compressível, a campo nulo, através da aproximação de campo médio. O modelo analisado é d-dimensional sob o ponto de vista magnético e unidimensional sob o ponto de vista elástico. Isto se consegue mantendo-se as interações compressivas entre os íons e desprezando-se totalmente as forças de cisalhamento. O parâmetro de troca  $J$  é linear e o potencial elástico quadrático em relação aos deslocamentos microscópicos da rede. No caso unidimensional, este modelo não apresenta nenhuma transição de fase. No caso de duas dimensões, o papel do spin  $S_i$  do  $i$ -ésimo íon é crucial: a) para spin  $\frac{1}{2}$  as transições são de segunda ordem; b) para spin 1, além das transições de segunda ordem temos um ponto tricrítico e uma linha de transições de primeira ordem.

## Í N D I C E

I. INTRODUÇÃO.....	1
II. MODELOS MAGNÉTICOS COMPRESSÍVEIS.....	4
II.1 - A SOLUÇÃO DE GBI EM UMA DIMENSÃO.....	8
II.2 - A SOLUÇÃO DE GBI EM DUAS OU MAIS DIMENSÕES.	11
III.O MODELO DE BAKER-ESSAM COM SPIN 1.....	16
IV. CONCLUSÕES.....	24
APÊNDICE A. O MODELO DE DOMB.....	27
A.1 - O MODELO DE DOMB UNIDIMENSIONAL.....	27
A.2 - MODELO DE DOMB PARA $d \geq 2$ .....	32
APÊNDICE B. O MODELO DE BEG.....	35
B.1 - Hamiltoniano de tentativa incluindo apenas um campo livre.....	36
B.2 - Hamiltoniano de tentativa incluindo o termo de campo cristalino.....	39
REFERÊNCIAS.....	43

**CAPÍTULO I**

## I - INTRODUÇÃO

Para analisar fenômenos ferromagnéticos, o modelo mais simples que apresenta resultados não triviais é o de Ising<sup>(1)</sup>, que é definido em uma rede cristalina rígida com cada íon "congelado" em um sítio da rede. Os íons interagem devido ao mecanismo de troca, de natureza coulombiana, que depende apenas do valor dos spins. No modelo de Ising usual os spins assumem os valores +1 ou -1.

Num sólido real, entretanto, deve haver uma interação entre os spins e as vibrações térmicas dos íons na rede. Neste sentido, Domb<sup>(2)</sup> propôs um modelo que leva em conta as vibrações da rede cristalina de uma forma média, através da dependência do parâmetro de troca com o volume. No apêndice A mostramos que este modelo, com parâmetro de troca linear e a parte elástica quadrática no volume, sempre apresenta uma instabilidade mecânica, conduzindo a uma transição de primeira ordem.

O modelo de Domb sofreu muitas críticas porque não leva em conta as interações locais, microscópicas, dos íons da rede cristalina. Baker e Essam<sup>(3)</sup> apresentaram um modelo com interações microscópicas bidimensionais magneticamente e unidimensionais do ponto de vista elástico, abandonando completamente as forças de cisalhamento. Originalmente, Baker e Essam fixaram as condições de contorno definindo a forma e o volume do sistema de spins. A solução, que é feita no ensemble canônico, tem os resultados escritos de forma pouco transparente. Gunther, Bergman e Imry<sup>(4)</sup> simplificaram o problema ao considerarem o ensemble  $\lambda$ , com as condições de contorno livres. Os resulta

dos são idênticos, pois a energia livre de Helmholtz de Baker e Essam está ligada à energia livre de Gibbs de Gunther, Bergman e Imry através de uma transformação de Legendre. No ensemble  $\lambda$ , este modelo, no caso de spin  $\frac{1}{2}$ , tem o hamiltoniano efetivo de spins reduzido ao modelo de Ising usual. Em duas dimensões vale a solução de Onsager, com uma transição de segunda ordem. Em três dimensões ainda é possível estabelecer que a transição é de segunda ordem.

No nosso trabalho vamos analisar o modelo de Baker e Essam seguindo uma linha semelhante à de Gunther, Bergman e Imry. Inicialmente integramos os graus elásticos de liberdade e obtemos um hamiltoniano efetivo de spins que poderá ser tratado pelas técnicas usuais da mecânica estatística. Vamos admitir apenas que o spin  $S_i$  do  $i$ -ésimo íon seja arbitrário. Nosso interesse é estudar o efeito de um valor maior do spin sobre a natureza da transição de fase. Será que ela continua sendo de segunda ordem? Ou poderá surgir um ponto tricrítico induzido pelas flutuações de spin?

No capítulo II.1 estudamos o modelo de Baker e Essam segundo Gunther, Bergman e Imry em uma dimensão. Independente do valor do spin este modelo não apresenta nenhuma transição de fase, servindo o caso unidimensional como uma ilustração do método seguido. No capítulo II.2 apresentamos a solução de Gunther, Bergman e Imry em duas ou mais dimensões. O hamiltoniano efetivo envolve interações quadráticas e também biquadráticas. No caso de spin  $\frac{1}{2}$  a transição é de segunda ordem. Para spin 1 o hamiltoniano efetivo se torna um caso particular do modelo de Blume,

Emery e Griffiths<sup>(5)</sup>. No apêndice B analisamos este modelo na aproximação de campo médio através da desigualdade de Bogoliubov. Mostramos que o termo de campo cristalino no hamiltoniano de tentativa é crucial para se obter os resultados do trabalho de Blume, Emery e Griffiths. O objetivo deste apêndice é apontar para o fato de que uma alteração no hamiltoniano de tentativa, no caso destes modelos, pode levar a resultados qualitativamente diferentes. No capítulo III obtemos uma solução aproximada para o modelo de Baker e Essam com spin 1 usando técnicas de campo médio e determinamos a curva crítica e o ponto tricrítico. Nesta solução, o hamiltoniano de tentativa não precisa conter o termo de campo cristalino porque este não aparece no hamiltoniano efetivo de spins. A curva de transições de primeira ordem é obtida numericamente. Concluimos que no modelo de Baker e Essam maiores flutuações de spin, na aproximação de campo médio, conduzem a um ponto tricrítico e a transições de primeira ordem. Resta, no futuro, verificar se estas características permanecem num cálculo mais sofisticado.

## CAPÍTULO II



## II - MODELOS MAGNÉTICOS COMPRESSÍVEIS

O modelo de Ising do ferromagnetismo - que fornece o exemplo mais simples de um comportamento não trivial - é definido sobre um rede cristalina rígida, em que os íons magnéticos não estão submetidos a vibrações térmicas. O hamiltoniano de Ising é normalmente escrito na forma

$$\mathcal{H}_I = -J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.1)$$

onde  $\sigma_i = \pm 1$ ,  $\forall i$ , a primeira soma é sobre vizinhos mais próximos,  $J$  é o parâmetro de troca, e  $h$  o campo magnético em unidades convenientes. A função de partição canônica é dada por

$$Z_I = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}) \quad (2.2)$$

onde  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura absoluta, e o traço representa uma soma sobre todas as configurações dos spins. O parâmetro  $J$  é uma constante, de natureza coulombiana, proveniente da justaposição das funções de onda eletrônicas.

No passado foram feitas várias tentativas de incluir as vibrações elásticas no modelo de Ising. É claro que num sólido real os íons estão vibrando termicamente e seria justo, portanto, supor que o parâmetro  $J$  refletisse estas vibrações. Uma das tentativas mais simples de incluir graus elásticos de liberdade no modelo

de Ising resulta no chamado modelo de Domb, que pode ser expresso pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J(V) \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i + \mathcal{H}_{\text{elástico}} \quad (2.3)$$

onde  $J$  é uma função do volume  $V$  da rede cristalina e  $\mathcal{H}_{\text{elástico}}$  representa a parte elástica do hamiltoniano. A função canônica de partição pode então ser escrita na forma

$$Z = Z_{\text{elástico}} Z_1(\beta J(V)) \quad (2.4)$$

onde fica evidente a separação entre os graus de liberdade magnéticos e elásticos. Na medida em que seja possível calcular  $Z_1$ , também será possível obter  $Z$  e, portanto, uma solução exata do modelo. No entanto, é fácil mostrar (ver Apêndice A) que o hamiltoniano (2.3), para formas razoáveis de  $J(V)$  e  $\mathcal{H}_{\text{elástico}}$ , conduz sempre a uma instabilidade mecânica e, portanto, a uma transição de primeira ordem.

