

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

SOLUÇÕES EXATAS NO MODELO DE ISING
UNIDIMENSIONAL COM INTERAÇÕES
COMPETITIVAS NA PRESENÇA DE CAMPO
EXTERNO

Deancarlo Bordin Degregori

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Daniel Adrián Stariolo, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física. Trabalho financiado pela Capes.

Porto Alegre

Maio - 2016

Agradecimentos

Na realização deste trabalho, alguns agradecimentos são imprescindíveis, pois essas pessoas foram fundamentais na sua realização.

Primeiramente, devo agradecer ao Daniel A. Stariolo, meu orientador, por me receber de braços abertos desde a primeira vez em que bati à sua sala, pela paciência incomensurável que sempre demonstrou para comigo, pelos ensinamentos valiosos e indefectíveis que recebi ao longo deste trabalho, mas acima de tudo pelo exemplo mostrado do que representa ser um cientista. Carregarei para sempre os seus ensinamentos no fundo no meu coração.

É claro que não poderia deixar de agradecer aos meus pais, meus companheiros nessa luta diária que é a vida, pelos apoios e amores incondicionais, pelo incentivo incessante, por aguentarem as minhas birras, meus maus humores, minhas enfermidades e por estarem sempre lá, quando precisei chamar e, especialmente, quando não precisei. Tenho-vos amor eterno.

Preciso também agradecer ao Instituto – incluindo CPG, Diretoria, Secretarias – que sempre me tratou com muito respeito e paciência, não apenas neste trabalho, mas desde que entrei para a graduação há tantos anos atrás. Senti-me parte de uma comunidade acadêmica que hoje considero também como minha família. À UFRGS, que possibilitou a realização deste sonho, e à Capes, pelo apoio financeiro.

Agradecer aos amigos, que nem sei por onde começar. A todos, por aguentarem minhas chatices e minhas piadas sem graça em cafés inúmeros de se perder a conta. Quero agradecer ao pessoal da física primeiro. À Mariana, por me tomar como exemplo (ainda que imperfeito), tuas atitudes aqueceram meu coração para seguir adiante. À Rosana, meu exemplo na física, a física mais persistente que já vi, além de inteligente e querida. Ao Felipe, pelo apoio e amizade, és uma pessoa inacreditável e fonte de inspiração pra mim. Ao pessoal da M208, que me recebeu com carinho num momento de pouca luz. Ao casal Ricardo e Débora, que a tua alegria sempre me contagiou. Ao Samoel, pela companhia e amizade desde o tempo de graduação, prometo solenemente por as minhas leituras em dia, pelo apoio desde sempre, tua serenidade é modelo. Queria agradecer ao Daniel Calovi, amigo agora à distância, cuja saudade não compensa pelas mensagens, tenho por ti admiração e

amor fraterno. Ao Jardel também, te admiro pela inteligência e simplicidade. Carine, por sua força de espírito. Glaucio, pelo companheirismo e incentivo. Gabriel pelo bom humor sempre.

Um pouco mais longe do Campus do Vale, devo agradecer à Cris, cuja presença é, desde o dia um, luz em minha vida. À Ramona, minha companheira de todas as horas, te quero bem pra caramba! Aos meus compadres Vica e Thiago, e à minha afilhada, cuja presença sempre me deu forças para seguir adiante. À Lou, essa mulher com eme maiúsculo, amo teu sotaque nordestino! És e sempre foi uma inspiração. Não posso deixar de agradecer ainda à Regina, cuja distância não conseguiu diminuir o que tenho por ti desde que nos conhecemos, há 15 anos atrás, te amo demais! Glaucio, pelo incentivo constante. Ao Eduardo, que mesmo a distância, me apoiou em todos os momentos. À Roberta, pelo apoio fundamental constante.

A todos, meu amor incondicional.

A quem eu não agradei aqui, peço desculpas e juro que, de forma ou de outra, vocês todos moram dentro de mim.

Muito obrigado!

Resumo

Neste trabalho se estudou um modelo de Ising unidimensional com interações competitivas de curto e longo alcance, na presença de campo externo. O modelo é exatamente solúvel e apresenta um rico comportamento de fases, com a presença de regiões do espaço de parâmetros com transições de primeira e segunda ordens, e um ponto multicrítico. Foi obtida a solução exata do modelo, já conhecida na literatura, embora alguns aspectos do diagrama de fases ainda não tenham sido devidamente explorados. O objetivo principal do estudo foi determinar a existência ou não de um comportamento reentrante na magnetização, que ocasiona magnetizações nulas em temperaturas baixas. Comportamentos reentrantes têm sido observados em sistemas frustrados bi e tridimensionais, tanto em modelos analíticos quanto experimentalmente. No presente modelo não foi observado comportamento reentrante, mas salienta-se a existência de comportamentos singulares no parâmetro de ordem que resulta em modulações nas correlações espaciais.

Abstract

In the present work, an unidimensional Ising model with long and short ranged interactions has been studied in the presence of an external applied field. The model is analytically solvable and displays a rich variety of phase behaviors, including regions in parameters space with first and second order transitions and a multicritical point. The exact solution for the model has been calculated and it is well known by the scientific literature, but some features, especially regarding the phase diagram, are yet to be explored. The main aim of this study was to determine if there is a reentrant behavior in the magnetization parameter, resulting in zero magnetizations at low temperatures. Reentrant behavior has been observed in frustrated and two-dimensional systems, in experimental systems as well as analytic models. In the present work a reentrant behavior was not found, however there is a big set of different behaviors in the order parameter generating modulations in the spatial correlations.

Sumário

1	Introdução, Motivação e Objetivos	1
2	Energia Livre e Magnetizações	5
2.1	O Modelo	5
2.1.1	O termo de longo alcance	6
2.1.2	A Energia Livre	7
2.2	Sobre a Magnetização	14
2.2.1	Equação de Magnetização	14
2.2.2	Limites de temperatura e Comportamento Anômalo	15
2.3	Uma Definição Prática para o Comportamento Anômalo	22
2.3.1	Análise do Máximo (extremo) de Magnetização	22
3	Estabilidade e Transições de Fases	26
3.1	Estabilidade da Energia Livre para $H=0$	26
3.2	Transições de Fases	29
3.2.1	Campo externo nulo	29
3.2.2	Presença do Campo Externo	32
3.2.3	Diagramas de Fases	33
3.2.4	A Região de Transição	37
4	Correlações Espaciais Conectadas	39
4.1	Limites de Temperatura	44
4.1.1	Altas Temperaturas	46
4.1.2	Baixas Temperaturas	46
4.2	Estado Ferromagnético Pleno	50
4.3	O Regime Oscilatório	51
5	Conclusões	53

Apêndices	54
A A Derivada da Equação de Magnetização	54
B Não Divergência de $(E'^2 - 1)\beta C' - E'$	56
C Expansão da Energia Livre	60
D Correlações	64
Referências Bibliográficas	69

Capítulo 1

Introdução, Motivação e Objetivos

As interações competitivas não são novidade na Física, tendo sido muito estudadas ao longo dos últimos anos, carregando consigo uma vasta gama de fenomenologia estudada das mais diversas formas, por exemplo através de simulações de Monte Carlo [1, 4, 5]. Quanto à sua aplicação experimental, estudos foram utilizados com base em espalhamento de nêutrons e elétrons [2, 19]. Soluções analíticas foram aproximadas através de modelos estatísticos [5, 6]. A fenomenologia surge de duas interações competindo entre si de modo a influenciar o parâmetro de ordem do modelo associado ao sistema: uma de longo alcance repulsiva e outra de curto alcance atrativa (ou vice-versa). De particular interesse, tem-se a fenomenologia que envolve a reentrância do parâmetro de ordem desses respectivos sistemas [7, 18, 19].

Os modelos supracitados alcançam as mais diversas áreas da Ciência, incluindo a Física, a Química e a Biologia. Na Física e na Química, tem-se os filmes ferromagnéticos ultrafinos (que dão origem a fases de bolhas, faixas e labirintos) [3], cristais líquidos eletrônicos [9] (fases esmética, nemática), supercondutores do tipo I (labirintos) [9], coloides (que se envolvem em fases hexagonais, faixas, quadradas, triangulares, labirintos) [12], e em modelos de partículas esféricas, como os bidimensionais de simetria radial (fases lamelares, miscelares) [10, 11, 13]. Na Biologia, a aplicação encontra espaço em sistemas tridimensionais de membranas e moléculas anfífilas capazes de aglomerações esféricas ou cilíndricas, de membranas celulares, como lipossomos e vesículas [2].

De particular interesse são os filmes ferromagnéticos ultrafinos (bidimensionais), dado o potencial tecnológico que possuem. Um caso bem estudado é o de filmes de Fe sobre substrato de Cu. Análises computacionais e experimentos determinaram claramente a existência de padrões de magnetização alternantes na componente perpendicular ao filme, conhecidas como fases de faixas, que variam em largura e amplitude de acordo com a temperatura e o campo aplicado, para dar origem a fases com bolhas e labirínticas (além da fase de magnetização uniforme) [8, 14, 20]. Para ilustrar o caso, a Figura 1.1 a seguir mostra uma imagem

experimental através do espalhamento de elétrons sobre o filme, ressaltando a presença das fases de faixas e labiríntica.

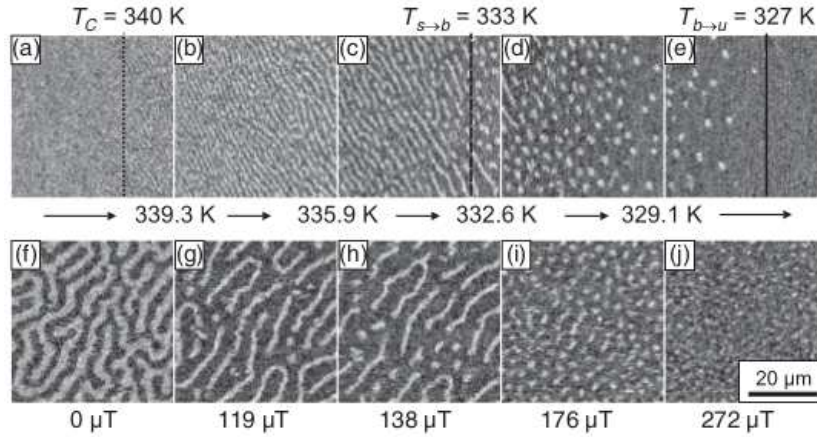


Figura 1.1: Figuras ilustrativas das mesofases de um filme ultrafino de Fe depositado sobre um *bulk* de Cu, determinadas experimentalmente através de microscopia eletrônica de varredura, conforme variando a temperatura (figuras (a) até (e)) e o campo (figuras (f) até (j)). Observar a presença de uma fase labiríntica em (f), de faixas (b)-(c), e de bolhas (d), (e), (i). Na figura, a magnetização é perpendicular ao plano do filme. Cores inversas significam magnetizações opostas. Extraído de [19].

Já a figura 1.2 abaixo elucida a presença de microfases em simulações computacionais de um modelo de partículas coloidais com potencial de simetria esférica.

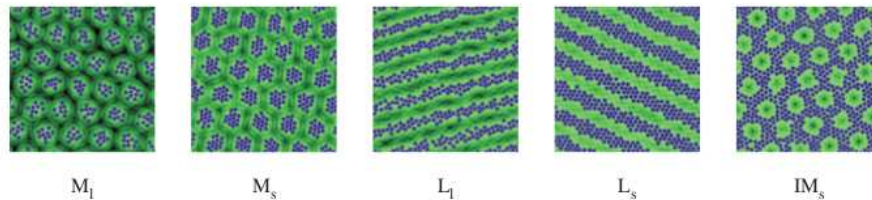


Figura 1.2: Figura ilustrativa de microfases presentes em um modelo de esferas duras estendido, observando a presença de fases miscelares (M_s , M_l , IM_s) e lamelares (L_s , L_l), para as fases sólida “s” e líquida “l”. Figura retirada de [13].

Dentro dessa fenomenologia das interações competitivas, um fator ainda mais intrigante surge na presença de um campo externo, a denominada *reentrância* do parâmetro de ordem (no caso de sistemas magnéticos, a magnetização), que consiste basicamente na repetição de fases conforme a temperatura do sistema é variada. Um exemplo clássico de reentrância se observa no modelo ANNNI, ou *Axial Next-Nearest Neighbor Ising model* [22–24], que leva em conta, além do campo externo, interações de primeiros e segundos vizinhos. Tal modelo, na aproximação de campo médio, apresenta reentrância no vetor de onda em temperaturas baixas na presença do campo [23]. A Figura 1.3 representa o diagrama de fases

T - H , em que fica claro que a magnetização migra de um estado paramagnético para uma fase modulada do tipo $\langle 4,3 \rangle$ (quatro spins para cima, três para baixo – ou vice-versa) e depois novamente para uma fase paramagnética, por exemplo, a campo fixo $H/J_1 \approx 0.025$ enquanto se aumenta (ou diminui) a temperatura.

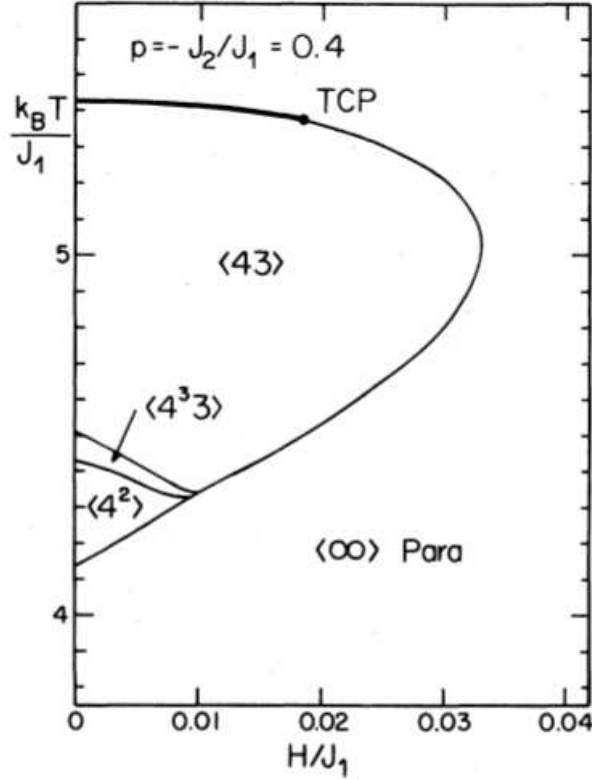


Figura 1.3: Diagrama de fases T - H do modelo ANNNI na aproximação de campo médio, em que se pode notar a reentrância de fases paramagnética \rightarrow modulada(s) \rightarrow paramagnética. J_1 representa a energia tomada com os vizinhos próximos do eixo de alinhamento. Figura extraída de [23].

Exemplos de reentrâncias no diagrama de fases incluem experimentos em filmes de Fe sobre Cu acima citados, cuja reentrância observada em baixas temperaturas acontece na sequência de fases: uniforme, bolhas, faixas e depois novamente uniforme [3, 19]. A reentrância nestes sistemas foi observada e analisada em um modelo efetivo formador de faixas na aproximação de campo médio [25]. Velasque *et al.* estudaram o mecanismo que produz a transição reentrante no modelo ferromagnético de Ising com interação dipolar competitiva em um campo externo [26]. Se verificou que a reentrância está associada ao congelamento dos graus de liberdade das paredes de domínio das faixas do sistema a medida que a temperatura diminui, a campo externo fixo, desde a fase de faixas. Quando a vantagem entrópica dada por estes graus de liberdade deixa de existir por causa da baixa temperatura, a competição com os termos de energia de troca e campo externo fazem com que o sistema reentre na fase homogênea paramagnética.

Este trabalho tem como objetivo determinar a existência do fenômeno da reentrância numa cadeia unidimensional de spins com interações competitivas de curto e de longo alcance na presença de um campo externo, que representa a forma mais simples de um modelo competitivo na presença de um campo que admite uma solução exata, enquanto se exploram também as propriedades comuns, similares a outros sistemas com interações competitivas. Tal modelo fora estudado primeiramente por J. Nagle *et al.* em 1970 [15], apresentando uma solução exata focando o estudo nos expoentes críticos e apresentando um panorama geral do modelo [16]. Alguns anos mais tarde, M. Kardar retomou os estudos do modelo focando-se no fenômeno de *crossover* [17]. A solução exata do modelo será reconsiderada, apresentando as análises das grandezas termodinâmicas na seguinte ordem: determinação da energia livre do modelo através da técnica da matriz de transferência; obtenção da equação que governa a magnetização do sistema através das relações termodinâmicas; algumas considerações sobre a estabilidade na expansão da energia livre; apresentação dos diagramas de fase com e sem campo; por último, estudos da correlação também através da matriz de transferência. Finalmete, sobrevêm as conclusões, seguidas pela seção de apêndices e da bibliografia.

