



***MODELO DE ISING NA REDE DE BETHE
COM INTERAÇÕES ATÉ TERCEIROS VIZINHOS***

Adriano dos Santos

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

Florianópolis

1998

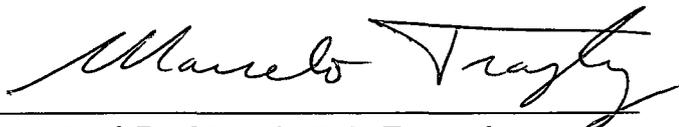
**MODELO DE ISING NA REDE DE BETHE
COM INTERAÇÕES ATÉ TERCEIROS VIZINHOS**

Adriano dos Santos

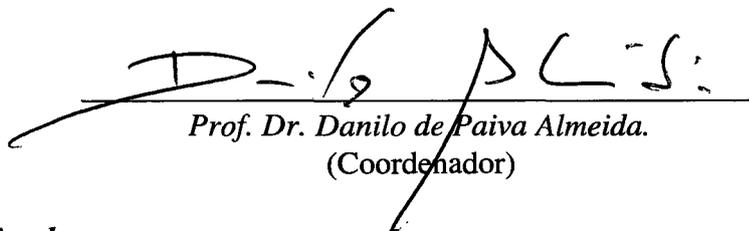
Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de

MESTRE EM FÍSICA

especialidade *Mecânica Estatística e Transições de Fase* e aprovada em sua forma final pelo programa de Pós-Graduação.



Prof. Dr. Marcelo H. R. Tragtenberg
(Orientador)



Prof. Dr. Danilo de Paiva Almeida.
(Coordenador)

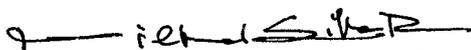
Banca examinadora:



Prof. Dr. Carlos S. O. Yokoi (USP)



Prof. Dr. Wagner Figueiredo (UFSC)



Prof. Dr. Nilton da Silva Branco (UFSC)

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais pelo apoio e incentivo aos estudos, desde cedo.

Ao Professor Dr. Marcelo H. R. Tragtenberg, pela orientação dedicada e atenciosa.

Aos amigos, Professores e Funcionários do Depto. de Física pelo convívio e pelo apoio.

À Fernanda, pela compreensão e apoio.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	v
RESUMO	viii
ABSTRACT	ix
Capítulo 1. INTRODUÇÃO GERAL	01
Capítulo 2. DESCRIÇÃO DO MODELO	10
2.1 <i>O MODELO A3NNI NA REDE DE BETHE</i>	10
2.2 <i>RELAÇÃO DE RECORRÊNCIA PARA A MAGNETIZAÇÃO</i>	13
2.3 <i>ATRADORES DO MAPEAMENTO</i>	20
Capítulo 3. MÉTODOS PARA A DETERMINAÇÃO DAS FRONTEIRAS DE FASES	
COMENSURÁVEIS	27
3.1 <i>INTRODUÇÃO</i>	27
3.2 <i>PROCEDIMENTO BASEADO NO MÉTODO DE NEWTON</i>	28
3.3 <i>PROCEDIMENTO BASEADO NA MINIMIZAÇÃO DA FUNÇÃO Φ</i>	30
Capítulo 4. COMPORTAMENTO DO MODELO A3NNI A CAMPO NULO ($H = 0$)	33
4.1 <i>ESTADO FUNDAMENTAL DO MODELO A CAMPO NULO</i>	33
4.2 <i>LIMITE DE ESTABILIDADE DA FASE PARAMAGNÉTICA</i>	36
4.3 <i>NÚMERO DE ONDA CRÍTICO</i>	41
4.4 <i>LIMITE DE ESTABILIDADE DA FASE FERROMAGNÉTICA</i>	42
4.5 <i>LIMITE DE ESTABILIDADE DA FASE MODULADA (LEFM)</i>	43
4.6 <i>DIAGRAMAS DE FASES PARA VALORES CARACTERÍSTICOS DE P_3</i>	44
4.6.1 <i>Comparação do limite de estabilidade da fase</i>	
<i>PARAMAGNÉTICA obtido com o encontrado por Moreira</i>	
<i>e Salinas (1987)</i>	44

4.6.2 Comparação entre os diagramas de fases que obtivemos e os encontrados por Moreira e Salinas (1987)	46
4.6.3 Diagramas de fases para valores altos de $ J_3 $	51
4.7 PROCESSO DE DUPLICAÇÃO DE PERÍODO DE FASES COMENSURÁVEIS E ATRADORES ESTRANHOS.....	57
Capítulo 5. COMPORTAMENTO DO MODELO A3NNI NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO	60
5.1 ESTADO FUNDAMENTAL	60
5.2 LIMITE DE ESTABILIDADE DA FASE PARAMAGNÉTICA	61
5.2.1 Regiões de co-estabilidade PARA-PARA	62
5.2.2 Limite de Estabilidade da fase PARA em relação à ANTIFERRO	64
5.2.3 Limite de Estabilidade da fase PARA em relação à MODULADA	66
5.3 NÚMERO DE ONDA CRÍTICO	69
5.4 DIAGRAMAS DE FASES GLOBAIS DO MODELO A3NNI NA PRESENÇA DE CAMPO EXTERNO	70
Capítulo 6. CONSIDERAÇÕES FINAIS	77
APÊNDICE - SEQUÊNCIA DE FAREY NÃO PADRÃO	78
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	81

LISTA DE FIGURAS

Capítulo 1. INTRODUÇÃO GERAL

<i>Figura 1.1</i> - Tipos de magnetização modulada	03
<i>Figura 1.2</i> - O modelo ANNNI numa rede cúbica simples	04
<i>Figura 1.3</i> - Diagrama de fases do modelo YOS	06
<i>Figura 1.4</i> - Diagrama de fases do modelo A3NNI, segundo a teoria de campo médio.....	07
<i>Figura 1.5</i> - Diagrama de fases do modelo A3NNI, segundo a teoria de campo médio	08

Capítulo 2. DESCRIÇÃO DO MODELO

<i>Figura 2.1</i> - Árvore de Cayley com $z = 3$	11
<i>Figura 2.2</i> - Árvore de Cayley com $z = 3$, mostrando-se as interações	13
<i>Figura 2.3</i> - Esquema de dizimação na rede de Bethe	15
<i>Figura 2.4</i> - Magnetização em função da temperatura	22
<i>Figura 2.5</i> - Atrator representando uma fase modulada comensurável	23
<i>Figura 2.6</i> - Atratores representando uma fase comensurável travada e deslizante	24
<i>Figura 2.7</i> - Atrator representando uma fase caótica	25

Capítulo 3. MÉTODOS PARA A DETERMINAÇÃO DAS FRONTEIRAS DE FASES COMENSURÁVEIS

<i>Figura 3.1</i> - Função Φ para uma fase $2\otimes 1/5$	31
<i>Figura 3.2</i> - Função Φ para uma fase $20\otimes 185$	32

Capítulo 4.	COMPORTAMENTO DO MODELO A3NNI NA REDE DE BETHE A CAMPO NULO ($H = 0$)	
Figura 4.1 -	O estado fundamental	34
Figura 4.2 -	Esboço do limite de estabilidade da fase PARA para $p_3 \geq 1$	40
Figura 4.3 -	Gráfico dos pontos de intersecção entre o limite de estabilidade da fase PARA em relação à FERRO e o limite de estabilidade da PARA em relação à MODULADA	46
Figura 4.4 -	Diagrama de fases para $p_3 = 0,1$ (MS, 1987).....	47
Figura 4.5 -	Diagrama de fases para $p_3 = -0,1$ (MS, 1987)	48
Figura 4.6 -	Diagrama de fases para $p_3 = 0,1$	49
Figura 4.7 -	Diagrama de fases para $p_3 = -0,1$	50
Figura 4.8 -	Representação das configurações $2 \otimes 1/5$ e $2/10$	51
Figura 4.9 -	Diagrama de fases para $p_3 = -1/3$	52
Figura 4.10 -	Diagrama de fases para $p_3 = -0,4$	53
Figura 4.11 -	Ampliação de uma região da figura 4.10	53
Figura 4.12 -	Esboço do diagrama de fases com Ponto Crítico Terminal	54
Figura 4.13 -	Diagrama de fases para $p_3 = -3,0$	55
Figura 4.14 -	Diagrama de fases para $p_3 = 1,0$	56
Figura 4.15 -	Diagrama de fases para $p_3 = 1,2$	57
Figura 4.16 -	Detalhe do diagrama de fases para $p_3 = -0,4$	58
Figura 4.17 -	Processo de bifurcação correspondente à diminuição de temperatura para $p_3 = -0,4$ e $p_2 = 1,125$	59

Capítulo 5. COMPORTAMENTO DO MODELO A3NNI NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO

Figura 5.1 - Limite de estabilidade de fases PARAMAGNÉTICAS para $p_2 = 0,2$ e $p_3 = 0,1$	64
Figura 5.2 - Região de estabilidade da fase PARA para $p_2 = -0,5$ e $p_3 = 1,2$	65
Figura 5.3 - Região de estabilidade da fase PARA para $p_2 = 0,5$ e $p_3 = 0,1$	67
Figura 5.4 - Região de estabilidade da fase PARA para $p_2 = 1,25$ e $p_3 = 0,1$	67
Figura 5.5 - Região de estabilidade da fase PARA para $p_2 = 0,985$ e $p_3 = -0,4$	68
Figura 5.6 - Diagrama de fases para $p_2 = 0,985$ e $p_3 = -0,4$	71
Figura 5.7 - Estado Fundamental para $p_2 = 0,985$ e $p_3 = -0,4$	71
Figura 5.8 - Diagrama de fases para $p_2 = 1,125$ e $p_3 = -0,4$	73
Figura 5.9 - Estado Fundamental para $p_2 = 1,125$ e $p_3 = -0,4$	73
Figura 5.10 - Diagrama de fases para $p_2 = 1,2$ e $p_3 = 0,1$	74
Figura 5.11 - Estado Fundamental para $p_2 = 1,2$ e $p_3 = 0,1$	74
Figura 5.12 - Diagrama de fases para $p_2 = 2,5$ e $p_3 = -3,0$	76
Figura 5.13 - Estado Fundamental para $p_2 = 2,5$ e $p_3 = -3,0$	76

Resumo

Estudamos o modelo de Ising na rede de Bethe, com interações ferromagnéticas entre spins primeiros vizinhos, e com sinal arbitrário entre segundos e terceiros vizinhos (denominado A3NNI - acrônimo de Axial Third Nearest Neighbor Ising). Este modelo, na ausência de campo magnético externo, já foi estudado por da Silva e Coutinho (SC, 1986) e Moreira e Salinas (MS, 1987). Obtivemos resultados diferentes e complementares em relação aos publicados por SC e MS.

Reobtivemos a relação de recorrência para a magnetização das camadas da rede de Bethe, e a partir dela, obtivemos um mapa tridimensional associado ao modelo.

Empregamos os métodos propostos por Tragtenberg e Yokoi (1995) para a determinação das fronteiras de fases comensuráveis. Para as fases de largura apreciável a determinação destas fronteiras foi baseada no método de Newton, e para a determinação das fronteiras de fases comensuráveis “estreitas” utilizamos um método baseado na minimização da função Φ .

Obtivemos analiticamente os limites de estabilidade das fases PARAMAGNÉTICA e FERROMAGNÉTICA, a campo nulo, para qualquer valor da interação entre terceiros vizinhos (medida por p_3). Estudamos também o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA na presença de campo magnético externo, o qual determinamos analiticamente.

Construímos diagramas de fases ($T \times p_2$) do modelo a campo nulo (para p_3 fixo). Num certo intervalo de valores de p_2 e p_3 encontramos regiões de co-estabilidade *PARAMODULADA* na ausência de campo magnético externo. Este tipo de comportamento até então, ao que sabemos, **não havia sido detectado em modelos na rede de Bethe** e aponta para uma linha de *Pontos Críticos Terminais* que deve ter nas extremidades *Pontos de Lifshitz Tricríticos*. Para valores de p_3 muito negativos encontramos uma linha de *Pontos Bicríticos*.

Determinamos aspectos do comportamento do modelo na presença de campo, através da obtenção de diagramas de fases para valores característicos de p_2 e p_3 .

Encontramos também seqüências de duplicação de período (Feigenbaum, 1980) em várias fases moduladas para certos valores dos parâmetros p_2 e p_3 , e observamos a existência de estruturas caóticas.

Abstract

We studied the Ising model on the Bethe lattice, with ferromagnetic interactions between nearest neighbors and arbitrary interactions between next-nearest and third neighbors (the so-called A3NNI - acronym of Axial Third Nearest Neighbor Ising). This model has been studied by da Silva & Coutinho (SC, 1986) and Moreira & Salinas (1986), in the absence of a magnetic field.

We determined the recursion relation for the mean magnetization of each shell of the Bethe lattice and the three-dimensional mapping associated to the model.

We used the methods proposed by Tragtenberg & Yokoi (1995) for determining the commensurate phase boundaries. For “thick” phases we used a kind of Newton method and for “thin” phases we used a method based on the minimization of a function Φ .

The stability limits for the PARAMAGNETIC and FERROMAGNETIC phases, at zero field, have been obtained analytically for any p_3 , as well as we found for the PARAMAGNETIC phase in the presence of a field.

We built phase diagrams ($T \times p_2$) of the model (for fixed p_3) at zero field. We found PARA-MODULATED co-stability regions at zero field, which points to the existence of a line of *Critical End Points* with Tricritical Lifshitz Points at its ends. This kind of multicritical point has not been found yet, as long as we know, in the study of models on Bethe lattices. For larger negative values of p_3 we found a line of *Bicritical Points*.

We studied the behavior of the model in the presence of a field by obtaining phase diagrams for characteristic values of p_2 and p_3 .

Period doubling commensurate phase sequences (Feigenbaum, 1980) have been found for many commensurate phases in some phase diagrams, as well as chaotic structures.

Capítulo 1

Introdução Geral

Uma grande variedade de sistemas na natureza apresenta “*ordem modulada*”.

Em muitos campos de estudo, além do magnetismo, se detecta a existência de ordenamento modulado, dos quais podemos citar: o arranjo dos átomos num cristal, adsorção de monocamadas em substratos, ferroeletricidade, cristais líquidos, etc..

Os artigos de revisão de Bak (1982), Yeomans (1988), Selke (1988) e Pynn (1979) trazem uma extensa fenomenologia de sistemas que possuem ordem modulada. Podemos citar, por exemplo:

⇒ O sistema magnético CeSb (Fisher e colab., 1978; Rossat-Mignod e colab., 1980)

⇒ O ferroelétrico NaNO_2 (Yamada *et al.*, 1963)

⇒ O ferroelétrico Rb_2ZnBr_4 , entre outros sistemas (Yamada e Hamaya, 1983)

⇒ Super estruturas de longo período tipo Ag_3Mg e Au_3Zn . (de Fontaine e Kulik, 1985), etc..

Sistemas magnéticos, nos quais concentraremos nossa atenção, são apenas uma das classes de sistemas que exibem comportamento modulado.

Alguns destes sistemas, abaixo de uma certa temperatura “ T_c ”, exibem magnetização espontânea (sem a presença de campo magnético externo). A magnetização espontânea é explicada se levarmos em conta a *interação de troca* (que tem origem no princípio de exclusão de Pauli) presente em pares de elétrons. Werner Heisenberg (1928) representou a *interação de troca* através de um hamiltoniano, cujo valor esperado é numericamente igual a energia de troca:

$$\mathcal{H} = -2J_{\text{troca}} \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \quad (1.1)$$

onde \vec{s}_1 e \vec{s}_2 são os operadores de spin. Este hamiltoniano (denominado hamiltoniano de Heisenberg) é a base de várias classes de modelos de magnetismo nos sólidos, sendo que o mais importante modelo baseado nele é o modelo de Ising.

Os FERROMAGNETOS, por exemplo, são substâncias onde os momentos magnéticos atômicos (Ashcroft e Mermin, 1976) podem estar, em média, alinhados numa mesma direção. Neste caso dizemos que o sistema está ordenado.

A figura 1.1 mostra uma variedade de formas pelas quais o ordenamento modulado se realiza; muitas delas existem em compostos de terras-raras e de manganês, conforme relatado em Cooper (1968) e Izyumov (1984). A estrutura modulada pode ser caracterizada basicamente pelo vetor de onda \mathbf{q} do harmônico principal. Uma fase modulada é classificada como comensurável ou incomensurável conforme a razão entre o comprimento de onda $\left(\lambda = \frac{2\pi}{q}\right)$ e o parâmetro da rede seja um número racional ou irracional, respectivamente.

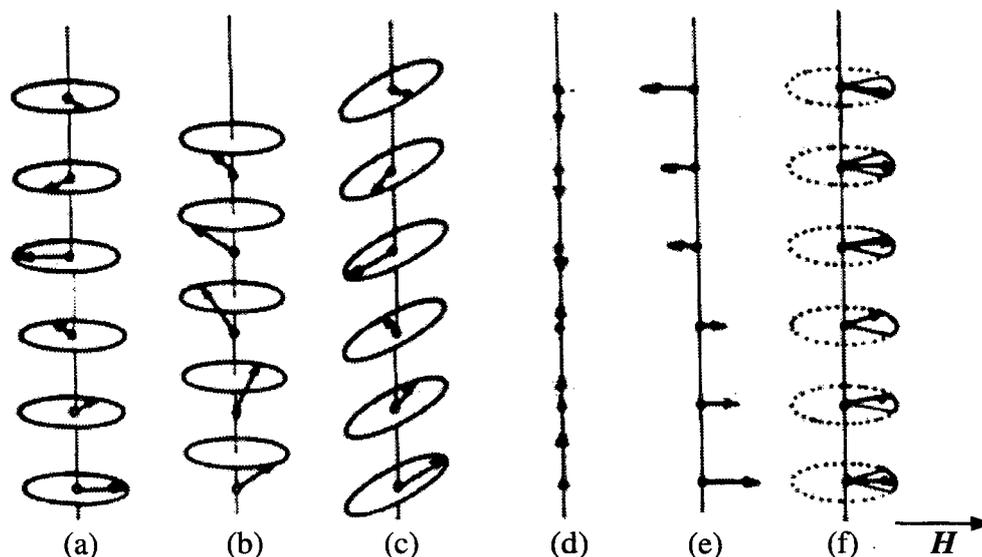


Figura 1.1 Tipos de magnetização modulada: (a) helicoidal, (b) espiral ferromagnética, (c) hélice inclinada, (d) onda de spin longitudinal, (e) onda de spin transversal, (f) leque. H indica o campo magnético aplicado. (Izyumov, 1984)

Quando os momentos magnéticos atômicos oscilam em torno de um valor médio ao longo de uma das direções do espaço (ver, por exemplo, figura 1.1e) dizemos que o sistema apresenta uma “*ordem modulada*”.

A modulação na ordem acontece devido à competição entre interações que, se atuassem isoladamente, resultariam num ordenamento uniforme ou, no máximo numa ordem do tipo ANTIFERROMAGNÉTICA. Devido à competição entre as interações, não é possível satisfazer as tendências de alinhamento de todas elas. Essa competição entre as interações faz surgir um efeito conhecido como *frustração*.

No caso dos compostos de terras raras e de manganês, por exemplo, a interação entre os momentos magnéticos atômicos (interação RKKY - Ruderman - Kittel - Kasuya - Yoshida) oscila em torno de zero com o aumento da distância entre os átomos, e sua amplitude decai com o inverso do cubo da distância. Portanto, as interações podem ser tanto FERROMAGNÉTICAS (tendendo a alinhar os momentos magnéticos paralelamente num mesmo sentido) quanto ANTIFERROMAGNÉTICAS (tendendo a alinhar os momentos magnéticos paralelamente em sentidos opostos), dando origem à *frustração*.

Os modelos mais populares para descrever os sistemas modulados têm como “ingrediente” básico a *frustração*.

O modelo ANNNI (Axial Next-Nearest-Neighbor Ising) na rede cúbica simples tem como característica básica uma interação FERROMAGNÉTICA entre spins primeiros vizinhos e ANTIFERROMAGNÉTICA entre spins segundos vizinhos, ao longo de uma direção espacial. Este modelo foi proposto por Elliott (1961) para explicar a ordem magnética modulada do érbio (Er), mas seus aspectos mais relevantes só foram revelados a partir da década de 70.

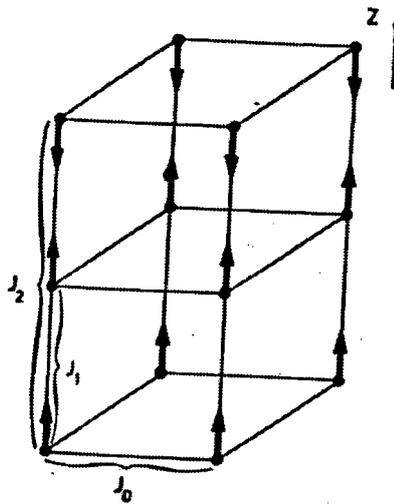


Figura 1.2 O modelo ANNNI numa rede cúbica simples (Selke, 1992).

Neste modelo, as interações RKKY são simuladas num Hamiltoniano de spins de Ising (que podem assumir valores ± 1) localizados numa rede cúbica simples (figura 1.2), dado por:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j,k} \left[J_0 \sigma_{i,j,k} (\sigma_{i+1,j,k} + \sigma_{i,j+1,k}) + J_1 \sigma_{i,j,k} \sigma_{i,j,k+1} + J_2 \sigma_{i,j,k} \sigma_{i,j,k+2} + H \sigma_{i,j,k} \right] \quad (1.1)$$

onde i, j e k indicam as coordenadas do sítio ao longo dos eixos x, y e z , respectivamente, J_0 é a interação entre spins primeiros vizinhos no plano xy , J_1 é a interação entre spins

primeiros vizinhos ao longo da direção z , J_2 é a interação entre spins segundos vizinhos ao longo da direção z , e H mede a intensidade do campo magnético. O caso mais estudado é quando os parâmetros J_0 e J_1 são iguais e FERROMAGNÉTICOS, $J_0 = J_1 > 0$, enquanto o parâmetro J_2 é ANTIFERROMAGNÉTICO, $J_2 < 0$.

Fisher e Selke (1980 e 1981), que cunharam o nome ANNNI, utilizando expansões em série de baixas temperaturas, mostraram que este modelo exibe uma infinidade de fases comensuráveis que se encontram num ponto de multifases a temperatura e campo magnético nulos e parâmetro de competição $p_2 = -J_2 / J_1 = 0,5$.

Bak e von Boehm (1980) determinaram o diagrama de fases $T \times p_2$ a campo nulo deste modelo na aproximação de campo médio.

Em 1981, Vannimenus estudou um modelo na árvore de Cayley (capítulo 2) que tentava simular o modelo ANNNI. A motivação para se estudar modelos na árvore de Cayley é que esta “árvore” não possui nenhum “circuito” fechado, facilitando a obtenção de soluções exatas (ver, por exemplo, Inawashiro, Thompson e Honda, 1983). Além disso os resultados obtidos na região central da árvore de Cayley (rede de Bethe) com interação entre spins primeiros vizinhos reproduzem a aproximação de Bethe, e no limite de coordenação infinita, correspondem à aproximação de campo médio para uma rede de Bravais (Thompson, 1982).

O modelo estudado por Vannimenus (1981) consiste em interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos, medidas por J_1 e J_2 respectivamente, ao longo dos ramos da árvore de Cayley com número de coordenação $z = 3$. A solução exata deste modelo conduz a um mapeamento tridimensional. Neste trabalho Vannimenus já havia detectado a existência de fases PARAMAGNÉTICA, FERROMAGNÉTICA e uma região MODULADA. O detalhamento do interior da região MODULADA não foi feito devido à complexidade das equações encontradas.

Yokoi, de Oliveira e Salinas (1985) estudaram o modelo de Vannimenus no limite de coordenação infinita (denominado YOS), e verificaram que o mapeamento de Vannimenus simplifica-se drasticamente neste limite, tornando-se bidimensional.

Eles obtiveram o diagrama de fases $T \times p_2$ (onde $p_2 = -\frac{J_2}{J_1}$) do modelo YOS na ausência de campo magnético externo (ver figura 1.3). Além disso detectaram a existência de estruturas caóticas e atratores estranhos.

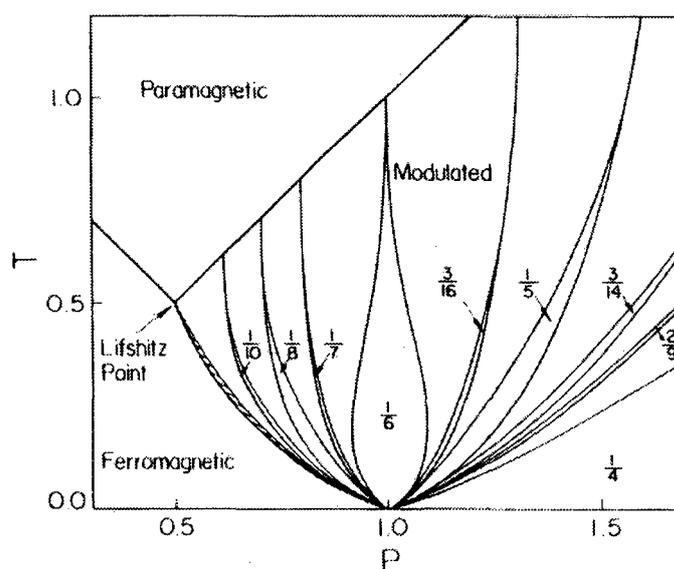


Figura 1.3 Diagrama de fases do modelo YOS (Yokoi *et al.*, 1985). Neste diagrama T é a temperatura absoluta e $P=J_2/J_1$.

Tragtenberg e Yokoi (1995) estudaram o modelo YOS na presença de campo magnético externo e obtiveram vários diagramas de fases deste modelo, além de propor novos métodos para a determinação de fronteiras de fases comensuráveis.

Yamada e Hamaya (1983) introduziram o modelo A3NNI (Axial Third - Nearest - Neighbor Ising) que considera, além das interações entre primeiros e segundos vizinhos, a interação entre os terceiros vizinhos ao longo de uma das direções espaciais. Para explicar as fases de uma classe de compostos foi também necessário incluir um campo magnético externo e uniforme na Hamiltoniana. Yamada e Hamaya introduziram o modelo acima

citado com o intuito de explicar as diversas fases existentes em materiais ferroelétricos (Rb_2ZnCl_4 , por exemplo), onde os vetores de onda podem assumir vários valores, tais como $q = 2/5$, $q = 1/2$ ou ainda $q = 1/3$ que é um valor bastante comum.

Selke, Barreto e Yeomans (1985), utilizando expansões em série de baixas temperaturas e teoria de campo médio, mostraram que o modelo A3NNI exibe uma infinidade de fases comensuráveis que se encontram em um ou dois pontos de multifases¹ (figuras 1.4 e 1.5), dependendo da intensidade da interação entre terceiros vizinhos.