O modelo de Domb sofreu várias críticas, pois na realidade só leva em conta as vibrações de uma forma média, através da dependência de  $J$  com  $V$ . Seria interessante considerar um modelo em que estivessem realmente incorporadas as vibrações locais, microscópicas, dos íons da rede cristalina. Por exemplo, é possível resolver exatamente um modelo unidimensional da forma

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=0}^{N-1} J(x_{i+1} - x_i) \sigma_{i+1} \sigma_i - h \sum_i \sigma_i + \mathcal{H}_{\text{elástico}} \quad (2.5)$$

onde

$$J(x_{i+1}, x_i) = J_0 - J_1 (x_{i+1} - x_i - a_0) \quad (2.6)$$

e

$$\mathcal{H}_{\text{elástico}} = \sum_i \varphi(x_{i+1} - x_i) = \sum_i [\varphi_0 + \frac{1}{2} \varphi_2 (x_{i+1} - x_i - a_0)^2] \quad (2.7)$$

ou seja,  $J$  é linear e o potencial elástico é quadrático nos deslocamentos  $x_i$ . É claro que uma solução unidimensional é pouco interessante, pois não exibe nem o fenômeno de transição de fase. No entanto, vale a pena apontar que o modelo de Domb, com  $J$  linear e a parte elástica quadrática em  $V$ , continua exibindo uma instabilidade mecânica mesmo em uma dimensão.

No intuito de incluir as vibrações microscópicas dos íons, Baker e Essam propuseram um modelo que não é verdadeiramente realista, mas que certamente evita qualquer média prévia sobre os deslocamentos. O modelo de Baker e Essam (BE) é bidimensional sob o ponto de vista magnético, mas continua sendo unidimensional sob o ponto de vista elástico. Isto se consegue mantendo-se as interações compressivas entre os íons e abandonando-se completamente o cisalhamento. Em duas dimensões, com  $J$  linear e potenciais elásticos quadráticos, o modelo de Baker e Essam pode ser resolvido exatamente e exibe apenas uma transição de segunda ordem, sem qualquer instabilidade. Temos então dois casos extremos: (1) no modelo de Domb as flutuações da rede são levadas em conta de ma

neira global, média, e a transição é de primeira ordem; (2) no modelo de Baker e Essam as flutuações são levadas em conta microscopicamente, mas são exageradas devido ao abandono das forças de cisalhamento; neste caso a transição é de segunda ordem.

No seu trabalho pioneiro Baker e Essam consideram o sistema de spins com condições de contorno fixas, com uma forma e um volume bem definidos. A solução do problema, que é feita no ensemble canônico, envolve uma integração de ponto de sela, com os resultados finais escritos de maneira pouco transparente. Uma considerável simplificação deste problema foi obtida por Gunther, Bergman e Imry (GBI), que consideraram o sistema no chamado ensemble- $\lambda$ , com condições de contorno livres. É claro que os resultados são idênticos, pois a energia livre canônica de Baker e Essam deve estar ligada à energia livre de Gibbs de Gunther, Bergman e Imry através de uma simples transformação de Legendre. Em nosso trabalho vamos então partir diretamente da formulação de GBI, admitindo apenas que o spin  $S_i$  do  $i$ -ésimo íon pode ser arbitrário. O nosso interesse se concentra no efeito de um spin maior, sujeito portanto a maiores flutuações, sobre a natureza da transição de fases. Vamos seguir uma linha semelhante aos cálculos de GBI - inicialmente serão integrados os graus elásticos de liberdade; ficaremos então com um hamiltoniano efetivo de spin que poderá ser tratado com as técnicas usuais da mecânica estatística.

## II.1 - A SOLUÇÃO DE GBI EM UMA DIMENSÃO

A título de ilustração é interessante considerar o problema em uma dimensão. De acordo com GBI, devemos fixar o primeiro spin e aplicar uma força  $\lambda$  sobre o último (ver figura abaixo)

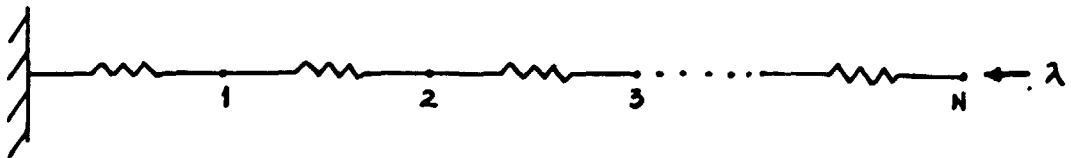


Fig. 1: N+1 osciladores unidimensionais com o primeiro fixo e com um força  $\lambda$  aplicada ao último.

A campo nulo, o hamiltoniano do sistema, incluindo o trabalho da força elástica, fica então escrito como

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=0}^{N-1} J(x_{i+1} - x_i) \sigma_i \sigma_{i+1} + \sum_{i=0}^{N-1} \psi(x_{i+1} - x_i) + \lambda(x_N - x_0) \quad (2.8)$$

onde  $x_i$  designa a posição do  $i$ -ésimo íon e  $x_0 \equiv 0$ . O termo de troca e o potencial elástico são dados por

$$J(x_{i+1} - x_i) = J_0 - J_1 (x_{i+1} - x_i - a_0) \quad (2.9)$$

$$\psi(x_{i+1} - x_i) = \psi_0 + \frac{1}{2} \psi_2 (x_{i+1} - x_i - a_0)^2 \quad (2.10)$$

onde  $J_0$ ,  $J_1$  e  $\psi_0$  têm sinais arbitrários, mas  $\psi_2$  é positivo.

No ensemble  $\lambda$  ( que, no caso unidimensional corresponde ao conhecido ensemble das pressões) a função de partição é dada por:

$$\gamma(T, \lambda, N) = \text{Tr} \int dx_1 \dots \int dx_N \exp(-\beta \mathcal{H}) \quad (2.11)$$

Devido às condições de contorno que estamos adotando, fica muito fácil realizar as integrais sobre as posições. Basta observar que

$$x_N - x_0 = (x_N - x_{N-1}) + (x_{N-1} - x_{N-2}) + \dots + (x_1 - x_0) \quad (2.12)$$

e fazer a mudança de variáveis

$$x_i - x_{i-1} \equiv y_i \quad ; \quad i=1, \dots, N \quad (2.13)$$

Temos assim uma integral totalmente fatorizada,

$$\gamma = \text{Tr} \prod_{i=1}^N \int dy_i \prod_i \exp \{ \beta J(y_i) \sigma_i \sigma_{i+1} - \beta \varphi(y_i) - \beta \lambda y_i \} \quad (2.14)$$

Como estamos considerando apenas pequenas vibrações, a integral em  $y_i$  é uma simples gaussiana, dada por

$$\int dy_i \exp\{ \beta J(y_i) \sigma_i \sigma_{i+1} - \beta \varphi(y_i) - \beta \lambda y_i \} =$$

$$= \left( \frac{2\pi}{\beta \varphi_2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{ \beta \left( J_0 + \frac{J_1 \lambda}{\varphi_2} \right) \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta \frac{J_1^2}{2\varphi_2} \sigma_i^2 \sigma_{i+1}^2 - \beta \left( \varphi_0 - \frac{\lambda^2}{2\varphi_2} + \lambda a_0 \right) \right\}$$

(2.15)

Frente a este resultado podemos escrever  $Y$  na forma

$$Y = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_\varphi - \beta N f(\lambda)} \left( \frac{2\pi}{\beta \varphi_2} \right)^{\frac{N}{2}}$$

(2.16)

onde  $f(\lambda)$  é uma função regular de  $\lambda$ . Qualquer anomalia termodinâmica será então provovada pelo hamiltoniano efetivo de spin no ensemble  $\lambda$ ,

$$\mathcal{H}_\varphi = - \left( J_0 + \frac{J_1 \lambda}{\varphi_2} \right) \cdot \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{J_1^2}{2\varphi_2} \sum_i \sigma_i^2 \sigma_{i+1}^2$$

(2.17)

No caso de spin  $\frac{1}{2}$ , ou seja, quando  $\sigma = \pm 1, \forall i$ , o segundo termo é uma mera constante e o problema se reduz à solução do modelo de Ising usual. Como sabemos, em uma dimensão não há qualquer anomalia termodinâmica. Com spin arbitrário, ainda podemos utilizar o argumento de Landau para provar que não há transição. Portanto, o caso unidimensional serve apenas como uma ilustração do nosso método.