Neste trabalho, será adotada a notação “ $\log(x)$ ” para denotar o logaritmo natural do número real $x > 0$. Também será adotado o ponto “.” para denotar a casa decimal dos números reais e por último, as unidades serão suprimidas. Cabe mencionar que as unidades apresentadas são:

- $[\mathcal{H}], [J_{sr}], [H], [J_{lr}], [f] = J$;
- $[T] = K, [\beta] = J^{-1}$;
- $[\mathcal{H}_J], [J_J], [h_J], [f_J], [J], [K], [h] = \text{adimensionais}$,

e ainda, será adotado o sistema de unidades em que $k_B = 1$, o sistema natural. Essas quantidades aparecerão ao longo do texto e sua definição apresentada conforme forem sendo utilizadas. O restante das quantidades utilizadas são adimensionais. Ainda se mencionam que as abreviações “Ferro” e “Para” referem-se às fases ferromagnética e paramagnética, respectivamente.

Capítulo 2

Energia Livre e Magnetizações

2.1 O Modelo

O modelo a ser analisado tem o seguinte Hamiltoniano, a ser tratado em uma dimensão [15]:

$$\mathcal{H} = -\frac{J_{sr}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle=1}^N s_i s_j - \frac{J_{lr}}{2N} \sum_{i,j=1}^N s_i s_j - H \sum_{i=1}^N s_i, s_i = \pm 1, \quad (2.1)$$

em que J_{sr} , J_{lr} e H representam, respectivamente, as energias de interações de curto (somente a primeiros vizinhos) e de longo alcance, e o campo externo aplicado (magnético). Na verdade, o termo com J_{lr} tem alcance infinito. O sinal negativo na frente dos termos indica que a energia total é minimizada quando as interações forem todas preferencialmente positivas. A variável de spin, s_i , é clássica de dois estados, do tipo Ising. É, assim, um modelo unidimensional em que se adotam condições de contorno periódicas no anel, $s_{N+1} = s_1$, que não afeta o limite termodinâmico do processo. O caso em que a interação de longo alcance não é presente representa o modelo de Ising na presença de um campo. Todos os três parâmetros do Hamiltoniano (2.1) podem ser tanto negativos como positivos; e aqui o interesse maior é a análise do caso *competitivo*, definindo-se como o caso em que as interações de curto e de longo alcance apresentam sinais opostos entre si. Em particular, o caso mais relevante ao estudo é o que apresenta $J_{lr} \geq 0$ e $J_{sr} \leq 0$, levando a uma configuração ferromagnética a longo alcance, e antiferromagnética a curto alcance. A existência, nesses casos, de um regime ferromagnético a longo alcance se dá por uma análise rápida ao termo $s_i s_j$ no Hamiltoniano (2.1), que é minimizado quando todos os produtos de spins $s_i s_j$ tenham o sinal positivo, e, portanto o mesmo valor individual (+1 ou -1) - encontrando uma configuração ferromagnética. Sendo o termo de curto alcance negativo, para que a energia do Hamiltoniano seja minimizada, é favorecida a situação em que $s_i s_j$, vizinhos próximos, sejam de

sinais opostos, daí a configuração antiferromagnética. Notar que o Hamiltoniano permanece com a mesma energia se os spins tiverem sinais revertidos à campo zero. Na presença deste, haverá uma simetria consoante o eixo $H = 0$. Assim, dependendo do jogo entre qual termo domina como um todo as interações, uma ou outra configuração poderá ser acessada pelo sistema. Já a situação oposta, em que $J_{lr} \leq 0$ e $J_{sr} \geq 0$, tem frustração por que o termo de longo alcance todo negativo significará demandar uma configuração antiferromagnética dos spins, enquanto que, na situação competitiva, o termo de vizinhos próximos tende a alinhar o sistema. Ambas as determinações são impossíveis de se satisfazerem simultaneamente, gerando frustração. O termo em longo alcance é normalizado por N , o número de sítios no anel, para que o sistema tenha equilíbrio termodinâmico garantido. Além disso, os fatores de $1/2$ constam para dar conta das interações repetidas. Doravante, ficará implícito que as somas sempre vão até o número de sítios N . Neste trabalho, focaremos a atenção no caso não frustrado, e o Hamiltoniano será tratado no *ensemble* canônico de Gibbs.

2.1.1 O termo de longo alcance

Para analisar o modelo proposto, será utilizada uma aproximação de campo médio para o termo de longo alcance, que é, na verdade, exata. Isso é necessário para somar o termo de longo alcance no futuro cálculo da função de partição. Para tanto, o Hamiltoniano (2.1), será reduzido de acordo com o procedimento a seguir. Definam-se:

$$\bar{\mathcal{H}} := -\beta\mathcal{H}; \quad (2.2)$$

$$J := \beta J_{lr} \geq 0; \quad (2.3)$$

$$K := \beta J_{sr} \leq 0, \text{ e} \quad (2.4)$$

$$h := \beta H \leq 0, \quad (2.5)$$

em que $\beta = 1/T$. A transformação de variáveis acima elimina a dependência explícita do modelo (e de suas equações subsequentes) da temperatura. Dessa forma,

$$\bar{\mathcal{H}} = \frac{K}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + \frac{J}{2N} \sum_{i,j} s_i s_j + h \sum_i s_i. \quad (2.6)$$

Novamente, definindo

$$m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_j, \quad (2.7)$$

uma variável cujo valor depende da configuração assumida pelo sistema de spins, a qual será chamada de *magnetização média* do sistema, tem-se: [17]

$$\frac{J}{2N} \sum_{i,j} s_i s_j = \frac{Jm}{2} \sum_i s_i = -\frac{1}{2} JNm^2 + Jm \sum_i s_i. \quad (2.8)$$

Quanto ao termo de curto alcance, este é idêntico a

$$\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \equiv \sum_i s_i s_{i+1}, \quad (2.9)$$

em que a condição anelar deve ser rigidamente lembrada, e onde fica evidente que autointerações são desprezadas (não existem interações do tipo $s_i s_i$, $\forall i$). Finalmente, combinando (2.8), (2.9) com (2.6) [15]

$$\bar{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} JNm^2 + K \sum_{i=1} s_i s_{i+1} + (Jm + h) \sum_i s_i, \quad (2.10)$$

que é um Hamiltoniano da cadeia de Ising em um campo externo, mas com dependência em m , a qual deverá ser levada em conta no cálculo da função de partição. Notar que $|m| \leq 1$, pois $-N \leq \sum_i s_i \leq N$.

2.1.2 A Energia Livre

De posse de um Hamiltoniano tratável, (2.10), pode-se dar início ao cálculo da energia livre de Helmholtz. Nesta equação, foi introduzida uma nova variável, m , que deve ser levada em conta no cálculo da função de partição do sistema. Como a última é a soma sobre todas as possibilidades de configuração acessíveis ao sistema, neste caso se pode escrever na forma:

$$\mathcal{Z}_T(K, J, h) = \int_{-1}^{+1} dm \sum_{\{s_i\}} e^{\bar{\mathcal{H}}}. \quad (2.11)$$

Tomando posse do Hamiltoniano modificado (2.10),

$$\mathcal{Z}_T = \int_{-1}^{+1} dm e^{-\frac{1}{2} JNm^2} \sum_{\{s_i, s_{i+1}\}} e^{K \sum_i s_i s_{i+1} + (Jm+h) \sum_i s_i}, \quad (2.12)$$

ou, em uma notação matricial,

$$\mathcal{Z}_T = \int_{-1}^{+1} dm \text{Tr} e^{\bar{\mathcal{H}}}. \quad (2.13)$$

Define-se

$$\mathcal{Q}_N(m) := \sum_{s_i} e^{K \sum_i s_i s_{i+1} + (Jm+h) \sum_i s_i}, \quad (2.14)$$

a qual terá a soma efetuada primeiro. Para tanto, será utilizada a técnica da *matriz de transferência*, introduzindo a álgebra matricial para obter uma expressão fechada para \mathcal{Q}_N . Para isso, considere-se que a função de partição parcial, (2.14), pode ser trabalhada na forma

$$\mathcal{Q}_N(m) = \sum_{s_i} \prod_{i=1}^N H_0(s_i, s_{i+1}) = \prod_{i=1}^N \sum_{s_i} H_0(s_i, s_{i+1}), \quad (2.15)$$

em que

$$H_0(s_i, s_{i+1}) = e^{Ks_i s_{i+1} + (Jm+h)s_i}. \quad (2.16)$$

Para realizar a soma em (2.15), o fator exponencial será associado a uma matriz bidimensional cujas colunas são indexadas pelos valores duais dos spins de curto alcance, enquanto que as linhas pelos vizinhos próximos, resultando numa matriz quadrada de segunda ordem. Tal técnica só é possível quando o termo de campo for não local. As componentes da matriz têm a forma

$$\mathbf{T}_{i,j} = e^{Ks^i s^j + (Jm+h)s^i}, \quad (2.17)$$

em analogia a (2.16), em que, no caso, $1 \leq i \leq 2, 1 \leq j \leq 2$, e o superescrito representa o possível valor do spin no sítio (i ou j), levando a

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} e^{K+(Jm+h)} & e^{-K+(Jm+h)} \\ e^{-K-(Jm+h)} & e^{K-(Jm+h)} \end{bmatrix}. \quad (2.18)$$

Somar sobre todas as possibilidades de spin da (2.15) equivale, então, na nova notação matricial, a tomar o traço da potência N da matriz acima:

$$\sum_{\{s_i\}} e^{Ks^i s^j + (Jm+h)s^i} \doteq \text{Tr } \mathbf{T}^N. \quad (2.19)$$

Da álgebra, sabe-se que o traço de uma matriz é invariante ante a uma transformação de base. Pode-se, então, trabalhar na base onde a matriz \mathbf{T} é diagonal. Assim, calculam-se os seus autovalores através da equação característica

$$\text{Det}(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{I}) = 0, \quad (2.20)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade. Isso leva à equação quadrática

$$\lambda^2 - [2e^K \cosh(Jm+h)] \lambda + 2 \sinh(2K) = 0, \quad (2.21)$$

cujas soluções são:

$$\lambda_{\pm} = e^K \cosh(Jm + h) \pm \sqrt{e^{2K} \sinh^2(Jm + h) + e^{-2K}}. \quad (2.22)$$

De posse dos autovalores, pode-se calcular a energia livre do sistema, o cálculo da função de partição parcial na nova representação diagonal dos autovalores de \mathbf{T} é expresso simplesmente pelo traço:

$$\mathcal{Q}_N(m) = \sum_{i=-}^{+} \lambda_i^N, \quad (2.23)$$

que representa o traço de um produto de N matrizes diagonais. No limite termodinâmico (em que $N \rightarrow \infty$),

$$\mathcal{Q}_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \approx \lambda_+^N. \quad (2.24)$$

A função de partição parcial é se reduz a

$$\mathcal{Q}_N = \left[e^K \cosh(Jm + h) + \sqrt{e^{2K} \sinh^2(Jm + h) + e^{-2K}} \right]^N, \quad (2.25)$$

e a energia livre correspondente, que é definida por

$$f \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta} \frac{\log \mathcal{Q}}{N}, \quad (2.26)$$

fica:

$$f_s = -\frac{1}{\beta} \log \left[e^K \cosh(Jm + h) + \sqrt{e^{2K} \sinh^2(Jm + h) + e^{-2K}} \right], \quad (2.27)$$

onde o subscrito “s” atenta para a energia livre parcial em que apenas foi considerada a soma dos spins (sendo necessário integrar, ainda, em m). Como a energia livre total está associada à função de partição através da relação

$$e^{-\beta F_T} = \mathcal{Z}_N, \quad (2.28)$$

tem-se:

$$e^{-\beta F_T} = \int_{-1}^{+1} dm \ e^{-N(Jm^2/2 + \beta f_s)}. \quad (2.29)$$

A integral pode ser resolvida pelo método do ponto sela, resultando em: [17]

$$f(J, K, h) \equiv \beta f_T = \min \left\{ -\log \left[e^K \cosh(Jm + h) + \sqrt{e^{2K} \sinh^2(Jm + h) + e^{-2K}} \right] + \frac{1}{2} Jm^2 \right\}_m. \quad (2.30)$$

Uma primeira verificação gráfica à energia livre sugere uma forma totalmente simétrica para campo nulo, em geral no formato quadrático ou de sino (quadrático inverso) com relação ao eixo de magnetização $m = 0$, como exemplificado na Figura 2.1.

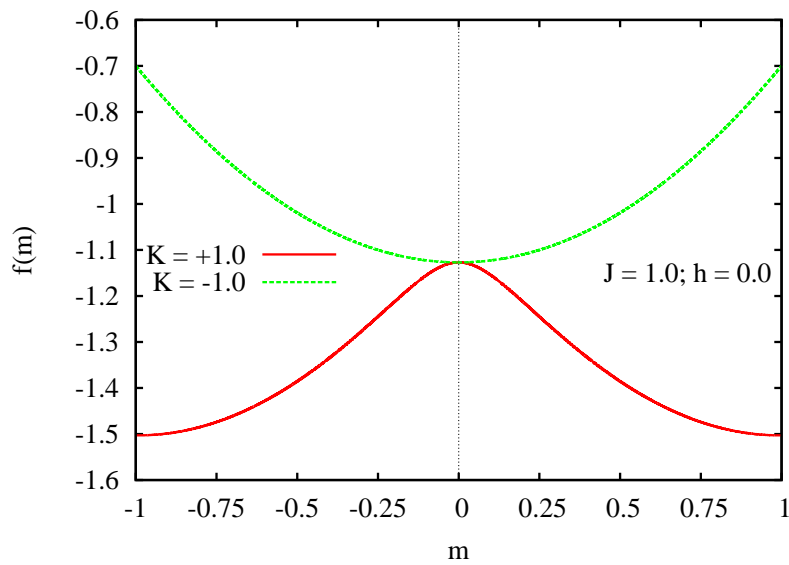


Figura 2.1: Curvas da energia livre $f(m)$ (de Helmholtz) em função da magnetização m . No caso, os conjuntos de parâmetros externos são $(J, K, h) = (1.0; \pm 1.0; 0.0)$, em que fica evidente que a magnetização que minimiza a função, para o caso de K negativo (curto alcance repulsivo), é $m = 0$, acarretando ao sistema assumir um estado paramagnético, e que, para o caso oposto o sistema pode assumir (obedecendo à simetria de inversão de spin) $m = \pm 1$, a máxima ordem acessível ao sistema, um estado de ferromagnetismo.

A situação com campo evidencia a quebra da simetria ao redor do eixo da magnetização nula. O sinal da magnetização alinha-se com o do campo, conforme a Figura 2.2.

Um gráfico de curvas sequenciais com a temperatura (aqui, como todos os parâmetros têm a temperatura oculta em suas definições, tanto pode se pensar como fixa a temperatura enquanto se varia J_{lr} , J_{sr} ou H , ou como fixos esses parâmetros enquanto se varia a temperatura), evidencia situações em que a magnetização nula passa a ser, subitamente máxima ou quase máxima (Figura 2.3, abaixo), sinal de uma transição de primeira ordem, e ainda situações em que a magnetização cresce suavemente a partir da nulidade, fato independente da aplicação do campo (como no caso da Figura 2.3 superior). No caso da transição de fases descontínua, esta aparece em valores altos (quando comparados aos outros componentes do

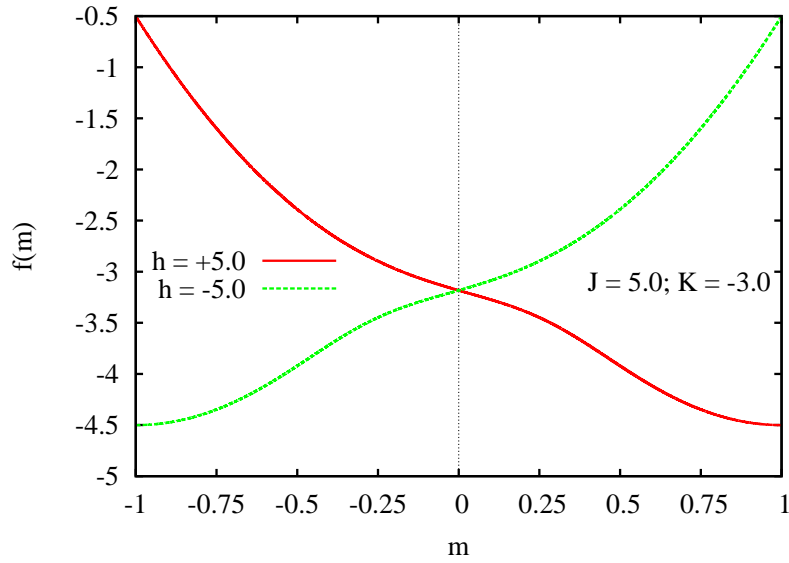


Figura 2.2: Curvas da energia livre mantendo-se $J = 5.0$ e $K = -3.0$, mas invertendo-se o sinal do campo externo aplicado, cujo valor absoluto é $|h| = 5.0$. A magnetização, no caso, é máxima, $|m| = 1.0$, no valor do campo aplicado, a indicar que o sistema assume uma configuração ferromagnética.

conjunto dos parâmetros) de J , suscitando que elas ocorrem, preferencialmente, em alto β (ou baixa T).