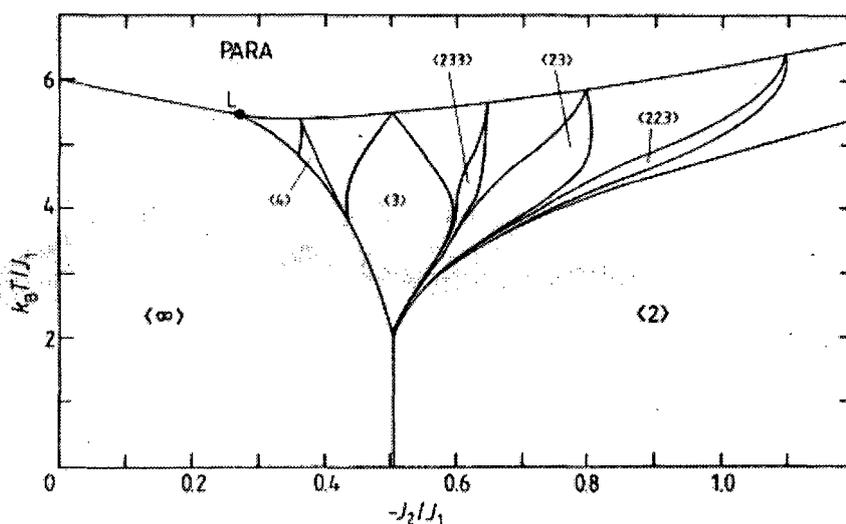


Figura 1.4 Diagrama de fases no plano $(k_B T/J_1, J_2/J_1)$ para $J_0 = J_1 = 1$ e $J_3 = 0,01$ mostrando algumas fases comensuráveis. Este diagrama foi obtido por Selke, Barreto e Yeomans (1985) utilizando teoria de campo médio. L denota o ponto de Lifshitz.

¹ Certos diagramas, dependendo do valor de J_2/J_1 e J_3/J_1 , apresentam mais de um ponto de multifases.

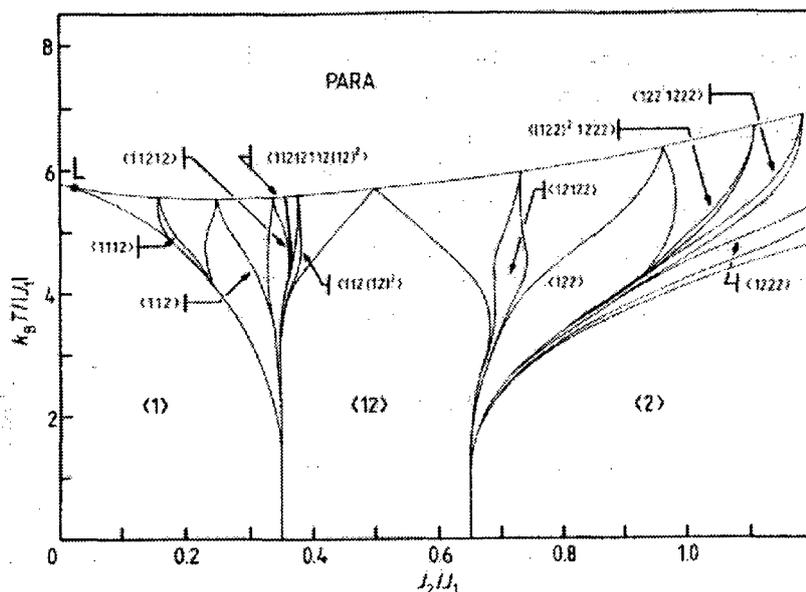


Figura 1.5 Diagrama de fases no plano $(k_B T / |J_1|, J_2 / J_1)$ para $-J_0 = J_1 = -1$ e $J_3 = 0,1$ mostrando algumas fases comensuráveis. Este diagrama foi obtido por Selke, Barreto e Yeomans (1985) utilizando teoria de campo médio. L denota o Ponto de Lifshitz.

Da Silva e Coutinho (1986) estudaram o modelo A3NNI na rede de Bethe, com número de coordenação “z” finito e obtiveram, além dos diagramas de fases para o estado fundamental no caso em que $z \rightarrow \infty$ e $z = 3$, alguns diagramas de fases para $z = 3$ a temperatura maior que zero.

Moreira e Salinas (1987), estudaram o modelo A3NNI na rede de Bethe, com número de coordenação infinita e na ausência de campo magnético, e obtiveram analiticamente o limite de estabilidade das fase PARAMAGNÉTICA. Além disso construíram diagramas de fases $T \times p_2$ para a interação “fraca” entre terceiros vizinhos.

Organizamos esta dissertação da seguinte forma:

No capítulo 2 descrevemos detalhadamente o modelo A3NNI, reobtemos a relação de recorrência para a magnetização das camadas e ainda caracterizamos os atratores (ou fases) possíveis neste modelo.

No capítulo 3 definimos os métodos utilizados para a determinação das fronteiras de fases comensuráveis.

O capítulo 4 é destinado à determinação das regiões de estabilidade dos atratores (ou fases) na ausência de campo magnético externo e à construção dos diagramas de fases no plano $T \times p_2$, para diversos valores do parâmetro de acoplamento p_3 .

No capítulo 5 estão diversos diagramas de fases no plano $T \times H$ (onde H mede a intensidade do campo magnético externo) para diversos valores dos parâmetros p_2 e p_3 .

Optamos por estudar separadamente os diagramas de fases na ausência e na presença de campo, pois achamos que esta metodologia facilita o entendimento dos diagramas de fases. Pois, como temos quatro parâmetros no modelo estudado (p_3 , p_2 , H e T), o diagrama de fases mais geral seria quadridimensional, prejudicando a visualização e contribuindo para que o tratamento se torne ainda mais complexo.

Finalmente, no capítulo 6, fazemos algumas considerações finais a respeito do modelo estudado, apontando para outras possíveis abordagens.

Capítulo 2

Descrição do Modelo, Relação de Recor- rência para a Magnetização e Atratores.

2.1 O Modelo A3NNI na rede de Bethe

Estudaremos um análogo do modelo A3NNI na rede de Bethe. Inicialmente, vamos descrever esta rede, mas, para entendê-la, é preciso definir o que é uma **árvore de Cayley**.

Uma árvore de Cayley com número de coordenação z é construída colocando-se um sítio central ligado a z sítios, que formam a primeira geração. A cada um desses z sítios são acrescentados $(z-1)$ sítios para formar a segunda geração, e assim sucessivamente, como mostra a figura 2.1.

Notamos que a primeira geração possui z sítios, a segunda $z(z-1)$ sítios e a n -ésima geração $z(z-1)^{n-1}$ sítios. Portanto, o número total de sítios de uma árvore com N gerações é:

$$N_t = 1 + \sum_{n=1}^N z(z-1)^{n-1} = \frac{[z(z-1)^N - 2]}{(z-2)}. \quad (2.1)$$

Para analisarmos as transições de fases do modelo precisamos, como é bem conhecido no contexto da *Mecânica Estatística*, estudá-lo no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Neste limite, a razão entre o número de sítios na fronteira e o número total de sítios tende a $\frac{z-2}{z-1}$, ou seja, o número de sítios na fronteira é uma parcela finita do número total de sítios. Isto é diferente do que ocorre em sistemas reais, onde os efeitos de superfície são desprezíveis.

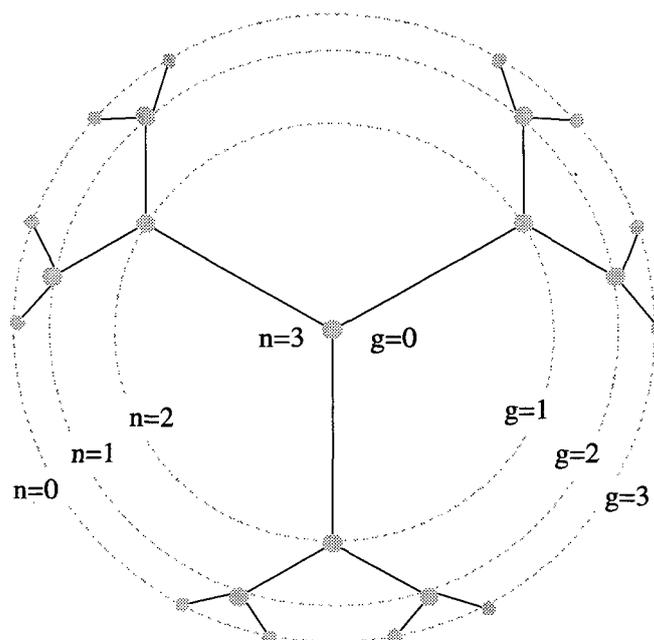


Figura 2.1 Árvore de Cayley com 3 gerações e número de coordenação $z=3$. As gerações (g) são numeradas a partir do sítio central ($g=0$) até a superfície da árvore e as camadas (n) são numeradas no sentido inverso.

Dessa forma, para podermos utilizar a árvore de Cayley como uma ferramenta que forneça resultados com conteúdo físico aceitável, devemos estudar suas propriedades muito longe da fronteira. Nesta região, todos os sítios são equivalentes e a contribuição dos sítios na superfície pode ser desprezada. Consideraremos então, em nossos cálculos, a parte central de uma árvore de Cayley, que é denominada *rede de Bethe* (Chen *et al.*, 1974).

O aspecto atraente de se estudar modelos numa rede de Bethe é que, neste caso, é possível determinar sua solução exata, associada a um mapa dissipativo, o que não acontece para as redes cristalinas, associadas a mapas conservativos (Aubry e Le Daeron, 1983). Vale a pena salientar que a solução do modelo de Ising na rede de Bethe, considerando-se interações restritas aos spins primeiros vizinhos, equivale à *aproximação de Bethe* (Bethe, 1935) para redes cristalinas. Thompson (1982) mostrou que, no limite de

coordenação infinita¹, a aproximação de Bethe torna-se idêntica à *aproximação de campo médio* (Bragg e Williams, 1934).

Um análogo do modelo A3NNI na rede de Bethe pode ser definido colocando-se um spin $\sigma = \pm 1$ em cada sítio da rede de Bethe. Estes spins interagem com seus primeiros, segundos e terceiros vizinhos através de interações de troca $J_1 > 0$, J_2 e J_3 , respectivamente. Estas interações são descritas pelo hamiltoniano

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j - J_3 \sum_{\langle\langle\langle ij \rangle\rangle\rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.2)$$

onde $\langle ij \rangle$ denota spins primeiros vizinhos, $\langle\langle ij \rangle\rangle$ denota spins segundos vizinhos e $\langle\langle\langle ij \rangle\rangle\rangle$ denota spins terceiros vizinhos e H é o campo magnético externo, conforme representado na figura 2.2.

¹ $\lim_{z \rightarrow \infty} zJ = \text{constante}$

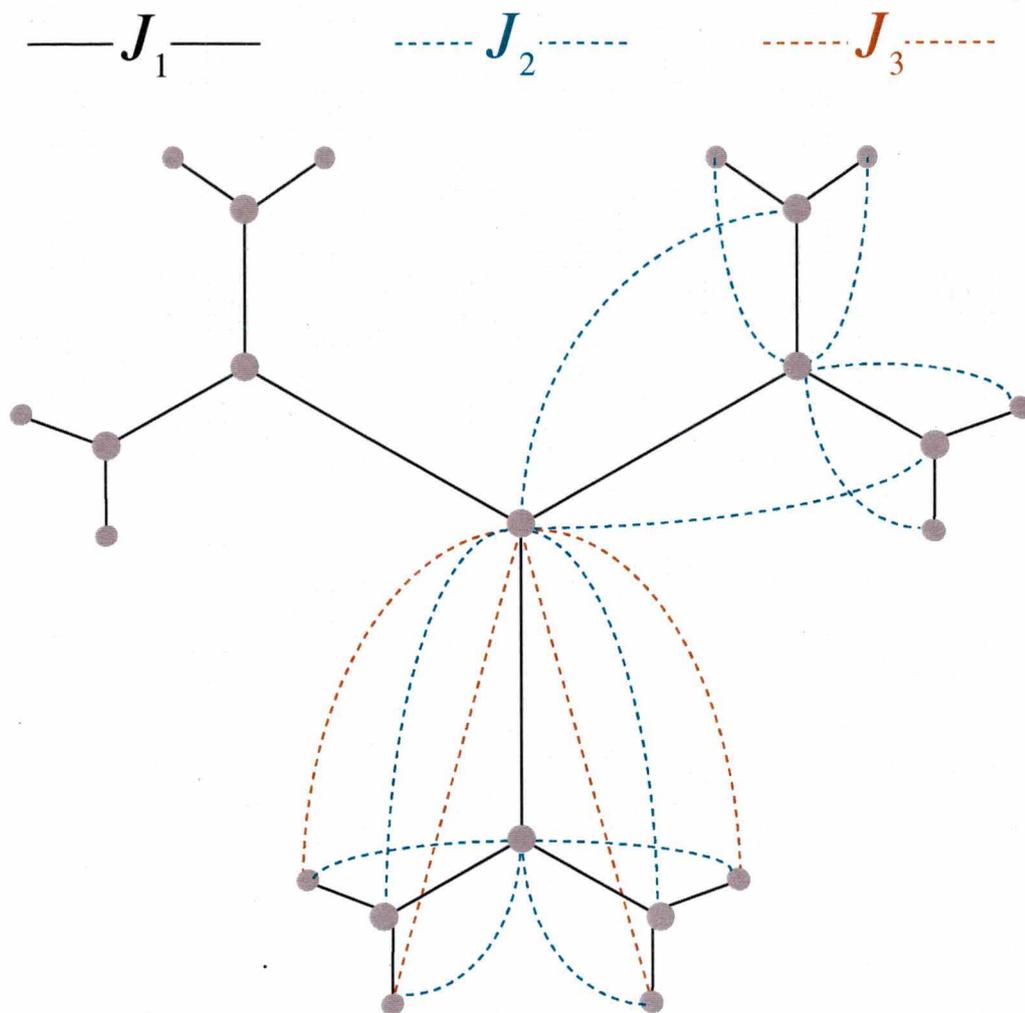


Figura 2.2 Árvore de Cayley com 3 gerações e número de coordenação $z=3$. Spins primeiros, segundos e terceiros vizinhos interagem através de constantes de troca J_1 , J_2 e J_3 , respectivamente. Estas interações estão presentes em todos os ramos e só não foram desenhadas para maior clareza.

2.2 Relação de Recorrência para a Magnetização

Estudaremos o modelo acima descrito na rede de Bethe partindo da superfície em direção à região interna da árvore. Obteremos uma relação de recorrência para campos efetivos ao longo das gerações. Neste sentido, é conveniente reindexar as gerações (ver figura 2.1, onde designamos a letra “n” para representar as *camadas* e a letra “g” para representar as gerações): a N -ésima geração será a *camada* de ordem zero de uma árvore de Cayley de N gerações. A primeira *camada* será a $(N-1)$ -ésima geração e, de forma geral, a

n -ésima *camada* será a $(N-n)$ -ésima geração. O spin central da árvore corresponderá à geração de ordem zero e à N -ésima *camada*.

Seja um ramo da árvore de Cayley (ver figura 2.3a) onde $\sigma_0^1, \sigma_0^2, \dots, \sigma_0^r$ denotam os $r = z-1$ spins da superfície pertencentes a este ramo, e $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ são spins das camadas 1, 2 e 3 desse ramo, respectivamente (r é dita razão de ramificação da árvore).

A estratégia adotada consiste em efetuar traços parciais sucessivos sobre spins das camadas, a começar da mais externa ($n = 0$), até atingir a camada N , que corresponde ao sítio central da árvore. Ao se tomar o traço sobre os spins da camada $n=0$ (ou seja, “dizimar” a camada mais externa), fazemos aparecer automaticamente interações e campos efetivos sobre os spins das três camadas seguintes ($n=1,2,3$) conforme representado na figura 2.3b.

A Função de Partição parcial do ramo da figura 2.3a pode ser escrita como:

$$Z_0 = \sum_{\sigma_0^{(1)} \dots \sigma_0^{(r)}} \exp\left[\left(K_1\sigma_1 + K_2\sigma_2 + K_3\sigma_3 + h\right)\left(\sigma_0^{(1)} + \dots + \sigma_0^{(r)}\right)\right], \quad (2.3)$$

onde $K_1 = \frac{J_1}{k_B T}$, $K_2 = \frac{J_2}{k_B T}$, $K_3 = \frac{J_3}{k_B T}$, $h = \frac{H}{k_B T}$, T é a temperatura absoluta e k_B é a constante de Boltzmann.

A somatória da equação (2.3) se fatoriza, podendo ser reescrita na forma:

$$Z_0 = f(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = \left[2 \cosh(K_1\sigma_1 + K_2\sigma_2 + K_3\sigma_3 + h)\right]^r. \quad (2.4)$$

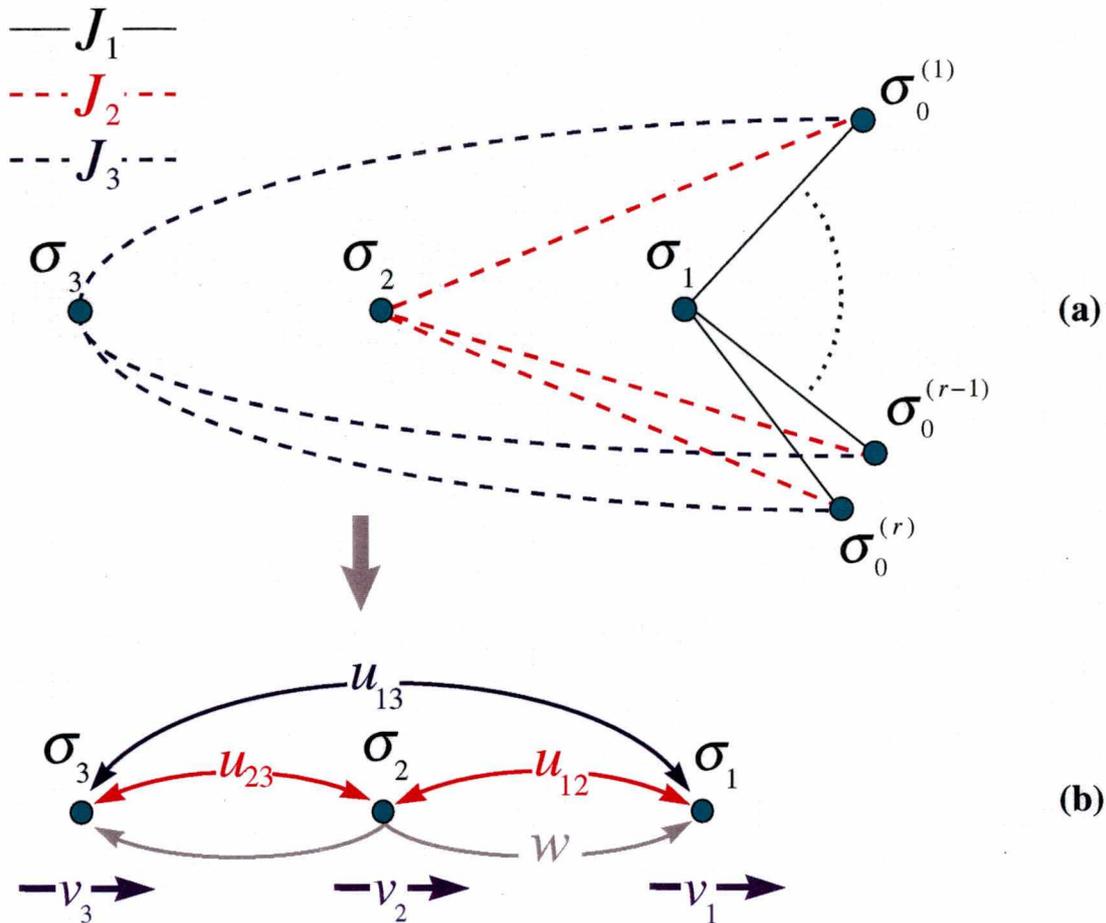


Figura 2.3 (a) Ramo da árvore de Cayley. J_1, J_2 e J_3 representam as interações entre spins primeiros, segundos e terceiros vizinhos, respectivamente. (b) Interações surgidas após a dizimação da camada mais externa.

Mas, esta Função de Partição corresponde às interações efetivas entre os spins 1,2 e 3 e destes spins com o campo externo como se pode ver na figura 2.3b. Então, podemos escrever Z_0 de outra forma:

$$Z_0 = C. \exp(w\sigma_1\sigma_2\sigma_3 + u_{12}\sigma_1\sigma_2 + u_{13}\sigma_1\sigma_3 + u_{23}\sigma_2\sigma_3 + v_1\sigma_1 + v_2\sigma_2 + v_3\sigma_3) \quad (2.5)$$

onde $w, u_{12}, u_{13}, u_{23}$ são as interações de troca entre os spins e v_1, v_2 e v_3 são os campos efetivos que passam a atuar sobre os spins 1, 2 e 3, após a “dizimação” dos spins da camada mais externa.

Os coeficientes $C, w, u_{12}, u_{13}, u_{23}, v_1, v_2$ e v_3 são funções de K_1, K_2, K_3, h e r como segue:

$$C^8 = f(1,1,1)f(1,1,-1)f(1,-1,1)f(1,-1,-1) \times \\ \times f(-1,1,1)f(-1,1,-1)f(-1,-1,1)f(-1,-1,-1) , \quad (2.6)$$

$$w = \frac{1}{8} \ln \left\{ \frac{f(1,1,1)f(1,-1,-1)f(-1,1,-1)f(-1,-1,1)}{f(1,1,-1)f(1,-1,1)f(-1,1,1)f(-1,-1,-1)} \right\} , \quad (2.7)$$

$$u_{12} = \frac{1}{8} \ln \left\{ \frac{f(1,1,1)f(1,1,-1)f(-1,-1,1)f(-1,-1,-1)}{f(1,-1,1)f(1,-1,-1)f(-1,1,1)f(-1,1,-1)} \right\} , \quad (2.8)$$

$$u_{13} = \frac{1}{8} \ln \left\{ \frac{f(1,1,1)f(1,-1,1)f(-1,1,-1)f(-1,-1,-1)}{f(1,1,-1)f(1,-1,-1)f(-1,1,1)f(-1,-1,1)} \right\} , \quad (2.9)$$

$$u_{23} = \frac{1}{8} \ln \left\{ \frac{f(1,1,1)f(-1,1,1)f(1,-1,-1)f(-1,-1,-1)}{f(1,1,-1)f(-1,1,-1)f(1,-1,1)f(-1,-1,1)} \right\} , \quad (2.10)$$

$$v_1 = \frac{1}{8} \ln \left\{ \frac{f(1,1,1)f(1,1,-1)f(1,-1,1)f(1,-1,-1)}{f(-1,1,1)f(-1,1,-1)f(-1,-1,1)f(-1,-1,-1)} \right\} , \quad (2.11)$$

$$v_2 = \frac{1}{8} \ln \left\{ \frac{f(1,1,1)f(1,1,-1)f(-1,1,1)f(-1,1,-1)}{f(1,-1,1)f(1,-1,-1)f(-1,-1,1)f(-1,-1,-1)} \right\} , \quad (2.12)$$

$$v_3 = \frac{1}{8} \ln \left\{ \frac{f(1,1,1)f(1,-1,1)f(-1,1,1)f(-1,-1,1)}{f(1,1,-1)f(1,-1,-1)f(-1,1,-1)f(-1,-1,-1)} \right\} . \quad (2.13)$$

Definimos:

$$\begin{cases} h_0 = h \\ A_0 = K_1 \\ D_0 = K_2 \\ w_0 = 0 \end{cases}$$

Como já falamos, com a dizimação dos spins da camada mais externa da árvore, “criam-se” novas interações entre os spins da árvore.

A interação que surge entre os três spins das camadas com $n=1,2$ e 3 é dada por:

$$w_1 = w(h_0, A_0, D_0, K_3) . \quad (2.14)$$

Surge uma outra interação, esta entre spins das camadas com $n=1, 2$, dada por:

$$A_1 = K_1 + u_{12}(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0). \quad (2.15)$$

Aparece também uma interação entre os spins das camadas com $n=1,3$, dada por:

$$D_1 = K_2 + u_{13}(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0). \quad (2.16)$$

Além disso, a dizimação origina campos efetivos h_i atuando sobre os spins das camadas com $n=1,2$ e 3 , dados por:

$$\begin{cases} h_1 = h + v_1(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0) \\ h_2 = h + rv_2(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0) \\ h_3 = h + r^2v_3(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0) \end{cases} \quad (2.17)$$

Passando à dizimação da camada com $n=1$, de maneira análoga à dizimação da primeira, obtemos:

$$\begin{cases} w_2 = w(h_1, A_1, D_1, K_3, w_1) \\ A_2 = K_1 + u_{12}(h_1, A_1, D_1, K_3, w_1) + ru_{23}(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0) \\ D_2 = K_2 + u_{13}(h_1, A_1, D_1, K_3, w_1) \\ h_2 = h + v_1(h_1, A_1, D_1, K_3, w_1) + rv_2(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0) \\ h_3 = h + r^2v_3(h_0, A_0, D_0, K_3, w_0) + rv_2(h_1, A_1, D_1, K_3, w_1) \\ h_4 = h + r^2v_3(h_1, A_1, D_1, K_3, w_1) \end{cases} \quad (2.18)$$

Se continuarmos a dizimar as próximas camadas em direção ao centro da árvore de Cayley, obteremos as seguintes relações de recorrência:

$$\begin{cases} A_n = K_1 + u_{12}(A_{n-1}, D_{n-1}, K_3, h_{n-1}, w_{n-1}) + ru_{23}(A_{n-2}, D_{n-2}, K_3, h_{n-2}, w_{n-2}) \\ D_n = K_2 + u_{13}(A_{n-1}, D_{n-1}, K_3, h_{n-1}, w_{n-1}) \\ w_n = w(A_{n-1}, D_{n-1}, K_3, h_{n-1}, w_{n-1}) \quad \text{com } w_0 = 0 \\ h_n = h + r^2v_3(A_{n-3}, D_{n-3}, K_3, h_{n-3}, w_{n-3}) + rv_2(A_{n-2}, D_{n-2}, K_3, h_{n-2}, w_{n-2}) + \\ v_1(A_{n-1}, D_{n-1}, K_3, h_{n-1}, w_{n-1}) \end{cases} \quad (2.19)$$

Definimos o limite de coordenação infinita como aquele em que o número de coordenação tende a infinito e as interações entre spins tendem a zero, de forma que:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{\substack{z \rightarrow \infty \\ J_1 \rightarrow 0}} z J_1 = \tilde{J}_1 \\ \lim_{\substack{z \rightarrow \infty \\ J_2 \rightarrow 0}} z^2 J_2 = \tilde{J}_2 \\ \lim_{\substack{z \rightarrow \infty \\ J_3 \rightarrow 0}} z^3 J_3 = \tilde{J}_3 \end{array} \right. \quad (2.20)$$

Neste limite, podemos escrever

$$f(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = [2 \cosh(h)]^r \times \exp[r \ln(\cosh a + \sinh a)], \quad (2.21)$$

onde $a = K_1 \sigma_1 + K_2 \sigma_2 + K_3 \sigma_3$

Expandindo $\ln(\cosh a + \sinh a)$ em termos até $O(r^{-3})$, temos

$$f(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \approx [2 \cosh(h)]^r \times \exp[r(a \tanh h + X)], \quad (2.22)$$

onde $X = [(\tanh h)^2 - 1] \left(\frac{K_1^3 \sigma_1 \tanh h}{3} - \frac{K_1^2}{2} - K_1 K_2 \sigma_1 \sigma_2 \right)$.