II.2 - A SOLUÇÃO DE GBI EM DUAS OU MAIS DIMENSÕES

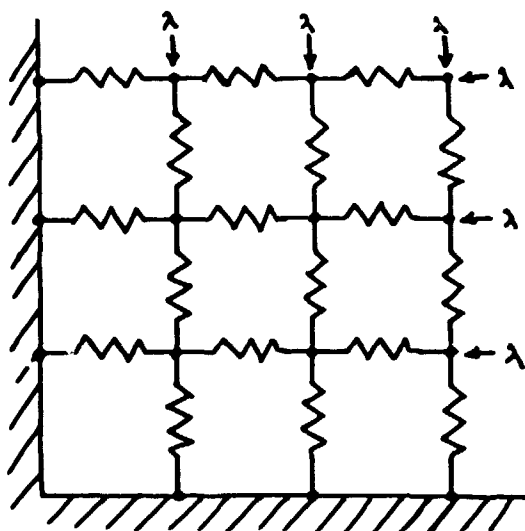


Fig.2:  $N^1 \times N^1$  osciladores acoplados magneticamente. O acoplamento elástico, no entanto, é unidimensional.

Vamos inicialmente considerar um caso bidimensional, com as condições de contorno indicadas na figura acima. Um sítio da rede será indicado pelo par de coordenadas  $(i,j)$ , nas direções  $x$  e  $y$  respectivamente. No modelo de BE só se levam em conta os termos compressivos. A interação entre os pares  $(i,j)$  e  $(i+1,j)$  será então dada por

$$-J (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \sigma_{i+1,j} \sigma_{i,j} + \varphi (x_{i+1,j} - x_{i,j}) \quad (2.18)$$

A interação entre  $(i,j)$  e  $(i, j+1)$  será dada por

$$-J (y_{i,j+1} - y_{i,j}) \sigma_{i,j+1} \sigma_{i,j} + \varphi (y_{i,j+1} - y_{i,j}) \quad (2.19)$$

onde a posição do sítio genérico  $(i,j)$  é dada por

$$\vec{r}_{i,j} = x_{i,j} \hat{x} + y_{i,j} \hat{y} \quad (2.20)$$



( $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  são os versores unitários nas direções  $x$  e  $y$  respectivamente). No hamiltoniano ainda comparece o trabalho das forças  $\lambda$ , dado por

$$\sum_{i=1}^N \{ +\lambda(x_{N,i} - x_{0,i}) + \lambda(y_{L,N} - y_{i,0}) \} \quad (2.21)$$

onde  $x_{0,i} = y_{0,i} = 0, \forall i$ . Podemos então escrever o hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i,j} [-J(x_{i+1,j} - x_{i,j})\sigma_{i+1,j}\sigma_{i,j} - J(y_{i,j+1} - y_{i,j})\sigma_{i,j+1}\sigma_{i,j}] + \\ & + \sum_{i,j} [\varphi(x_{i+1,j} - x_{i,j}) + \varphi(y_{i,j+1} - y_{i,j})] + \\ & + \sum_{i=1}^N \lambda(x_{N,i} - x_{0,i}) + \lambda(y_{i,N} - y_{i,0}) \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde

$$J(t) = J_0 - J_1 (t - a_0), \quad (2.23)$$

$$\varphi(t) = \varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_2 (t - a_0)^2 \quad (2.24)$$

$$\text{com } t = x_{i+1,j} - x_{i,j} \text{ ou } t = y_{i,j+1} - y_{i,j}. \quad (2.25)$$

A função de partição é dada por

$$Y = \text{Tr} \prod_{ij} \int dx_{i,j} dy_{i,j} \exp(-\beta \mathcal{H}) \quad (2.26)$$

Levando em conta apenas as interações compressivas, as integrais nas posições podem ser tratadas de forma idêntica ao caso unidimensional. Sob o ponto de vista elástico cada linha ou coluna não interage com os seus vizinhos e pode ser tratada separadamente. Como no caso unidimensional, o problema se fatoriza e acabamos com um hamiltoniano efetivo da forma

$$\mathcal{H}_{\text{ef}} = -J_2 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}'} - J_4 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}'')} \sigma_{\vec{l}}^2 \sigma_{\vec{l}''}^2 \quad (2.27)$$

onde

$$J_2 = J_0 + \frac{J_1 \lambda}{\phi_2} \quad , \quad (2.28)$$

$$J_4 = \frac{J_1^2}{2\phi_2} \quad , \quad (2.29)$$

$\vec{l}$  designa agora um sítio da rede e  $(\vec{l}, \vec{l}')$  indica um par de vizinhos mais próximos. Pode-se facilmente verificar que uma forma deste tipo acaba sendo obtida para um modelo definido sobre uma rede hipercúbica simples de dimensionalidade arbitrária. Fica então mais claro adotar a notação da Eq.(2.27), sem dar grande importância à dimensão euclidiana em que estamos trabalhando.

No caso de spin  $\frac{1}{2}$  o termo biquadrático é

uma constante e o cálculo da função de partição  $Y$  é bem mais simples. Em  $d=2$  temos a solução exata de Onsager, com uma transição de segunda ordem para

$$\beta J_2 = \beta \left( J_0 + \frac{J_1 \lambda}{\varphi_2} \right) = c \quad (2.30)$$

onde  $c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2})$ . Portanto, no plano  $\lambda \times T$  o diagrama de fases será dado pela figura abaixo. Há apenas uma linha do tipo  $\lambda$ , de transições de segunda ordem.

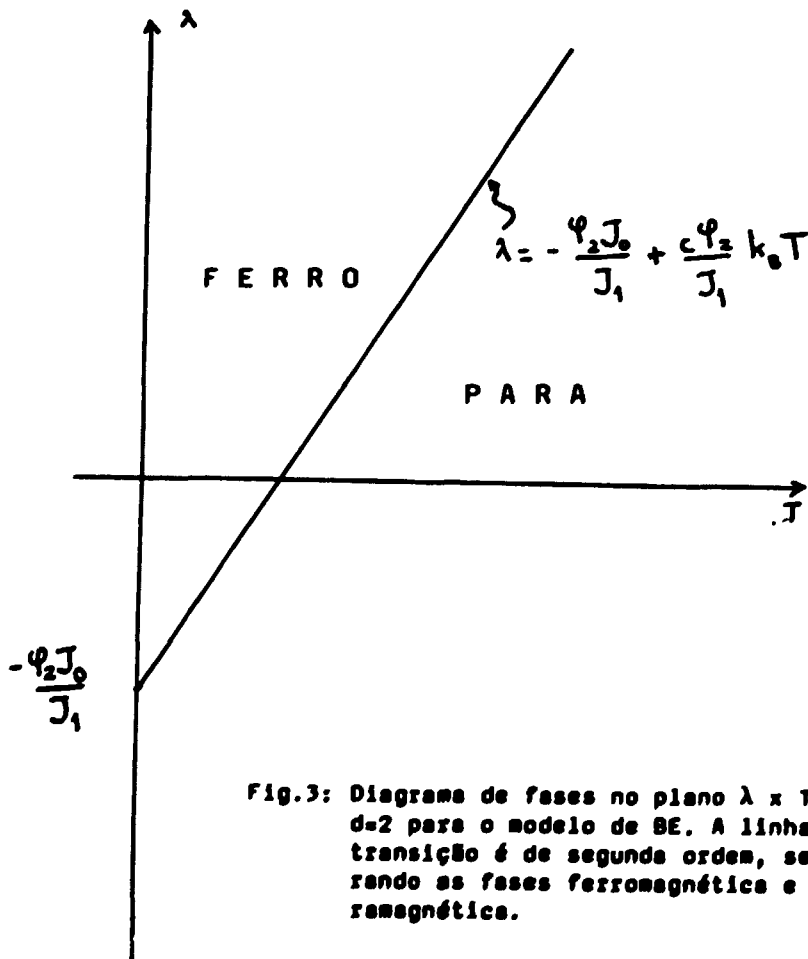


Fig.3: Diagrama de fases no plano  $\lambda \times T$  em  $d=2$  para o modelo de BE. A linha de transição é de segunda ordem, separando as fases ferromagnética e paramagnética.