É importante ressaltar que, nesse trabalho, dizer que o estado de magnetização nula ($m = 0$) é desordenado é o mesmo que dizer que é paramagnético. Da mesma forma, dizer que assume um estado ordenado é sinônimo de uma configuração ferromagnética (parcial ou total).

Chama-se a atenção para o fato de um fator de temperatura ter sido assimilado à energia livre f , em sua definição em (2.30), mas que não interfere na determinação do mínimo de f , visto que β é tomada como constante.

A fim de se obter a temperatura de modo explícito, pode-se fazer um escalonamento da função Hamiltoniana dividindo-a por uma das constantes de interação, por exemplo $\mathcal{H}_J := \frac{\mathcal{H}}{J_r}$, obtendo:

$$f_J(\beta, J_J, h_J) = \min \left[\frac{1}{2} \beta m^2 - \log \left[e^{\beta J_J} \cosh \left(\beta(m + h_J) \right) + \sqrt{e^{2\beta J_J} \sinh^2 \left(\beta(m + h_J) \right) + e^{-2\beta J_J}} \right] \right]_m, \quad (2.31)$$

em que o seguinte conjunto de definições fora utilizado:

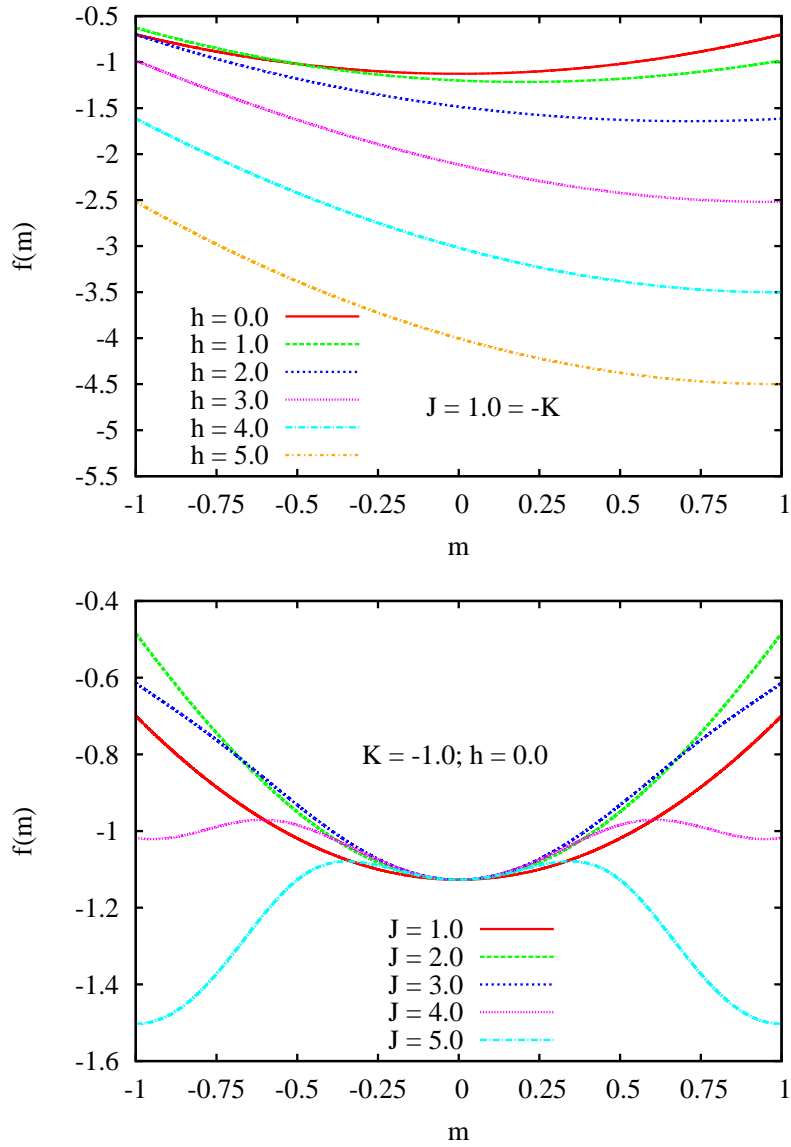


Figura 2.3: Na figura de cima, as curvas da energia livre são executadas como função da magnetização para diversos valores do campo, observando-se um crescimento de m que minimiza a função que é suave a partir do zero (sem constituir uma transição de fase contínua). Na de baixo, um exemplo de transição de fase de primeira ordem, como função do parâmetro de longo alcance J . Há uma transição que ocorre entre os valores de $J = 4.0$ e $J = 5.0$. Há ainda estados de magnetização metaestáveis em $J = 4.0$, e um estado metaestável em $J = 5.0$, com $m = 0$.

$$\begin{aligned} \frac{J_{sr}}{J_{lr}} &:= J_J; \\ \frac{H}{J_{lr}} &:= h_J. \end{aligned} \quad (2.32)$$

As figuras 2.4 são representativas dessa última energia livre (2.31) em diferentes temperaturas e campo, mas compartilham em comum que $J_J = -2.5$.

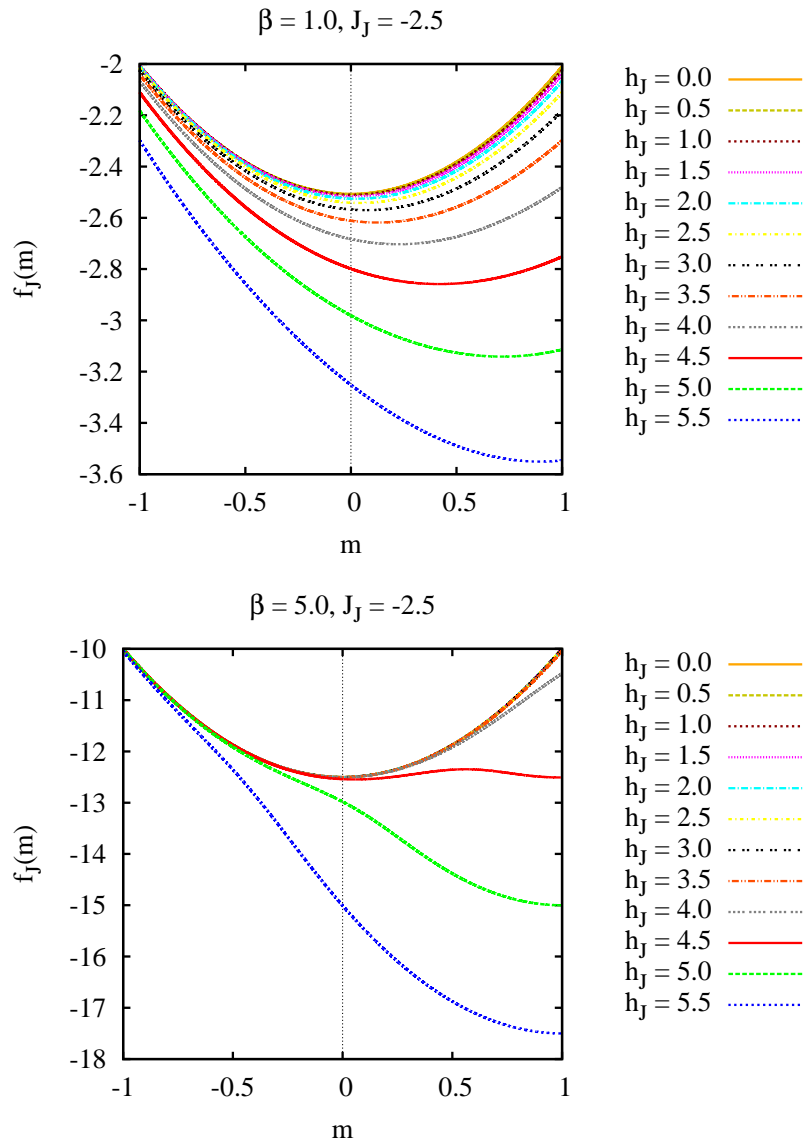


Figura 2.4: Figuras da energia livre como função da magnetização para $J_J = -2.5$, para diversos campos. Acima, tem-se, à temperatura $\beta = 1.0$, um comportamento que demonstra um crescimento suave da magnetização a partir do zero. O formato das curvas (sinodal) lembra a energia livre não reduzida. Abaixo: $\beta = 5.0$. Claramente, tem-se um salto descontínuo, conforme o módulo do campo se eleva, em $h_{J,c} = 4.5$. Na sequência de curvas de baixo, o caso em que $h_J = 4.5$ é um possível estado de coexistência.

A possibilidade das transições de fases contínuas será investigada na próxima seção, em que se trabalhará explicitamente com o parâmetro de magnetização. Já o caso das transições descontínuas, suscitado nas figuras 2.3, será evidenciado com maior detalhamento.

2.2 Sobre a Magnetização

2.2.1 Equação de Magnetização

A fim de obter a equação que fornecerá o valor da magnetização como função dos parâmetros externos, é necessário que a energia livre, equação (2.30), seja extremizada.

Há dois caminhos possíveis:

- Extremiza-se a função tomando apenas a sua derivada nula, lembrando da condição de que a magnetização deve ser a que minimiza a energia livre¹,

$$\left. \frac{\partial f_T}{\partial m} \right|_m = 0; \quad (2.33)$$

- Utiliza-se a relação termodinâmica

$$m = -\frac{\partial f_T}{\partial h}. \quad (2.34)$$

Neste trabalho a equação (2.34) será utilizada. A fim de facilitar o cálculo da equação de magnetização, sejam feitas as seguintes definições:

$$\begin{aligned} \delta(J, m, h) &:= Jm + h \\ E(\delta, K) &:= e^K \sinh(\delta) \\ C(\delta, K) &:= e^K \cosh(\delta) \\ D(\delta, K) &:= \sqrt{E^2 + e^{-2K}} \\ B(\delta, K) &:= -\log([C(\delta, K) + D(\delta, K)]) \\ A(J, m) &:= \frac{1}{2}Jm^2 \end{aligned} \quad (2.35)$$

Dessa forma, a energia livre simplesmente reduz-se a

$$f = A(J, m) + B(\delta, K). \quad (2.36)$$

Logo, (2.34) implica em

$$m = -\frac{\partial A}{\partial h} - \frac{\partial B}{\partial \delta} \frac{\partial \delta}{\partial h} = \frac{1}{C + D} \left[\frac{\partial C}{\partial \delta} \frac{\partial \delta}{\partial h} + \frac{\partial D}{\partial \delta} \frac{\partial \delta}{\partial h} \right]; \quad (2.37)$$

Todavia:

¹Ambas levam ao mesmo resultado.

$$\frac{\partial C}{\partial \delta} \frac{\partial \delta}{\partial h} = e^K \sinh(\delta) \frac{\partial \delta}{\partial h} = E, \quad (2.38)$$

e,

$$\frac{\partial D}{\partial \delta} \frac{\partial \delta}{\partial h} = \frac{E}{D} \frac{\partial E}{\partial \delta} \frac{\partial \delta}{\partial h}. \quad (2.39)$$

Por total analogia,

$$\frac{\partial E}{\partial \delta} = C. \quad (2.40)$$

Assim,

$$m = \frac{1}{C + D} \left[E + E \frac{C}{D} \right], \quad (2.41)$$

a qual pode ser finalmente reduzida a:

$$m = \frac{E}{D} = \frac{e^K \sinh(\delta)}{\sqrt{e^{2K} \sinh^2(\delta) + e^{-2K}}}. \quad (2.42)$$

O conjunto de gráficos 2.5 abaixo representa as curvas de evolução da magnetização como função dos parâmetros externos, num regime de campo nulo. É importante observar a presença das duas categorias de transição, como os gráficos da energia livre já mostraram. Para baixas temperaturas, o sistema tende ao ordenamento máximo; já no oposto, mostra a tendência para a desordem. As curvas se bifurcam porque, a campo nulo, há simetria de inversão dos spins; ambos os estados, positivos e negativos de magnetização, minimizam a energia livre.

Os casos com campo constam no conjunto de figuras 2.6 abaixo. Há a presença dos dois regimes de transição, de primeira e de segunda ordem. O campo negativo é espelho do positivo: existe uma simetria (como esperado), ao redor do eixo $m = 0$.

O caso com campo é indicador de como as transições se dão a partir da Figura 2.7, que deixa examinar a situação. Ali, mantendo-se agora K fixo, há uma nítida diferenciação da forma como se dá a transição conforme o campo cresce. Naturalmente, o campo favorecerá trocas súbitas de estado em baixas temperaturas, visto que injeta energia no sistema, porém o que se observa é a quebra do regime de primeira ordem.

2.2.2 Limites de temperatura e Comportamento Anômalo

Procederemos agora à análise da equação de magnetização nos limites extremos de temperatura.

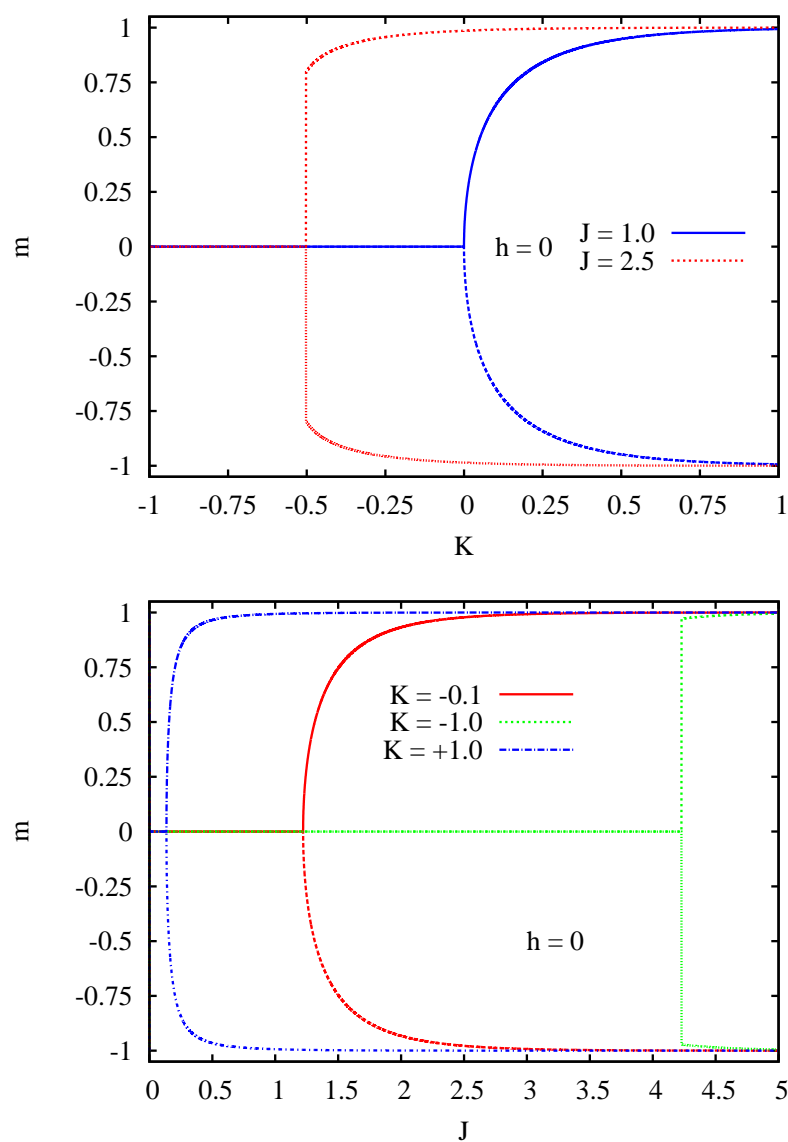


Figura 2.5: Várias curvas da magnetização como função das energias de interação (que possuem a temperatura embutida em suas definições), em campo nulo. Em cima: curvas de magnetização para valores fixos de J que representam, respectivamente, transições de segunda e primeira ordens. Como $J \propto 1/T$, o comportamento do sistema mediante mudanças na temperatura se visualiza melhor no gráfico de baixo. Ali, pode-se notar que a ordem é estabelecida à temperatura nula e há desordem em temperatura elevada. A temperatura cresce da direita para a esquerda.