Substituindo a equação (2.22) nas equações (2.7)-(2.13), chegamos a:

$$\left\{ \begin{array}{l} w \approx 0 + O(1/r) \\ u_{12} \approx 0 + O(1/r) \\ u_{13} \approx 0 + O(1/r) \\ u_{23} \approx 0 + O(1/r^2) \\ v_1 \approx r K_1 \tanh(h) + O(1/r) \\ v_2 \approx r K_2 \tanh(h) + O(1/r^2) \\ v_3 \approx r K_3 \tanh(h) + O(1/r^3) \end{array} \right. \quad (2.23)$$

Assim as equações (2.19) ficam:

$$\left\{ \begin{array}{l} A_n = K_1 \\ D_n = K_2 \\ w_n = 0 \\ h_n = h + r^3 K_3 \tanh(h_{n-3}) + r^2 K_2 \tanh(h_{n-2}) + r K_1 \tanh(h_{n-1}) \end{array} \right. \quad (2.24)$$

Fazendo: $t = \frac{k_B T}{\tilde{J}_1}$, $p_2 = -\frac{\tilde{J}_2}{\tilde{J}_1}$ e $p_3 = -\frac{\tilde{J}_3}{\tilde{J}_1}$ obtemos:

$$h_n = \frac{1}{t} \left\{ \tanh(h_{n-1}) - p_2 \tanh(h_{n-2}) - p_3 \tanh(h_{n-3}) \right\} + h. \quad (2.25)$$

Utilizando um Sistema de Unidades conveniente, onde $\tilde{J}_1 = 1$ e $k_B = 1$, temos

$$\text{que: } \begin{cases} t = T, \\ h = \frac{H}{T}. \end{cases}$$

Podemos definir uma magnetização média por spin na n -ésima camada da Árvore de Cayley como $M_n = \tanh(h_n)$. Sendo assim, a relação de recorrência entre as magnetizações de camadas sucessivas será dada por:

$$M_n = \tanh(h_n) = \tanh \left[\frac{1}{T} (M_{n-1} - p_2 M_{n-2} - p_3 M_{n-3} + H) \right]. \quad (2.26)$$

Esta relação de recorrência pode ser reescrita como um mapa tridimensional (Lichtenberg e Lieberman, 1983)

$$\begin{aligned} x_n &= y_{n-1} \\ y_n &= z_{n-1} \\ z_n &= \tanh \left(\frac{z_{n-1} - p_2 y_{n-1} - p_3 x_{n-1} + H}{T} \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

A escolha da condição inicial do mapa acima equivale à escolha das condições de contorno para as magnetizações da primeira, segunda e terceira camadas da árvore.

Podemos ainda escrever o mapa acima sob a forma matricial:

$$\mathbf{X}_n = \mathbf{F}(\mathbf{X}_{n-1}), \quad (2.28)$$

onde:

$$\mathbf{X}_n = \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \\ z_n \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{F}(\mathbf{X}_n) = \begin{bmatrix} y_n \\ z_n \\ \tanh\left(\frac{z_n - p_2 \cdot y_n - p_3 \cdot x_n + H}{T}\right) \end{bmatrix}. \quad (2.29)$$

2.3 Atratores do mapeamento

A utilização da rede de Bethe na determinação das estruturas magnéticas de um modelo está relacionada à iteração de um mapeamento. Esta conexão com a área de Sistemas Dinâmicos faz com que uma série de conceitos desta área (como atratores, órbitas, ciclos, etc.) sejam utilizados na caracterização destas estruturas.

Obtemos as estruturas magnéticas do modelo em questão através da imposição de uma condição inicial às magnetizações das três primeiras camadas e da iteração do mapeamento (2.27), até chegar a seu(s) atrator(es). Estes atratores podem representar estruturas magnéticas uniformes, moduladas ou caóticas na rede de Bethe, ou seja, no interior da árvore de Cayley. Estas estruturas, quando iguais para todas as condições iniciais do mapa, serão chamadas de *fases*.

É bom salientar que essa denominação não implica necessariamente que as estruturas, das quais falamos acima, apresentam as propriedades das fases no sentido termodinâmico usual aplicável a sistemas reais. Pretendemos esclarecer mais este detalhe ao longo do texto.

Os expoentes de Lyapunov (Lichtenberg e Lieberman, 1983) associados aos atratores do mapeamento podem ser importantes na caracterização de estruturas magnéticas. Estes expoentes medem a taxa de convergência (ou divergência) dos pontos do mapeamento nas vizinhanças do atrator. Eles são definidos por

$$\lambda_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |\Lambda_i| \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.30)$$

onde Λ_i ($i=1,2,3$) são os autovalores da matriz L , produto das matrizes jacobianas do mapeamento (2.27)

$$L = \mathbf{J}(\mathbf{X}_N)\mathbf{J}(\mathbf{X}_{N-1})\dots\mathbf{J}(\mathbf{X}_2)\mathbf{J}(\mathbf{X}_1), \quad (2.31)$$

onde as matrizes jacobianas são dadas por

$$J(X_n) = \frac{\partial(x_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1})}{\partial(x_n, y_n, z_n)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -\frac{p_3(1-z_n^2)}{T} & -\frac{p_2(1-z_n^2)}{T} & \frac{(1-z_n^2)}{T} \end{bmatrix}. \quad (2.32)$$

Para facilitar a classificação dos atratores do mapa (2.27), ordenamos os expoentes de Lyapunov segundo a magnitude $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3$.

Ao iteramos o mapeamento (2.27), dependendo dos valores dos parâmetros e das condições iniciais, obtemos:

- (1) *Pontos fixos* (ver exemplo na figura 2.4): dizemos que a fase é paramagnética na ausência de campo se o atrator é o ponto fixo trivial (magnetização zero) e ferromagnética se o atrator é um ponto fixo não-trivial. Na presença de campo magnético, o ponto fixo paramagnético tem magnetização não nula. Para um ponto fixo $\lambda_3 \leq \lambda_2 < \lambda_1 < 0$.
- (2) *Ciclos de período Q* (ver exemplo na figura 2.5): representam fases moduladas comensuráveis de período Q. Neste caso também $\lambda_3 \leq \lambda_2 < \lambda_1 < 0$.
- (3) *Órbitas aperiódicas* (ver exemplo na figura 2.6a e 2.6b): representam fases moduladas incomensuráveis. Neste caso $\lambda_3 \leq \lambda_2 < \lambda_1 = 0$. Há dois tipos: deslizante e travada.
- (4) *Atratores estranhos* (ver exemplo na figura 2.7): representam estruturas moduladas caóticas. Finalmente, neste caso $\lambda_3 \leq \lambda_2 < 0$ e $\lambda_1 > 0$.

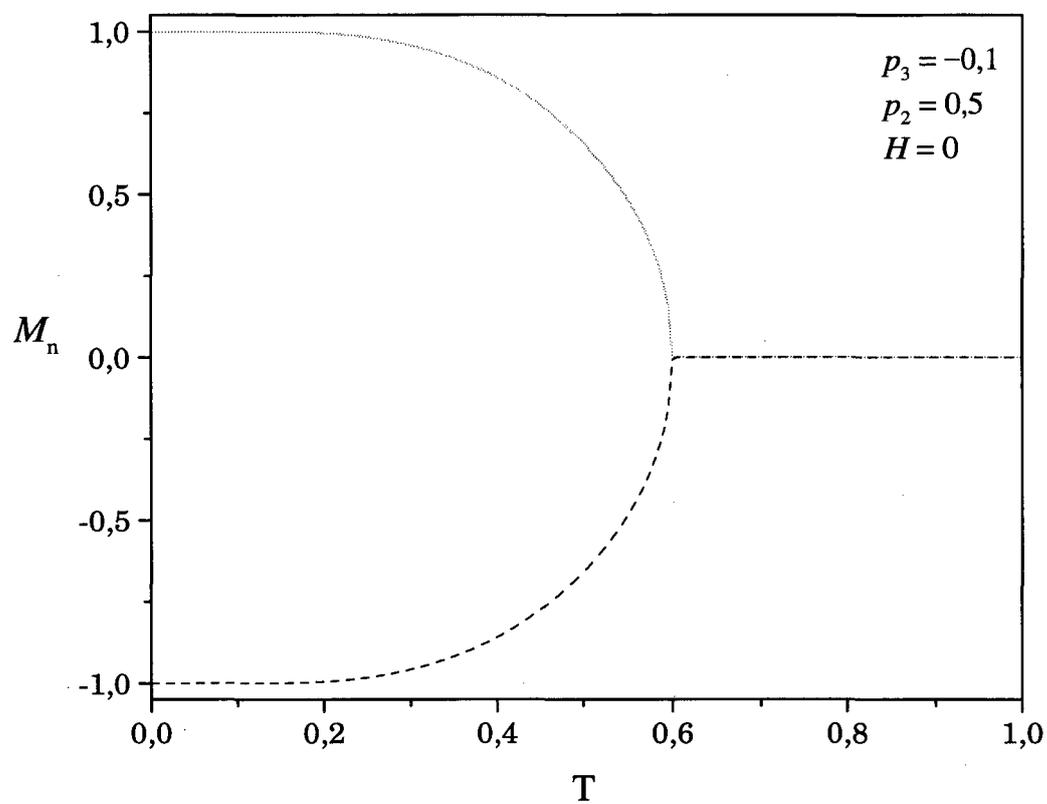


Figura 2.4 Magnetização (atrator é um ponto fixo) em função da temperatura. Este comportamento é bem conhecido em sistemas magnéticos. A linha cheia foi obtida iterando-se o mapa (2.27) 20.000 vezes e utilizando as condições iniciais (1,1,1). A linha tracejada foi obtida iterando-se 20.000 vezes o mapa (2.27) e utilizando as condições (-1,-1,-1).

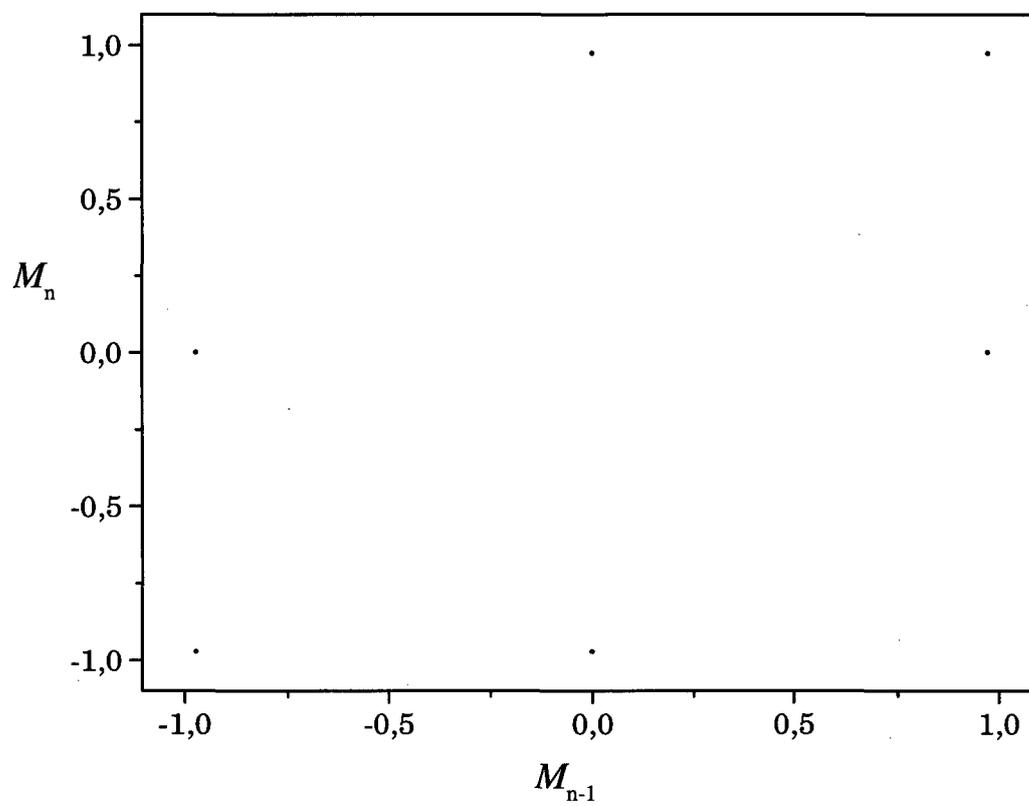


Figura 2.5 Exemplo de um atrator representando uma fase modulada comensurável de período 6. Neste caso, $p_3 = 0,1$; $p_2 = 1,0$; $T = 0,5$ e $H=0$.

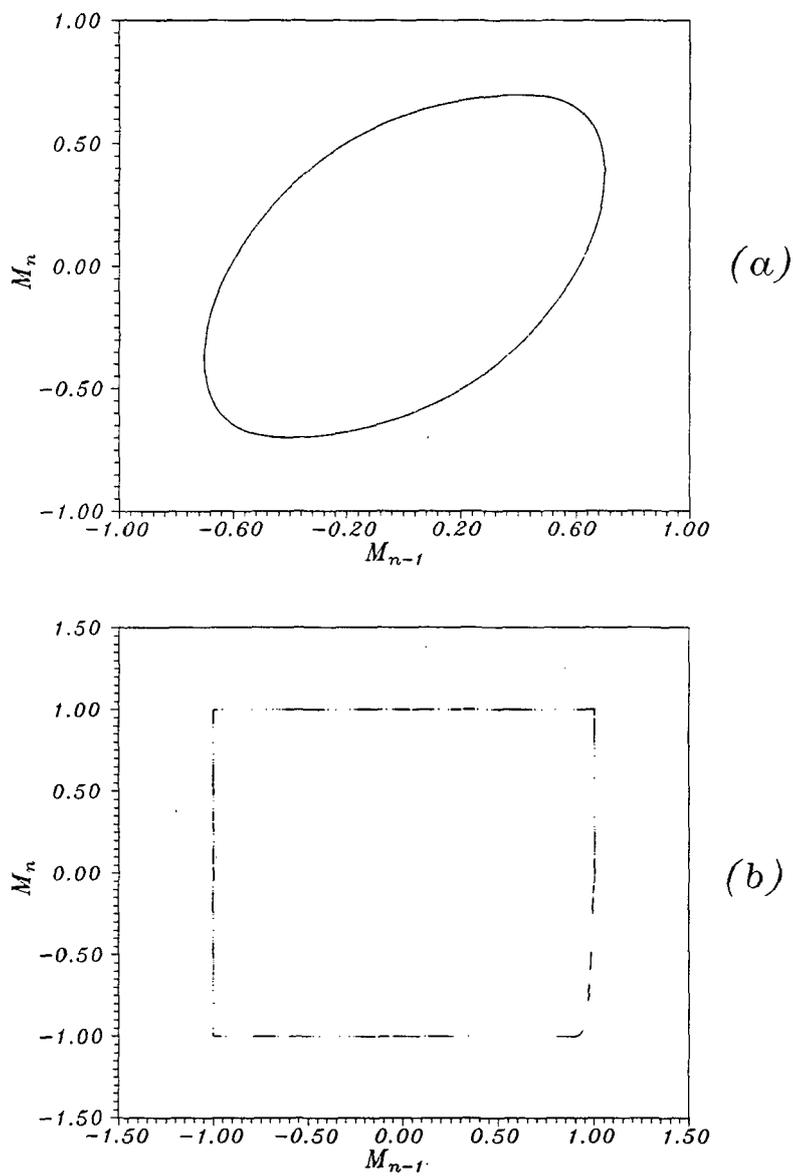


Figura 2.6. Atratores representando fases incomensuráveis ($p_3 = 0,1$; $p_2 = 0,95$). (a) *deslizante* ($T = 0,9$ e $H = 0$) e (b) *travada* ($T = 0,03111755$ e $H = 0,05$) . As 50.000 primeiras iterações foram descartadas. Estão representadas as 20.000 iterações seguintes.

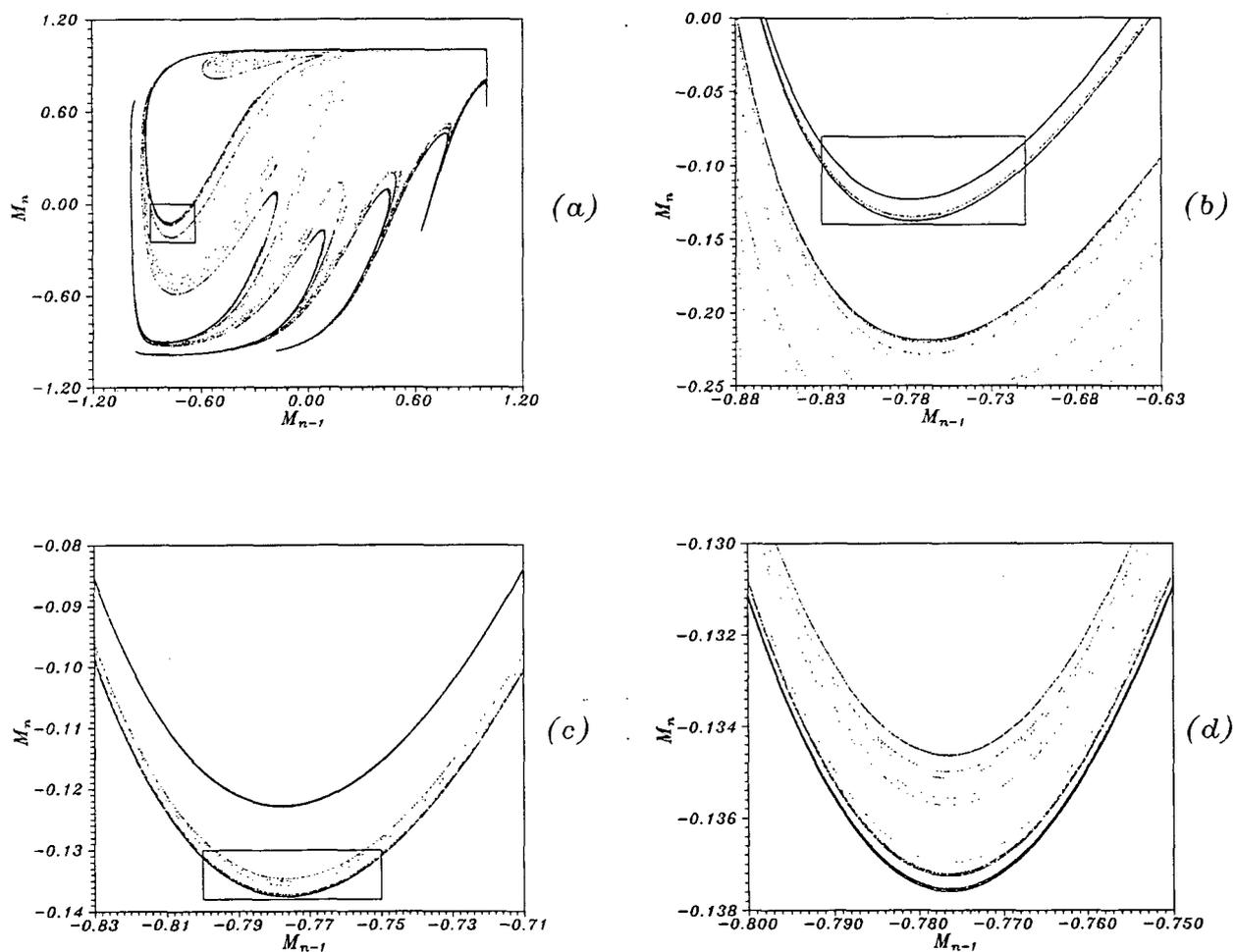


Figura 2.7. Atrator representando uma estrutura caótica. Este atrator é encontrado para $p_3 = -0,1$; $p_2 = 1,0$; $T = 0,25$ e $H = 0,224$. As figuras (b), (c) e (d) representam ampliações das regiões marcadas por um retângulo nas figuras anteriores [a figura (c), por exemplo, é uma ampliação da região destacada por um retângulo na figura (b)].

Nos gráficos (2.7a), (2.7b), (2.7c) e (2.7d) são descartadas as primeiras 50.000 iterações, pois não estamos interessados no transiente e sim no atrator que representa a magnetização nas camadas mais internas da árvore de Cayley. Em (2.7a) são plotados 40.000 pontos desconsiderando o transiente. Em (2.7b), (2.7c) e (2.7d) estão representados

10.000 pontos. Desta forma, em (2.7b) foram necessárias aproximadamente 126 mil iterações para acumular 10.000 pontos na região destacada por um retângulo na figura (2.7a). Em (2.7c) foram necessárias aproximadamente 2,1 milhões de iterações para acumular 10.000 pontos na região destacada por um retângulo na figura (2.7b). Finalmente em (2.7d) foram necessárias aproximadamente 17,2 milhões de iterações para acumular 10.000 pontos na região destacada por um retângulo na figura (2.7c).

Observando as figuras (2.7b), (2.7c) e (2.7d) notamos que essas várias ampliações evidenciam o caráter auto-similar do atrator.

A região de estabilidade de um dado atrator no espaço $p_3 - p_2 - T - H$ é a região onde a fase correspondente a este atrator é estável. É bastante comum acontecer que, para certos valores dos parâmetros $p_3 - p_2 - T - H$, os pontos do mapeamento convirjam para atratores diferentes dependendo da escolha da condição inicial (magnetizações nas três camadas mais externas). Nestes casos dizemos que há uma co-estabilidade de fases. Regiões de co-estabilidade ocupam, em geral, hiper-volumes quadridimensionais no espaço $p_3 - p_2 - H - T$. Lembrando a regra de fases de Gibbs (Callen, 1985), segundo a qual (neste caso) só poderia haver coexistência sobre uma “região tridimensional” no espaço $p_3 - p_2 - H - T$, nos deparamos com uma contradição. Esta contradição é resolvida se lembrarmos que estamos estudando as propriedades do sistema numa rede de Bethe, e que, portanto as considerações termodinâmicas usuais válidas para sistemas reais não se aplicam. Como não nos foi possível atribuir energia livre às fases moduladas, não pudemos definir as linhas de transição de primeira ordem associadas a regiões de co-estabilidade de fases.

Capítulo 3

Métodos para a determinação das fronteiras de fases comensuráveis

3.1 Introdução

A determinação das fronteiras de fases em sistemas modulados é, geralmente, uma tarefa extremamente complexa e laboriosa. Devido a esta dificuldade utilizamos alguns métodos conforme descrevemos abaixo.

Como já dissemos (capítulo 2), a iteração do mapeamento dado pela eq. (2.27) nos fornece a fase que se realiza na rede de Bethe. A iteração é o processo geralmente empregado na determinação dos diagramas de fases. Este processo é essencial no estudo exploratório do diagrama de fases, permitindo a determinação do número de onda de atratores periódicos e do limite de estabilidade das fases moduladas.

Entretanto, muitas vezes a convergência só se dá após um número muito grande de iterações tornando este processo inviável no estudo detalhado do diagrama de fases, pois o tempo de processamento numérico é excessivamente grande.

Para contornar este problema utilizamos um procedimento baseado no método de Newton, que permite a determinação da fronteira de uma fase comensurável com velocidade e precisão muito maiores. Este método (descrito na seção 3.2) é aplicável sempre que a largura da fase comensurável for detectável, dentro da precisão adotada nos cálculos numéricos.

Muitas vezes, para temperaturas altas e períodos longos, a largura das fases comensuráveis torna-se extremamente delgada sendo necessário um outro método. Nestes casos utilizamos um procedimento baseado na minimização da função Φ (descrito na seção 3.3), que também apresenta maior velocidade e precisão em relação a simples iteração do mapeamento.

O limite de estabilidade das fases PARAMAGNÉTICA e FERROMAGNÉTICA, que correspondem a pontos fixos (zero ou m respectivamente) podem ser determinados analiticamente como faremos nos capítulos 4 e 5.

3.2 Procedimento baseado no método de Newton

Um ciclo de período Q é caracterizado pelo fato de que após Q iterações retorna-se ao ponto inicial, ou seja,

$$\mathbf{X}_{n+Q} = \mathbf{X}_n. \quad (3.1)$$

Os pontos do ciclo são portanto soluções da equação

$$\mathbf{X} = \underbrace{\mathbf{F}(\mathbf{F}(\dots(\mathbf{F}(\mathbf{X}))\dots))}_{Q \text{ vezes}} = \mathbf{F}^{(Q)}(\mathbf{X}), \quad (3.2)$$

onde \mathbf{F} é dado pela eq. (2.29).

Podemos achar a solução para a equação acima utilizando o método de Newton.

Seja $\mathbf{X}_0^{(i)}$ uma solução tentativa na proximidade de uma das soluções da equação (3.2), definimos

$$\mathbf{X}_0^{(i+1)} = \mathbf{X}_0^{(i)} + \delta\mathbf{X}_0^{(i)}. \quad (3.3)$$

Substituindo $\mathbf{X}_0^{(i+1)}$ na equação (3.2), e expandindo-se em primeira ordem em

$\delta\mathbf{X}_0^{(i)}$, obtemos

$$\mathbf{X}_0^{(i)} + \delta\mathbf{X}_0^{(i)} = \mathbf{F}^{(Q)}(\mathbf{X}_0^{(i)} + \delta\mathbf{X}_0^{(i)}) \approx \mathbf{X}_Q^{(i)} + \mathbf{L}\delta\mathbf{X}_0^{(i)}, \quad (3.4)$$

onde \mathbf{L} é a matriz definida em (2.31). Portanto a correção $\delta\mathbf{X}_0^{(i)}$ que move $\mathbf{X}_0^{(i)}$ para mais perto da solução da equação (3.2) é dada por

$$\delta\mathbf{X}_0^{(i)} = (\mathbf{L} - \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{X}_0^{(i)} - \mathbf{X}_Q^{(i)}), \quad (3.5)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade.

Geralmente o processo iterativo representado pelas equações (3.3) e (3.5) converge muito rapidamente para uma solução da equação (3.2), desde que se esteja no interior da região de existência do ciclo-Q. Para fora desta região não se observa convergência.

Nas análises numéricas, para a maioria dos casos, adotamos o número máximo de iterações igual a 30, ou seja se o processo iterativo não convergisse dentro destas 30 iterações considerávamos que se estava fora da região de existência do ciclo-Q. O critério adotado para admitirmos a convergência foi

$$\max(|\delta x_0^{(i)}|, |\delta y_0^{(i)}|, |\delta z_0^{(i)}|) < 10^{-12}. \quad (3.6)$$

Assim, partindo-se de um ponto no interior da região de existência do ciclo-Q e um ponto fora, determinamos a fronteira da fase usando um processo de bissecção (Press *et al.*, 1986).