Em três dimensões, embora não se disponha de uma solução exata, é possível, através de expansões em séries estabelecer que a transição é de segunda ordem e obter a constante  $c$  com vários significativos. Isto significa que, qualitativamente, temos o mesmo tipo de diagrama de fases.

A situação fica interessante para um valor arbitrário do spin, quando não podemos desprezar as interações biquadráticas. Na próxima secção vamos considerar o caso mais simples possível, em que o spin pode assumir os valores  $+1$ ,  $0$  ou  $-1$ . Na realidade o hamiltoniano (2.27) neste caso não passa de um caso particular do chamado modelo de Blume-Emery-Griffiths, proposto inicialmente num contexto completamente diferente.

### CAPÍTULO III

III - O MODELO DE BAKER - ESSAM COM SPIN 1

Vamos considerar nesta secção o hamiltoniano efetivo correspondente ao modelo de Baker-Essam no ensemble  $\lambda$ ,

$$H_{ef} = -J_2 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}'}, - J_4 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \sigma_{\vec{l}}^2 \sigma_{\vec{l}'}^2, - h \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}} \quad (3.1)$$

onde a soma  $(\vec{l}, \vec{l}')$  é sobre vizinhos mais próximos e estamos adicionando um termo de campo. Com spin 1, o hamiltoniano (3.1) é um caso particular do modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG), dado por

$$H_{BEG} = -J_2 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}'}, - J_4 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \sigma_{\vec{l}}^2 \sigma_{\vec{l}'}^2, + \Delta \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}}^2 -$$

$$- h \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}}^2 - H_3 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \frac{1}{2} (\sigma_{\vec{l}} + \sigma_{\vec{l}'}) \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}'}, \quad (3.2)$$

Estamos, portanto, considerando o modelo BEG com  $\Delta=H_3=0$ . No apêndice B vamos fazer algumas observações sobre o trabalho original de BEG, que se concentra no caso  $H_3=0$ , com  $J_4$  muito pequeno ou nulo.

A solução de campo médio do nosso problema pode ser obtida através da desigualdade de Bogoliubov

$$F(\mathcal{H}) \leq F_0(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \equiv \Phi_0 \quad (3.3)$$

onde  $F(\mathcal{H})$  é a energia livre correspondente ao hamiltoniano  $\mathcal{H}$ ,  $F_0(\mathcal{H}_0)$  é a energia livre correspondente ao hamiltoniano de tentativa  $\mathcal{H}_0$ , e o valor esperado  $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$  deve ser tomado com respeito a um ensemble definido por  $\mathcal{H}_0$ . Devido à estrutura do hamiltoniano (3.1), é natural considerar um hamiltoniano de tentativa da forma

$$\mathcal{H}_0 = - \eta \sum_{\vec{r}} \sigma_{\vec{r}} \quad (3.4)$$

onde  $\sigma_{\vec{r}} = +1, 0, -1, \forall \vec{r}$ . Assim temos:

$$F_0(\mathcal{H}_0) = - k_B T N \ln [ e^{-\beta \eta} + e^{\beta \eta} + 1 ] \quad (3.5)$$

e

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{1}{2} J_2 q N m_1^2 - \frac{1}{2} J_4 q N m_2^2 - (h - \eta) N m_1 \quad (3.6)$$

onde  $q$  é o número de coordenação da rede e as funções  $m_1$  e  $m_2$  são dadas por

$$m_1 \equiv \frac{e^{\beta \eta} - e^{-\beta \eta}}{e^{\beta \eta} + e^{-\beta \eta} + 1} \quad (3.7)$$

e

$$m_2 = \frac{e^{\beta\eta} + e^{-\beta\eta}}{e^{\beta\eta} + e^{-\beta\eta+1}} \quad (3.8)$$

Temos, portanto, o lado direito da desigualdade (3.3),  $\Phi$ , como função do parâmetro  $\eta$ . A aproximação de campo médio consiste em minimizar  $\Phi$  com respeito a  $\eta$  e tomar o mínimo de  $\Phi$  como a energia livre do sistema. Alternativamente, podemos escrever  $\Phi$  como função da magnetização  $m_1$  ao invés do parâmetro  $\eta$  (pois  $m_1$  e  $\eta$  estão relacionados através da Eq.(3.7)). Neste caso é interessante, ao invés de minimizar  $\Phi$  com respeito a  $m_1$ , obter inicialmente uma série de potências para  $\Phi$  no estilo da expansão de Landau para transições de segunda ordem. Assim, a campo nulo ( $H=0$ ), o nosso objetivo consiste em escrever:

$$\Phi = N\Phi_0 + ANm_1^2 + BNm_1^4 + CNm_1^6 + \dots \quad (3.9)$$

Para  $A=0$  com  $B>0$  temos uma transição de segunda ordem. Por outro lado, para  $A=B=0$ , com  $C>0$  temos um ponto tricrítico.

Com um pouco de trabalho algébrico é possível escrever  $\Phi$  na forma (3.9) com os coeficientes

$$\Phi_0 = -k_B T \ln 3 - \frac{2}{9} J_4 q \quad (3.10)$$



$$A = \frac{3}{4} k_B T - \frac{1}{6} q J_4 - \frac{1}{2} q J_2 \quad (3.11)$$

$$B = \frac{9}{64} k_B T - \frac{1}{16} q J_4 \quad (3.12)$$

$$C = \frac{33}{153} k_B T - \frac{3}{128} q J_4 \quad (3.13)$$

A linha crítica será dada por  $A=0$ , isto é,

$$\frac{k_B T}{q J_2} = \frac{2}{9} \frac{J_4}{J_2} + \frac{2}{3} \quad (3.14)$$

com  $B > 0$ , ou seja,

$$k_B T > \frac{4}{9} q J_4 \quad (3.15)$$

Introduzindo as definições

$$\frac{k_B T}{q J_2} \equiv t \quad (3.16)$$

$$\frac{J_4}{J_2} \equiv p \quad (3.17)$$

temos um linha de pontos críticos

$$t = \frac{2}{9} p + \frac{2}{3} \quad (3.18)$$

que, para  $J_2 > 0$ , termina no ponto tricrítico

$$t = \frac{4}{3} \quad \text{e} \quad p = 3$$

Para  $p > 3$ , a transição de primeira ordem só pode ser determinada numericamente (ver figura 4)

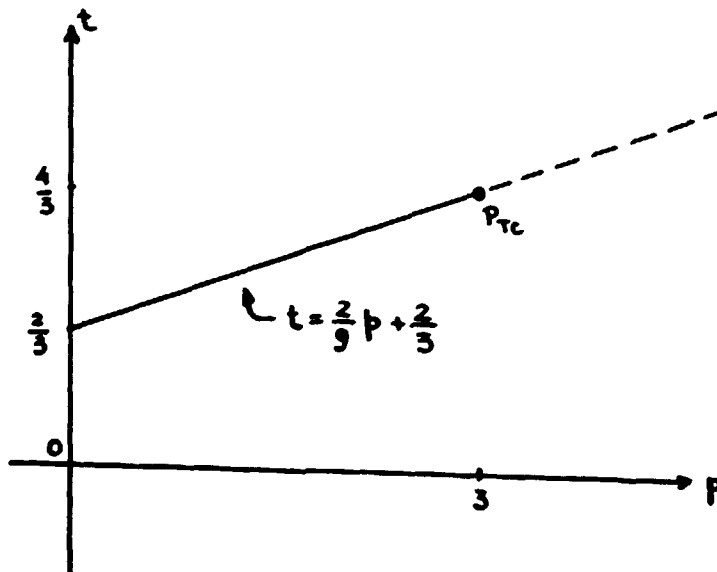


Fig.4 :Diagrama de fases no plano  $t \times p$  para o modelo BEG com  $\Delta = H_3 = H = 0$ . Para  $p > 3$  temos uma linha de transições de primeira ordem (tracejada). A linha cheia é de segunda ordem.