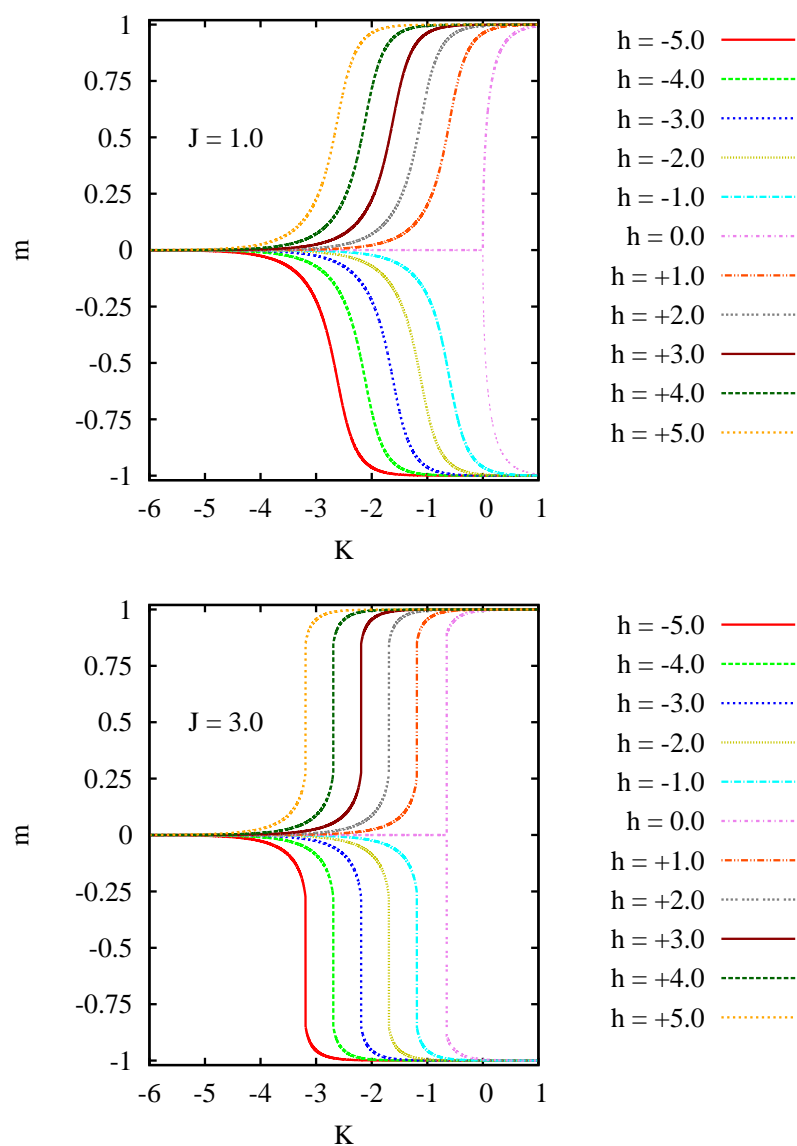


Figura 2.6: Curvas da magnetização na influência de campo externo. Figura de cima: caso com apenas um regime de segunda ordem ou contínuo de transição, enquanto que abaixo há exclusivamente o regime descontínuo. Em ambos os casos, o aumento do valor do campo (em módulo) adianta, no valor em temperatura, o processo de transição ao regime ferromagnético.

Baixas Temperaturas ($\beta \rightarrow +\infty$)

Em baixas temperaturas, existem duas situações distintas: $K > 0$ e $K < 0$. Analisemo-las separadamente.

(i) $K > 0$

Reescrevendo a equação de magnetização na forma

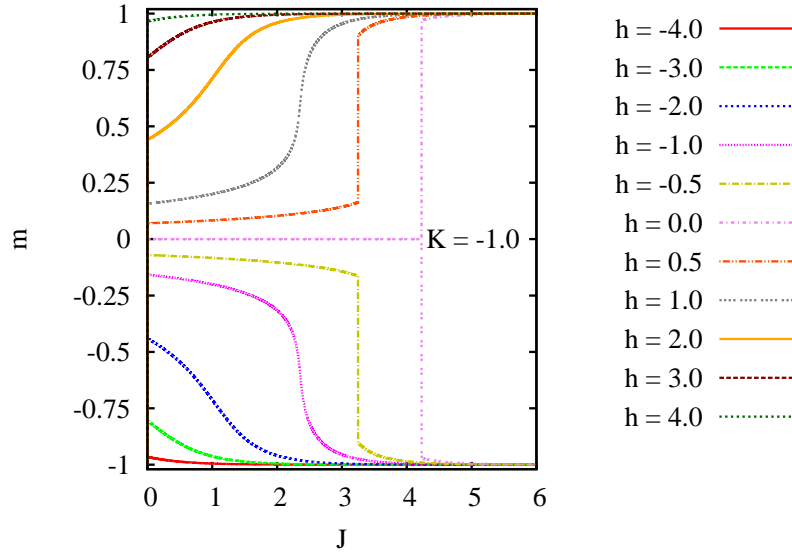


Figura 2.7: Figura da magnetização em um caso tipicamente competitivo, em que $K = -1$. Aqui, a temperatura cresce para a esquerda. Conforme o módulo do campo é elevado, há uma mudança de transição de fases, de primeira ordem para uma curva suave sem transições, respectivamente.

$$\frac{1}{m^2} - 1 = \frac{e^{-4K}}{\sinh^2(Jm + h)}, \quad (2.43)$$

analisemos o lado direito da equação. Como $K > 0$, é fácil ver que

$$\frac{e^{-4K}}{\sinh^2(Jm + h)} = \left(\frac{e^{-2K}}{\sinh(Jm + h)} \right)^2 = \left(\frac{1}{e^{2K} \sinh(Jm + h)} \right)^2. \quad (2.44)$$

Conforme $\beta \rightarrow +\infty$, $e^{2K} \rightarrow +\infty$, e $\sinh(Jm + h) \rightarrow \pm\infty$. Portanto,

$$\left(\frac{1}{e^{2K} \sinh(Jm + h)} \right)^2 \rightarrow 0. \quad (2.45)$$

Evidentemente, pela equação (2.43),

$$\therefore |m| \rightarrow 1. \quad (2.46)$$

Novamente, cabe rever as curvas do gráfico de baixo da Figura 2.6, que confirmam o comportamento limítrofe.

(ii) $K < 0$

Para este limite, primeiramente tem-se:

$$\sinh^2(Jm + h) \rightarrow \left(\frac{e^{Jm+h} - e^{-Jm-h}}{2} \right)^2 \rightarrow \frac{1}{4} e^{|Jm+h|}. \quad (2.47)$$

Assim, é claro que a equação de magnetização

$$\left(\frac{1}{m^2} - 1\right) \sinh^2(Jm + h) = e^{-4K} \quad (2.48)$$

no limite analisado, deverá tender para:

$$\left(\frac{1}{m^2} - 1\right) = 4e^{-2(2K+|Jm+h|)}. \quad (2.49)$$

Logo, retornando à notação original, em que não há a temperatura embutida:

$$2J_{sr} + |J_{lr}m + H| > 0 \implies \left(\frac{1}{m^2} - 1\right) \rightarrow 0, \therefore |m| \rightarrow 1; \quad (2.50)$$

$$2J_{sr} + |J_{lr}m + H| = 0 \implies \left(\frac{1}{m^2} - 1\right) \rightarrow 4, \therefore |m| \rightarrow \frac{\sqrt{3}}{3} = 0.557 \quad (2.51)$$

$$2J_{sr} + |J_{lr}m + H| < 0 \implies \left(\frac{1}{m^2} - 1\right) \rightarrow +\infty, \therefore m \rightarrow 0. \quad (2.52)$$

O primeiro caso, em que $2J_{sr} + |J_{lr}m + H| > 0$, é facilmente observável na Figura 2.5, cujo gráfico inferior apresenta duas curvas com $K < 0$ que tendem ao estado ferromagnético. É interessante que, em baixíssimas temperaturas, possa haver a possibilidade de o sistema adquirir magnetização não uniforme. Na literatura, o comportamento reentrante é a repetição de fases, mas aqui esse comportamento particular (ou anômalo) é ferromagnético por toda a parte, exceto nos limites termodinâmicos. A situação é mostrada na Figura 2.8 abaixo.

Desta forma, a condição $2J_{sr} + |J_{lr}m + H| = 0$ atua como um separador de comportamentos, na ausência e presença da particularidade, em ambos os casos, em que $2J_{sr} + |J_{lr}m + H| > 0$ e $2J_{sr} + |J_{lr}m + H| < 0$, respectivamente.

O caso pode ser melhor visualizado no caso do conjunto de variáveis (β, J_J, h_J) do Hamiltoniano escalonado. Nas novas variáveis, a equação (2.42) se traduz em

$$m \sqrt{e^{2\beta J_J} \sinh^2[\beta(m + h_J)] + e^{-2\beta J_J}} = e^{\beta J_J} \sinh[\beta(m + h_J)], \quad (2.53)$$

cuja checagem ao conjunto de figuras 2.9 a seguir executados de forma sequencial mostra ainda mais curvas anômalas. Todas as figuras referentes à magnetização foram obtidas aplicando-se o método de Newton-Raphson na equação (2.42), num algoritmo em Fortran 95. As figuras mostram o caso bem evidente de que a magnetização cresce a partir do zero sem haver um ponto crítico indicativo de uma transição presente; as curvas são suaves e contínuas e apenas atingem a nulidade em $\beta = 0$ e em $\beta \rightarrow +\infty$. Comparando-se à curva solitária do gráfico 2.8, que exhibe a magnetização como função de T , faz-se notar a similaridade das curvas. Observar que o máximo da magnetização anômala nunca é tal que

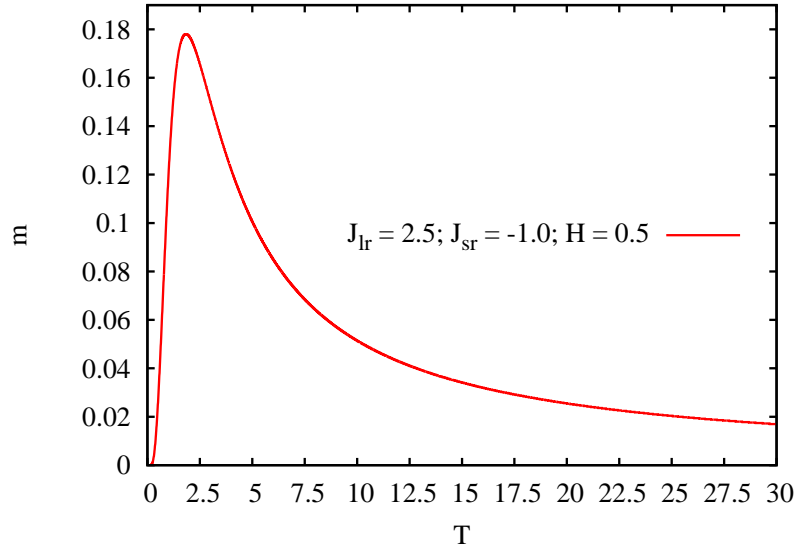


Figura 2.8: Magnetização com comportamento anômalo (aqui também chamado de particular), em função da temperatura, obtida a partir da equação (2.42) para o conjunto de parâmetros externos $\{J_{lr} = 2.5, J_{sr} = -1.0, H = 0.5\}$. Como a magnetização é tal que $m < 0.18$, a curva obedece ao regime $2J_{sr} + |J_{lr}m + H| < 0$, em que $m \rightarrow 0$ com a temperatura.

$m > 0.5$. A sequência de curvas também suscita a existência de um valor de campo abaixo do qual toda curva de magnetização é anômala (ou particular), o qual será chamado de campo crítico doravante. No caso da figura em que $J_J = -2.5$, o campo crítico é $h_{J,c} = 4.5$.

Altas Temperaturas ($\beta \rightarrow 0$)

Novamente analisando a equação (2.43), quando $\beta \rightarrow 0$, expandem-se a exponencial e o seno hiperbólico como:

$$\sinh^2(Jm + h) \approx (Jm + h)^2, \quad (2.54)$$

$$e^{-4K} \approx 1 - 4K. \quad (2.55)$$

A última equação é independente do sinal de K. Fica trivial então que $e^{-4K} \rightarrow 1$ e $\sinh(Jm + h) \rightarrow 0$. Rearranjando os termos da equação,

$$\frac{\sinh^2(Jm + h)}{e^{-4K}} = \left(1 - \frac{1}{m^2}\right)^{-1}. \quad (2.56)$$

Em vista dos limites anteriores,

$$\frac{\sinh^2(Jm + h)}{e^{-4K}} \rightarrow 0. \quad (2.57)$$

Tal fato implica que

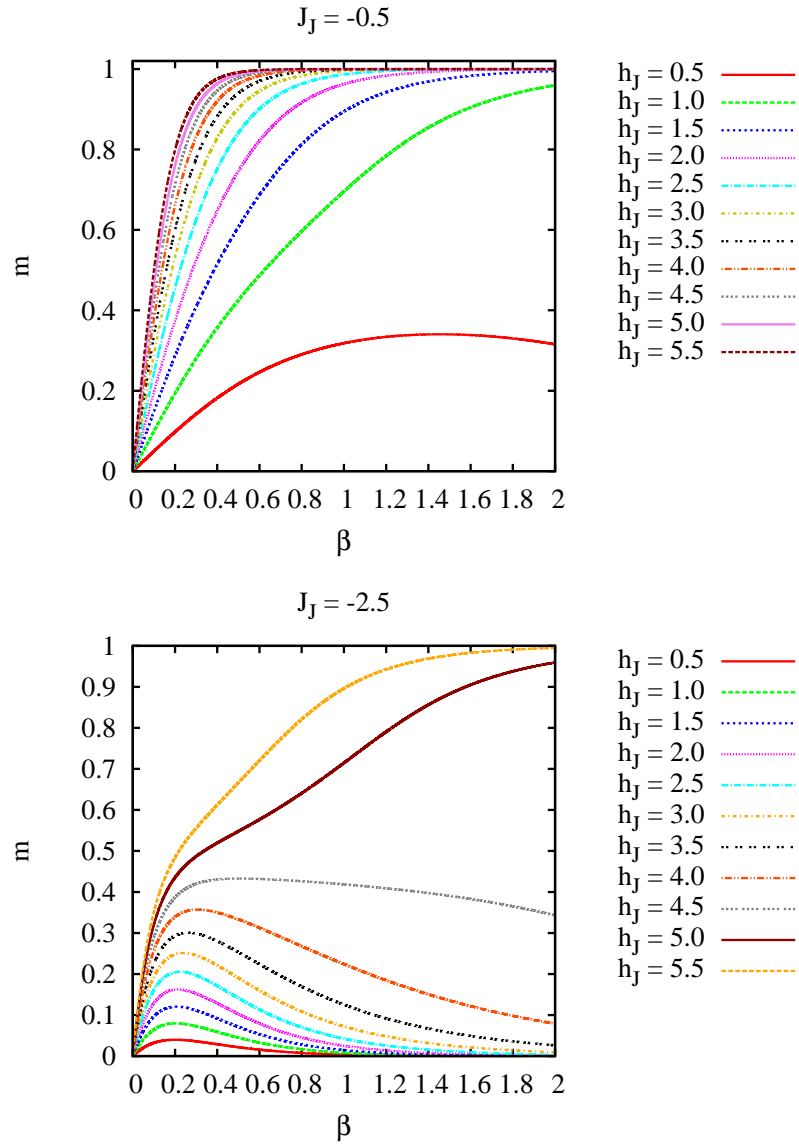


Figura 2.9: Famílias de curvas para dois casos competitivos, executadas como função do fator de Boltzmann para um conjunto de campos positivos indicados na legenda. A figura de cima tem $J_J = -0.5$, apresentando apenas um comportamento anômalo, mas a figura de baixo apresenta vários exemplos. Aqui, o campo crítico é $h_J = 4.5$. Acima deste valor, a magnetização atinge um estado ordenado de modo suave.

$$\left(1 - \frac{1}{m^2}\right)^{-1} \rightarrow 0 \Leftrightarrow \frac{m^2}{1 - m^2} \rightarrow +\infty. \quad (2.58)$$

Como $-1 \leq m \leq 1$, finalmente obtemos que

$$\therefore m \rightarrow 0. \quad (2.59)$$

Os gráficos das figuras 2.6 e 2.5 deixam bem claro o limite. Observação: esse resultado independe dos valores de assumidos por K , J , e h .

2.3 Uma Definição Prática para o Comportamento Anômalo

Ao checar-se as curvas das magnetizações que apresentam o comportamento particular, (2.8) e (2.9), é possível associá-lo à existência de uma região na faixa de temperaturas $(\beta^*, +\infty)$, tal que:

$$\forall \beta \in (\beta^*, +\infty) \implies \left(\frac{\partial m}{\partial \beta} \right)_{H, J_J} < 0. \quad (2.60)$$

A definição (2.60) acima pode servir de critério inicial para uma determinação analítica do comportamento particular da magnetização.