Vale a pena salientar que em alguns casos a iteração da eq. (3.3) nos leva a soluções com magnetização maior que um. Nestes casos, dizemos que estas são soluções não físicas e não são estáveis se submetidas ao mapeamento dado pela eq. (2.27).

Em certas regiões do diagrama de fases o processo iterativo converge para uma *solução não estável (repulsor)*, pois este tipo de órbita não pode ser obtida por meio de iteração do mapeamento dado pela eq. (2.27) e não se realiza na rede de Bethe, portanto não têm interesse físico. Pode-se distinguir os *atratores* e os *repulsores* analisando o expoente de Lyapunov.

A convergência do processo iterativo pode depender do ponto inicial escolhido e a não convergência não significa necessariamente que a fase não exista. Entretanto, partindo-se de um conjunto abrangente de pontos iniciais podemos obter resultados confiáveis.

3.3 Procedimento baseado na minimização da função Φ

As fases com períodos muito longos são estáveis em regiões muito estreitas, sendo que a largura dessas regiões torna-se menor que a precisão numérica adotada. Nestes casos não é possível determinar a fronteira de fase utilizando o procedimento baseado no método de Newton. Nas regiões de altas temperaturas, as fases com períodos curtos também são estáveis em regiões muito estreitas.

Para estudar estes casos utilizamos um procedimento baseado na minimização da função Φ . Definimos então a função

$$\Phi(T, p_2, p_3, H, Q) = \min_{\mathbf{X}_0} \|\mathbf{X}_Q - \mathbf{X}_0\|^2,$$

$$\text{onde } \begin{cases} \mathbf{X}_Q = \mathbf{F}^{(Q)}(\mathbf{X}_0) \\ \text{e} \end{cases}$$

$$\|\mathbf{X}_Q\| = \|(x, y, z)\| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

A função Φ representa a menor “distância ao quadrado” entre os pontos \mathbf{X}_0 e $\mathbf{X}_Q = \mathbf{F}^{(Q)}(\mathbf{X}_0)$, e portanto tem a propriedade de se anular na região onde existe um ciclo-Q. Para determinar o menor valor da norma acima referida utilizamos uma rotina padrão do IMSL (DUMPOL) baseada no método SIMPLEX (Press *et al.*, 1986). Os métodos de gradiente não funcionam bem neste caso, talvez devido à maior

dimensionalidade do problema (três) em relação ao modelo estudado por Tragtenberg e Yokoi (1995), que pode ser associado a um mapa bidimensional.

Nas figuras 3.1 e 3.2 apresentamos dois exemplos de gráficos da função Φ para fronteiras de fases largas e estreitas, respectivamente.

Para determinarmos a fronteira de uma fase comensurável quando ela é muito estreita, aplicamos o método da secante (Press *et al.*, 1986) para encontrar o zero da função Φ . Partimos de dois pontos em que a função Φ é positiva, para encontrar, a partir da secante por eles determinada, o ponto em que a função se anula.

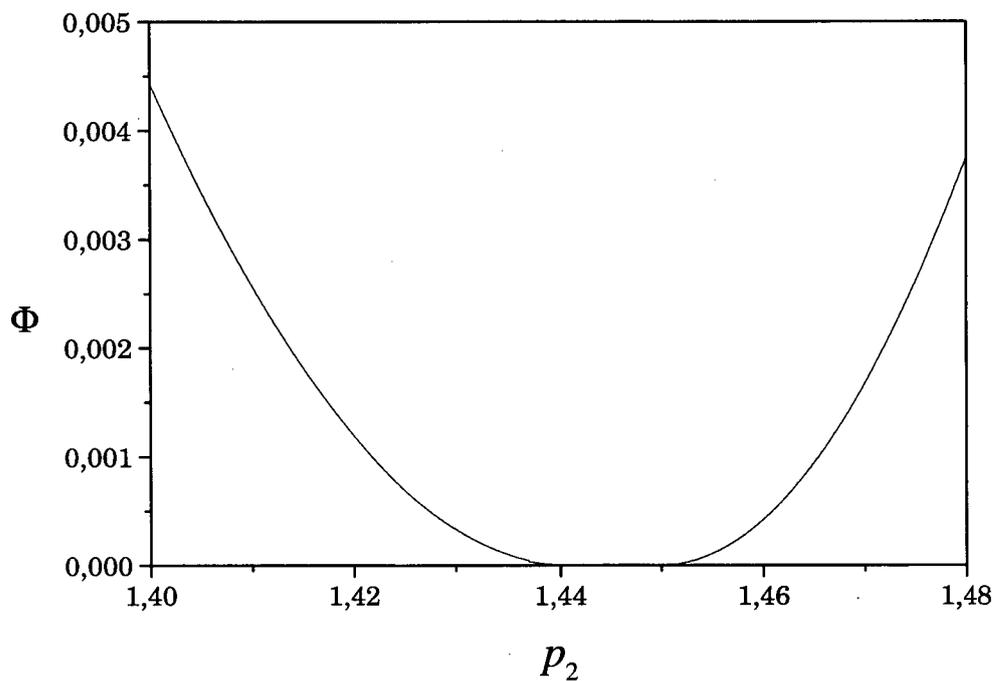


Figura 3.1 Função Φ para a fase $2\otimes 1/5$, $H = 0$, $p_3 = -0,1$, $T = 0,8$ e $Q = 5$. É visível um intervalo de valores de p_2 em que a função Φ se anula. A condição inicial utilizada foi $(+1, +1, -1)$. Neste caso caracteriza-se uma fase “larga”.

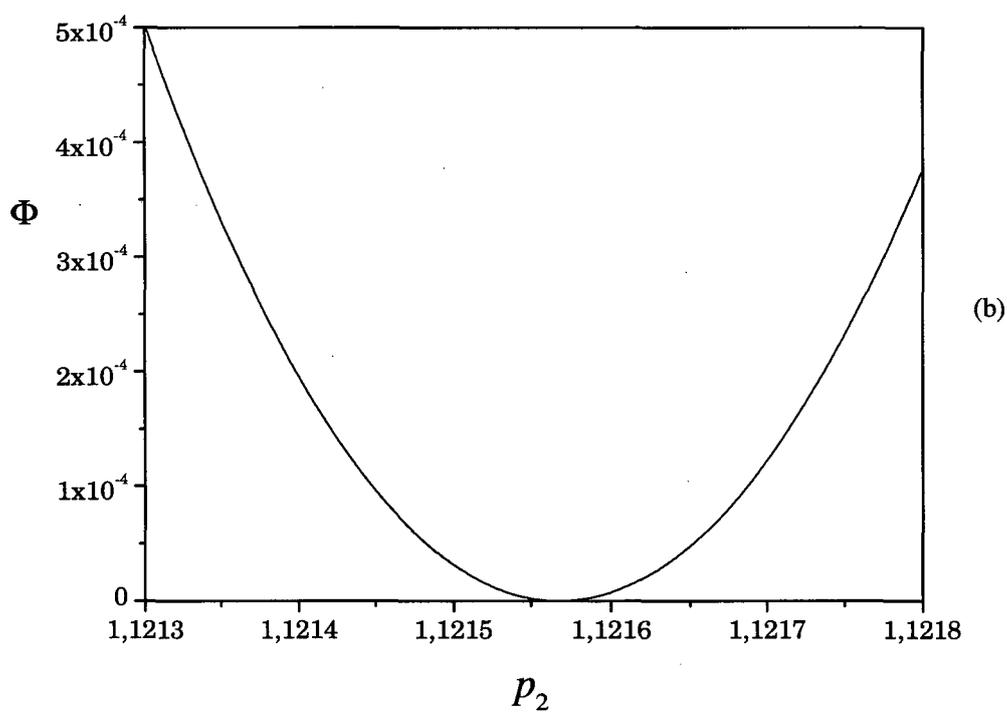
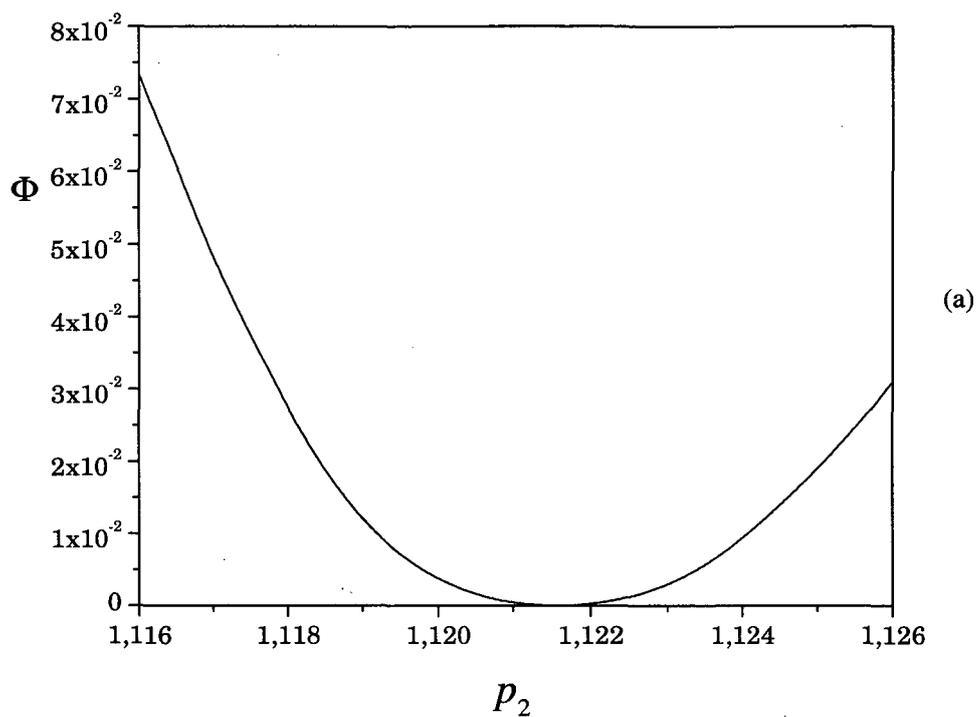


Figura 3.2 Função Φ para a fase 2 \otimes 20/185, $H = 0$, $p_3 = -1/3$, $T = 0,5$ e $Q = 185$. A condição inicial utilizada foi $(+1, +1, +1)$.

(a) $1,116 < p_2 < 1,126$.

(b) detalhe de (a), onde é visível que, para este intervalo de valores de p_2 , a função Φ se anula praticamente num ponto. Neste caso caracteriza-se uma fase "estrita".

Capítulo 4

Estudo do Modelo A3NNI a Campo Nulo

Neste capítulo vamos descrever e discutir o estado fundamental e os diagramas de fases característicos do modelo A3NNI na rede de Bethe a campo nulo, em função dos parâmetros p_2 , p_3 e T .

4.1 O Estado Fundamental do Modelo a Campo Nulo

O estado fundamental do modelo A3NNI na rede de Bethe pode ser estudado a partir do limite de temperatura zero da relação de recorrência (2.26). Neste limite e a campo nulo obtemos:

$$M_n = \text{sgn}(M_{n-1} - p_2 M_{n-2} - p_3 M_{n-3}), \quad (4.1)$$

onde $\text{sgn}(x)$ é a função sinal de x , definida por

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} -1 & \text{se } x < 0 \\ 0 & \text{se } x = 0 \\ +1 & \text{se } x > 0 \end{cases} .$$

Iterando esta relação de recorrência obtemos o diagrama de fases do estado fundamental do modelo (figura 4.1).

Observamos diversas **regiões bidimensionais** do diagrama em que fases diferentes são estáveis a temperatura zero. Neste diagrama achamos também algumas **linhas** com várias configurações diferentes de spins. Além disso, achamos alguns **pontos** isolados do diagrama nos quais existem várias configurações estáveis.

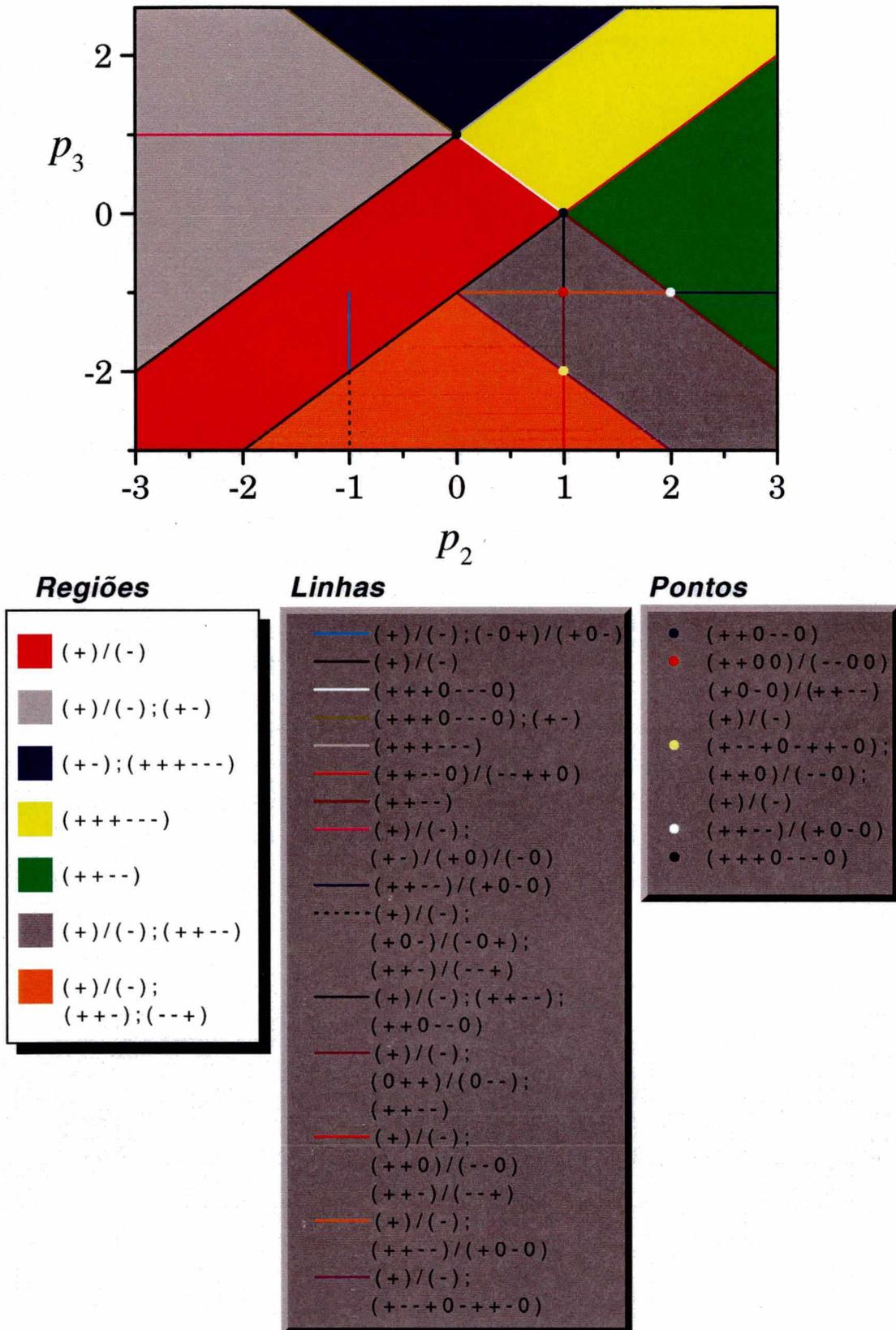


Figura 4.1: Estado fundamental (T = 0) do modelo A3NNI na rede de Bethe a campo nulo.

Passamos à caracterização das regiões bidimensionais. Na região **vermelha** coexistem configurações ferromagnéticas com magnetização positiva ($+++ \dots$) e negativa ($--- \dots$). Na região **cinza claro** estas configurações coexistem com uma configuração antiferromagnética ($+ - + - \dots$). Na região **cinza escuro** coexistem as configurações ferro ($+$) e ($-$) com a fase $1/4$ ($++--++-- \dots$). Estas configurações ferro coexistem com as configurações ($++-$) e ($--+$) da fase $1/3$ na região **laranja**. A região **azul** abriga configurações antiferromagnética e da fase $1/6$ ($+++---$). A fase $1/6$ é a única observada na região **amarela**. Já na região **verde** há somente fase $1/4$.

Entre as regiões bidimensionais (e também no interior de algumas delas) há linhas que abrigam configurações de fases diferentes. Não nos deteremos na explicitação de cada uma destas linhas especiais, que tem cores particulares, e cujas configurações presentes sobre elas estão destacadas na legenda da figura 4.1.

Desejamos destacar apenas algumas linhas que contém configurações que não estão presentes nas regiões bidimensionais citadas no parágrafo anterior. A linha **branca** que separa as regiões **amarela** e **vermelha** contém somente a fase $1/8$ com configuração ($+++0---0$). A linha **amarela** que separa as regiões **azul** e **cinza claro** contém as configurações ($+++0---0$) e ($+ -$). A linha **preta** tracejada no interior da região **laranja** contém as configurações ferromagnéticas ($+$) e ($-$) e quatro configurações diferentes da fase $1/3$: ($+0-$), ($-0+$), ($++-$), ($--+$). A linha **roxa** entre as regiões **cinza escuro** e **laranja** contém as duas configurações ferromagnéticas e a fase $3/10$ ($+---+0-++-0$).

Há ainda pontos especiais em que muitas configurações se fazem presentes. O ponto **vermelho** ($p_2 = 1, p_3 = -1$) contém quatro configurações diferentes da fase $1/4$ e as

duas configurações ferromagnéticas. O ponto **amarelo** (1,-2) contém duas configurações ferromagnéticas, duas configurações da fase 1/3 (+ + 0) e (- - 0) e a fase 3/10. O ponto **branco** (2,-1) contém duas configurações da fase 1/4 (+ + - -) e (+ 0 - 0). Já o ponto **preto** (0,1) contém apenas uma configuração da fase 1/8 (+ + + 0 - - - 0).

4.2 Limite de Estabilidade da Fase PARA

A fase PARAMAGNÉTICA, cuja magnetização média em cada camada da rede de Bethe é zero, é estável a altas temperaturas. Diminuindo a temperatura os spins da rede de Bethe ordenam-se¹. Este ordenamento de spins pode ocorrer originando uma fase FERROMAGNÉTICA, ANTIFERROMAGNÉTICA ou uma estrutura MODULADA.

Sabendo que a fase PARAMAGNÉTICA é estável a altas temperaturas, podemos nos perguntar qual a superfície separa esta região de estabilidade de uma região de instabilidade desta fase. Estamos então interessados em calcular o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA.

Este limite de estabilidade está ligado à matriz jacobiana do mapeamento (2.27) definida em (2.31) e, neste caso, é dada por:

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -p_3/T & -p_2/T & -1/T \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Os autovalores “ Λ ” da matriz \mathbf{L} são soluções da equação cúbica:

¹ Também podemos favorecer o ordenamento dos spins aumentando o valor absoluto do acoplamento (p_2 e/ou p_3) entre eles.

$$\Lambda^3 - \frac{\Lambda^2}{T} + \frac{p_2 \Lambda}{T} + \frac{p_3}{T} = 0. \quad (4.3)$$

E, para que a fase seja estável, é necessário que:

$$\max\{|\Lambda_1|, |\Lambda_2|, |\Lambda_3|\} \leq 1. \quad (4.4)$$

Sendo assim, o limite de estabilidade é encontrado quando o autovalor de maior módulo tiver módulo 1. Isto pode ocorrer em três casos:

Caso 1: $\Lambda_{1,2} = e^{\pm i\theta} \Rightarrow$ 2 autovalores complexos e 1 real .

Caso 2: $\Lambda_1 = +1 \Rightarrow$ 1 autovalor real e 2 complexos ou 3 autovalores reais .

Caso 3: $\Lambda_1 = -1 \Rightarrow$ 1 autovalor real e 2 complexos ou 3 autovalores reais .

Podemos então considerar cada caso separadamente.

Para o caso 1, em que $\Lambda_{1,2} = e^{\pm i\theta}$, temos que $\Lambda_3 = -\frac{p_3}{T}$, portanto a divisão da equação cúbica por $\left(\Lambda + \frac{p_3}{T}\right)$ deve ter resto "R" igual a zero. Efetuando-se esta divisão, o resto "R" será:

$$R = \frac{p_3}{T} - \frac{p_3}{T^2} \left[p_2 + p_3 \left(\frac{p_3 + 1}{T} \right) \right]. \quad (4.5)$$

Igualando a equação acima a zero obtemos:

$$p_2 = T - \frac{p_3(p_3 + 1)}{T}. \quad (4.6)$$

Para o caso 2, substituímos o valor de $\Lambda = 1$ na eq. (4.3) e obtemos:

$$p_2 = 1 - p_3 - T. \quad (4.7)$$

Finalmente, para o caso 3, substituímos o valor de $\Lambda = -1$ na eq. (4.3) e obtemos:

$$p_2 = p_3 - 1 - T. \quad (4.8)$$

Ao caso 1, que resulta na eq. (4.6), está associado o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação às fases MODULADAS. E aos casos 2 ou 3, que resultam nas equações (4.7) e (4.8) respectivamente, estão associados ao limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação à fase FERROMAGNÉTICA ou ANTIFERROMAGNÉTICA.

As curvas dadas pelas equações (4.7) e (4.8) são paralelas para p_3 fixo. Lembramos que a fase PARAMAGNÉTICA é estável a altas temperaturas, portanto o limite de estabilidade desta fase é a curva associada a temperatura mais alta. Isolando a temperatura (T) na eq. (4.7), obtemos:

$$T = 1 - p_3 - p_2 . \quad (4.9)$$

Fazendo o mesmo para a eq. (4.8) obtemos:

$$T = p_3 - 1 - p_2 . \quad (4.10)$$

Então o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação à fase FERROMAGNÉTICA será determinado pela eq. (4.7) se “ $1 - p_3 - p_2 > p_3 - 1 - p_2$ ”, ou seja $p_3 < 1$. Caso contrário ($p_3 > 1$) será determinado pela eq. (4.8) e a fase que se realiza imediatamente abaixo dele será a fase ANTIFERROMAGNÉTICA.

Assim achamos as superfícies sobre as quais pelo menos um dos autovalores têm módulo 1 ($|\lambda| = 1$). Agora precisamos saber em que regiões sobre estas curvas, dadas pelas equações (4.6), (4.7) e (4.8), os outros autovalores tem módulo:

⇒ Menor (ou igual) a 1 (região de estabilidade sobre a curva)

⇒ Maior (ou igual) a 1 (região de instabilidade sobre a curva)

Passamos então a analisar os outros autovalores:

Para o caso 1 já vimos que $\Lambda_{1,2} = e^{\pm i\theta}$ e $\Lambda_3 = -\frac{p_3}{T}$, mas a condição necessária

para que a fase PARAMAGNÉTICA seja estável sobre a curva dada pela eq. (4.6) é:

$$|\Lambda_3| \leq 1, \text{ ou seja } T \geq |p_3|. \quad (4.11)$$

Analogamente, para o caso 2, para que fase PARAMAGNÉTICA seja estável sobre a curva dada pela eq. (4.7) é necessário que $|\Lambda_2| \leq 1$ e $|\Lambda_3| \leq 1$, sendo assim:

$$\begin{cases} T \geq \frac{1+p_3}{2} & \text{se } p_3 \geq -\frac{1}{3} \\ & \text{ou} \\ T \geq -p_3 & \text{se } p_3 \leq 0 \end{cases} \quad (4.12)$$

E para o caso 3 a condição necessária para a fase PARAMAGNÉTICA ser estável sobre a curva dada pela eq. (4.8) é $|\Lambda_2| \leq 1$ e $|\Lambda_3| \leq 1$, ou seja:

$$\begin{cases} T \geq -\left(\frac{1+p_3}{2}\right) & \text{se } p_3 \leq -\frac{1}{3} \\ & \text{ou} \\ T \geq p_3 & \text{se } p_3 \geq 0 \end{cases} \quad (4.13)$$

Podemos verificar facilmente que a intersecção entre as curvas dadas pelas eq. (4.6) e (4.7) ocorre em:

$$T = -p_3 \quad \text{e} \quad T = \frac{1+p_3}{2}. \quad (4.14)$$

E os pontos de intersecção entre as curvas dadas pelas eqs. (4.6) e (4.8) ocorrem em:

$$T = p_3 \quad \text{e} \quad T = -\left(\frac{1+p_3}{2}\right).$$

Com isto encontramos três regiões com soluções diferenciadas:

Para $p_3 \geq 1$ vimos (conforme página anterior) que devemos considerar as curvas dadas pelas eqs. (4.6) e (4.8). Neste caso, o ponto de intersecção entre as curvas é $T = p_3$ e $p_2 = -1$, pois $T \geq 0$ (ver fig. (4.2)).

Analisando a eq. (4.13) para $p_3 \geq 1$ e $p_2 \leq -1$, vemos que o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação à ANTIFERROMAGNÉTICA é dado pela eq. (4.8) se $T \geq p_3$. Já para $p_2 \geq -1$ o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação à MODULADA é dado pela eq. (4.6)

Logo, o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA para $p_3 \geq 1$ é dado por:

$$\begin{cases} T = p_3 - 1 - p_2 & \text{se } p_2 \leq -1 \\ p_2 = T - \frac{p_3(p_3 + 1)}{T} & \text{se } p_2 \geq -1 \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{matrix} T_L = p_3 \\ e \\ p_{2L} = -1 \end{matrix} \quad (4.15)$$

onde p_{2L} e T_L são as coordenadas do Ponto de Lifshitz (Hornreich *et al*, 1975) no plano $T \times p_2$ (ver figura abaixo).

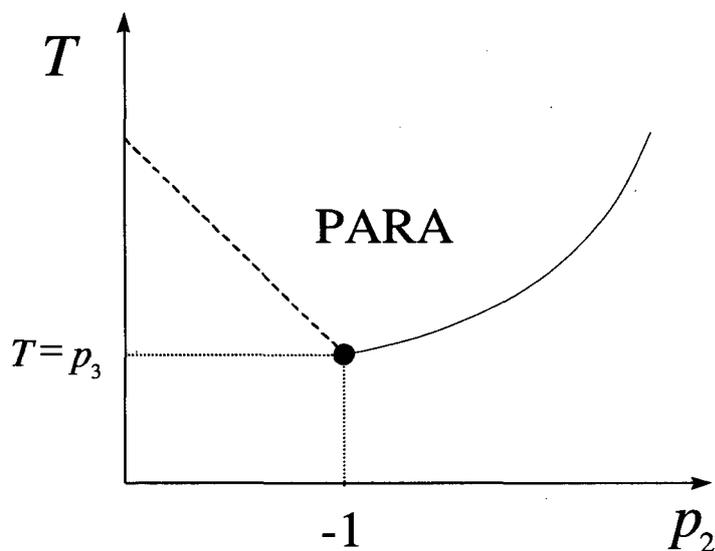


Figura 4.2 Esboço das curvas dadas pelas equações (4.6) e (4.8) representadas pelas linhas cheia e tracejada, respectivamente, para o caso $p_3 \geq 1$.