Exceto nas vizinhanças do ponto tricrítico, a linha de primeira ordem só pode ser obtida numericamente. Neste caso a expansão de Landau é de pouca valia. Vamos então minimizar  $\Phi$  com respeito a  $\eta$ . É fácil verificar que  $\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} = 0$  equivale à equação

$$x = \frac{2 \sinh\left(\frac{x}{t}\right) \left[ 2(p+1) \cosh\left(\frac{x}{t}\right) - 4 \right]}{2 \cosh\left(\frac{x}{t}\right) \left[ 4 \cosh\left(\frac{x}{t}\right) + 5 \right] + 5} \quad (3.19)$$

onde  $x = \beta \eta$ . Pode-se notar que  $x=0$  é uma solução sempre (solução trivial ou paramagnética). No entanto, dados  $t$  e  $p$  poderá haver uma ou mais soluções diferentes de zero. Quando houver duas ou mais soluções diferentes de zero temos que verificar qual delas é que corresponde a um mínimo de  $\Phi$ . A curva de primeira ordem é obtida quando a solução paramagnética e duas soluções ferromagnéticas correspondem ao mesmo valor de  $\Phi$ . Desta forma é que obtivemos a linha tracejada da figura 5.

Utilizando as expressões (2.28) e (2.29) para  $J_2$  e  $J_4$  é fácil obter o diagrama de fases no plano  $\lambda \times T$ . A linha crítica, Eq.(3.14), será dada por

$$\lambda = \frac{3\varphi_2 k_0}{2\varphi J_1} T - \frac{\varphi_2 J_0}{J_1} - \frac{1}{6} J_1 \quad (3.20)$$

com

$$k_B T > \frac{4}{9} \varphi \frac{J_1^2}{2\varphi_2} \quad (3.21)$$

O ponto tricrítico será então dado por

$$T_{TC} = \frac{2\varphi J_1^2}{9\varphi_2 k_B} \quad \lambda_{TC} = \frac{1}{6} J_1 - \frac{\varphi_2 J_0}{J_1} \quad (3.22)$$

O diagrama  $\lambda \times T$  está esboçado na figura 5.

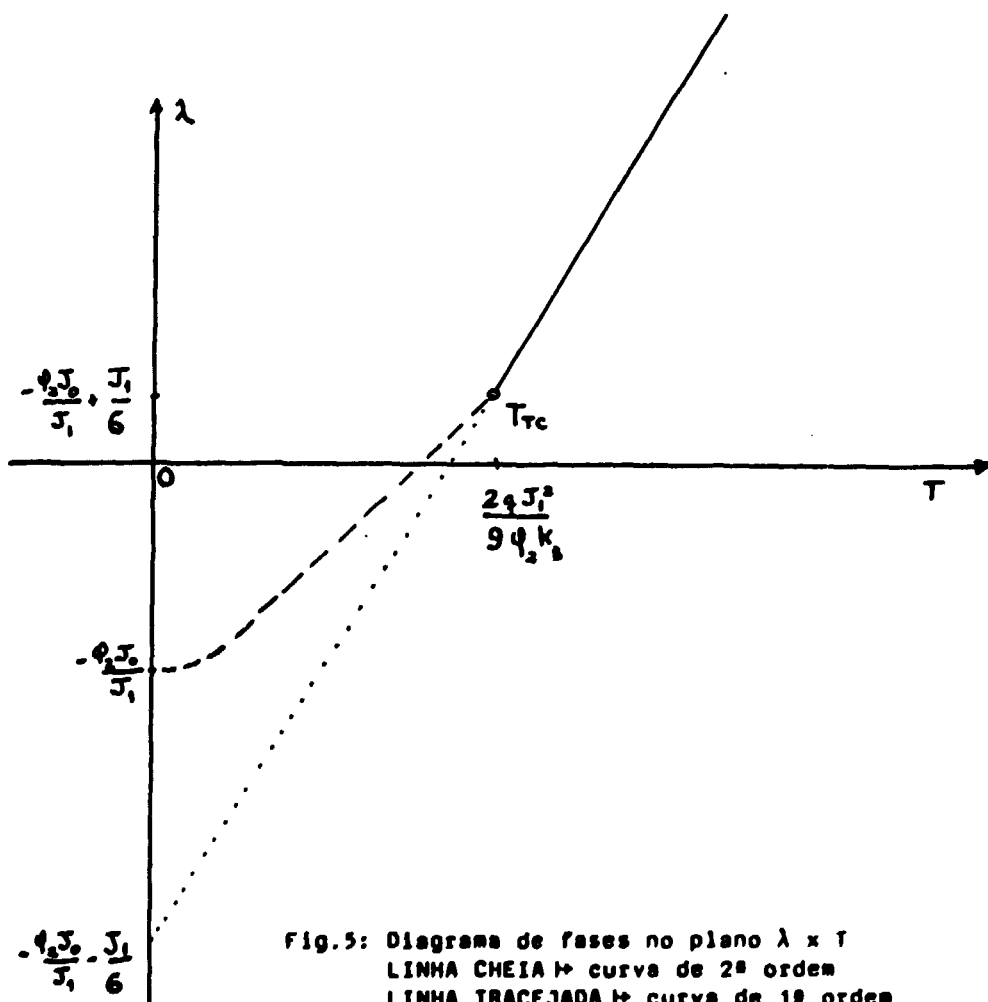


Fig.5: Diagrama de fases no plano  $\lambda \times T$   
 LINHA CHEIA  $\rightarrow$  curva de 2ª ordem  
 LINHA TRACEJADA  $\rightarrow$  curva de 1ª ordem  
 $T_{TC}$   $\rightarrow$  ponto tricrítico

Verificamos, portanto, que no modelo de BE maiores flutuações de spin podem conduzir, na aproximação mais simples de campo médio, a um ponto tricrítico e a transições de primeira ordem. Resta, no futuro, verificar se estas características permanecem num cálculo mais sofisticado.

CAPÍTULO IV

#### IV - CONCLUSÕES

Para transformar o modelo de Ising num modelo mais realista é necessário incluir as vibrações elásticas dos íons. Neste sentido, duas linhas de trabalho foram seguidas. Uma, a proposta por Domb, na qual as vibrações da rede cristalina são tomadas de uma forma média, através da dependência da constante de acoplamento  $J$  com o volume  $V$ . Como vimos no apêndice A, esta maneira de abordar o problema conduz, no caso do modelo de Ising, a uma instabilidade mecânica, gerando sempre uma transição de primeira ordem. A outra linha de trabalho foi a proposta por Baker e Essam, que evitaram tomar qualquer média prévia sobre os deslocamentos, considerando as vibrações locais, microscópicas, dos íons da rede cristalina, mas abandonando totalmente as forças de cisalhamento; neste caso, a transição é de segunda ordem.

Gunther, Bergman e Imry simplificaram consideravelmente o problema de Baker e Essam ao utilizarem o chamado ensemble  $\lambda$ , com condições de contorno livres. Baker e Essam, ao fixarem as condições de contorno, com uma forma e um volume bem definidos, usaram o ensemble canônico. Dada a equivalência dos resultados nos dois ensembles, partimos diretamente da formulação de Gunther, Bergman e Imry, admitindo apenas que o spin  $S_i$  do  $i$ -ésimo íon pode ser arbitrário, porque nosso interesse é o de analisar o papel que desempenham as flutuações dos spins sobre a natureza das transições de fase.