Ainda tendo em mente o mesmo conjunto de figuras, observa-se a existência de um pico na magnetização, que ocorre justamente quando

$$\left(\frac{\partial m}{\partial \beta} \right)_{\beta^*} = 0, \quad (2.61)$$

que pode ser usada para a determinação dos extremos (máximos, no caso de $(h_J, -J_J) > 0$), onde é imprescindível o auxílio da equação de magnetização, $m D(\beta) = E(\beta)$.

Obtém-se a derivada da equação de magnetização derivando implicitamente a equação de magnetização com relação a β , cuja dedução pode ser encontrada na seção Apêndice A, ao final deste trabalho. O cálculo leva a

$$\frac{\partial m}{\partial \beta} = \frac{(E'^2 - 1)(\delta C' / \beta + 2J_J E')}{(E'^2 - 1)\beta C' - E'}, \quad (2.62)$$

em que a aspa representa apenas uma divisão por D ($E' := E/D$; $C' := C/D$). Nas figuras 2.10 abaixo estão apresentados os gráficos da expressão última, como função do fator de Boltzmann, para os casos de $J_J = -1.5$ e $J_J = -2.5$, respectivamente. Observe a existência da região referida pelo critério estabelecido em (2.60).

Em seguida, serão analisadas algumas propriedades dessa equação última.

2.3.1 Análise do Máximo (extremo) de Magnetização

Utilizando o critério (2.61), e supondo que divergência alguma aconteça no denominador da equação (A.9), tem-se que:²

$$(E'^2 - 1) \left(\frac{\delta}{\beta} C' + 2J_J E' \right) = 0, \quad (2.63)$$

²Uma argumentação rigorosa é feita no Apêndice B.

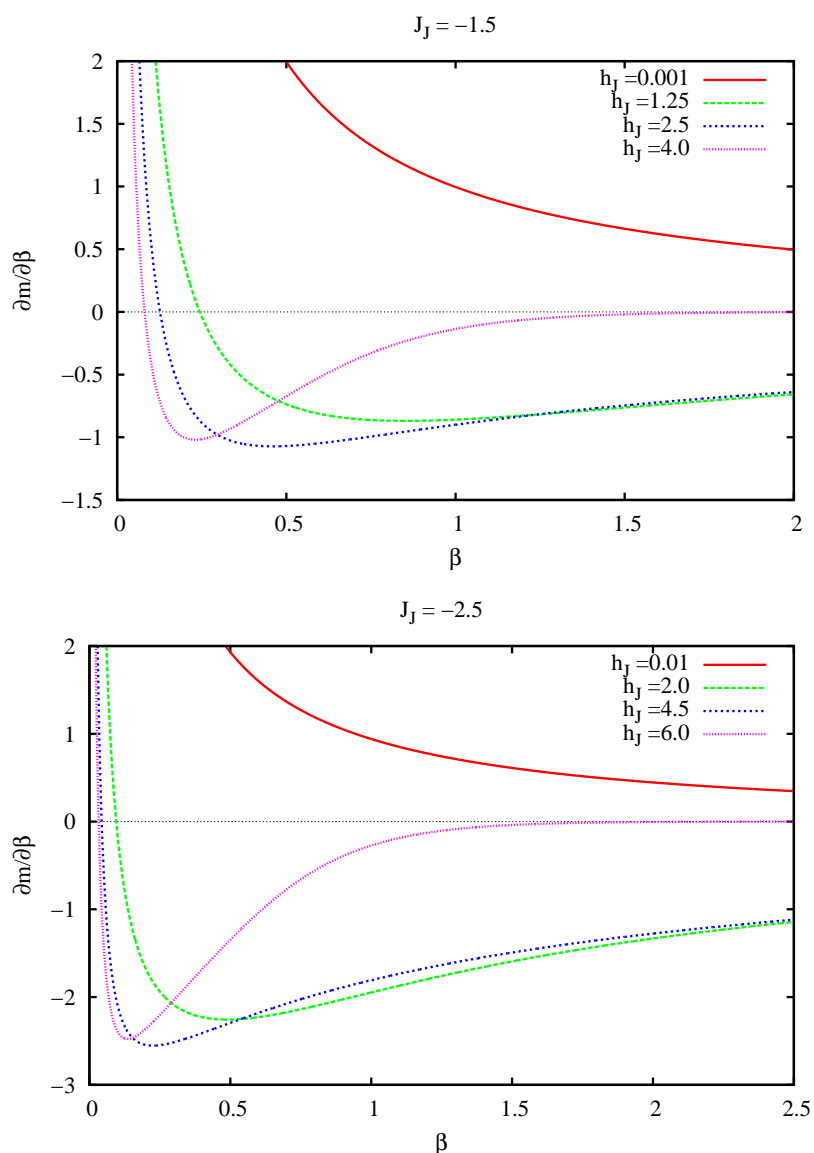


Figura 2.10: Curvas da derivada da magnetização como função do fator de Boltzmann, em $J_J = -1.5$ (acima) e $J_J = -2.5$ (abaixo). Para certos valores do campo externo, há uma região onde $\partial m/\partial\beta < 0$, estendendo-se a $\beta \rightarrow +\infty$.

levando a duas situações distintas:

$$\begin{cases} E'^2 - 1 = 0; \\ \frac{\delta}{\beta} C' + 2J_J E' = 0. \end{cases} \quad (2.64)$$

Lembrando que $m = E'$ (equação de magnetização (2.53)), a primeira das equações acima converte-se facilmente em

$$|m| = 1, \quad (2.65)$$

a qual corresponde trivialmente ao caso da transição de primeira ordem, em salto máximo. Porém, o interesse maior é encontrar uma equação que relacione o máximo inferior a $|m_m| = 1$, onde m_m define o máximo fisicamente realizável, para o caso competitivo. Tomando a segunda do conjunto de equações (2.64), reescrevemo-la de maneira tal a

$$\frac{\delta}{\beta} = -2J_J \frac{E'}{C'}, \quad (2.66)$$

que, observando as definições de $C'(\beta)$ e $E'(\beta)$ torna-se,

$$\frac{\delta}{\beta} = -2J_J \tanh(\delta). \quad (2.67)$$

Uma equação similar à conhecida equação da magnetização para o modelo de magnetismo de spins clássicos do modelo de Ising. Reescrevendo a equação,

$$-J_J = \frac{1}{2\beta} \left(\frac{\tanh(\delta)}{\delta} \right)^{-1}. \quad (2.68)$$

Desde que $\tanh(\delta)/\delta$ é uma função par, e portanto, sempre positiva com relação ao argumento δ , tem-se um lado direito da equação (2.68) totalmente positivo. Assim, a validade desta equação está simplesmente atrelada ao caso competitivo, justificando a ocorrência do máximo (no caso mais geral, o extremo) apenas em casos em que $J_J < 0$, e portanto, a ocorrência do comportamento anômalo nessa região.

Nas figuras 2.11 a seguir são apresentadas duas curvas de magnetização em função do fator de Boltzmann, além dos lados direito e esquerdo da equação (2.68), em curvas verde e azul, respectivamente. O ponto de encontro de ambas representa o ponto β^* de magnetização máxima para o conjunto de variáveis $\{J_J, h_J\}$, calculado numericamente de acordo com o método de Newton-Raphson, via Fortran 90.

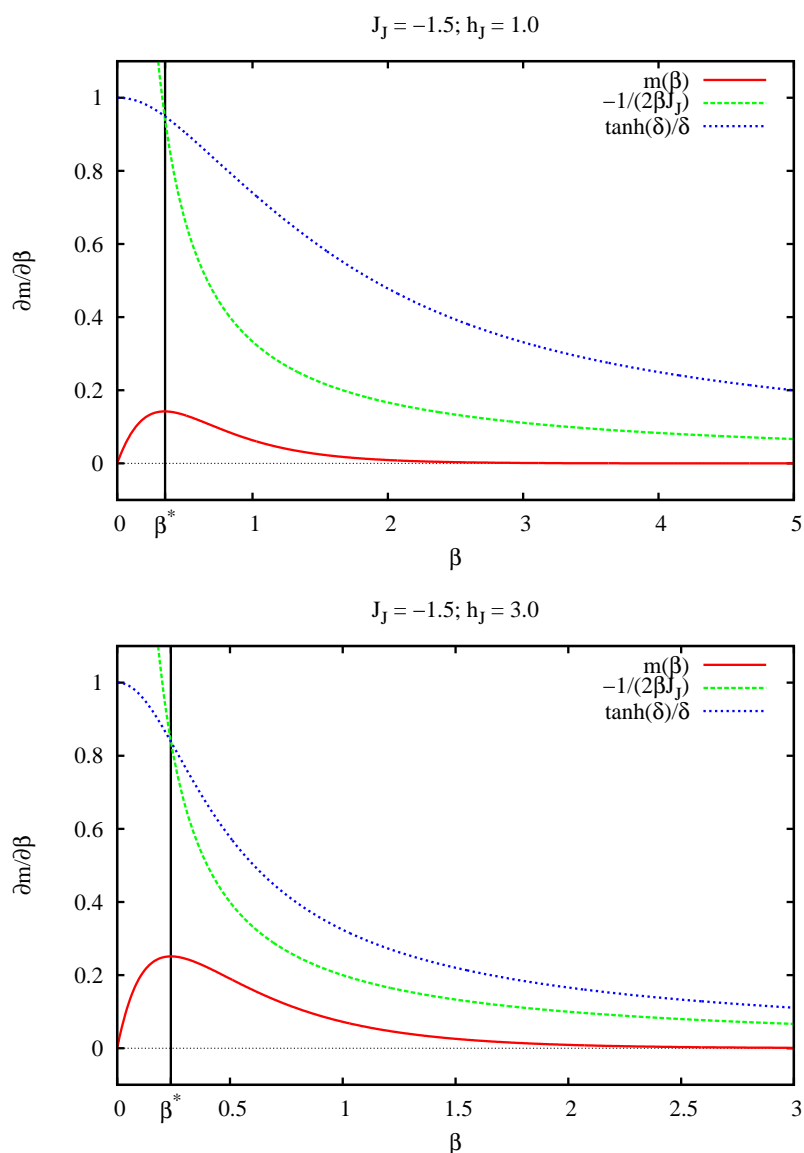


Figura 2.11: Gráficos da magnetização como função do fator de Boltzmann (linha contínua ou vermelha) juntamente às curvas tracejadas que representam o lado esquerdo e direito da equação (2.68). No caso de cima, em que $J_J = -1.5$ e $h_J = 1.0$, $\beta^* \approx 0.354$, como evidenciado pela linha vertical. Na de baixo ($J_J = -2.5$, $h_J = 3.0$), $\beta^* \approx 0.238$.

Para se ter uma ideia de quando e como os valores das constantes externas influenciam na configuração magnética do sistema além do que já foi visto nesse capítulo, é necessário obter os diagramas de fases, que será feito no capítulo seguinte.

Capítulo 3

Estabilidade e Transições de Fases

Nesse capítulo serão tratadas as questões de estabilidade da magnetização da energia livre, levando à ideia de como é o diagrama de fases a campo nulo para em seguida apresentar-se os diagramas de fases dos casos com e sem campo, juntamente a resultados oriundos da expansão da energia livre.

3.1 Estabilidade da Energia Livre para $H=0$

O estudo da estabilidade do parâmetro de ordem na série de Taylor do mesmo fornece uma base de como o diagrama de fases é. Nesta seção, será analisada a estabilidade da magnetização em campo nulo.

Relembrando a expressão para a energia livre (2.31), onde apenas a dependência na magnetização é destacada,

$$f_J(m) = -\log \left[e^{\beta J_J} \cosh(\beta m + \beta h_J) + \sqrt{e^{2\beta J_J} \sinh(\beta m + \beta h_J) + e^{-2\beta J_J}} \right] + \frac{1}{2}\beta m^2, \quad (3.1)$$

é útil fazer sua expansão em campo nulo no intuito de determinar a estabilidade das diferentes soluções (extremos em relação a m). A expansão, de acordo com a teoria de Landau, tem a forma:

$$f(m) = a_0(\beta, J_J) + a_2(\beta, J_J)m^2 + a_4(\beta, J_J)m^4 + a_6(\beta, J_J)m^6, \quad (3.2)$$

onde o termo a_0 pode ser absorvido numa nova redefinição de $f(m)$ por ser uma constante, e¹

¹A expansão da energia livre em série de Taylor encontra-se no Apêndice C.

$$\begin{aligned}
a_0(\beta, J_J) &= f_J(m=0) = -\log [2 \cosh(\beta J_J)]; \\
a_2(\beta, J_J) &= \frac{1}{2}\beta(1 - \beta e^{2\beta J_J}); \\
a_4(\beta, J_J) &= \frac{1}{24}\beta^4 e^{2\beta J_J} (3e^{4\beta J_J} - 1); \\
a_6(\beta, J_J) &= -\frac{1}{720}\beta^6 e^{2\beta J_J} (45e^{8\beta J_J} - 30e^{4\beta J_J} + 1).
\end{aligned} \tag{3.3}$$

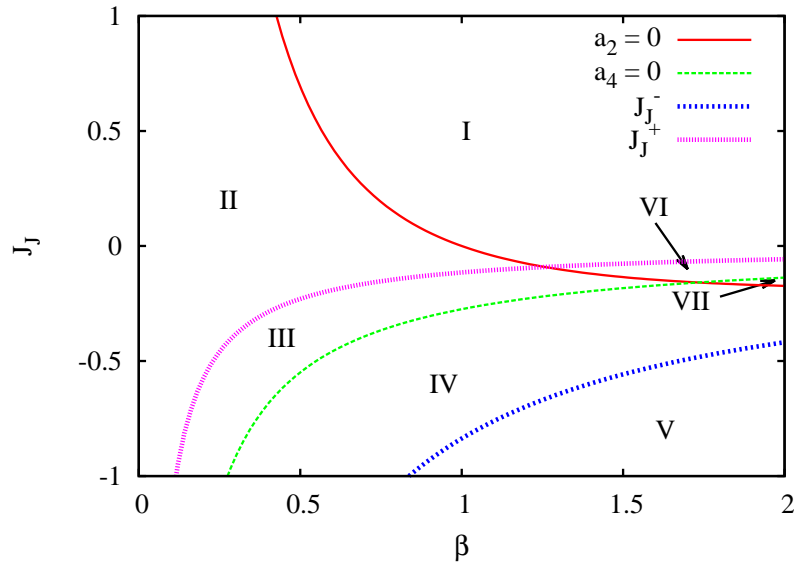


Figura 3.1: Gráfico ilustrativo das diferentes regiões de estabilidade das soluções de mínima energia livre, no plano J_J versus β .

A estabilidade devido ao comportamento de cada termo está resumida na Figura 3.1. Abaixo da curva $a_2 = 0$, representada na Figura 3.1 em vermelho, $a_2 > 0$, e acima, $a_2 < 0$. Abaixo da curva o estado estável deve ser o nulo, como se pode ver na curva de energia livre correspondente na Figura 3.2. Acima da curva a solução $m = 0$ passa a ser um ponto instável, e o termo quártico passa a ser importante para reestabelecer a estabilidade das soluções na função energia livre.

Na Figura 3.2 se encontram curvas da energia livre como função da magnetização para todas as sete regiões constantes na Figura 3.1, que são as regiões do espaço de fases divididas fazendo-se cada termo da expansão da energia livre nulos. Note como todas as regiões abaixo da curva de $a_2 = 0$ (II, III, IV e V) possuem estados de magnetização estável paramagnética ($m = 0$). A expressão que divide essas regiões é:

$$J_J = -\frac{1}{2\beta} \log(\beta). \tag{3.4}$$

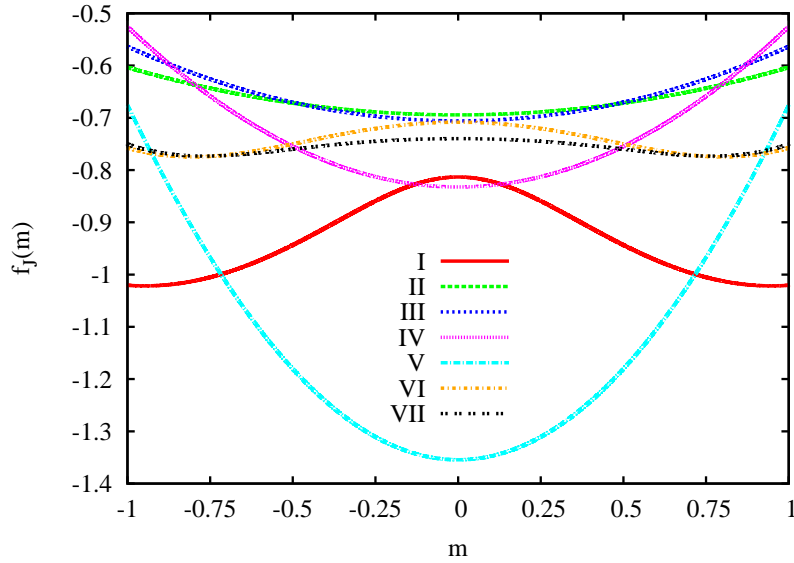


Figura 3.2: Sequência de energias livres como função da magnetização. As legendas correspondem aos pontos definidos pela tabela 3.1 das regiões definidas pelas curvas da Figura 3.1. As regiões II - V possuem magnetizações nulas, mas as demais são magnetizadas.