De maneira análoga obtemos as soluções:

Para $-\frac{1}{3} \leq p_3 \leq 1$

$$\begin{cases} T = 1 - p_2 - p_3 & \text{se } p_2 \leq \frac{1-3p_3}{2} = p_{2L} \\ p_2 = T - \frac{p_3(p_3+1)}{T} & \text{se } p_2 \geq \frac{1-3p_3}{2} \end{cases} \Rightarrow T_L = \frac{1+p_3}{2} \quad (4.16)$$

E para $p_3 \leq -\frac{1}{3}$

$$\begin{cases} T = 1 - p_2 - p_3 & \text{se } p_2 \leq 1 = p_{2L} \\ p_2 = T - \frac{p_3(p_3+1)}{T} & \text{se } p_2 \geq 1 \end{cases} \Rightarrow T_l = -p_3 \quad (4.17)$$

As coordenadas do Ponto de Lifshitz em cada região de valores de p_3 foram obtidas levando-se em conta que as transições PARA - FERRO e PARA - MODULADA são de 2ª ordem.

4.3 Número de Onda Crítico

Determinar o *número de onda crítico* significa caracterizar a fase MODULADA sobre a linha que representa o limite de estabilidade das fases PARA-MODULADA, supondo que haja transição contínua entre elas. Para o modelo A3NNI na rede de Bethe a campo nulo é possível calculá-lo analiticamente.

Na fronteira entre as fases PARA e MODULADA temos:

$$\Lambda_1 = \exp(i\theta) \quad \Lambda_2 = \exp(-i\theta) \quad \text{e} \quad \Lambda_3 = -\frac{p_3}{T} .$$

Da equação cúbica (4.3) temos:

$$\Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3 = \frac{1}{T} \quad \rightarrow \quad T = \frac{1+p_3}{2 \cos(2\pi q_c)} \quad , \text{ onde } q_c = \frac{n^{\circ} \text{ de ondas}}{\text{período}} . \quad (4.18)$$

Sobre o limite de estabilidade PARA-MODULADA temos:

$$p_2 = T - \frac{p_3(p_3 + 1)}{T} .$$

Portanto, a fase com rótulo “ q_c ” é estável sobre a linha de transição (contínua)

PARA-MODULADA se tiver coordenadas

$$T_c = \frac{1+p_3}{2 \cos(2\pi q_c)} \quad \text{e} \quad p_{2_c} = T_c - \frac{p_3(p_3 + 1)}{T_c} . \quad (4.19)$$

4.4 Limite de Estabilidade da Fase FERROMAGNÉTICA

A fase FERROMAGNÉTICA ocorre quando a iteração da relação de recorrência (2.26) converge para um *ponto fixo não-trivial*, ou seja, quando a magnetização média por camada se torna uma constante não-nula, após um número suficiente de iterações. Neste caso, a matriz L definida em (2.31) é dada por:

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -p_3\xi & -p_2\xi & \xi \end{pmatrix}, \quad \text{onde} \quad \xi = \frac{1-m^2}{T} . \quad (4.20)$$

Os autovalores Λ_i ($i=1,2,3$) desta matriz são soluções da equação:

$$\Lambda^3 - \xi \cdot \Lambda^2 + (p_2\xi)\Lambda + p_3\xi = 0 . \quad (4.21)$$

Sabemos também que a fase é estável se $\max\{|\Lambda_1|, |\Lambda_2|, |\Lambda_3|\} \leq 1$. Portanto, na transição FERRO-MODULADA, temos $\Lambda_1 = e^{i\theta}$ e $\Lambda_2 = e^{-i\theta}$. Conseqüentemente $\Lambda_3 = -p_3\xi$.

Então, a divisão da equação cúbica 4.21 por $(\Lambda + p_3\xi)$ deve ter resto “ R ” igual a zero. Efetuando-se esta divisão o resto “ R ” será:

$$R = p_3 \xi \left[1 - p_2 \xi - p_3 (p_3 + 1) \xi^2 \right]. \quad (4.22)$$

Igualando a equação acima à zero obtemos:

$$p_2 = \frac{1}{\xi} - p_3 (p_3 + 1) \xi. \quad (4.23)$$

De acordo com a eq. (2.26), o ponto fixo FERROMAGNÉTICO (m) é dado por:

$$m = \tanh \left[\frac{1}{T} (1 - p_2 - p_3) m \right]. \quad (4.24)$$

As equações (4.23) e (4.24) nos permitem determinar o limite de estabilidade da fase FERROMAGNÉTICA em relação às fases MODULADAS.

4.5 Limite de Estabilidade da Fase MODULADA (LEFM)

Para calcular o LEFM desenvolvemos um programa baseado em iterações da relação de recorrência (2.26), onde investigamos para quais valores dos parâmetros p_2 , p_3 e T a fase MODULADA deixa de existir. A convergência para as fases MODULADAS é bastante lenta perto de seu limite de estabilidade e, além disso, precisamos testar várias condições iniciais para a relação de recorrência, pois há regiões de co-estabilidade de fases MODULADAS e FERROMAGNÉTICA. Nos diagramas de fases obtidos utilizamos, em geral, 100.000 iterações (as primeiras 20.000 iterações são consideradas transiente e então descartadas) e 27 conjuntos de condições iniciais.

4.6 Diagramas de fases para valores característicos de p_3

4.6.1 Comparação do limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA obtido com o encontrado por Moreira e Salinas (1987)

Como já mencionamos, Moreira e Salinas (1987) estudaram o modelo A3NNI na ausência de campo magnético. Eles obtiveram resultados analíticos para o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA para $p_3 > -\frac{1}{3}$. Para o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação a fase FERROMAGNÉTICA eles obtiveram:

$$T + p_2 + p_3 = 1 \quad \text{se} \quad p_2 < \frac{1 - 3p_3}{2}. \quad (4.20)$$

E para o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação a fase MODULADA eles encontraram:

$$p_2 = T - \frac{p_3(p_3 + 1)}{T} \quad \text{se} \quad p_2 < \frac{1 - 3p_3}{2}. \quad (4.21)$$

Eles também determinaram uma linha de Pontos de Lifshitz:

$$p_{2L} = \frac{1 - 3p_3}{2} \quad \text{e} \quad T_L = \frac{1 + p_3}{2}. \quad (4.22)$$

O resultado de Moreira e Salinas concorda com o nosso para $-\frac{1}{3} \leq p_3 \leq 1$. Eles não obtiveram o citado limite para $p_3 \leq -\frac{1}{3}$ e obtiveram resultado diferente do nosso para $p_3 \geq 1$.

Conseqüentemente, obtivemos resultados diferentes, nestas regiões de parâmetros, para a intersecção dos limites de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação à

MODULADA e FERROMAGNÉTICA, que formariam uma linha de Pontos de Lifshitz. Esses pontos de intersecção são mostrados na figura (4.3).

Para $p_3 \in [-0,4667, -0,2015]$, aproximadamente, encontramos uma região de co-estabilidade PARA-MODULADA (ver Fig. 4.10 e 4.11, por exemplo). Esta co-estabilidade sugere a existência de uma transição de primeira ordem entre fases PARA e MODULADA, perto do possível Ponto de Lifshitz. Neste caso, este Ponto de Lifshitz provavelmente se tornaria um Ponto Crítico Terminal, pois nele a linha de segunda ordem FERRO-MODULADA deve encontrar uma linha de primeira ordem (inicialmente PARA-MODULADA e depois FERRO-MODULADA). Este resultado será discutido em detalhe na seção 4.6.3. Este talvez seja um dos resultados mais interessantes deste trabalho, já que desconhecemos a ocorrência de Pontos de Lifshitz Tricríticos em modelos na rede de Bethe.

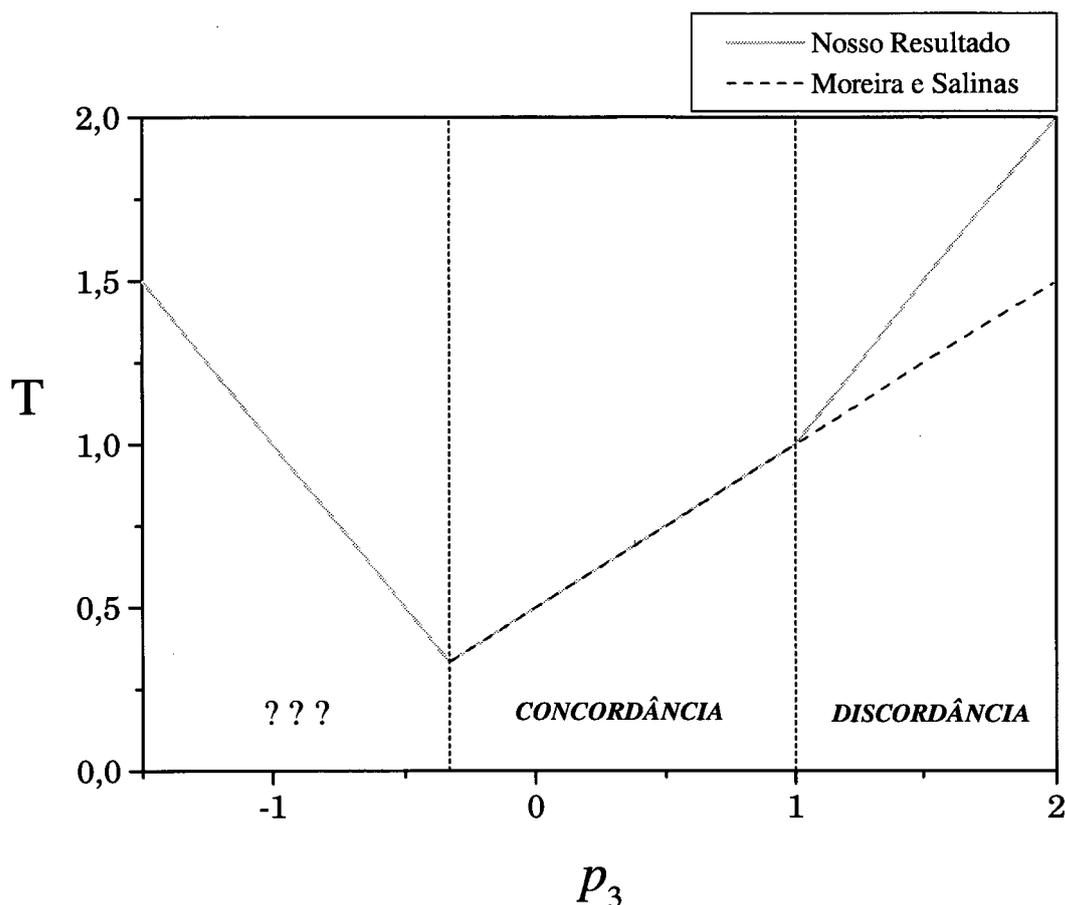


Figura 4.3 Gráfico dos pontos de intersecção entre o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação as fases FERROMAGNÉTICA e MODULADA, segundo os cálculos de Moreira e Salinas (linha tracejada) e segundo os nossos resultados (linha cinza).

4.6.2 Comparação entre os diagramas de fase que obtivemos e os encontrados por Moreira e Salinas (1987)

As figuras (4.4) e (4.5) mostram os diagramas de fases obtidos por Moreira e Salinas.

No caso $p_3 = 0,1$ (interação J_3 ANTIFERROMAGNÉTICA, ver figura 4.4) o diagrama de fases obtido por Moreira e Salinas (1987) apresenta dois pontos de multifase a temperatura nula, dados por $p_2 = 1 \pm p_3$. Do Ponto de Lifshitz se origina uma região hachurada que vai até um ponto de multifase ($p_2 = 1 - p_3$ e $T = 0$). Nos pontos desta região

podemos encontrar tanto configurações FERROMAGNÉTICAS quanto MODULADAS, dependendo da condição inicial escolhida para iterar a relação de recorrência (2.26). Neste caso dizemos que há co-estabilidade entre estruturas FERROMAGNÉTICAS e MODULADAS. O estrangulamento observado em algumas fases e também na fase $1/6$ é suave.

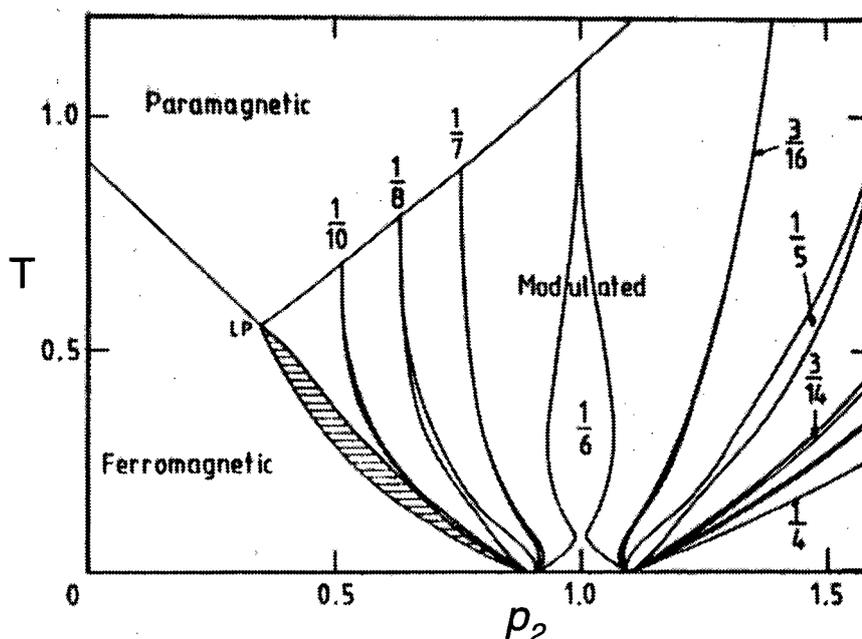


Figura 4.4 Diagrama de fases $T \times p_2$ do modelo de Ising na rede de Bethe com interações até terceiros vizinhos no limite de coordenação infinita (MS, 1987). Neste caso $p_3 = 0,1$. A região hachurada está evidenciando a co-estabilidade das fases FERROMAGNÉTICA e MODULADAS

Já no caso $p_3 = -0,1$ (interações J_3 FERROMAGNÉTICAS, ver Fig. 4.5), o diagrama de fases apresenta características bem diferentes. Fronteiras de fases MODULADAS terminam em outras fases MODULADAS, acusando a existência de transições de primeira ordem entre fases MODULADAS. Além disto, há duas regiões hachuradas: a com hachuras horizontais é análoga à descrita para o caso $p_3 = 0,1$ (há co-estabilidade FERRO-MODULADA); a que tem hachuras verticais é uma região de co-estabilidade entre a fase FERROMAGNÉTICA e a fase $1/4$ ($++--++--...$).

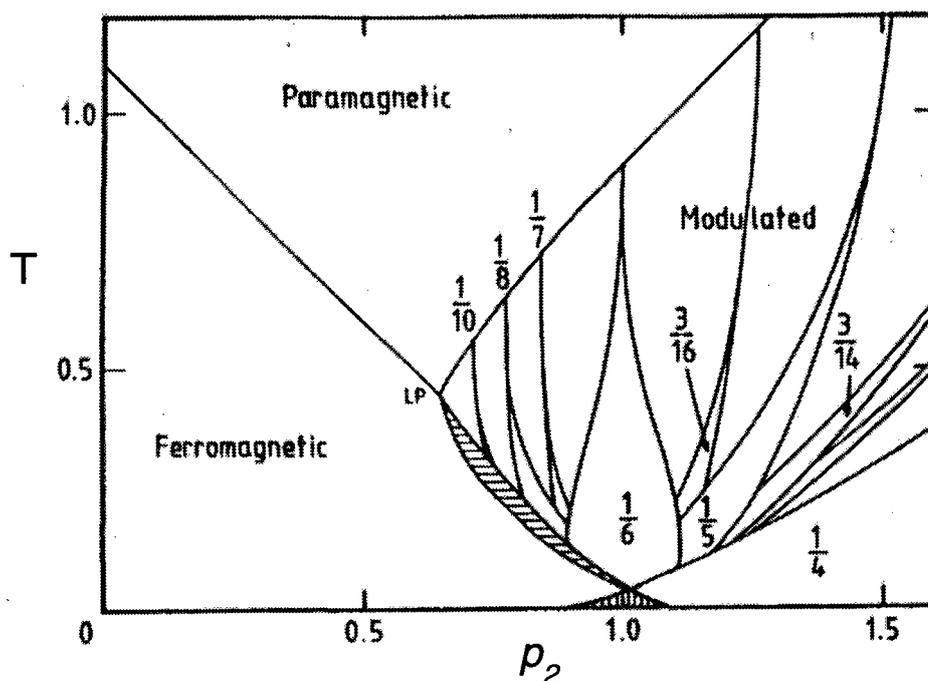


Figura 4.5 Diagrama de fases $T \times p_2$ do modelo de Ising na rede de Bethe com interações até terceiros vizinhos no limite de coordenação infinita (MS, 1987). Neste caso $p_3 = -0,1$, eles encontraram uma região (hachuras verticais) de co-estabilidade das fases FERROMAGNÉTICA e $\frac{1}{4}$.

Para $p_3 = 0,1$ obtivemos um diagrama de fases quase idêntico ao encontrado por MS. Para este diagrama a interação entre spins terceiros vizinhos é ANTIFERROMAGNÉTICA e faz diminuir (em relação ao caso $p_3 = 0$) a região da fase FERROMAGNÉTICA do diagrama, bem como aparecer dois pontos de multifase a temperatura zero. Além disto, várias fronteiras de fases comensuráveis que ocupam línguas de Arnol'd no diagrama apresentam estrangulamentos. Por exemplo, a fase $1/6$ apresenta um estrangulamento perto de $T = 0,1$ com $p_2 = 1$. Este estrangulamento não é suave, mas na forma de bicos que apontam para dentro da região de estabilidade da fase. Eles devem estar ligados a transições de fases entre configurações diferentes no interior de uma fase (Tragtenberg e Yokoi,1995).

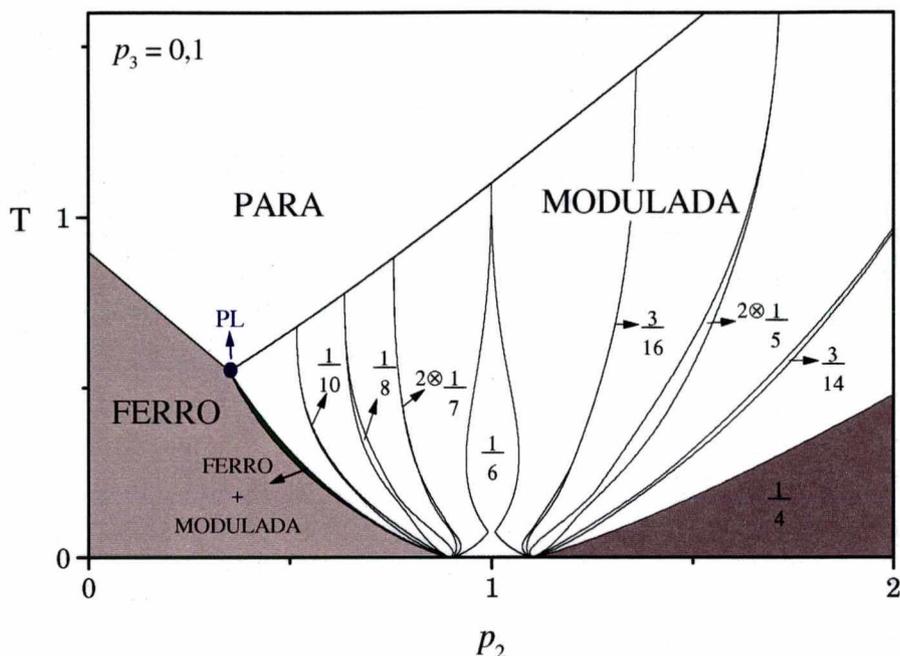


Figura 4.6 Diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = 0,1$ (interação ANTIFERROMAGNÉTICA entre terceiros vizinhos). PL é o Ponto de Lifshitz, (encontro das transições FERRO-PARA E PARA-MODULADA). Na região verde são estáveis as fases FERRO e MODULADA. O limite de estabilidade das fases MODULADAS foi calculado utilizando-se 100.000 iterações (as primeiras 20.000 são consideradas transiente) e impondo-se 27 condições iniciais diferentes.

Já para $p_3 = -0,1$, encontramos um diagrama de fases bem mais complexo do que o obtido por MS (compare as figuras (4.7) e (4.5)). A região de co-estabilidade FERRO+MODULADA é bem mais irregular, devido à forma das fronteiras de fases comensuráveis. Neste caso, a interação entre terceiros vizinhos é FERROMAGNÉTICA e faz aumentar (em relação ao caso $p_3 = 0$) a região de estabilidade da fase FERROMAGNÉTICA e das fases comensuráveis de período maior. Aparece também uma outra região de co-estabilidade das fases FERRO e $\frac{1}{4}$ a baixas temperaturas, que já havia sido detectada por MS. As fronteiras das fases MODULADAS de período par apresentam, a temperaturas baixas, uma ramificação em três direções: na continuação dos dois limites de estabilidade obtidos a altas temperaturas e na continuação do centro da região de estabilidade da fase. Já as fases de período ímpar apresentam somente as duas ramificações

nas direções dos limites de estabilidade obtidos a altas temperaturas. Estas ramificações penetram no interior do limite de estabilidade de outras fases MODULADAS, denotando regiões de co-estabilidade de diferentes fases MODULADAS e, desta forma, indicando a existência de transições de primeira ordem entre fases MODULADAS. As regiões contidas nas ramificações das fronteiras de fases MODULADAS são extremamente complexas e serão discutidas na seção 4.7.

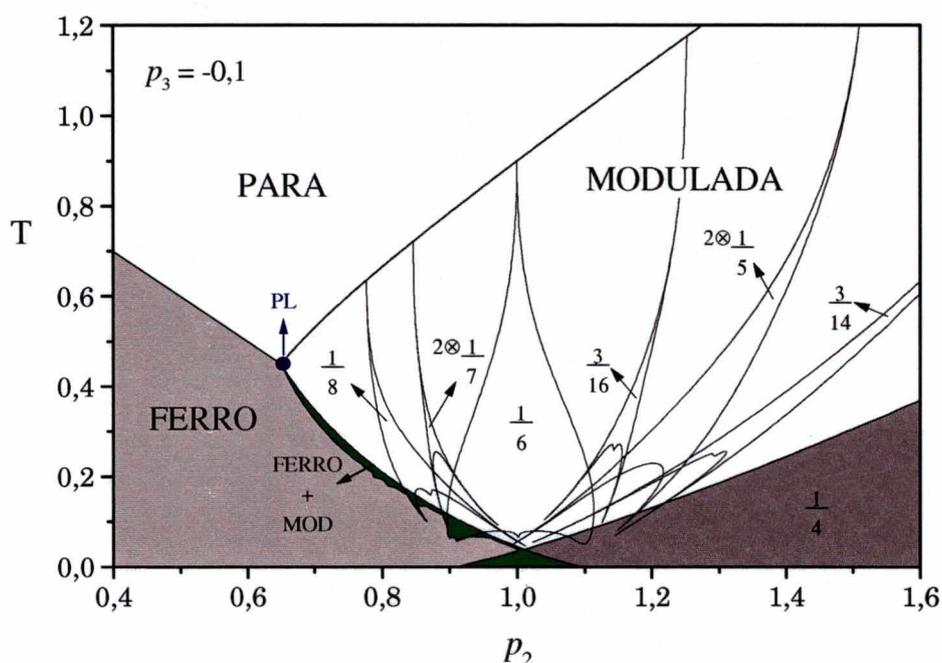


Figura 4.7 Diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = -0,1$ (interação FERROMAGNÉTICA entre terceiros vizinhos). O limite de estabilidade das fases MODULADAS foi calculado utilizando-se 100.000 iterações (as primeiras 20.000 são consideradas transiente e então descartadas) e impondo-se 27 condições iniciais diferentes ao mapeamento (2.27). Algumas fases como a $1/8$ penetram na região de co-estabilidade das fases FERRO e MODULADA sendo necessário considerá-las para a determinação do limite de estabilidade da fase MODULADA, pois utilizando o método iterativo não conseguimos detectá-las por serem muito “finas”.

Neste caso, tornou-se necessário introduzir uma nova forma de rotular algumas fases moduladas. Por exemplo, a fase $2 \otimes 1/5$ possui duas configurações com período 5 (fig. 4.8). Segundo nomenclatura proposta por Kinouchi e Tragtenberg (1996), esta fase seria representada pelo rótulo $2/10$, uma vez que há dois atratores de período 5 e esta fase

estaria ligada a uma seqüência de Farey não-padrão (Perez *et al.*, 1991 e Anexo A). No entanto, neste modelo, existe uma fase $2/10$ legítima, isto é, com período 10 e com duas ondas completas por período. O produto \otimes significa que há dois atratores diferentes de período 5 (fig. 4.8).

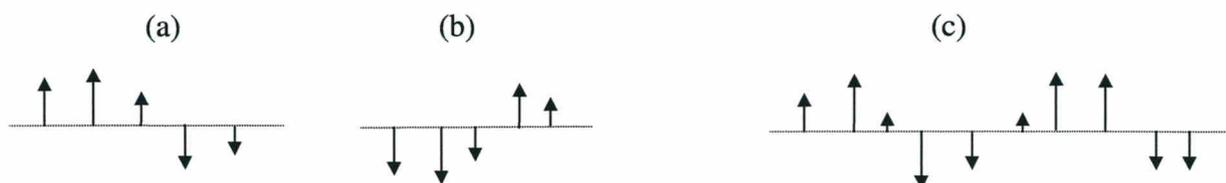


Figura 4.8 Representação de duas configurações de período 5 com atratores diferentes ($2\otimes 1/5$) em (a) e (b) e de uma configuração com número de onda $2/10$ em (c).

4.6.3 Diagramas de fases para valores altos de $|p_3|$

Para valores grandes (em módulo) de p_3 , ocorrem comportamentos qualitativamente diferentes dos já relatados. As figuras (4.9) e (4.10) exibem diagramas de fases dos casos $p_3 = -1/3$ e $p_3 = -0,4$, respectivamente. Eles mostram uma complexa estrutura de fases comensuráveis. Nestes diagramas, encontramos uma região de co-estabilidade PARA-MODULADA perto da intersecção entre os limites de estabilidade da fase PARA em relação à fase MODULADA e à fase FERROMAGNÉTICA, calculado analiticamente e expresso na equação 4.17. Esta intersecção, que deveria representar um Ponto de Lifshitz usual, neste caso não o é. Deve haver um Ponto Crítico Terminal na intersecção entre a região de co-estabilidade PARA-MODULADA e a linha de transição PARA-FERRO. Não podemos determiná-lo precisamente pois carecemos de uma energia livre que permita escolher as configurações que se realizam termodinamicamente. Deve haver também um Ponto Tricrítico usual na fronteira PARA-MODULADA, separando uma linha de transição de segunda ordem de uma linha de transição de primeira ordem. Neste caso, o vetor de onda crítico q_c no encontro entre a transição PARA-MODULADA e a

transição FERRO-MODULADA é diferente de zero. O ponto de encontro dessas linhas deve ser o Ponto Crítico Terminal acima mencionado (ver figura 4.12).