Quando integramos o hamiltoniano original nos graus elásticos de liberdade, obtemos um hamiltoniano

efetivo de spins que pode ser tratado pelas técnicas usuais da mecânica estatística. Consideramos o acoplamento dos spins linear e o potencial elástico quadrático nos deslocamentos. Nesta condições, em uma dimensão, o hamiltoniano efetivo de spins é dado pela equação (2.17)

$$\mathcal{H}_{\text{ef}} = - \left( J_0 + \frac{J_1 \lambda}{\phi_2} \right) \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{J_1}{2\phi_2} \sum_i \sigma_i^2 \sigma_{i+1}^2$$

No caso de spin  $\frac{1}{2}$ , isto é,  $\sigma_i = \pm 1, \forall i$ , o segundo termo é uma constante e o problema se reduz ao modelo de Ising usual, que em uma dimensão não possui nenhuma anomalia termodinâmica. Com spin arbitrário, podemos utilizar o argumento de Landau para mostrar que não há transição de fase, servindo o caso unidimensional apenas como ilustração do método que usamos. Em duas dimensões, o hamiltoniano efetivo é dado pela equação (2.27)

$$\mathcal{H}_{\text{ef}} = - \left( J_0 + \frac{J_1 \lambda}{\phi_2} \right) \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \sigma_{\vec{r}} \sigma_{\vec{r}'} - \left( \frac{J_1^2}{2\phi_2} \right) \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \sigma_{\vec{r}}^2 \sigma_{\vec{r}'}^2$$

É fácil verificar que se obtem um hamiltoniano efetivo com a mesma forma para um modelo definido sobre uma rede hipercúbica simples de dimensionalidade arbitrária. Para o caso de spin  $\frac{1}{2}$ , o termo quadrático é uma constante. Em duas dimensões, a solução é exata. No plano  $\lambda \times T$  o diagrama de fases apresenta uma única linha do tipo  $\lambda$  de tran



sições de segunda ordem. Em três dimensões, a solução não é exata, mas com técnicas de expansões em séries pode-se estabelecer que a transição é de segunda ordem. Temos, qualitativamente, o mesmo tipo de diagrama de fases.

O spin arbitrário mais simples é quando ele toma valores +1, 0, -1. O hamiltoniano efetivo de spins correspondente ao modelo Baker e Essam no ensemble  $\lambda$  com este valor de spin é um caso particular do modelo de Blume, Emery e Griffiths. Inicialmente, obtivemos a energia livre  $\phi$  na forma de série de potências da magnetização, nos moldes da expansão de Landau para transições de segunda ordem, a campo externo nulo. Obtivemos a linha crítica dada pela equação (3.18)

$$t = \frac{2}{9} p + \frac{2}{3}$$

com  $p = \frac{J_4}{J_2^2}$  e  $t = \frac{k_B T}{qJ_2}$ . Esta linha crítica termina no ponto tricrítico dado por  $t = \frac{4}{3}$  e  $p = 3$ . A curva de transição de primeira ordem foi determinada numericamente.

Assim, concluímos que no modelo de Baker e Essam, maiores flutuações no spin podem conduzir, na aproximação de campo médio, a um ponto tricrítico e a transições de primeira ordem. Resta agora saber se uma análise mais rigorosa do hamiltoniano de Baker e Essam continua apontando nesta direção.

**A P Ê N D I C E A**

## APÊNDICE A - O MODELO DE DOMB

O modelo de Ising é definido sobre uma rede cristalina rígida - os spins são produzidos por íons magnéticos rigidamente associados aos sítios da rede cristalina. Num sólido real, no entanto, é mais correto supor que os íons estejam vibrando termicamente em torno de uma posição média de equilíbrio. Domb inclui estas vibrações elásticas no parâmetro de troca  $J$ , através da sua dependência com o volume  $V$ . Neste sentido, Domb leva em conta as vibrações de uma forma global, desprezando os movimentos locais, microscópicos, dos íons da rede. Vamos mostrar que o hamiltoniano de Domb, dado pela Eq.(2.3), com  $J(V)$  linear e a parte elástica,  $\mathcal{H}_{\text{elástico}}$ , quadrática nos volumes, conduz a uma instabilidade mecânica e, portanto, a transições de primeira ordem. Inicialmente vamos resolver o modelo de Domb em uma dimensão; a seguir vamos tratá-lo em duas ou mais dimensões.

### A1 - O MODELO DE DOMB UNIDIMENSIONAL

Em uma dimensão o hamiltoniano (2.3) pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H} = -J(a) \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \sigma_i + N\phi(a), \quad (\text{A.1})$$

com

$$J(a) = J_0 - J_1(a - a_0) \quad (\text{A.2})$$

e

$$\varphi(a) = \varphi_0 + \frac{1}{2} \varphi_2 (a - a_0)^2 \quad (\text{A.3})$$

A campo nulo, a função de partição é dada por

$$Z = \exp[-\beta N \varphi(a)] Z_I[\beta J(a)] \quad (\text{A.4})$$

onde  $Z_I(K)$  é a função de partição do modelo de Ising rígido em uma dimensão,

$$Z_I(K) = (2 \cosh K)^N \quad (\text{A.5})$$

A partir da Eq.(2.4) temos a energia livre

$$F = N \varphi(a) - k_B T N \ln \{2 \cosh[\beta J(a)]\}, \quad (\text{A.6})$$

donde podemos obter uma equação de estado para a pressão:

$$p \equiv -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial a} = -\varphi_2 (a - a_0) - J_1 \tanh[\beta J(a)] \quad (\text{A.7})$$

A Eq.(A.7) pode ser resolvida graficamente - isto é, dados  $p$  e  $T$ , podemos calcular  $a$  (ver a figura 6)

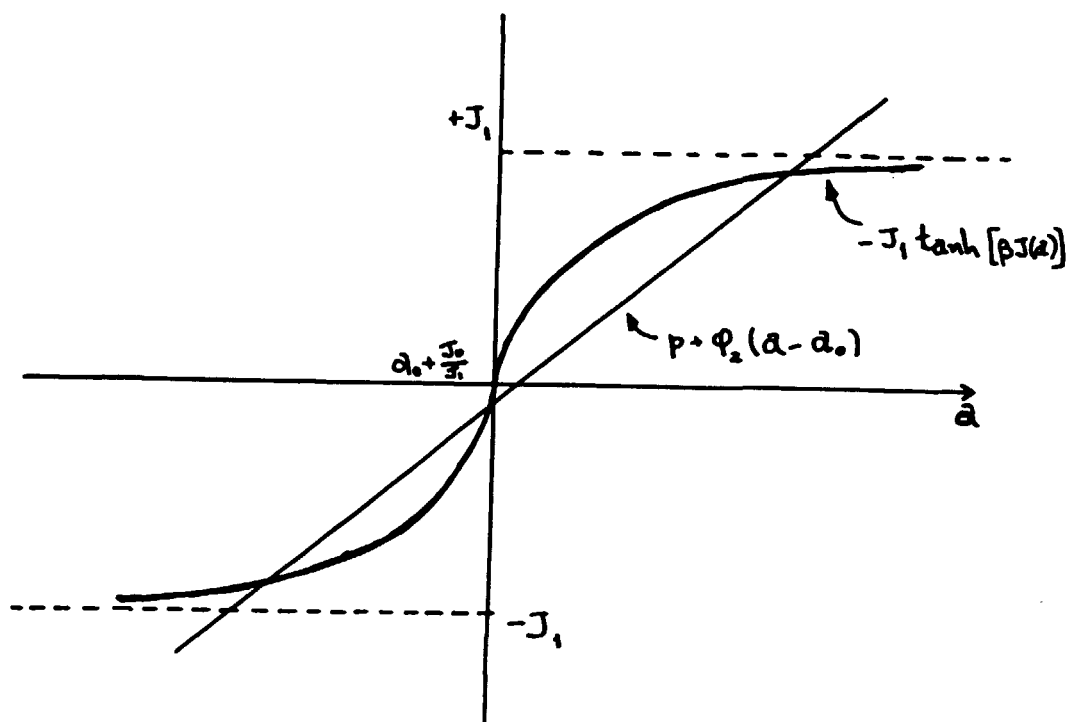


Fig.6: Resolução gráfica da equação A.7

Dependendo dos valores de  $p$  e  $T$  podemos ter apenas uma solução ou então três soluções. Quanto tivermos três soluções precisaremos substituí-las na Eq.(A.6) para verificar qual delas produz a menor energia livre. Este processo, que deve ser feito numericamente, corresponde à conhecida construção de Maxwell que se utiliza para estudar as soluções múltiplas da equação de Van der Waals. A transição se verifica quando duas soluções forem idênticas (coexistência de fases) - isto só pode ocorrer quando a função  $p + \varphi_2(a - a_0)$  se anular para  $a = a_0 + \frac{J_0}{J_1}$ . Então temos uma linha de coexistência de fases dada por