A curva obtida fazendo-se $a_4 = 0$ é a linha verde na Figura 3.1. A expressão que divide as regiões dessa curva é

$$J_J = -\frac{1}{4\beta} \log(3). \quad (3.5)$$

Acima da curva, $a_4 > 0$. Quando $a_2 < 0$, $m = 0$ é solução instável como discutido anteriormente, mas se $a_4 > 0$ a energia livre apresentará dois mínimos metaestáveis que deverão ser as soluções magnetizadas do sistema. Isso corresponde a grande parte da região I ($a_2 < 0$) e na região VI da Figura 3.1. A presença de magnetização é confirmada na Figura 3.2. O ponto onde ambas as curvas (vermelha e verde) se cruzam corresponde a um ponto tricrítico, como veremos nas próximas seções.

Abaixo de ambas as curvas, a região em que $a_4 < 0$ (VII), para ambos os casos dos sinais de a_2 , afirma que ali é necessária a análise do termo de ordem sexta, a_6 deverá ser positivo para garantir a estabilidade da energia livre. Agora, há as regiões em que a_2 e a_4 têm sinais opostos.

Para temperaturas abaixo do ponto tricrítico ($\beta > \beta_t$)², o sistema apresenta uma linha de transições de primeira ordem. A curva de segunda ordem nessa região (curva representada pela condição $a_2 = 0$), corresponde a uma linha *espinodal*, um limite superior para a existência de soluções magnetizadas. A curva de primeira ordem deve estar abaixo da linha espinodal representada pelo termo $a_2 = 0$. Entre as duas curvas, a energia livre apresenta

²O sistema possui um ponto tricrítico que será calculado na próxima seção.

duas soluções, uma de menor energia, correspondente a solução termodinamicamente estável, e uma outra de maior energia livre, metaestável.

Resta, enfim, saber qual o comportamento na região VII. Tomando-se, agora, $a_6 = 0$ a fim de investigar sua estabilidade, são encontradas duas curvas, a saber,

$$J_J^\pm = \frac{1}{4\beta} \left[\log \left(1 \pm \frac{2}{\sqrt{5}} \right) \frac{1}{3} \right] = -\frac{1}{4\beta} \log(3) + \frac{1}{4\beta} \log \left(1 \pm \frac{2}{\sqrt{5}} \right), \quad (3.6)$$

que delimitam o espaço $J_J \otimes \beta$ conforme Figura 3.1. Cada uma dessas regiões fornece um sinal para o termo de a_6 . Próximo à origem, a tendência é negativizar-se, passando por uma faixa onde o termo é positivo, e finalmente tornando-se novamente negativo na direção $(\infty, -\infty)$. Isso significa que na região VII se tem uma solução estável com presença de um estado magnetizado. Uma nova checagem à Figura 3.2 confirma a lógica.

Região	(β, J_J)	Termo que dita m	m
I	(1.0, 0.5)	$a_2 < 0, a_4 > 0$	≈ 1.0
II	(0.25, 0.2)	$a_2 > 0$	0
III	(0.4, -0.4)	$a_2 > 0$	0
IV	(0.9, -0.6)	$a_2 > 0$	0
V	(1.6, -0.8)	$a_2 > 0$	0
VI	(1.75, -0.1)	$a_2 < 0, a_4 > 0$	> 0.75
VII	(2.0, -0.154)	$a_4 < 0, a_6 > 0$	> 0.75

Por fim, todos esses resultados são postos em perspectiva na tabela 3.1, bem como os pontos utilizados para calcular as energias livres da Figura 3.2 (segunda coluna). Na penúltima coluna, a análise que permite levar às conclusões sobre a magnetização, que constam na última coluna.

3.2 Transições de Fases

O modelo apresenta transições de fase de primeira e segunda ordens que ocorrem, respectivamente, em baixas e altas temperaturas. Serão analisados os casos com campo e sem campo, conforme visto, por exemplo, nas figuras 2.5 e 2.7. Por último os diagramas de fases serão apresentados.

3.2.1 Campo externo nulo

Tomando a equação de magnetização (2.42) reescrita na forma

$$\sinh^2(\beta m + \beta h_J) - \frac{m^2}{1 - m^2} e^{-4\beta J_J} = 0, \quad (3.7)$$

sabe-se que tal pode ter mais de uma solução. Neste caso, a que minimiza a energia livre é a adequada.

Para estudar esse caso, considere as seguintes expansões para o caso de $m \ll 1$, onde o valor do campo h_J já foi tomado como nulo:

$$\frac{m^2}{1 - m^2} = m^2 \sum_k m^{2k} = \sum_k m^{2k+2}, \quad (3.8)$$

e

$$\sinh(\beta m) = \sum_k \frac{(\beta m)^{2k+1}}{(2k+1)!} \implies \sinh^2(\beta m) = \sum_{k,l} \frac{(\beta m)^{2k+2l+2}}{(2k+1)!(2l+1)!}; \quad (3.9)$$

onde k e l são tais que $0 \leq k, l < \infty$, inteiros. Substituindo (3.8) e (3.9) em (3.7), e rearranjando os termos obtemos:

$$\sum_k (\beta m)^{2k} \left[\frac{\beta m}{(2k+1)!} \sum_l \frac{(\beta m)^{2l+1}}{(2l+1)!} - e^{-4\beta J_J} \frac{m^2}{\beta^{2k}} \right] = 0. \quad (3.10)$$

Assim, inferem-se duas possibilidades, a saber:

$$(\beta m)^{2k} = 0, \quad \forall k \implies m = 0, \quad \forall k; \quad (3.11)$$

ou,

$$\frac{\beta m}{(2k+1)!} \sum_l \frac{(\beta m)^{2l+1}}{(2l+1)!} - e^{-4\beta J_J} \frac{m^2}{\beta^{2k}} = 0, \quad \forall k. \quad (3.12)$$

Na ordem mais baixa de k e l ($k = l = 0$), válida para $m \ll 1$, a curva de segunda ordem deve ser obtida:

$$J_{J,c}^{(2)} = -\frac{1}{2\beta} \log(\beta). \quad (3.13)$$

Observe que essa é a mesma curva obtida fazendo-se $a_2 = 0$ na expansão livre apresentada anteriormente. Se agora a soma em l for efetuada, resulta em

$$\frac{\beta m}{(2k+1)!} \sinh(\beta m) - e^{-4\beta J_J} \frac{m^2}{\beta^{2k}} = 0. \quad (3.14)$$

Novamente considerando o caso $k = 0$ e assumindo que a equação acima carrega em si a transição de primeira ordem, tomam-se os limites para $|m| \rightarrow 1$:

$$\lim_{|m| \rightarrow 1} \left[\beta m \sinh(\beta m) - e^{-4\beta J_J} \frac{m^2}{1} \right] = 0. \quad (3.15)$$

Efetando os limites, e rearranjando os termos,

$$J_{J,c}(m=1) = -\frac{1}{4\beta} \log(\beta \sinh(\beta)). \quad (3.16)$$

Naturalmente, esta curva não representa a transição de primeira ordem, cujo salto pode ocorrer para qualquer valor de magnetização. Porém, ao tomar-se $\lim_{\beta \rightarrow +\infty}$, chega-se a um resultado interessante, a saber:

$$J_{J,c}(m=1) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} -\frac{1}{4}, \quad (3.17)$$

significando que as transições de primeira ordem findam em $J_J = -0.25$.

Um gráfico onde esses resultados são exibidos e contrastados com os numéricos é o da Figura 3.3. Repare na existência do limite acima e como a curva de segunda ordem $J_{J,c}^{(2)}$ perde o seu efeito em baixas temperaturas (onde o regime transitivo passa a ser de primeira ordem). Para obter o ponto de transição, escolhe-se o ponto médio entre a magnetização nula e o primeiro ponto onde a magnetização é diferente de zero.

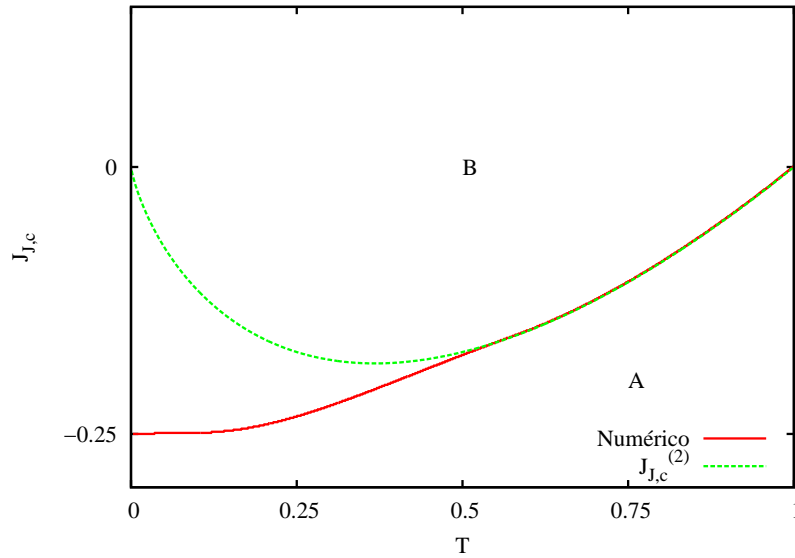


Figura 3.3: Comparativo entre os dados numéricos e a curva de transição de segunda ordem. Curva executada à campo nulo, a parte numérica é explicitada em vermelho e a da equação para $J_{J,c}^{(2)}$, em verde. “A” é uma região desmagnetizada (paramagnética) e “B”, magnetizada (ferromagnética) – com relação à curva vermelha.

Determinação do Ponto Tricrítico

A Figura 3.3 também fornece um bom panorama numérico do ponto tricrítico. A partir de altas temperaturas, os dados numéricos sobrepõem-se à curva de segunda ordem calculada por (3.13). Essa situação prolonga-se até por volta de $T_t \approx 0.5$, ou $\beta_t \approx 2.0$.

O ponto tricrítico pode ser determinado a partir dos coeficientes da expansão da energia livre quando a magnetização é exígua. A energia livre expandida anteriormente até ordem sexta, recordando, vale,

$$\begin{aligned} f(m) = & -\log [2 \cosh(\beta J_J)] + \frac{1}{2}\beta(1 - \beta e^{2\beta J_J})m^2 + \\ & + \frac{1}{24}\beta^4 e^{2\beta J_J} (3e^{4\beta J_J} - 1)m^4 + \\ & - \frac{1}{720}\beta^6 e^{2\beta J_J} (45e^{8\beta J_J} - 30e^{4\beta J_J} + 1)m^6. \end{aligned} \quad (3.18)$$

O ponto tricrítico $(\beta_t, J_{J,t})$ é calculado fazendo-se nulos, simultaneamente, os termos quadrático e quártico da expansão. Como já dito, a nulidade do termo quadrático oferta a linha de segunda ordem,

$$J_J = -\frac{1}{2\beta_t} \log(\beta_t), \quad (3.19)$$

e o termo quártico,

$$J_J = -\frac{1}{4\beta_t} \log(3). \quad (3.20)$$

Considerando que o ponto é acessado de valores inferiores do ponto tricrítico (do regime de altas temperaturas), a estabilidade do termo sexto da expansão é assegurada. Igualando as duas expressões, obtém-se que

$$\beta_t = \sqrt{3} \implies J_{J,t} = -\frac{1}{4\sqrt{3}} \log(3). \quad (3.21)$$

Assim, se $\beta > \beta_t$, o sistema sofre uma transição de primeira ordem e, no caso contrário, contínua. Note ainda que, $T_t = 1/\beta_t = 1/\sqrt{3} \approx 0.577$, em boa concordância com os resultados numéricos da Figura 3.3 acima.

3.2.2 Presença do Campo Externo

As transições de fases obtidas via numérica para alguns valores de J_J constam na Figura 3.4 abaixo, obtidas numericamente em função da temperatura.

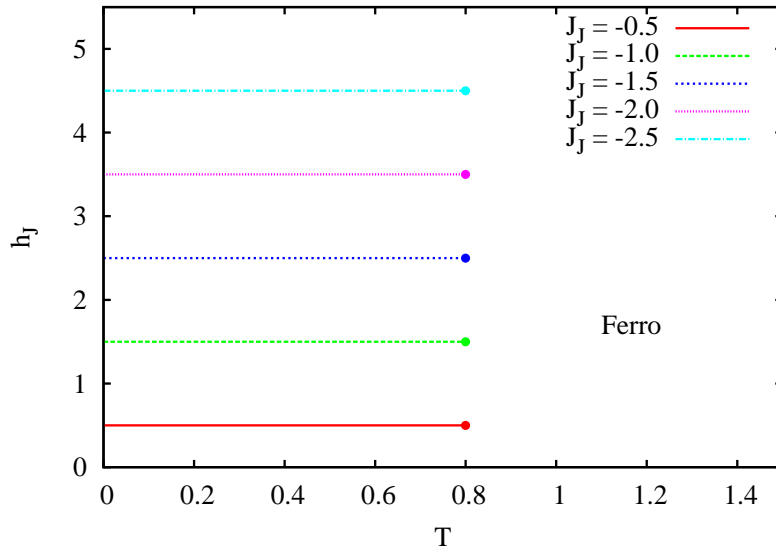


Figura 3.4: Linhas de transição numéricas para o caso com campo como função da temperatura. As linhas representam transições de primeira ordem que ocorrem em campo, do tipo ferro-ferro, em sua extensão que varre o intervalo $0 \leq T \lesssim 0.8$. Abaixo de cada linha sempre há um comportamento anômalo (ou particular) e acima, um decaimento suave da magnetização com a temperatura.

Para um melhor entendimento do que se passa no diagrama de fases, sugere-se acompanhar a Figura 2.9 para o caso $J_J = -2.5$. Em ambos os gráficos, há a existência de “platôs” desde $T = 0$ até por volta de $T = 0.8$. Para temperaturas dentro desse intervalo, o sistema sofre um salto descontínuo em campo, que é máximo ($m = 0 \rightarrow m = 1$) apenas no limite de temperatura nula, para em seguida diminuir continuamente até o fim do platô, em $T \approx 0.812$. Esta finda descontinuamente para dar lugar a uma mudança contínua na magnetização, mas que *não representa uma transição de segunda ordem*.

3.2.3 Diagramas de Fases

Tendo investigado as propriedades do sistema em torno da magnetização, torna-se imprescindível acrescentar, a essa altura, os diagramas de fases. Primeiramente, em campo zero na Figura 3.5, em seguida apresentado como função de β .

Ali, o ponto tricrítico $T = (\beta_t = 1.732, J_{J,t} = -0.1585)$ separa o diagrama entre regimes em que se veem transições de segunda ordem (para $\beta < \beta_t$) e de primeira ordem (em $\beta > \beta_t$), representadas pelas curvas nas cores vermelha e verde, respectivamente. Repare a similaridade com os resultados já obtidos através da discussão sobre a estabilidade na seção anterior, mais precisamente com a Figura 3.1.

O diagrama de fases para o caso com campo é bem mais simples, como a Figura 3.6 nos explica. A presença do campo elimina as transições térmicas, que ficam restritas apenas

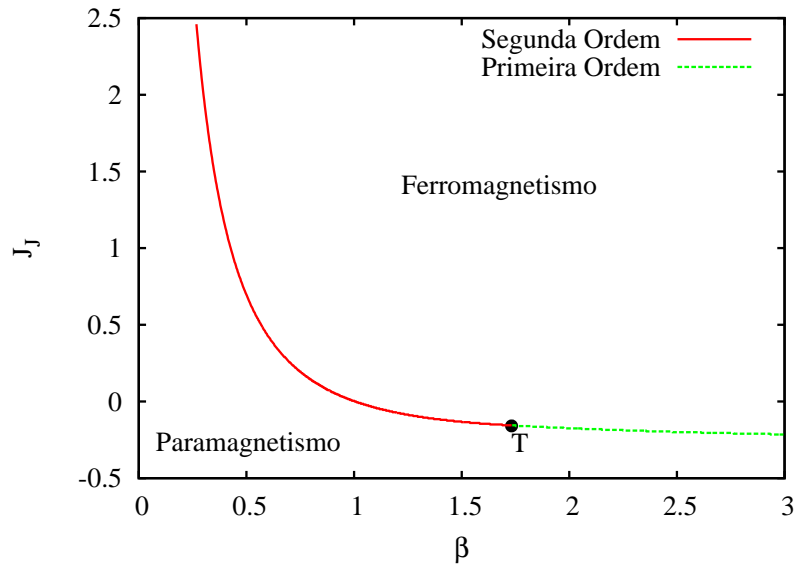


Figura 3.5: Diagrama de fases para transições que aconteçam em campo zero. O ponto tricrítico (T) separa os regimes de transição de segunda ordem (à esquerda) dos de primeira ordem (à direita). Em ambos os casos, o sistema migra de um estado paramagnético para uma configuração ferromagnética.