Estes resultados indicam a ocorrência de Pontos de Lifshitz Tricríticos (PLT) nos extremos do intervalo de valores de p_3 acima citado, quando os PTC usuais “colidem” com a linha de transição PARA-FERRO. Nestes pontos, $q_c \rightarrow 0$. Este Ponto Tricrítico está representado nos diagramas por pontos azuis.

Os diagramas das figuras 4.9 e 4.10 são dois exemplos de valores de p_3 nos quais ocorre este comportamento tricrítico complexo.

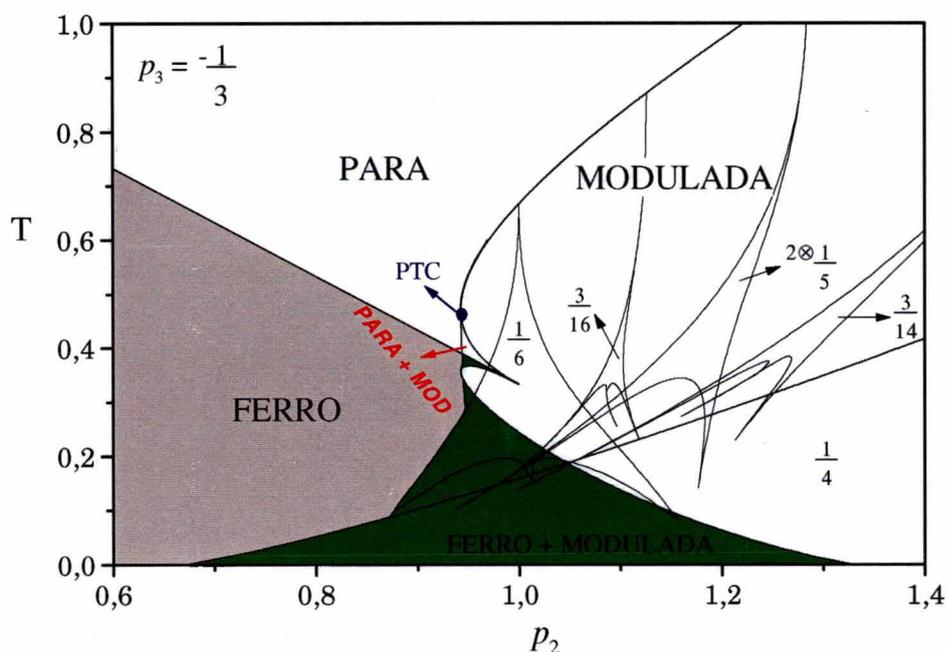


Figura 4.9 Diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = -1/3$. Destaca-se a ocorrência de uma região de co-estabilidade PARA-MODULADA, que insinua uma linha de transição de primeira ordem entre estas fases, com extremos num Ponto de Lifshitz Tricrítico e num Ponto Tricrítico usual.

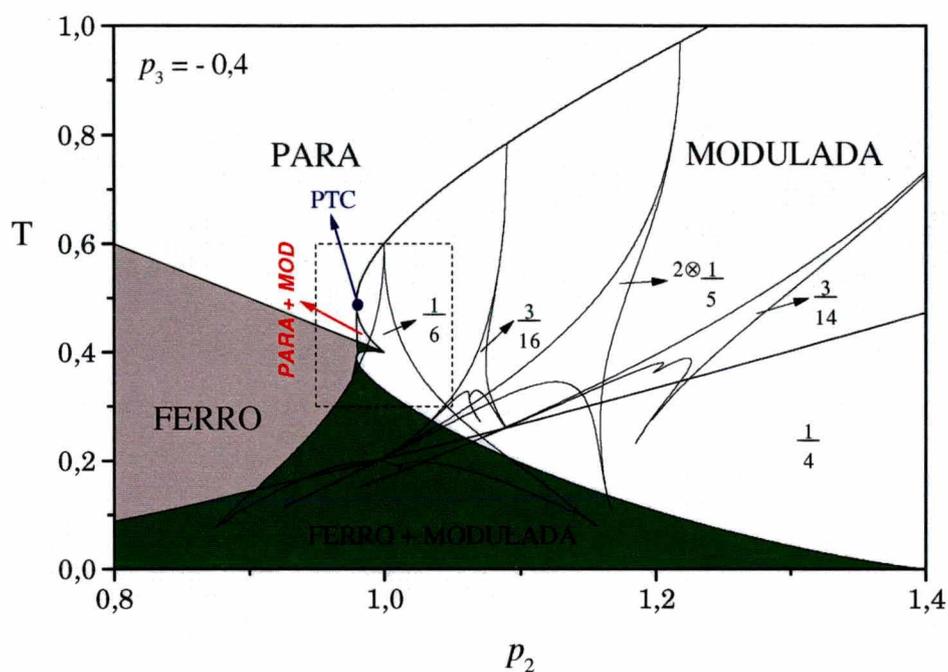


Figura 4.10 Diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = -0,4$. Há uma região de co-estabilidade PARA-MODULADA que acaba num Ponto Tricrítico (PTC). Observamos várias outras regiões onde há coexistência de fases, principalmente a baixas temperaturas.

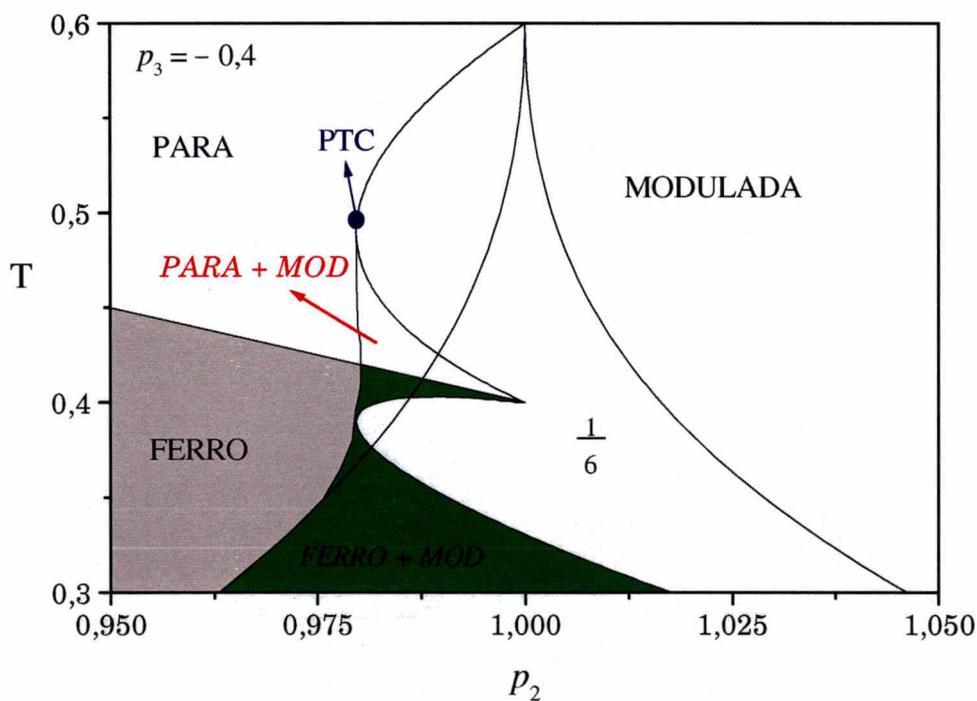


Figura 4.11 A região marcada com um retângulo na figura 4.10 foi ampliada para uma melhor visualização da região de co-estabilidade PARA-MODULADA.

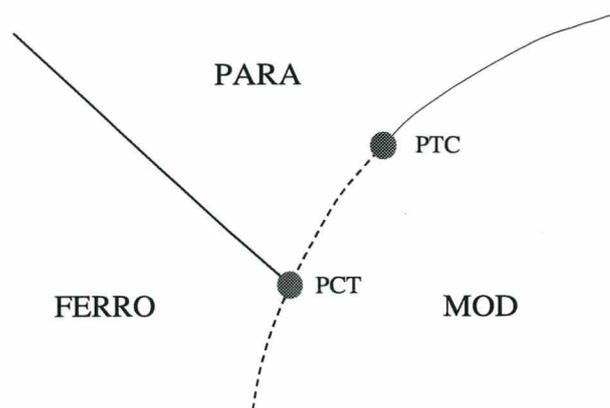


Figura 4.12 Esquema do diagrama de fases termodinâmico do modelo A3NNI na rede de Bethe, para $-0,4667 < p_3 < -0,2015$. A região de co-estabilidade PARA-MODULADA sugere a existência de um Ponto Tricrítico usual (PTC). A fronteira PARA-FERRO (linha contínua) deve acabar num Ponto Crítico Terminal (PCT), sobre a linha de primeira ordem (tracejada), onde há transições PARA-MODULADA e FERRO-MODULADA.

Para valores muito negativos de p_3 , na região de co-estabilidade FERRO-MODULADA, surge uma co-estabilidade FERRO- $2 \otimes 1/3$ (Fig. 4.13). Na realidade, esta fase de período 3 reflete um grande predomínio da interação entre spins terceiros vizinhos, que origina três estruturas FERROMAGNÉTICAS fracamente acopladas.

Para $p_3 < -0,4667$, o vetor de onda crítico é diferente de zero no encontro das linhas críticas PARA-MODULADA e PARA-FERRO (Ponto Bicrítico). Isto indica a existência de uma linha de Pontos Bicríticos no espaço (p_2, p_3, T) .

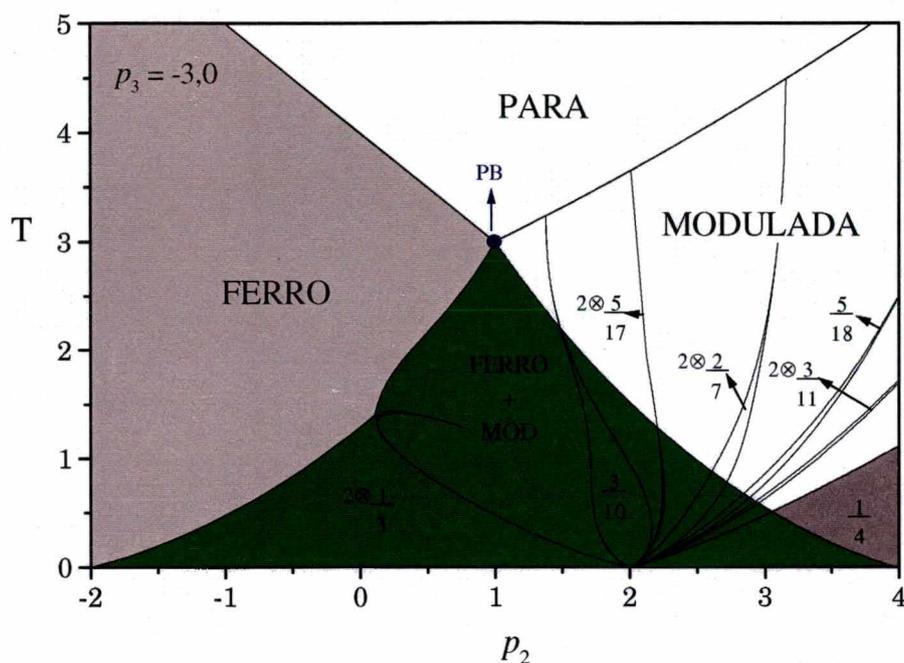


Figura 4.13 Diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = -3,0$ (interação entre terceiros vizinhos FERROMAGNÉTICA). Neste caso e em todos os outros diagramas de fases deste capítulo o limite de estabilidade da fase MODULADA foi calculado iterando-se 100.000 vezes a relação de recorrência (2.26) e utilizando-se 27 condições iniciais diferentes. PB representa um *Ponto Bicrítico*, pois nele $q_c \neq 0$.

Para valores positivos de p_3 , temos um diagrama peculiar para $p_3 = 1$ (figura 4.14), que é quando o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA em relação as fases FERROMAGNÉTICA e ANTIFERROMAGNÉTICA sobrepõem-se. A fase ANTIFERROMAGNÉTICA na realidade funciona como uma superposição de duas fases FERROMAGNÉTICAS fracamente acopladas, e faz fronteira com uma fase PARAMAGNÉTICA. A região de co-estabilidade contém fases FERRO, ANTIFERRO e MODULADA. Em toda a região de ocorrência da fase FERRO ela é co-estável com a ANTIFERRO.

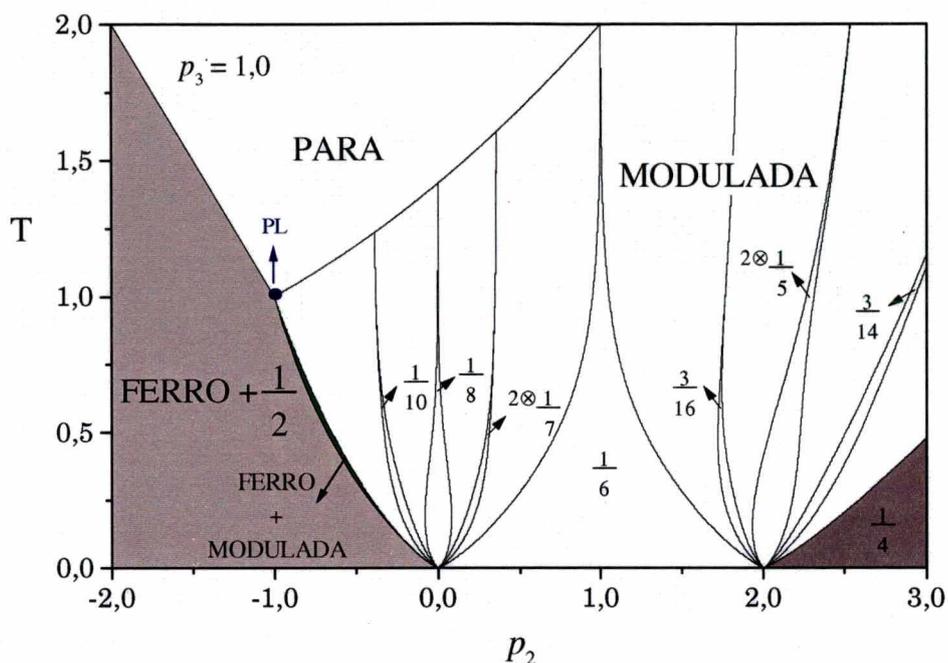


Figura 4.14 Diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = 1,0$. Há dois pontos de multifases e uma região de co-estabilidade FERRO + ANTIFERRO ($\frac{1}{2}$) e uma outra região de co-estabilidade FERRO+ANTIFERRO+MODULADA.

Valores maiores de p_3 , como 1,2 por exemplo (figura 4.15), mostram que a fase ANTIFERROMAGNÉTICA passa a ocorrer a temperaturas mais altas que a FERROMAGNÉTICA. Desta forma, o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA se dá quando começa a estabilidade da fase ANTIFERROMAGNÉTICA e não mais da FERROMAGNÉTICA, como ocorria para valores menores de p_3 ($p_3 \leq 1$). A região de co-estabilidade, delimitada pela linha azul, passa a conter configurações ANTIFERROMAGNÉTICAS e MODULADAS somente.

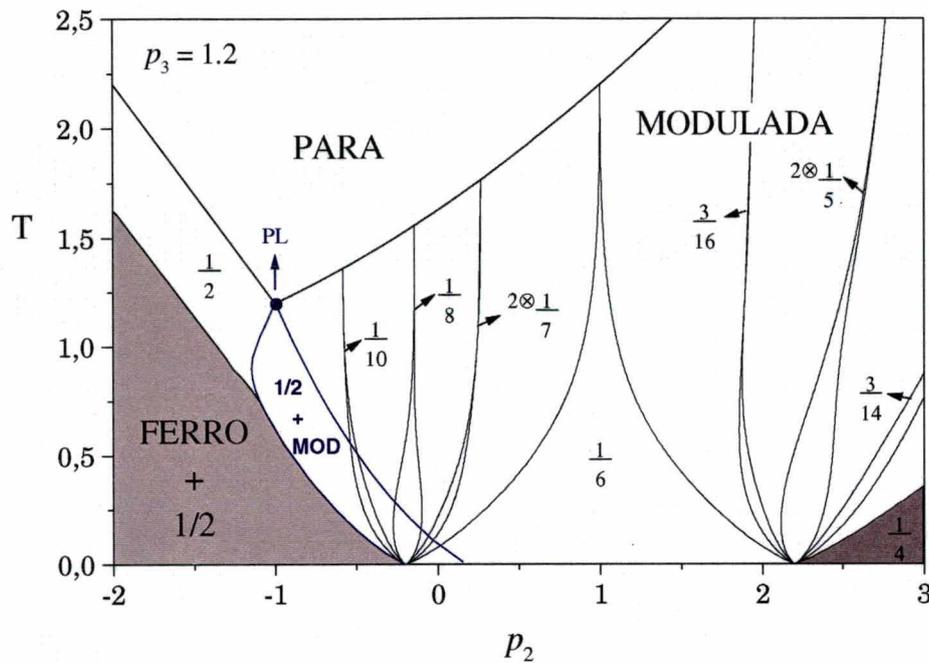


Figura 4.15 Diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = 1,2$. Há dois pontos de multifases, um deles contido num ponto de fronteira entre duas regiões de co-estabilidade: uma FERRO+ANTIFERRO e outra ANTIFERRO+MODULADA (delimitada por uma linha azul). Para calcular o limite de estabilidade da fase ANTIFERRO utilizamos o método iterativo com 27 condições iniciais diferentes e 100.000 iterações, descartando-se as primeiras 20.000.

4.7 Processo de duplicação de período de fases comensuráveis e atratores estranhos

Estudando com mais detalhe o diagrama de fases do modelo a campo nulo, para o caso $p_3 = -0,4$, encontramos uma seqüência de fases comensuráveis com duplicação de período. Detectamos esta seqüência de estruturas para todos os valores negativos de p_3 estudados.

Este processo se assemelha à rota de Feigenbaum para o caos. Na figura 4.16 vemos um detalhe da fase $2 \otimes 1/5$. A temperaturas mais baixas, começam a aparecer fases $2/10$ (período de repetição 10), e , para temperaturas ainda menores aparecem fases $4/20$, $8/40$, etc. Este processo ocorre também em outras fases ($3/14$, $3/16$, etc.) e parece convergir para

uma fase caótica. É possível encontrar, para temperaturas ainda menores, estruturas comensuráveis de período 5, denotando uma região de tremenda complexidade. Provavelmente esta também é uma região de co-estabilidade de várias fases, uma vez que outras fronteiras de fases, obtidas pelo método de Newton, penetram na fase $2 \otimes 1/5$ nessa região (ver fig. (4.10)).

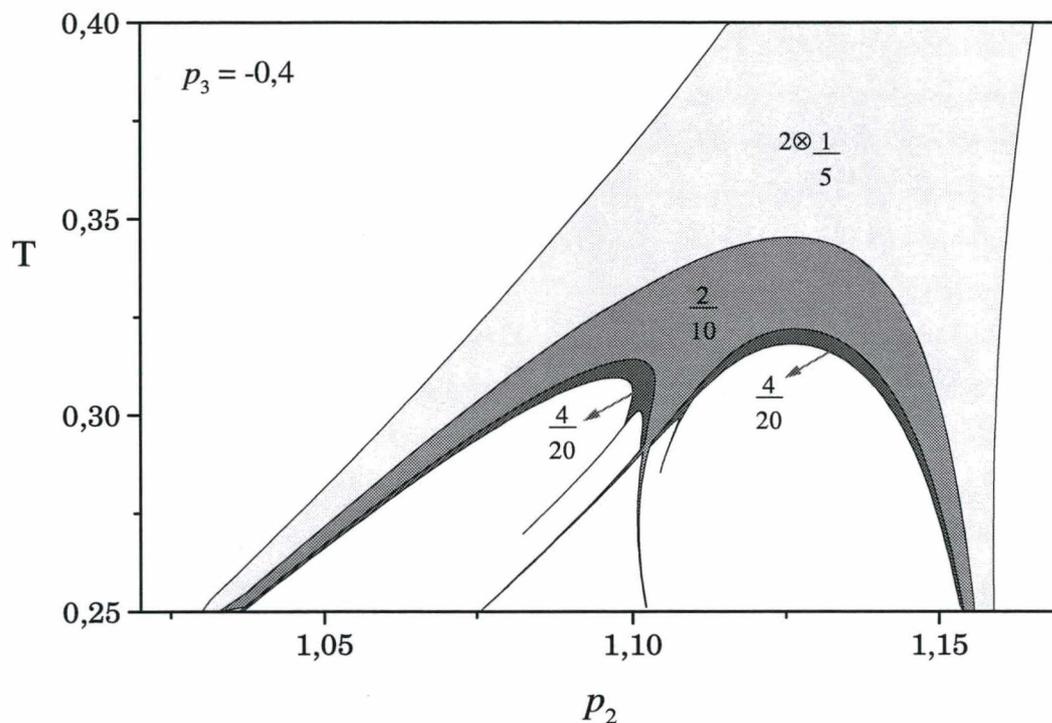


Figura 4.16: Detalhe do diagrama de fases a campo nulo $T \times p_2$ e $p_3 = -0,4$ (ver fig. 4.10). Abaixo da fase $2 \otimes 1/5$ encontram-se fases de período 10 ($2/10$) e 20 ($4/20$)

Na figura 4.17 podemos admirar a seqüência de bifurcações correspondente aos atratores/fases MODULADAS para $p_3 = -0,4$, $p_2 = 1,125$ e temperatura variável.

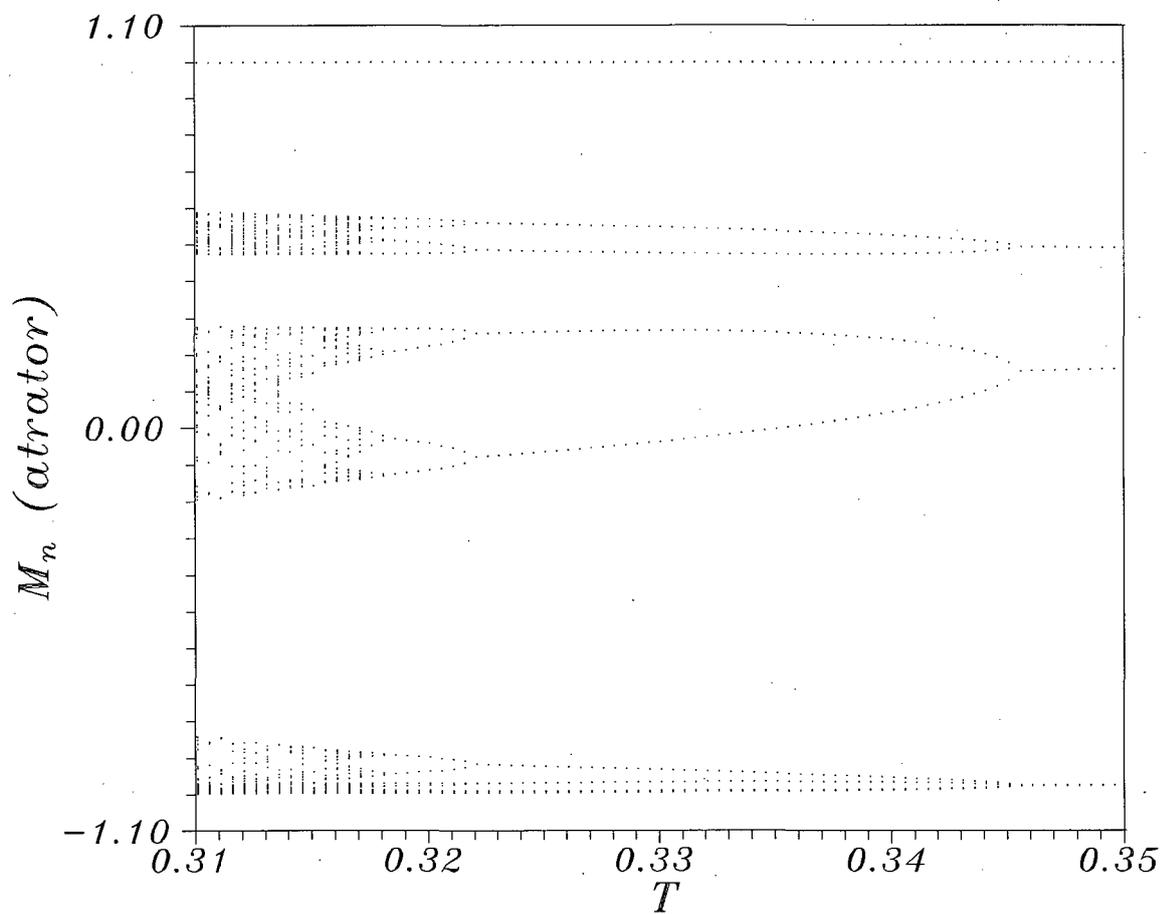


Figura 4.17 Processo de bifurcação correspondente à diminuição de temperatura para $p_3 = -0,4$ e $p_2 = 1,125$. Obtivemos este diagrama iterando 10.000 vezes a relação de recorrência (2.26) e representando as últimas 150 iterações para cada conjunto dos parâmetros p_2 , p_3 , H e T . Neste caso utilizamos a condição inicial $(-1, -1, -1)$.

Capítulo 5

Comportamento do modelo A3NNI na presença de campo magnético externo

5.1 O Estado Fundamental do Modelo na presença de Campo Magnético externo

No limite de temperatura zero ($T \rightarrow 0$), na presença de um campo magnético externo (H), a relação de recorrência (2.26) toma a forma:

$$M_n = \text{sgn}(M_{n-1} - p_2 M_{n-2} - p_3 M_{n-3} + H), \quad (5.1)$$

onde $\text{sgn}(x)$ é a função sinal de x ,

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} -1 & \text{se } x < 0 \\ 0 & \text{se } x = 0 \\ +1 & \text{se } x > 0 \end{cases} .$$

Iterando a relação de recorrência (5.1) obtivemos o diagrama de fases do Estado Fundamental ($T = 0$) para todos os diagramas de fases globais $T \times H$ construídos. Eles serão mostrados na seção 5.4, próximos aos diagramas de fases a temperaturas finitas.

Os diagramas de fases obtidos para temperaturas maiores que zero mostram que o estado fundamental determina a fase modulada que se encontra imediatamente acima dele.

5.2 Limite de Estabilidade da fase PARA

Na presença de campo magnético externo a fase PARAMAGNÉTICA ocorre quando a iteração da relação de recorrência (2.26) converge para um “ponto fixo” não trivial, ou seja, quando a magnetização assume o mesmo valor não nulo¹ nas camadas da rede de Bethe após um número suficiente de iterações.

A fase PARAMAGNÉTICA ocorre para valores altos da temperatura e/ou campo magnético externo. Diminuindo-se o valor do campo magnético e/ou da temperatura podemos ordenar, de maneira diferente, os spins em cada camada da rede de Bethe. Esta ordenação diferente poderá dar origem às fases MODULADAS.

Queremos calcular para quais valores de campo magnético e temperatura (espaço $T \times H$) a fase PARAMAGNÉTICA deixa de ser estável, ou seja, estamos interessados em calcular o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA.