$$p + \varphi_2 \left[ a_0 + \frac{J_0}{J_1} - a_0 \right] = 0 \quad , \quad (\text{A.8})$$

ou seja

$$p = - \frac{\varphi_2 J_0}{J_1} \quad (\text{A.9})$$

Por outro lado, quando a tangente da reta  $p + \varphi_2(a - a_0)$  for superior à tangente da curva  $-J_1 \tanh [\beta J(a)]$  no ponto  $a = a_0 + \frac{J_0}{J_1}$ , só haverá uma solução trivial ( $a = a_0 + \frac{J_0}{J_1}$ ). Temos então um temperatura crítica:

$$\varphi_2 = -J_1 \frac{-\beta J_1}{\cosh^2[\beta J(a)]} \Bigg|_{a = a_0 + \frac{J_0}{J_1}} = \frac{J_1^2}{k_B T_c} \quad (\text{A.10})$$

ou seja,

$$T_c = \frac{J_1^2}{k_B \varphi_2} \quad (\text{A.11})$$

Estas considerações nos levam ao diagrama de fases da figura 7

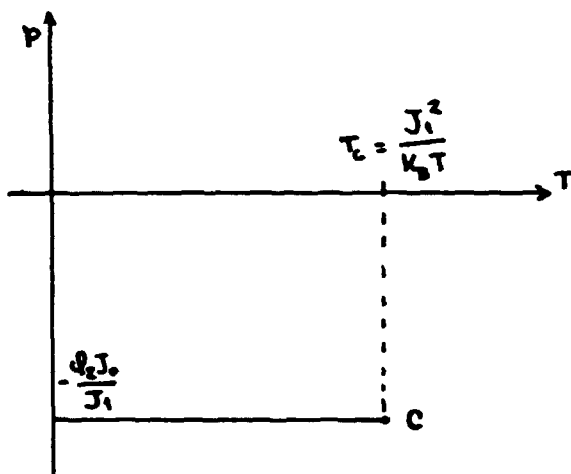


Fig.7: Diagrama de fases no plano  $p \times T$ .  
 A linha cheia representa um "locus"  
 de transições de primeira ordem que  
 terminam no ponto crítico C.

A instabilidade mecânica no modelo de Domb também pode ser facilmente constatada pela análise da derivada  $\left(\frac{\partial p}{\partial a}\right)_T$ . Assim temos:

$$\frac{\partial p}{\partial a} = -\phi_2 + \frac{\beta J_1^2}{\cosh^2[\beta J(a)]} \quad (\text{A.12})$$

O segundo termo da equação é positivo e, para temperaturas suficientes baixas, pode ser maior do que  $\phi_2$ , gerando desta forma uma instabilidade mecânica no sistema. Para qualquer valor de spin, superior a  $\frac{1}{2}$ , todas as nossas con-  
clusões permanecem essencialmente inalteradas.

A2 - MODELO DE DOMB PARA  $d \geq 2$ 

O hamiltoniano de Domb a campo nulo pode ser escrita na forma

$$\mathcal{H} = -J(V) \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j + N\varphi(V) \quad (\text{A.13})$$

onde

$$J(V) = J_0 - \frac{J_1}{N}(V - V_0) \quad (\text{A.14})$$

e

$$\varphi_2 = \varphi_0 + \frac{1}{2} \varphi_2 \frac{1}{N^2} (V - V_0)^2, \quad (\text{A.15})$$

onde  $V$  representa o hipervolume na dimensão considerada,  $N$  é o número de spin, e a somatória é feita sobre os pares de primeiros vizinhos.

A função canônica de partição será dada por

$$Z = \exp\left[-\frac{\beta\varphi_2}{2N} (V - V_0)^2\right] Z_1(K) \quad (\text{A.16})$$

onde  $K = \beta J(V)$ , e  $Z_1(K)$  é a função de partição do modelo de Ising rígido numa rede hipercúbica de dimensão  $d$ . A energia livre é dada por



$$F = \frac{1}{2N} \varphi_2 (V - V_0)^2 - k_B T \ln Z_I(K) \quad (\text{A.17})$$

donde calculamos a pressão

$$p = -\frac{\partial F}{\partial V} = -\frac{\varphi_2}{N} (V - V_0) - \frac{J_1}{N} \frac{\partial}{\partial K} \ln Z_I(K), \quad (\text{A.18})$$

e a compressibilidade isotérmica,

$$\frac{\partial p}{\partial V} = -\frac{1}{N} \varphi_2 + \frac{\beta J_1^2}{N^2} \frac{\partial^2 \ln Z_I(K)}{\partial K^2}. \quad (\text{A.19})$$

Para estudar o sinal desta última expressão, basta considerar a função de partição do modelo de Ising rígido,

$$Z_I = \text{Tr} \exp \left[ \beta J \sum_{(ij)} \sigma_i \sigma_j \right] \quad (\text{A.20})$$

A energia interna será dada por

$$U_I \equiv -\frac{\partial \ln Z_I}{\partial \beta} = -\left[ \frac{\partial}{\partial K} \ln Z_I(K) \right] J. \quad (\text{A.21})$$

Então, o calor específico é

$$C_1 \equiv \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial K} \frac{-J}{k_B T^2} = -\frac{J}{N k_B T^2} \frac{\partial U}{\partial K} = \frac{J^2}{N k_B T^2} \left[ \frac{\partial^2}{\partial K^2} \ln Z_1(K) \right]$$

(A.22)

Substituindo na Eq.(A.19) temos

$$N \frac{\partial P}{\partial V} = -\varphi_2 + \frac{J^2 k_B^2}{K^2} C_1(K)$$

(A.23)

Como  $C_1(K)$  é positivo e diverge na temperatura crítica,  $K = K_c$ , vamos sempre ter uma faixa de temperaturas em que  $\frac{\partial P}{\partial V}$  se torna positivo e o sistema fica mecanicamente instável.

**A P E N D I C E B**

## APÊNDICE B - O MODELO BEG

O hamiltoniano estudado no trabalho de Blume, Emery e Griffiths é dado pela expressão

$$\mathcal{H} = -J_2 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \sigma_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}'} - J_4 \sum_{(\vec{l}, \vec{l}')} \sigma_{\vec{l}}^2 \sigma_{\vec{l}'}^2 + \Delta \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}}^2 - h \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}} \quad (\text{B.1})$$

onde  $\sigma_{\vec{l}} = +1, 0, -1, \forall \vec{l}$ , e a soma  $(\vec{l}, \vec{l}')$  deve ser feita sobre os vizinhos mais próximos de uma rede cúbica simples.

A solução do modelo de BEG na aproximação de campo médio pode ser obtida através da chamada desigualdade de Bogoliubov,

$$F(\mathcal{H}) \leq F_0(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 \quad (\text{B.2})$$

onde  $F(\mathcal{H})$  é a energia livre do sistema e  $F(\mathcal{H}_0)$  é uma energia livre correspondente ao hamiltoniano de tentativa  $\mathcal{H}_0$ . Inicialmente nós utilizamos um hamiltoniano de tentativa do tipo

$$\mathcal{H}_0 = -\eta \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}} \quad (\text{B.3})$$

e verificamos, com surpresa, que não é possível obter um ponto tricrítico no espaço  $\frac{kT}{J_2} \times \frac{\Delta}{J_2}$  (com  $J_4 = h = 0$ ). Refizemos depois os cálculos, com um hamiltoniano de tentativa mais sofisticado, incluindo o termo de campo cristalino,

$$\mathcal{H}_0 = -\eta \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}} + \Delta \sum_{\vec{l}} \sigma_{\vec{l}}^2 \quad (\text{B.4})$$

e obtivemos os resultados do trabalho de Blume, Emery e Griffiths. Este apêndice tem o propósito de apontar este fato e evidenciar o papel crucial do hamiltoniano de tentativa. No caso do modelo de Baker-Essam (em que  $\Delta = 0$ ) isto não é importante. Entretanto, é preciso ter em mente que, no caso destes modelos, uma alteração no hamiltoniano de tentativa pode levar a resultados qualitativamente distintos.