à nulidade do campo. Ali então consta apenas a transição (sempre de primeira ordem) em campo. Repare que a magnetização é máxima no eixo vertical acima do campo crítico e nula abaixo. Não obstante, a diferença de comportamento monótono da magnetização (crescendo abaixo do campo crítico – antes de tornar a decrescer – e decrescendo acima do campo), o sistema se encontra magnetizado. A magnetização, indiferentemente de sofrer transição ou não, sempre sobe, em módulo, de baixo para cima (conforme se aumenta o campo), como naturalmente esperado.

Embora o platô tenha sido executado para o caso onde $J_J = -2.5$, cabe dizer que é idêntico para todos os valores de $J_J < -0.25$: iniciam em $T = 0$ e findam em $T \approx 0.812$, como computado numericamente. Dessa maneira, pode-se dizer que o parâmetro $J_J = -0.25$ é um divisor de comportamentos nas transições: para valores acima dele, tem-se apenas transições em campo zero, e abaixo, transições em campo presente. Uma possível explicação pode ser dada pelo fato de que o campo crítico requerido pelo sistema quando $J_J > -0.25$ passa a ser nulo eliminando as magnetizações singulares e, por conseguinte, o efeito da competição.

O regime paramagnético é acessado apenas no limite de temperatura nula (no gráfico, a flecha aponta para o eixo vertical, abaixo do campo crítico). Ademais, o sistema apresenta uma configuração ferromagnética presente no restante do diagrama, ainda que fracamente (m pequena).

As coisas tornam-se mais interessantes, porém, quando a magnetização passa a ser olhada do ponto de vista de variáveis não reduzidas (o conjunto $\{K, J, h\}$). De um modo

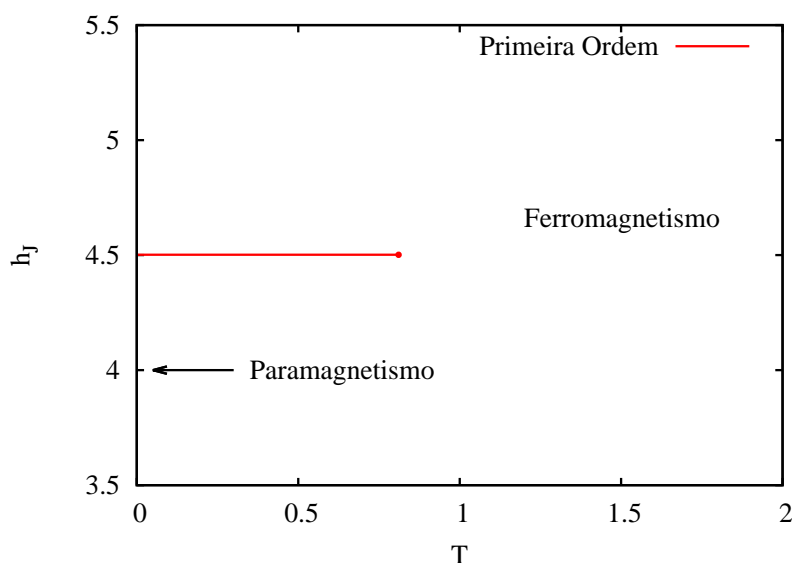


Figura 3.6: Diagrama de fases para o caso com campo, tomando-se fixo $J_J = -2.5$. O platô no campo crítico de $h_J = 2.5$ finda em $\beta \approx 0.811$, padrão que se repete para todos os valores de $J_J < -0.25$. Não há transições térmicas, apenas em campo e o sistema tem uma configuração ferromagnética presente em todo o espaço.

similar ao caso das variáveis reduzidas (em que a presença da temperatura foi exposta - lembra-se), os gráficos de transição são uma sucessão de linhas de primeira ordem, ocorrendo em ambos os sentidos: no campo e na temperatura (ou em função de J), conforme a Figura 3.7 a seguir, em que alguns casos competitivos são mostrados. Repare como a figura de magnetização 2.7, que contém uma transição em $h = 0.5$, corrobora a linha para $K = -1.0$, ali explicitada em vermelho.

Mostra-se o caso particular em que $K = -2.0$ no diagrama 3.8 abaixo. Como no caso de variáveis não reduzidas, a transição é ferromagnetismo-ferromagnetismo (ou um degrau para um estado ferrmagnético maior, em módulo), só que dessa vez sendo orientada em ambas as direções, vertical e horizontal. A declividade da curva é de aproximadamente $(\partial h / \partial J)_K \approx 0.55$. Ali, a transição para o valor ferromagnético máximo de magnetização se dá sempre na direção $(+\infty, +\infty)$, e o mesmo vale para a figura anterior. Para melhor explicitar o comportamento da magnetização aqui descrito, sugere-se olhar o mapa de calor para o caso na Figura (3.9), também como forma de resumo do discutido.

Assim, infere-se do panorama geral que transições do tipo paramagnetismo-ferromagnetismo apenas se apresentam no caso do campo nulo, sendo o único caso também que apresenta transição de segunda ordem. Nos demais casos, a transição é sempre de primeira ordem; diz-se que o campo tem por efeito eliminar as transições térmicas.

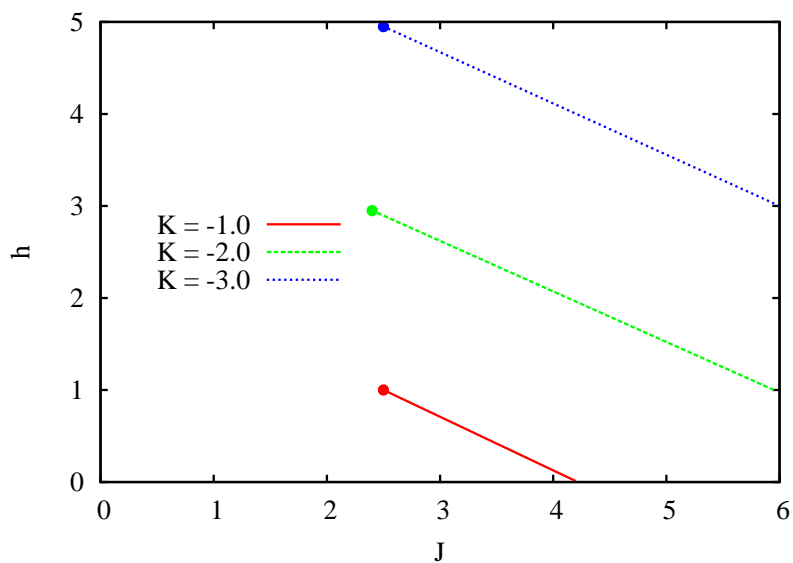


Figura 3.7: Linhas de transição de primeira ordem para alguns casos de K fixos e negativizados. Todas as curvas se iniciam (ou terminam) a partir de algum ponto do eixo- y , mas no valor fixo de $J \approx 2.5$. Todas elas tem um declividade de aproximadamente 0.55.

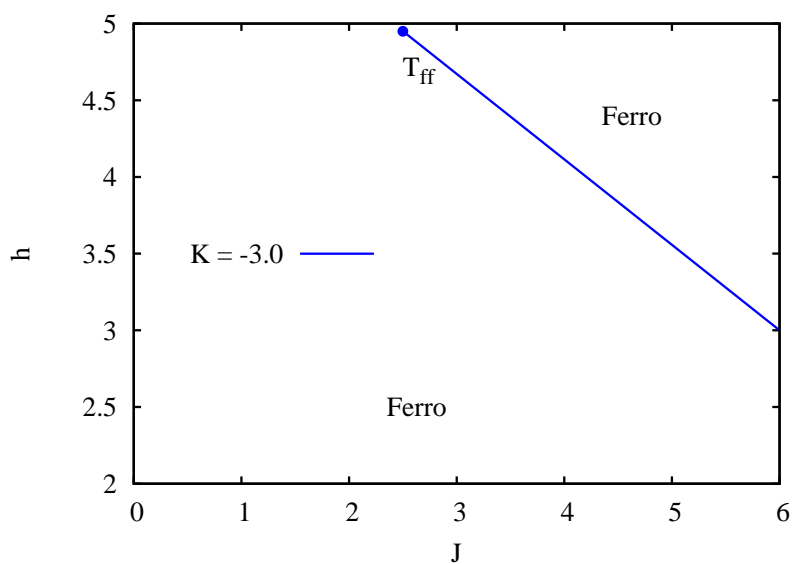


Figura 3.8: Transição de primeira ordem presente no caso competitivo $K = -2.0$. A linha é uma transição do tipo ferro-ferro, que finda no ponto $T_{ff} = (2.5; 2.95)$. Nos lugares onde não há a linha, o comportamento da magnetização é suave.

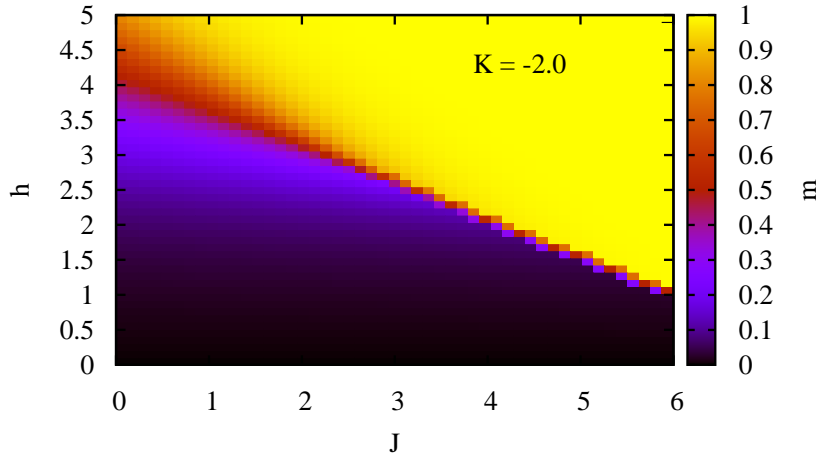


Figura 3.9: Mapa de calor de magnetizações para o caso $K = -2.0$. A cor amarela representa a máxima, e a preta, a mínima. As outras cores são magnetizações intermediárias.

3.2.4 A Região de Transição

A região de transição ocorre justamente quando $|\delta|/\beta + 2J_J = 0$, como calculado pelos limites (2.50)-(2.52). Dessa equação, é possível retirar a equação que rege os platôs de transição de primeira ordem. Em primeiro lugar, note que ela é independente da temperatura, pois o fator de Boltzmann é passível de isolamento:

$$\beta(m + h_J + 2J_J) = 0, \quad (3.22)$$

em que o módulo foi retirado devido a estarmos nos restringindo apenas ao estudo de $(m, h_J) > 0$. Resta saber: qual valor é adequado para a magnetização? A tentação inicial é escolher a nulidade, já que representa o limite físico da equação. Entretanto, sendo independente da temperatura o valor mais adequado a ser posto é o valor médio no salto da transição de primeira ordem, equivalendo a $+0.5$. Então é possível obter o campo em que a transição de primeira ordem deverá ocorrer ($h_J^{(1)}$) em função do parâmetro externo J_J :

$$h_J^{(1)} = -2J_J - 0.5. \quad (3.23)$$

A tabela abaixo encerra os valores retirados de diversos campos dos gráficos (gráficos de transição com campo em função da temperatura 3.4). Compare-os e veja como os valores fitam a equação (3.23).

No capítulo a seguir, serão analisadas as correlações conectadas. Seu comportamento se relaciona, e de muitas formas, endossa a magnetização, e pode dar uma ideia maior da

J_J	$h_J^{(1)}$
-0.5	0.5
-1.0	1.5
-1.5	2.5
-2.0	3.5
-2.5	4.5

Tabela 3.1: Tabela de $h_J^{(1)}$ versus J_J . Os valores fitam equação (3.23).

riqueza dos resultados obtidos no Capítulo 2.

Capítulo 4

Correlações Espaciais Conectadas

As correlações espaciais dão uma ideia da integridade do sistema explicitando a interdependência entre cada componente de spin, pesadas pelas constantes externas, $(K, J, h$ ou $\beta, J_J, h_J)$, também provendo informações sobre a ordem do sistema e transições de fases.

Definem-se as *correlações espaciais conectadas* de dois spins quaisquer de uma rede através de¹:

$$G_c(i, j) := \langle [s_i - \langle s_i \rangle][s_j - \langle s_j \rangle] \rangle, \quad (4.1)$$

a qual expressa a média do desvio da variável de spin em cada sítio com relação ao seu valor médio. Efetuando a multiplicação e tomando as médias, é imediato mostrar que a fórmula se reduz a:

$$G(i, j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle. \quad (4.2)$$

E é com ela que o trabalho se dará, novamente usufruindo da técnica da matriz de transferência, já utilizada para o cálculo da energia livre de Helmholtz.

Para tanto, serão necessárias as médias estatísticas em termos dos produtos matriciais. Um método que facilita muito o processo é utilizar-se da matriz dos estados de variáveis de spin, a saber, a *matriz z de Pauli*:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & +1 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Aqui, serão necessários os resultados apresentados sobre a matriz de transferência \mathbf{T} em (2.18) e das definições oferecidas pelo conjunto de equações (2.35). Multiplicando-a pela

¹As correlações não conectadas seguem pela fórmula $G(i, j) := \langle s_i s_j \rangle$, ao passo que as conectadas apenas retiram a contribuição média sistêmica.

matriz de transferência \mathbf{T} , os componentes da nova matriz resultante se expressam:

$$[\sigma_z \cdot \mathbf{T}]_{ij} = \sum_{k=1}^2 \sigma_{ik} T_{kj}. \quad (4.4)$$

Como, de acordo com as definições respectivas,

$$[\sigma_z]_{ij} = (-1)^i \delta_{ij}, \quad (4.5)$$

$$[T]_{ij} = e^{-\beta H_0(s_i, s_j)}; \text{ tal que } -H_0(s_i, s_j) \equiv J_J s_i s_j + \frac{\delta}{\beta} s_i, \quad (4.6)$$

na qual δ_{ij} é a delta de Kronecker, e da qual claramente deduz-se que

$$[\sigma_z \cdot \mathbf{T}]_{ij} = \sum_k (-1)^i \delta_{ik} e^{-\beta H_0(s_k, s_j)} = s_i e^{-\beta H_0(s_i, s_j)}. \quad (4.7)$$

A expressão acima dita que se a matriz de Pauli for inserida diante da matriz de transferência, o spin será pesado pelo fator de Boltzmann $e^{-\beta H_0}$. Logicamente, a função de correlação conectada (4.2), que tem as suas médias calculadas de acordo com o *ensemble* canônico através da expressão

$$\begin{aligned} G_c(i, j) &= -\frac{1}{\mathcal{Z}^2} \left[\sum_{\{s_i\}} s_i e^{-\beta \mathcal{H}(s_i, s_j)} \right] \left[\sum_{\{s_i\}} s_j e^{-\beta \mathcal{H}(s_i, s_j)} \right] \\ &\quad + \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\{s_i\}} s_i s_j e^{-\beta \mathcal{H}(s_i, s_j)}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

pode ser reexpressa simplesmente como um produto de matrizes de Pauli e de transferência. Observe que:

$$s_i s_j e^{-\beta \mathcal{H}} = s_i s_j e^{-\beta \sum_i H_0(s_i, s_j)}. \quad (4.9)$$