Numa região onde a fase PARAMAGNÉTICA é estável a magnetização média por spin nas camadas da rede de Bethe, segundo a equação (2.26), é dada por:

$$m = \tanh \left[\frac{1}{T} (1 - p_2 - p_3) m + H \right]. \quad (5.2)$$

Isolando H na equação acima, obtemos:

$$H = T \operatorname{arctgh}(m) + (p_2 + p_3 - 1)m. \quad (5.3)$$

Além disso, a matriz L definida em (2.31) é dada por:

¹ Na presença de campo não há fase com magnetização igual a zero em todas as camadas da rede de Bethe, pois qualquer campo magnético externo (mesmo que seja muito pequeno) privilegiará uma orientação dos spins, fazendo com que a fase com magnetização zero seja instável para quaisquer valores dos parâmetros p_2, p_3, T .

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -p_3\xi & -p_2\xi & \xi \end{pmatrix}, \text{ onde } \xi = \frac{1-m^2}{T}, \quad (5.4)$$

e m é a magnetização média nas camadas da rede de Bethe.

Os autovalores Λ desta matriz são dados pela equação:

$$\Lambda^3 - \xi\Lambda^2 + (p_2\xi)\Lambda + p_3\xi = 0. \quad (5.5)$$

Sabemos que a fase PARAMAGNÉTICA é estável se $\max\{|\Lambda_1|, |\Lambda_2|, |\Lambda_3|\} \leq 1$.

Portanto o limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA é encontrado quando o autovalor de maior módulo (Λ_1 , por definição) tiver módulo igual a 1.

Podemos encontrar vários tipos de diagramas de fases com limites de estabilidade da fase PARA diferentes: (1) diagramas com co-estabilidade de diferentes fases PARAMAGNÉTICAS; (2) diagramas que contém esta co-estabilidade e o limite de estabilidade da fase PARA em relação à fase ANTIFERRO; (3) diagramas com esta co-estabilidade e também o limite de estabilidade da fase PARA em relação à fase MODULADA sem co-estabilidade com esta última e (4) diagramas mais complexos que, além de conter co-estabilidade PARA-PARA também exibem co-estabilidade PARA-MODULADA.

5.2.1 Regiões de co-estabilidade PARA-PARA

Como já mencionamos (capítulo 4), na ausência de campo magnético externo, para certos valores dos parâmetros p_2 e p_3 a fase FERROMAGNÉTICA (co-estabilidade das configurações $+m$ e $-m$) é estável. Nestes casos, com o aumento do campo externo, a magnetização que tiver sinal contrário ao campo irá diminuir em módulo. Se continuarmos a aumentar a intensidade do campo externo esta configuração irá se tornar instável. Neste

ponto, dizemos que encontramos a fronteira de uma região de co-estabilidade PARA-PARA, pois daqui em diante somente a configuração favorecida (magnetização com o mesmo sinal do campo) “sobreviverá” e portanto haverá somente uma configuração estável ao invés de duas.

No limite de estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA temos $\Lambda_1 = 1$. Então, de acordo com a eq. (5.5) teremos:

$$m_c^\pm = \pm \sqrt{1 - \frac{T_c}{1 - p_2 + p_3}}, \quad (5.6)$$

onde m_c^\pm é a magnetização neste limite.

Sendo assim, a eq. (5.3) torna-se:

$$H_c^\pm = T_c \operatorname{arctgh}(m_c^\pm) + (p_2 + p_3 - 1)m_c^\pm. \quad (5.7)$$

A eq. (5.7) determina as fronteiras da região de co-estabilidade PARA-PARA no plano $T \times H$ (ver figura 5.1, por exemplo).

Na figura 5.1, na região preenchida (cor cinza claro), coexistem dois pontos fixos correspondendo a magnetizações paralelas e antiparalelas ao campo magnético externo². Já na região externa há somente um ponto fixo estável; este surge devido a atuação do campo magnético externo na fase PARAMAGNÉTICA a campo nulo ($m = 0$) que orienta os spins no mesmo sentido do campo.

² Como já mencionamos, estas duas magnetizações se originam devido a existência de simetria na fase FERROMAGNÉTICA (coexistência das configurações $+m$ e $-m$) na ausência de campo magnético externo.

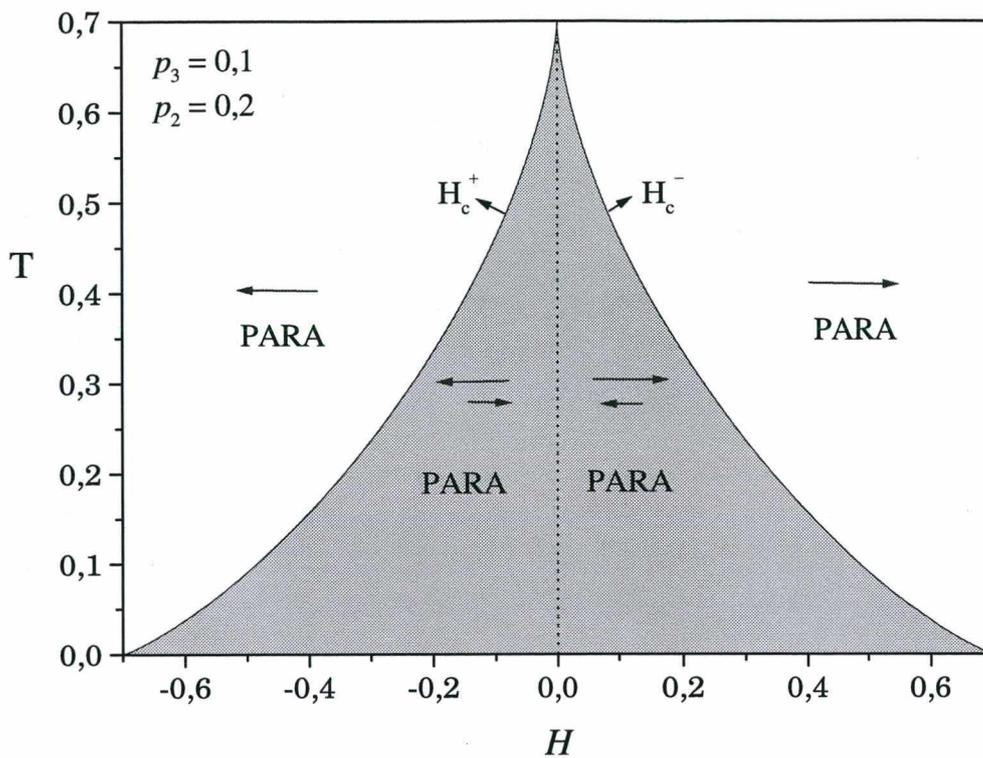


Figura 5.1 Limite de estabilidade de fases PARAMAGNÉTICAS do modelo A3NNI na rede de Bethe para $p_2 = 0,2$ e $p_3 = 0,1$. As setas apontando para a direita (esquerda) representam magnetização positiva (negativa). H_c^+ e H_c^- são os campos críticos em função da magnetização positiva e negativa, respectivamente, conforme a eq. (5.7).

5.2.2 Limite de Estabilidade da fase PARA em relação à ANTIFERRO.

Este limite de estabilidade ocorre (ver figura 4.13, por exemplo) quando o autovalor de maior módulo for igual a -1 , ou seja, $\Lambda_1 = -1$. Conseqüentemente, da eq. (5.5), temos:

$$m_c^\pm = \pm \sqrt{1 - \frac{T}{p_3 - p_2 - 1}}, \quad (5.8)$$

onde m_c^\pm é a magnetização no limite de estabilidade da fase PARA em relação à fase ANTIFERRO.

Sendo assim, a eq. (5.3) torna-se:

$$H_c^\pm = T_c \operatorname{arctgh}(m_c^\pm) + (p_2 + p_3 - 1)m_c^\pm. \quad (5.9)$$

A eq. (5.9) determina o limite de estabilidade da fase PARA no plano $T \times H$ (ver figura 5.2, por exemplo).

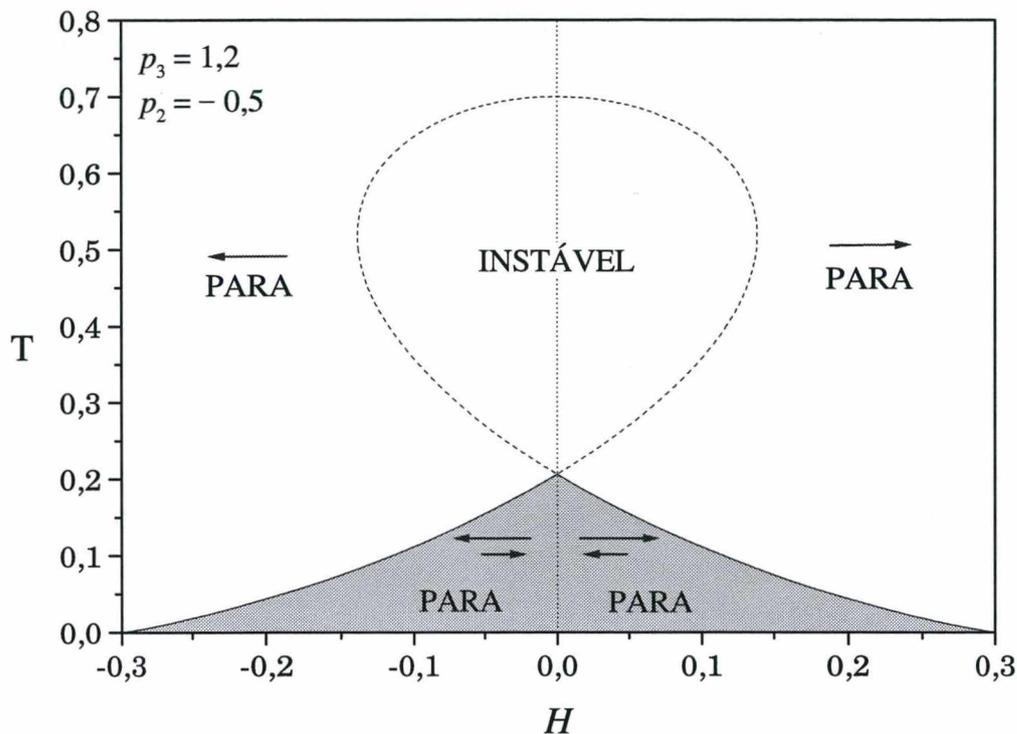


Figura 5.2 Limites de estabilidade da fase PARA em relação à ANTIFERRO (linha tracejada) e PARA (em preto) do modelo A3NNI na rede de Bethe para $p_3 = 1,2$ e $p_2 = -0,5$. As setas apontando para a direita (esquerda) representam magnetização positiva (negativa). H_c^+ e H_c^- são os campos críticos em função da magnetização positiva e negativa, respectivamente, conforme a eq. (5.7).

No diagrama da figura 5.2 a região em cinza claro é análoga à região da mesma cor na figura 5.1. Na região circundada pela linha tracejada a fase PARAMAGNÉTICA é instável.

5.2.3 Limite de estabilidade da fase PARA em relação à MODULADA

Neste limite, temos $\Lambda_1 = e^{i\theta}$, $\Lambda_2 = e^{-i\theta}$ e, conseqüentemente, $\Lambda_3 = -p_3\xi$.

Então, a divisão da equação cúbica (5.5) por $(\Lambda + p_3\xi)$ deve ter resto "R" igual a zero. Efetuando-se esta divisão, o resto "R" será:

$$R = p_3\xi[1 - p_2\xi - p_3(p_3 + 1)\xi^2]. \quad (5.10)$$

Igualando a equação acima a zero, obtemos:

$$p_2 = \frac{1}{\xi_c} - p_3(p_3 + 1)\xi_c, \text{ onde } \xi_c = \frac{1 - m_c^2}{T}. \quad (5.11)$$

No limite de estabilidade da fase PARA em relação à MODULADA, de acordo com a eq. (5.3), temos:

$$H_c = T_c \operatorname{arctgh}(m_c) + (p_2 + p_3 - 1)m_c. \quad (5.12)$$

A solução das equações acopladas (5.11) e (5.12) determina o limite de estabilidade acima referido (ver figuras 5.3 e 5.4, por exemplo).

Na figura 5.3, analogamente à figura 5.1, na região cinza claro coexistem dois pontos fixos correspondendo a magnetizações paralelas e antiparalelas ao campo magnético externo. Na região branca há somente um ponto fixo estável. Neste caso surge também uma região (cor cinza escuro) onde a fase PARAMAGNÉTICA é instável. Esta região está relacionada a existência apenas de fases moduladas na ausência de campo magnético externo.

No diagrama da figura 5.4, a campo nulo, não há fase FERROMAGNÉTICA (coexistência das estruturas $+m$ e $-m$). Portanto, neste diagrama, há somente a região cinza escuro onde a fase PARAMAGNÉTICA é instável e a região branca onde existe somente um ponto fixo estável.

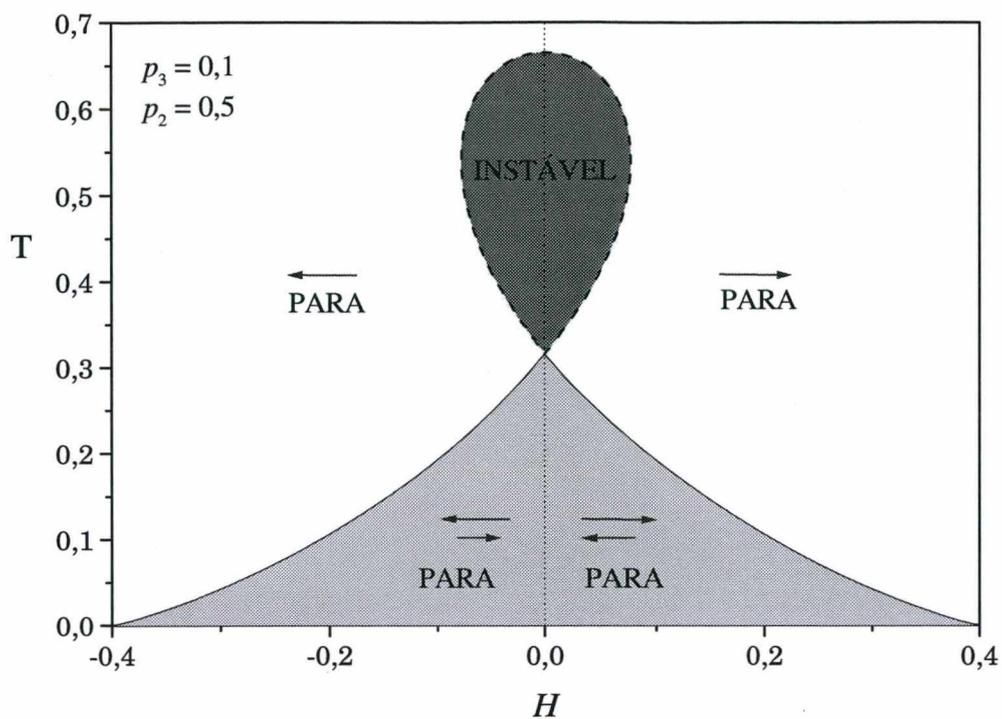


Figura 5.3 Limites de estabilidade da fase PARA em relação à MODULADA (linha tracejada) e PARA (linha cheia) do modelo A3NNI na rede de Bethe para $p_2 = 0,5$ e $p_3 = 0,1$. Na região cinza escuro a fase PARA é instável.

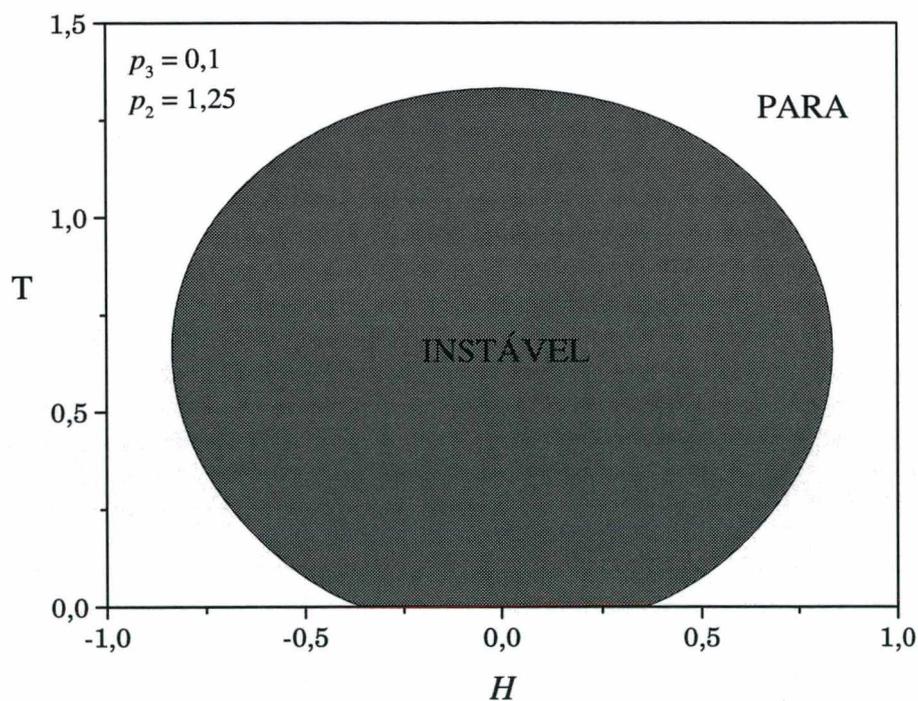


Figura 5.4 Limite de Estabilidade da fase PARA-MOD do modelo A3NNI na rede de Bethe com número de coordenação infinita para $p_2 = 1,25$ e $p_3 = 0,1$. Na região cinza escuro a fase PARA é instável.

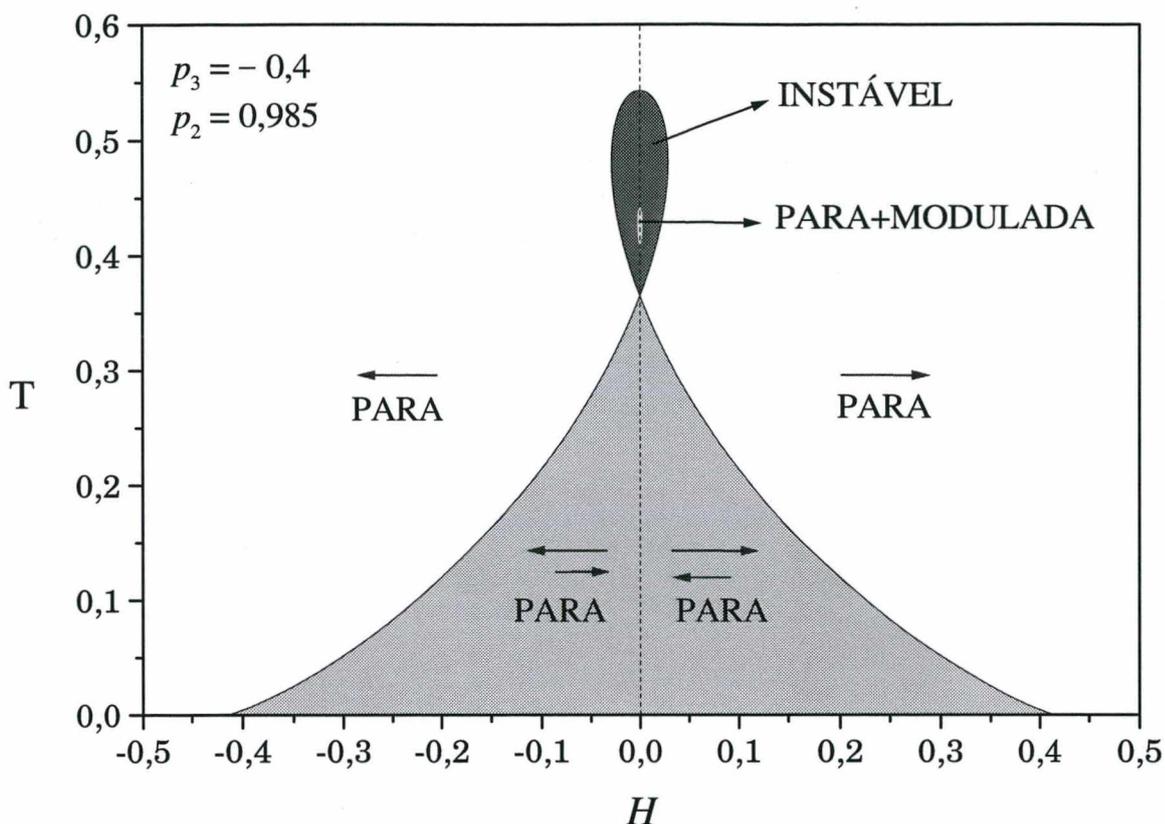


Figura 5.5 Limite de Estabilidade da fase PARAMAGNÉTICA para $p_2 = 0,985$ e $p_3 = -0,4$. Na região cinza escuro ela é instável. Neste caso, como indicamos com uma seta, há uma região de co-estabilidade das fases PARA e MODULADA.

No caso da figura 5.5, como evidenciamos, há uma região na qual existe uma co-estabilidade PARA-MODULADA. Como já mencionamos, na presença de campo, a fase com magnetização zero em todas as camadas da rede de Bethe não é estável, pois a simetria antes existente é destruída pela ação do campo. Na região cinza escuro a fase PARAMAGNÉTICA é instável.

5.3 Número de Onda Crítico

No limite de estabilidade PARA-MODULADA $\Lambda_1 = \Lambda_2^*$ e $|\Lambda_1| = |\Lambda_2| = 1$,

Portanto, $\Lambda_1 = e^{i\theta}$, $\Lambda_2 = e^{-i\theta}$ e $\Lambda_3 = -p_3\xi$.

Da equação cúbica temos:

$$\Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3 = \xi \quad \rightarrow \quad \cos(2\pi q_c) = \frac{1+p_3}{2} \xi_c, \text{ onde } q_c = \frac{n^0 \text{ de ondas}}{\text{período}}. \quad (5.13)$$

O limite de estabilidade PARA-MODULADA é dado por:

$$p_2 = \frac{1}{\xi_c} - p_3(p_3 + 1)\xi_c. \quad (5.14)$$

Portanto, $\xi_c = f(p_2, p_3)$. Como ξ_c não depende de H e nem de T concluímos que

o número de onda crítico é constante no plano $T \times H$.

5.4 Diagramas de Fases do Modelo A3NNI na presença de Campo Magnético Externo

Nesta seção apresentaremos os diagramas de fases $H \times T$ obtidos para diversos valores dos parâmetros p_2 e p_3 .

É bom salientar que em todos os diagramas determinados foram utilizados um procedimento baseado no Método de Newton e um método baseado na minimização da função Φ (ver capítulo 3), que serve para determinar regiões “finas” de ocorrência de fases comensuráveis. Estas fases normalmente possuem períodos muito longos.

O fato dessas fases serem representadas por linhas não significa que tenham largura nula. Significa somente que não pudemos detectar sua largura e que, dentro da precisão numérica adotada, ela é nula. Geralmente a “espessura” das fases citadas acima é menor que a espessura da linha que as representa (ver figura 5.10, por exemplo).

A utilização dos métodos acima citados foi indispensável na construção dos diagramas de fases globais ($T \times H$), sem os quais seria praticamente inviável o estudo destes diagramas com o grau de detalhamento obtido.

Escolhemos valores típicos dos parâmetros p_2 e p_3 para estudar o comportamento do modelo A3NNI na presença de campo.

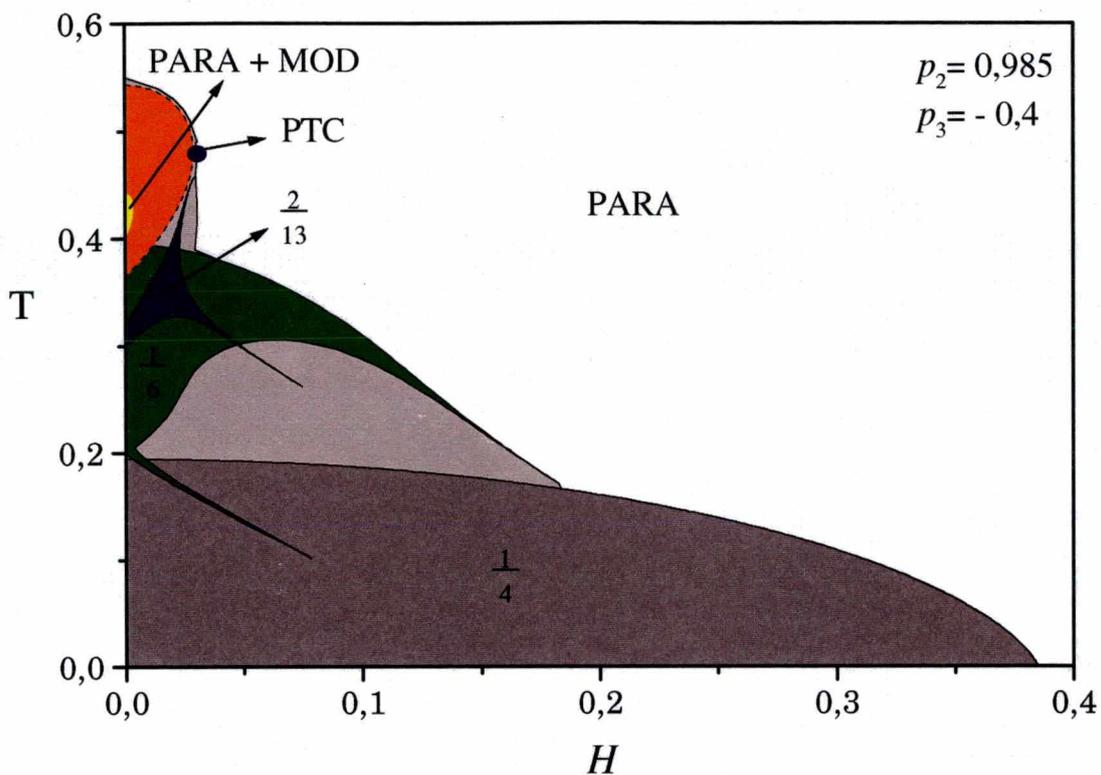


Figura 5.6 Diagrama de fases do modelo A3NNI na rede de Bethe na presença de campo magnético externo. Neste caso, $p_2 = 0,985$ e $p_3 = -0,4$. Na região amarela são co-estáveis a fase PARA e MODULADA. Há regiões de co-estabilidade entre fases comensuráveis (como $2/13$ e $1/6$) e a fase PARA. PTC é um Ponto Tricrítico.