#### B.1 - HAMILTONIANO DE TENTATIVA INCLUINDO APENAS UM CAMPO LIVRE

Vamos considerar  $\mathcal{H}_0$  dado pela Eq.(B.3). Então temos

$$F_0(\mathcal{H}_0) = -Nk_b T \ln[e^{\beta\eta} + e^{-\beta\eta} + 1] \quad (\text{B.5})$$

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = -\frac{1}{2} N q J_2 m_1^2 + \Delta N m_2 - \frac{1}{4} J_4 q N m_2^2 + (\eta - h) N m_1 \quad (\text{B.6})$$

com

$$m_1 = \frac{e^{\beta\eta} - e^{-\beta\eta}}{e^{\beta\eta} + e^{-\beta\eta} + 1} \quad (\text{B.7})$$

e

$$m_2 = \frac{e^{\beta\eta} + e^{-\beta\eta}}{e^{\beta\eta} + e^{-\beta\eta} + 1} \quad (\text{B.8})$$

Definindo  $\Phi \equiv F_0(\mathcal{H}_0) + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0$ , podemos obter, a campo nulo, o desenvolvimento em série

$$\Phi = N \Phi_0 + A N m_1^2 + B N m_1^4 + C N m_1^6 + \dots \quad (\text{B.9})$$

onde

$$\Phi_0 = -k_B T \ln 3 - \frac{2}{9} q J_4 + \frac{2}{3} \Delta \quad (\text{B.10})$$

$$A = \frac{3}{4} k_B T - \frac{1}{6} J_4 + \frac{1}{4} \Delta - \frac{1}{2} q J_2 \quad (\text{B.11})$$

$$B = \frac{9}{64} k_B T - \frac{1}{16} q J_4 + \frac{3}{64} \Delta \quad (\text{B.12})$$

$$C = \frac{153}{2560} k_B T - \frac{3}{128} q J_4 + \frac{9}{512} \Delta \quad (\text{B.13})$$

A linha crítica será dada por  $A=0$  (com  $B, C, \dots > 0$ ), ou seja,

$$\frac{k_B T}{q J_2} = \frac{2}{9} \frac{J_4}{J_2} - \frac{1}{3} \frac{\Delta}{q J_2} + \frac{2}{3} \quad (\text{B.14})$$

com

$$-\frac{3}{64} q J_4 + \frac{3}{32} q J_2 > 0. \quad (\text{B.15})$$

Vemos, portanto, que, com  $J_4 = 0$ , a condição de estabilidade da linha de pontos críticos é satisfeita para qualquer valor de  $\Delta$ . Isto também fica claro se fizermos  $B = 0$ , ou seja,

$$k_B T = \frac{4}{9} q J_4 - \frac{1}{3} \Delta \quad (\text{B.16})$$

A intersecção das curvas definidas pelas equações (B.14) e (B.16), que define o ponto tricrítico, será dada por

$$\frac{2}{9} q J_4 - \frac{1}{3} \Delta + \frac{2}{3} q J_2 = \frac{4}{9} q J_4 - \frac{1}{3} \Delta \quad (\text{B.17})$$

ou seja,

$$\frac{2}{3} q J_2 = \frac{2}{9} q J_4, \quad (\text{B.18})$$

isto é,

$$J_4 = 3 J_2 \quad (\text{B.19})$$

independentemente do valor de  $\Delta$ . Estes resultados, em contradição com o trabalho original de Blume, Emery e Griffiths, são corrigidos quando tomamos um hamiltoniano de tentativa que inclui o termo de campo cristalino.

## B.2 - HAMILTONIANO DE TENTATIVA INCLUINDO O TERMO DE CAMPO CRISTALINO

Agora vamos tomar o hamiltoniano de tentativa dado pela Eq.(B.4). Então temos

$$F_0(\mathcal{H}_0) = -N k_B T \ln [ e^{\beta \eta - \beta \Delta} + e^{-\beta \eta - \beta \Delta} + 1 ] \quad (\text{B.20})$$



e

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_0 = \frac{1}{2} N q J_2 m_1^2 - \frac{1}{2} N q J_4 m_2^2 + N (\eta - h) m_1, \quad (\text{B.21})$$

onde

$$m_1 = \frac{e^{\beta\eta - \beta\Delta} - e^{-\beta\eta - \beta\Delta}}{e^{\beta\eta - \beta\Delta} + e^{-\beta\eta - \beta\Delta} + 1} \quad (\text{B.22})$$

e

$$m_2 = \frac{e^{\beta\eta - \beta\Delta} + e^{-\beta\eta - \beta\Delta}}{e^{\beta\eta - \beta\Delta} + e^{-\beta\eta - \beta\Delta} + 1} \quad (\text{B.23})$$

A campo nulo, novamente podemos escrever  $\Phi$  na forma

$$\Phi = N \Phi_0 + A N m_1^2 + B N m_1^4 + C N m_1^6 + \dots \quad (\text{B.24})$$

com os coeficientes

$$\Phi_0 = \Delta - k_B T \ln(2 + e^{\beta\Delta}) - \frac{2qJ_4}{(2 + e^{\beta\Delta})^2} \quad (\text{B.25})$$

$$A = \frac{2+e^{\beta\Delta}}{4\beta} - \frac{1}{2} q J_2 - \frac{e^{\beta\Delta}}{2(2+e^{\beta\Delta})} q J_4 \quad (\text{B.26})$$

$$B = \frac{1}{12} \left(1 + \frac{1}{2} e^{\beta\Delta}\right) \left(1 - \frac{1}{4} e^{\beta\Delta}\right) - \frac{1}{16} e^{\beta\Delta} q J_4 \quad (\text{B.27})$$

$$C = \frac{1}{7680\beta} \left(2+e^{\beta\Delta}\right)^3 (32-18e^{\beta\Delta} + 3e^{2\beta\Delta}) - (2e^{2\beta\Delta} - 7e^{\beta\Delta} + 4)(2+e^{\beta\Delta}) \frac{e^{\beta\Delta}}{1152} q J_4 \quad (\text{B.28})$$

Para  $\Delta = 0$ , estes resultados reproduzem os coeficientes dados pelas equações (3.10) a (3.13). Por outro lado, no limite  $\beta\Delta \rightarrow 0$ , eles reproduzem em ordem dominante as equações (B.10) a (B.13).

Quando  $J_4 = 0$ , a linha de pontos críticos ( $A=0$ ) será dada por

$$\frac{k_B T}{q J_2} = \frac{2}{2 + e^{A/k_B T}} \quad (\text{B.29})$$

que corresponde ao resultado do trabalho de Blume, Emery e Griffiths. Agora é fácil verificar que existe um ponto tricrítico, correspondente a  $A=B=0$ , com  $C>0$ , dado por

$$\frac{k_B T}{q J_2} = \frac{2}{2 + e^{A/k_B T}} \quad (\text{B.30})$$

com

$$4 = e^{\Delta/k_B T} \quad (B.31)$$

ou seja,

$$\frac{k_B T}{qJ_2} = \frac{1}{3} \quad e \quad \frac{\Delta}{qJ_2} = \frac{2}{3} \ln 2, \quad (B.32)$$

que também concorda com o trabalho de Blume, Emery e Griffiths.

R E F E R Ê N C I A S .

- (1) S.G.Brush, Rev. Mod. Phys. 39, 883(1 967).
- (2) S.R.Salinas, J.Phys.C:Sol.State Phys. 7, 241 (1 974)
- (3) G.A.Baker Jr. e J.W.Essam, Phys.Rev.Lett.24, 447(1 970)
- (4) L.Gunther, D.J.Bergman e Y.Imry, Phys.Rev.Lett.27, 558  
(1 971).
- (5) M.Blume, V.J.Emery e R.B.Griffiths, Phys.Rev.A 4, 1 071  
(1 971).