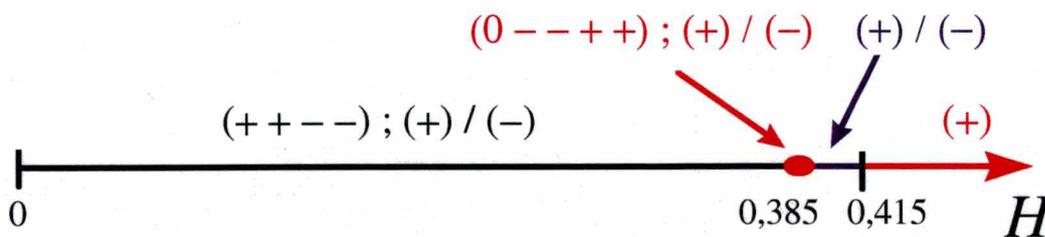


Figura 5.7 Estado fundamental para $p_2 = 0,985$ e $p_3 = -0,4$. Os intervalos com cores diferentes indicam a existência de estruturas diferentes [no intervalo em azul, por exemplo, há estruturas $(-)$ e $(+)$]. Além disso, encontramos pontos onde existem diferentes configurações.

No diagrama de fases da figura 5.6, a região amarela perto de $T = 0,4$ e $H=0$ é uma região de co-estabilidade PARA-MODULADA, reminescente da região de co-estabilidade PARA-MODULADA na ausência de campo. Nota-se que as fases comensuráveis $2/13$ e $1/6$ apresentam regiões de co-estabilidade, mas encontram-se numa região do diagrama de fases em que são também co-estáveis com a fase PARA, bem como as regiões cinza claras e a fase $1/4$. A região laranja apresenta somente fases comensuráveis, pois seus limites coincidem com o limite de estabilidade da fase PARA. PTC representa um Ponto Tricrítico, onde se encontram uma linha de transição de segunda ordem PARA-MODULADA, com uma região de co-estabilidade PARA-MODULADA, indicando a existência de uma transição de primeira ordem entre estas fases.

Verificamos, no diagrama da figura 5.8, várias duplicações de período (5, 10, 20...) ao diminuir a temperatura (T). Se continuarmos a diminuir a temperatura observamos que surge uma fase caótica. Há também regiões de co-estabilidade entre fases comensuráveis ($1/5$ e $2/10$, por exemplo), que indicam transições de fases de primeira ordem entre fases comensuráveis. Além disto, verificamos a existência de um Ponto Tricrítico, encontro de uma linha de segunda ordem PARA-MODULADA com a região de co-estabilidade PARA-MODULADA. A linha tracejada indica o limite de estabilidade da fase PARA em relação à MODULADA.

Para determinar o limite de estabilidade da fase MODULADA a relação de recorrência (2.26) foi iterada 80.000 vezes partindo-se de diferentes condições iniciais para verificar a existência ou não de configurações MODULADAS.

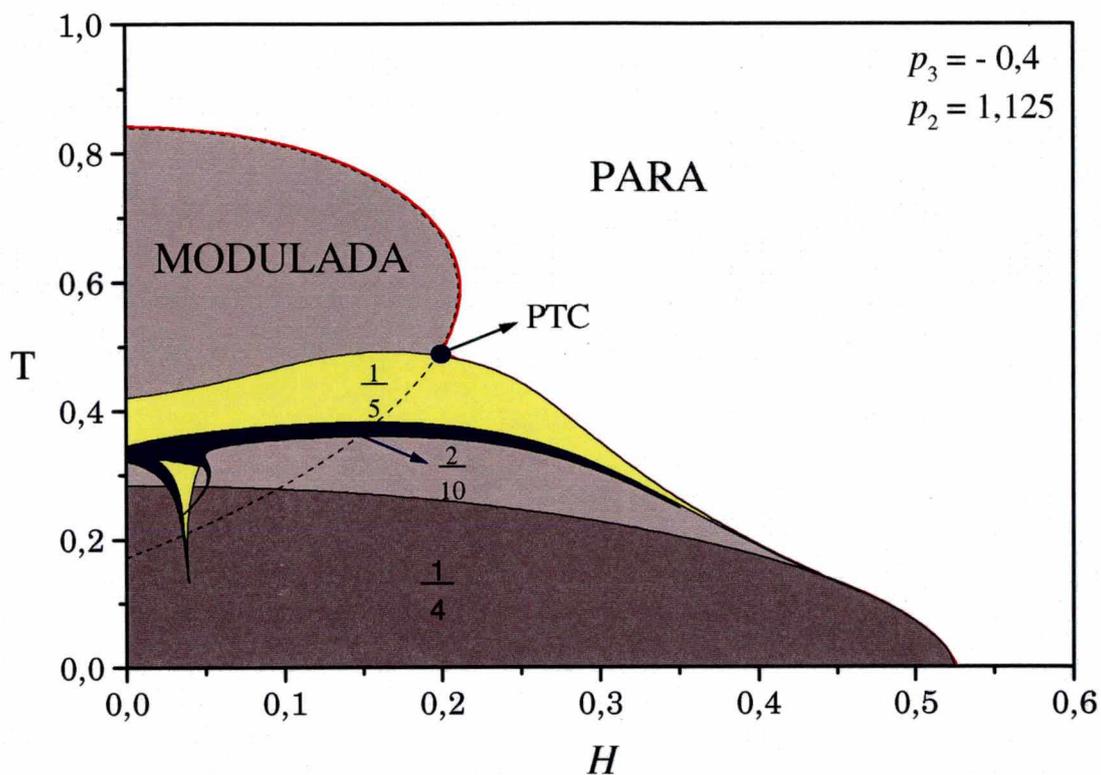


Figura 5.8 Diagrama de fases para $p_2 = 1,125$ e $p_3 = -0,4$. Cada região de cor diferente representa a região de estabilidade de uma fase (a fase $2/10$ é estável na região em azul, por exemplo). PTC é um Ponto Tricrítico.

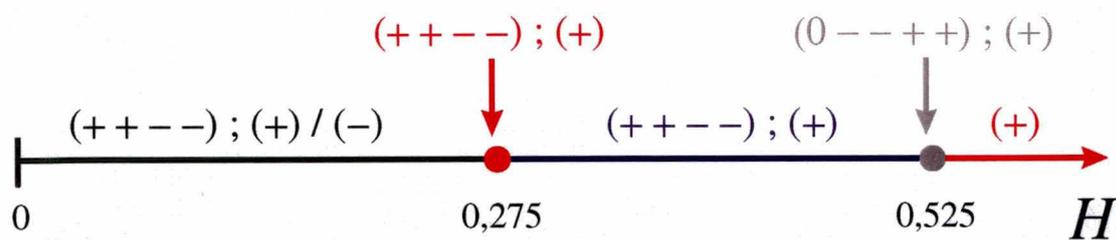


Figura 5.9 Estado fundamental para $p_2 = 1,125$ e $p_3 = -0,4$. Os intervalos com cores diferentes indicam a existência de estruturas diferentes [no intervalo em azul, por exemplo, coexistem as estruturas $(+ + - -)$ e $(+)$]. Além disso encontramos pontos onde diferentes configurações são estáveis.

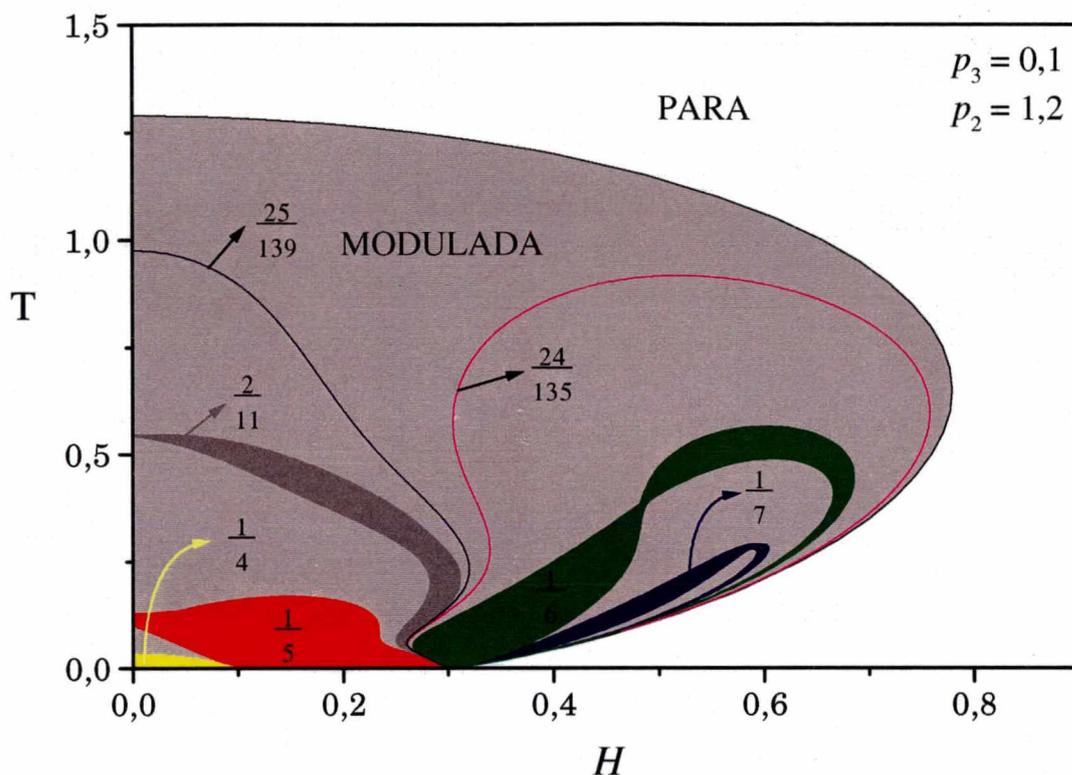


Figura 5.10 Diagrama de fases para $p_2 = 1,2$ e $p_3 = 0,1$. Existem fases comensuráveis “muito estreitas” que determinamos utilizando o método da função Φ (ver capítulo 3).

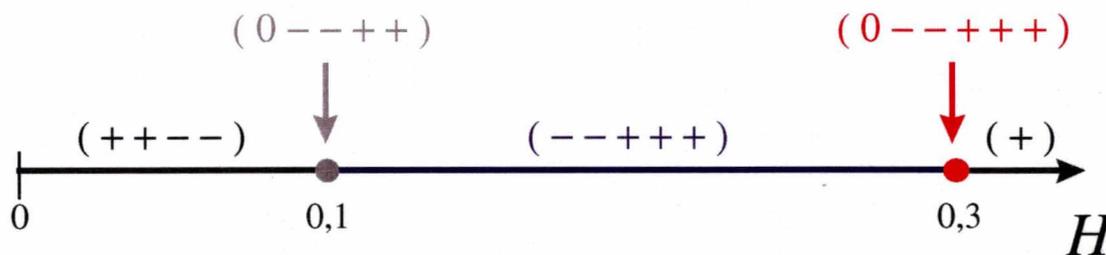


Figura 5.11 Estado fundamental para $p_2 = 1,2$ e $p_3 = 0,1$. Analogamente ao caso da figura 5.5 os intervalos e os pontos com cores diferentes representam fases diferentes.

O diagrama de fases da figura 5.10 evidencia que as fases que existem na ausência de campo magnético sobrevivem em sua presença. Algumas (com número de onda entre $\frac{1}{4}$ e $\frac{1}{5}$) se juntam num ponto de multifases ($H=0,1$) e outras (com número de onda entre $\frac{1}{5}$ e o número de onda crítico) se juntam num outro ponto de multifases ($H=0,3$). Por outro

lado, as fases que só existem na presença de campo, saem e retornam a este último ponto de multifases de forma que uma envolva a outra, como camadas de uma cebola. Não há Ponto Tricrítico neste caso.

No caso da figura 5.12 notamos uma estrutura extremamente rica no interior de uma região de co-estabilidade PARA-MODULADA, incluindo um ponto de multifases e a ocorrência de fases exclusivamente quando o campo magnético é aplicado ($1/3$ e $3/10$, por exemplo). A fase $1/3$ ocupa uma região apreciável do diagrama. Sua fronteira a alto campo, bem como a das regiões cinza delimitam o limite de estabilidade das fases moduladas. A linha tracejada indica o limite de estabilidade da fase PARA, indicando que o Ponto Tricrítico se encontra a temperaturas mais altas que as indicadas na figura 5.12.

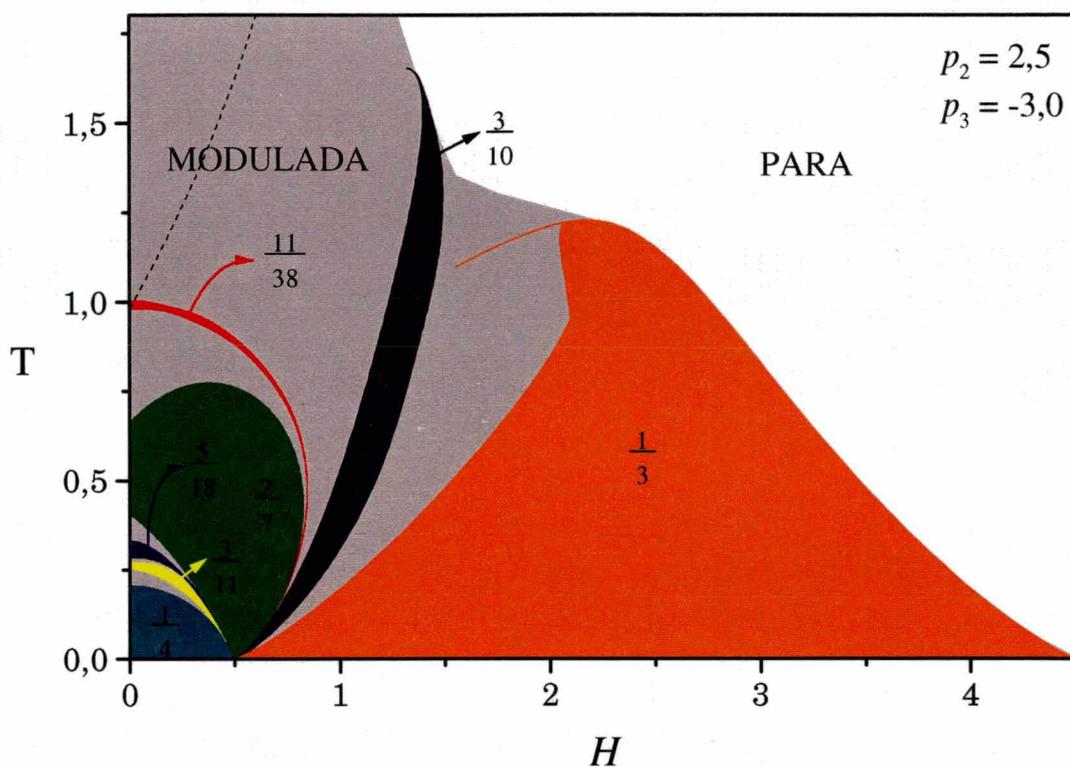


Figura 5.12 Diagrama de fases para $p_2 = 2,5$ e $p_3 = -3,0$. Na presença de campo surgem fases ($1/3$, por exemplo) que na ausência de campo são inexistentes.

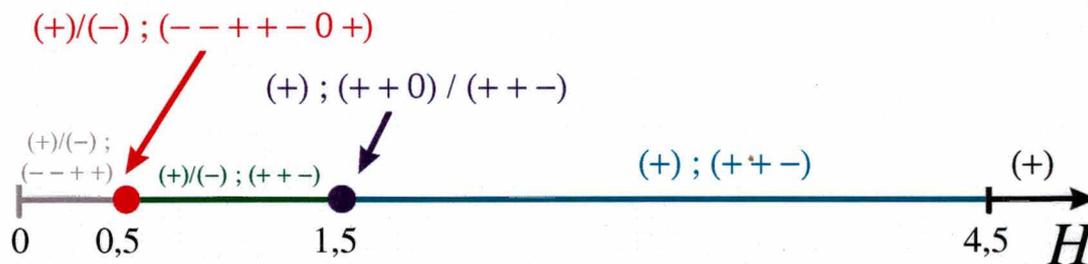


Figura 5.13 Estado fundamental do modelo A3NNI na rede de Bethe com interações até terceiros vizinhos na rede de Bethe e número de coordenação infinito para $p_2 = 2,5$ e $p_3 = -3,0$.

Capítulo 6

Considerações Finais

Utilizando métodos diferentes dos abordados por Moreira e Salinas (1987), obtivemos novos resultados para o modelo A3NNI na rede de Bethe a campo nulo. Além disso estudamos o citado modelo na presença de campo magnético externo.

Encontramos as fases detectadas experimentalmente ($1/2$, $1/3$, $5/17$, etc.), que inicialmente foi o estímulo para se estudar o modelo A3NNI. Estas fases surgem quando há “interação forte” entre terceiros vizinhos. Como Moreira e Salinas (1987) não haviam estudado esse tipo de interação, eles ainda não haviam encontrado estas fases. A fase $1/3$, por exemplo, ocorre devido a interação (antiferromagnética) “forte” entre terceiros vizinhos e pode ser pensada como três estruturas antiferromagnéticas desacopladas.

Detectamos, para uma certa região dos parâmetros p_2 e p_3 , a existência de co-estabilidade das fases *PARA-MODULADA* a campo nulo (que ao que sabemos ainda não havia sido detectada em modelos de Ising na rede de Bethe). Este comportamento é interessante, pois esta co-estabilidade evidencia uma linha de *Pontos Críticos Terminais* com *Pontos de Lifshitz Tricríticos* em seus extremos, na ausência de campo magnético externo. Esta linha não pudemos determinar, pois carecemos de uma energia livre que permita escolher as configurações que se realizam termodinamicamente.

Foram encontradas duplicações de período (Feigenbaum, 1980) em várias fases moduladas, que apontam para a existência de estruturas caóticas (ver figura 4.15 e 2.7, por exemplo). Mas não nos foi possível determinar se há **fases caóticas puras**.

Deixamos como sugestão, a utilização do Grupo de Renormalização para checar a existência dos *Pontos de Lifshitz Tricríticos* na ausência de campo magnético externo.

Apêndice A

Seqüência de Farey não padrão.

Árvores de Farey são seqüências de frações que aparecem em vários modelos relacionados com sistemas dinâmicos. A construção de Farey é a forma de gerar uma árvore de Farey e obedece à seguinte regra ingênua de “soma” de frações: dadas duas frações p/q e p'/q' , a fração construída a partir dela é dada por:

$$\frac{p}{q} \oplus \frac{p'}{q'} = \frac{p+p'}{q+q'} \quad (\text{A1})$$

Esta regra matemática até certo ponto arbitrária rotula uma hierarquia de importância de fases comensuráveis em diagramas de fases de uma série de modelos. A importância está relacionada com a área ocupada pela fase dentro do diagrama de fases global do modelo.

Um dos modelos mais populares que exhibe uma seqüência de fases periódicas que obedecem a uma construção de Farey é o mapa do círculo (Ott, 1994). Em seu diagrama de fases vemos uma exemplificação do citado no parágrafo anterior. As gerações da construção de Farey são enumeradas à esquerda e as fases que geram esta construção são $0/1$ e $1/1$. Parte da árvore de Farey gerada a partir delas pode ser vista abaixo

1 ^a .	$\frac{0}{1}$			$\frac{1}{1}$				
2 ^a		$\frac{1}{2}$						
3 ^a .		$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$					
4 ^a .	$\frac{1}{4}$	$\frac{2}{5}$	$\frac{3}{5}$	$\frac{3}{4}$				
5 ^a .	$\frac{1}{5}$	$\frac{2}{7}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{7}$	$\frac{4}{7}$	$\frac{5}{8}$	$\frac{5}{7}$	$\frac{4}{5}$

e assim sucessivamente. Este tipo de fração representa, *grosso modo*, no denominador o período da fase e no numerador o número de vezes que o sistema cruza a origem da variável dinâmica.

Esta árvore de Farey é construída de forma a todas as frações serem próprias, isto é, o numerador e o denominador são primos entre si. Perez *et al.*(1991) estudaram um outro modelo relacionado a um diodo não-linear e encontraram uma construção de Farey a partir das frações $2/7$ e $2/8$. As frações impróprias como $2/8$ (ou $10/38$), na realidade representam dois atratores coexistentes mas designados pelo rótulo $1/4$ (ou $5/19$). Nesta dissertação adotamos a nomenclatura $2\otimes 1/4$ para este tipo de estrutura, e o motivo para isto ficará claro logo abaixo. Eles observaram que se for feita a simplificação das frações impróprias as gerações subsequentes da construção de Farey apresentarão as frações em ordem errada de importância.

Seqüências de Farey em que aparecem estruturas rotuladas por frações impróprias, significando coexistência de mais de um atrator, foram chamadas por Perez *et al.*(1991) de seqüências de Farey não-padrão. Implicitamente, seqüências de Farey padrão seriam as que aparecem somente frações próprias, como a gerada pelo mapa do círculo.

Kinouchi e Tragtenberg (1996) arrolaram alguns exemplos de outras seqüências de Farey não-padrão que aparecem em outros modelos, como :

- ⇒ modelo ANNNI na aproximação de campo médio (Bak & von Boehm, 1980);
- ⇒ oscilador de van der Pol forçado (Mettin *et al.*, 1993);
- ⇒ modelo de Potts quiral na rede de Bethe (Yokoi e de Oliveira, 1985);
- ⇒ modelo de Hopfield assimétrico (Tamashiro *et al.*, 1996).

No entanto, observamos nesta dissertação que nem sempre frações impróprias correspondem a coexistência de atratores. Na figura 4.13, observamos que há uma fase de período 5 com dois atratores simétricos que rotulamos como $2\otimes 1/5$. No entanto, para temperaturas mais baixas, ela fica instável e surge uma fase $2/10$ autêntica, isto é, uma fase com período 10, com duas “ondas” por período e apenas um atrator. Portanto, identificar frações impróprias com coexistência de atratores pode funcionar em alguns casos, mas não pode ser tomado como regra geral

Por fim, observamos que nesta mesma figura, a temperaturas ainda mais baixas, surgem fases $4/20$, $8/40$, etc., cujas frações impróprias não representam coexistência de atratores, mas apenas um atrator por fase.

Referências Bibliográficas

AUBRY, S e P. Y. Le Daeron (1983) *Physica D***8**, 381.

ASHCROFT, N. W. e N. D. Mermin (1976) *Solid State Physics* (Saunders College).

BAK, P. (1982) *Rep. Prog. Phys.* **42**, 587.

BAK, P. e J. von Boehm (1980) *Phys. Rev. B* **21**, 5297.

BAK, P. R e Bruinsma (1982) *Phys. Rev. Lett.* **49**, 249.

BARBOSA, Márcia C. (1994) *Ising model with isotropic competing interactions in presence of a field: A tricritical Lifshitz point realization,(preprint)* RS, Brasil.

BARRETO, M. N. e J. M. Yeomans (1985) *Physica A***134**, 84.

BAXTER, R. (1982) *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press).

BETHE, H. (1935) *Proc. Roy. Soc.* **A150**, 552.

BRAGG, W. L. e E. J. Williams (1934) *Proc. Roy. Soc.* **A145**, 699.

CALLEN, H. (1985) *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics* (John Wiley & Sons, Inc.)

CHEN, M. S., L. Onsager, J. Bonner e J. Nagle (1974) *J. Chem. Phys.* **60**, 405.

COOPER, B. R. (1968) *Solid State Physics*, vol. **21**, 393.

da SILVA, C. R. da e S. Coutinho (1986) *Phys. Rev. B* **34**, 7975.

de FONTAINE, D. e J. Kulik (1984) *Acta Metallurgica* **33** 145.

ELLIOTT, R. J. (1961) *Phys. Rev.* **124**, 346.

FEIGENBAUM, M. (1980) *Los Alamos Sc.* **1**, 4.

FISHER, P., B. Lebech, G. Meier, B. D. Rainford e O. Vogt (1978) *J. Phys.* **C11**, 345.

FISHER, M. E. e W. Selke (1980) *Phys. Rev. Lett.* **44**, 1502.

FISHER, M. E. e W. Selke (1981) *Phyl. Trans. R. Soc. London* **302**, 1.

HORNREICH, R. M., M. Luban e S. Shtrikman (1975) *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1678.

HUANG, K. (1987) *Statistical Mechanics*, New York, John & Sons.

IMSL - Problem Solving Software Systems (1987), versão 1.0, para IBM-PC com Microsoft FORTRAN, E.U.A.

INAWASHIRO, S., C. J. Thompson e G. Honda (1983) *J. Stat. Phys.* **33**, 419.

IZYUMOV, Y. A. (1984) *Sov. Phys. - Usp.* **27**, 845.

KINOUCI, O. e M. H. R. Tragtenberg (1996) *Int. J. Bifurcation and Chaos* **6**, **12A**, 2343.

LICHTENBERG, A. J. e M. A. Lieberman (1983) *Regular and Stochastic Motion* (Springer-Verlag).

METTIN, R. , U. Parlitz e W. Lauterborn (1993) *Int. J. Bifurcation and Chaos* **3**, 1529

MOREIRA, J.G. e S.R. Salinas (1987), *J. Phys. A* **20**, 1621.

- MOREIRA, J. G. (1987) Tese de doutoramento – *Estudo de modelos com interações competitivas na árvore de Cayley* - Departamento de Física da UFMG.
- OTT, E. (1994) *Chaos in Dynamical Systems*, USA, Cambridge Univ. Press
- PATHRIA, R. K. (1978) *Statistical Mechanics*, Oxford, Pergamon.
- PEREZ, G., S. Sinha e H. A. Cerdeira (1991) *Europhys. Lett.* **16**, 635-641.
- PRESS, W. H., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky e W. T. Vetterling (1986) *Numerical Recipes* (Cambridge University Press).
- PYNN, R. (1979) *Nature*, **281**, 433.
- REIF, F. (1988) *Fundamentals of Statistical Mechanics and Thermal Physics*, Singapore, McGraw-Hill.
- SELKE, W. (1980) *J. Phys.* **C13**, L265.
- SELKE, W. e P. M. Duxbury (1984) *Z. Phys.* **B57**, 49.
- SELKE, W., M. Barreto e J. Yeomans (1985), *J. Phys. C* **18**, L 393.
- SELKE, W. (1988) *Phys. Rep.* **170**, 213.
- SELKE, W. (1992) em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, eds. C. Domb e J. L. Lebowitz, vol. 15, p. 1 (Academic Press).
- STANLEY, H. G. (1971) *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press.
- THOMPSON, C. J. (1982) *J. Stat. Phys.* **27**, 441.

TRAGTENBERG, M. H. R. (1993) - Tese de Doutorado, Instituto de Física da USP.

TRAGTENBERG, M. H. R. e C. S. O. Yokoi (1995) *Phys. Rev. E* **52**, 2187.

VANNIMENUS, J. (1981) *Z. Phys.* **B43**, 141.

YAMADA, Y. e I. Shibuya e S. Hoshino (1963) *J. Phys. Soc. Japan* **18**, 1594.

YAMADA, Y. e N. Hamaya (1983). *J. Phys. Soc. Jpn.* **52**, 3466.

YEOMANS, J. (1988) *Sol. St. Phys.*, **41**, 151.

YOKOI, C. S. O., M. D. Coutinho-Filho e S. R. Salinas (1981) *Phys. Rev.* **B24**, 4047.

YOKOI, C. S. O. e M. J. de Oliveira (1985) *J. Phys. A* **18**, L153

YOKOI, C. S. O., M. J. de Oliveira e S. R. Salinas (1985) *Phys. Rev.* **54**, 163.