Supondo agora que $i < j$, tem-se a seguinte estrutura geral do produto:

$$\begin{aligned} s_i s_j e^{-\beta \mathcal{H}} &= \underbrace{e^{H_0(s_1, s_2)} e^{H_0(s_2, s_3)} \dots s_i e^{H_0(s_i, s_{i+1})}}_{i \text{ termos}} \times \\ &\quad \times \underbrace{e^{H_0(s_{i+1}, s_{i+2})} \dots s_j e^{H_0(s_j, s_{j+1})}}_{j-i \text{ termos}} \times \\ &\quad \times \underbrace{e^{H_0(s_{j+1}, s_{j+2})} \dots e^{H_0(s_N, s_1)}}_{N-j \text{ termos}}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

ou ainda, ao colocar o primeiro conjunto de i termos junto no final da expressão,

$$s_i s_j e^{-\beta \mathcal{H}} = \underbrace{e^{H_0(s_{i+1}, s_{i+2})} \dots s_j e^{H_0(s_j, s_{j+1})}}_{(j-i) \text{ termos}} \times \underbrace{e^{H_0(s_{j+1}, s_{j+2})} \dots e^{H_0(s_N, s_1)} e^{H_0(s_1, s_2)} e^{H_0(s_2, s_3)} \dots s_i e^{H_0(s_i, s_{i+1})}}_{N-(j-i) \text{ termos}}. \quad (4.11)$$

No caso oposto, em que $i > j$, ter-se-iam $i - j$ termos e $N - (i - j)$. Defina-se a quantidade inteira positiva $n < N$, a qual nada mais é que a distância entre os sítios, tal que

$$n := |i - j|. \quad (4.12)$$

Assim,

$$\sum_{\{s_i\}} s_i s_j e^{-\beta \mathcal{H}} = \text{Tr} (\sigma_z \cdot \mathbf{T}^n \cdot \sigma_z \mathbf{T}^{N-n}). \quad (4.13)$$

Analogamente, e com um raciocínio ainda menos exigente,

$$\sum_{\{s_i\}} s_i e^{-\beta \mathcal{H}} = \text{Tr} (\sigma_z \cdot \mathbf{T}^N) = \sum_{\{s_i\}} s_j e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (4.14)$$

e a função de correlação conectada é finalmente expressa, agora num caráter matricial, no modo a seguir:

$$G_c(n) = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left\{ \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} (\sigma_z \cdot \mathbf{T}^n \cdot \sigma_z \cdot \mathbf{T}^{N-n}) - \left[\frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} (\sigma_z \cdot \mathbf{T}^N) \right]^2 \right\}. \quad (4.15)$$

As technicalidades que envolvem os demais cálculos das correlações encontram-se na seção “Correlações”, do Apêndice D. O resultado a que se chega é:

$$G_c(n) = F_{+-}^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n, \quad (4.16)$$

onde

$$F_{+-}^2 = \text{sen}^2 [\text{acth} (e^{2\beta J_J} \tanh(\delta))], \quad (4.17)$$

e λ_{\pm} são os autovalores da matriz \mathbf{T} como definidos em (2.22), só que agora adaptados ao conjunto de variáveis $\{\beta, J_J, h_J\}$, a saber,

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J_J} \cosh(\beta(m + h_J)) \pm \sqrt{e^{2\beta J_J} \sinh^2(\beta(m + h_J)) + e^{-2\beta J_J}}. \quad (4.18)$$

O conjunto de figuras 4.1 abaixo representa o comportamento típico da função de correlação com relação aos casos competitivos e não competitivos. Do ponto de vista da magnetização, o caso competitivo da figura encontra-se na região de magnetização com comportamento anômalo, exibindo um estado de magnetização parcial. Idem para o outro caso, à exceção de que este exibe o comportamento anômalo.

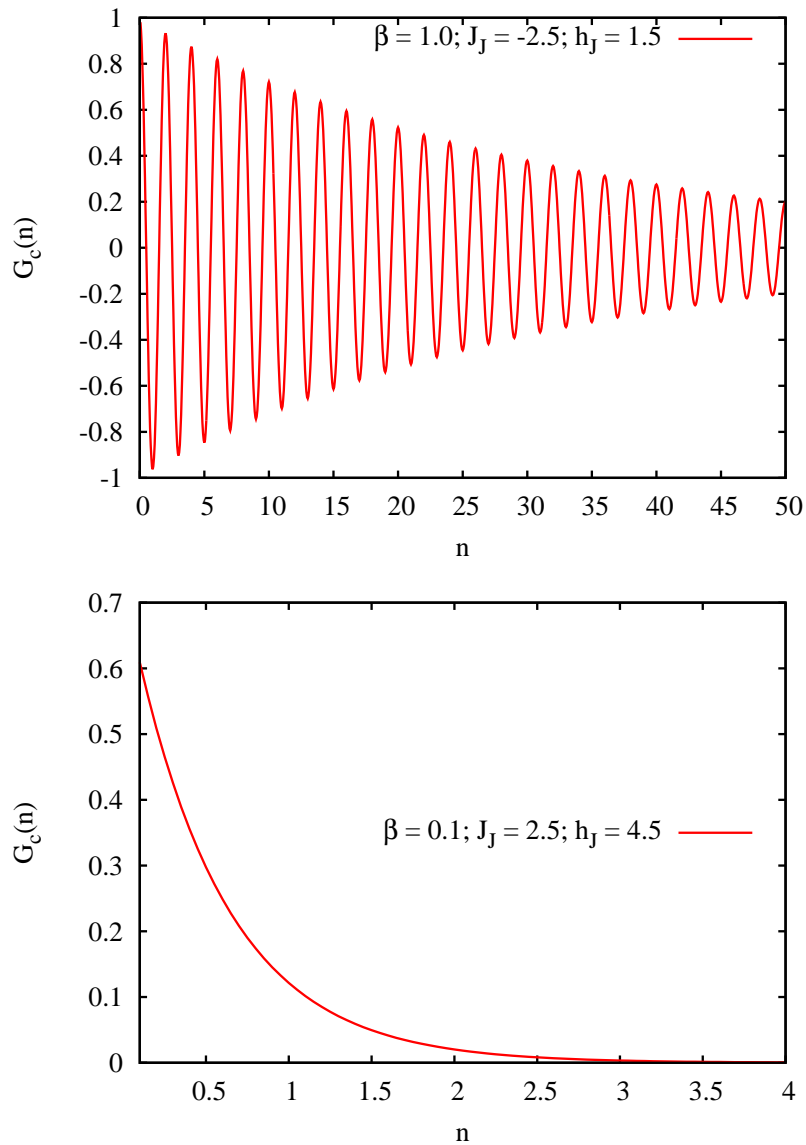


Figura 4.1: Da cima para baixo: o comportamento padrão da função de correlação; um decaimento oscilatório no caso de $J_J < 0$ e um decaimento exponencial para o caso de $J_J > 0$.

Em todos os casos em que $J_J < 0$, é verificada uma oscilação, que pode ou não ser amortecida. No caso oposto sem competitividade, o comportamento observado é simplesmente um decaimento exponencial. Todos os gráficos apresentados nesta seção foram feitos passando-se a variável n para o contínuo.

No caso sem campo, observa-se o mesmo comportamento, conforme evidenciado pela Figura 4.2, em que ambos os casos competitivo e não competitivo, estão presentes e nos quais o sistema é totalmente desmagnetizado.

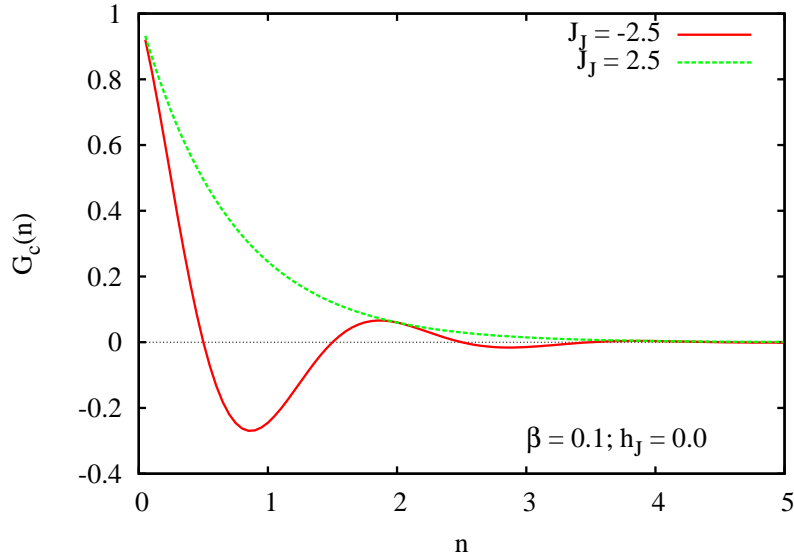


Figura 4.2: Gráfico de correlações à campo nulo para casos simétricos em que $|J_J| = 2.5$ e $\beta = 1.0$, como função da distância entre os sítios.

Ressalta-se que o caso $n = 0$ não tem significado físico, mas fornece o valor de F_{+-}^2 , já que, de acordo com a equação (4.16), $G_c(n = 0) = F_{+-}^2$.

À primeira vista, tendo inspecionado a Figura 4.2 acima, parece que a equação de envelope é a função de correlação no seu oposto, isto é, $G_{env}(J_J < 0, n) = G_c(|J_J|, n)$. Conforme o conjunto de figuras 4.3 abaixo, isso é verdadeiro apenas no caso em que o campo é nulo, contanto que, é claro, não estejam numa região absolutamente magnetizada do espaço de fases, como na figura da esquerda. Na figura de cima, o sistema é parcialmente magnetizado para $J_J = -2.5$ e totalmente magnetizado para o caso de $J_J = 2.5$. Já os casos onde $|J_J| = 4.5$ apresentam ambos um regime de magnetização nula.

O caso em que $J_J = 0$ é observado ter uma função de correlação nula para todas as temperaturas e campos. Isso é facilmente demonstrável, visto que $J_J \rightarrow 0 \implies \lambda_- \rightarrow 0 \therefore G_c(n) \rightarrow 0, \forall \beta > 0$.

O campo não possui um efeito dominante sobre as correlações. Seu principal efeito é o de descorrelacionar o sistema com uma maior eficiência – leia-se, $G_c(n)$ cai mais rápido com n – do que casos sem campo. Os gráficos demonstrados na Figura 4.4 explicitam isso.

A investigação das magnetizações sugere um comportamento bem definido quando o sistema se encontra parcialmente ou totalmente magnetizado, bem como quando encontra-se em magnetização nula. O caso totalmente magnetizado apresenta correlação nula no sistema,

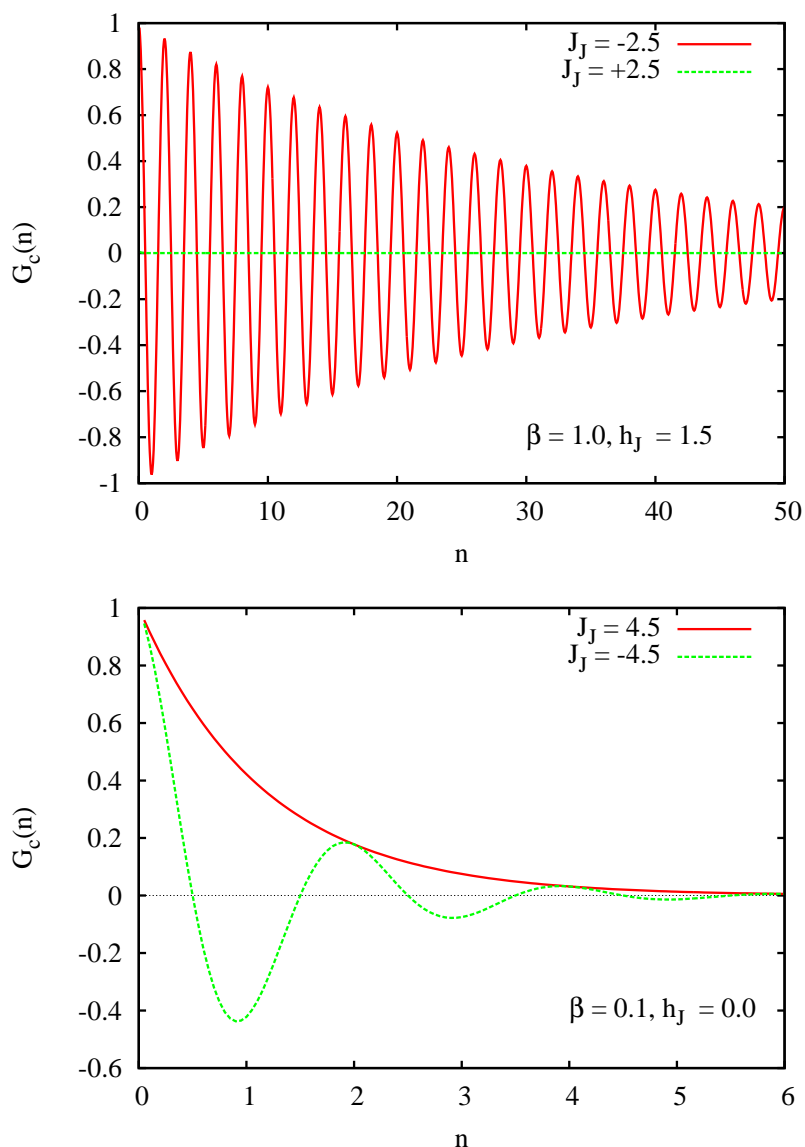


Figura 4.3: No topo: função de correlação para os casos em que $|J_J| = 2.5$, no ponto de temperatura em que $\beta = 1.0$. A função de correlação, no caso positivo, é nula para todas as temperaturas. Embaixo: funções de correlação para os casos $|J_J| = 4.5$ em $\beta = 0.1$, em que o caso positivo envelope o negativo.

enquanto que a atividade correlacional do presente apresenta-se nos outros dois casos. Em particular, a correlação que decai ao modo “oscilador amortecido” parece estar associado ao caso onde há o comportamento particular da magnetização.

4.1 Limites de Temperatura

Antes de analisar os limites para onde a função de correlação se comporta, apenas se reescreve a razão entre os autovalores que aparece na expressão (4.16) sob nova forma,

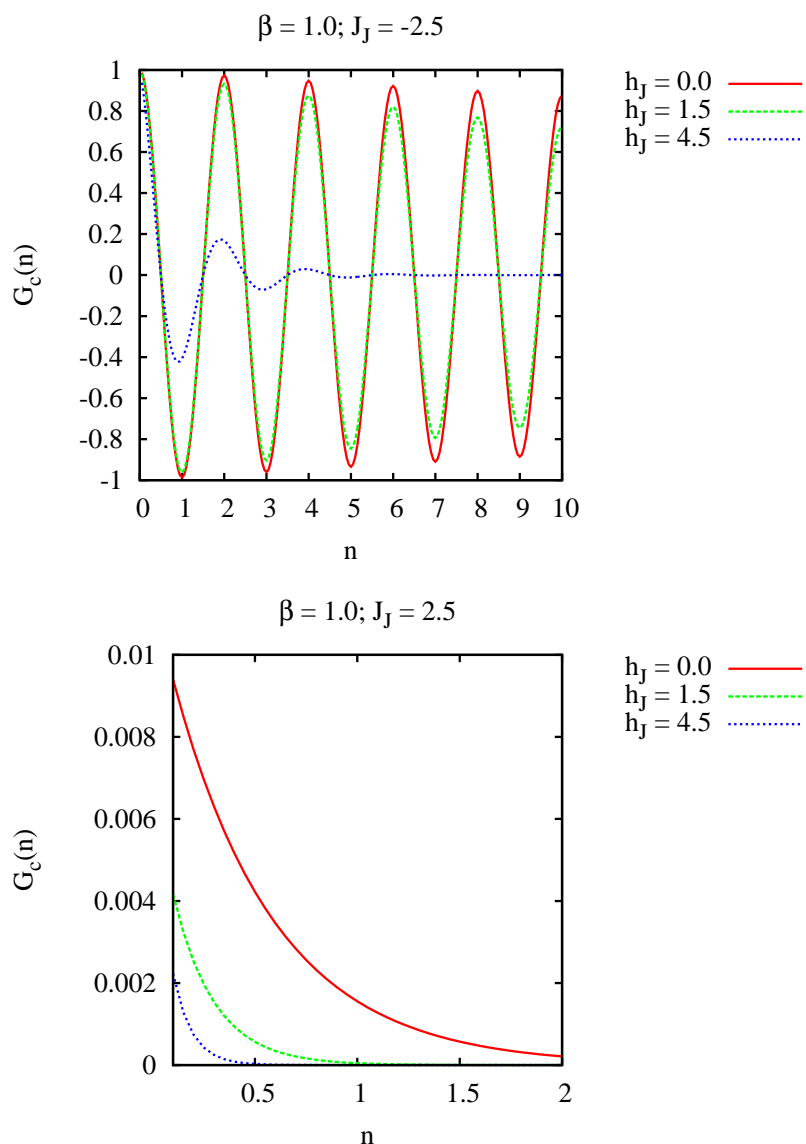


Figura 4.4: Efeitos do campo. Acima, a oscilação amortecida. A presença e o aumento do campo externo têm efeito sobre o envelope da equação, acelerando o seu decaimento. A mesma aceleração acontece no caso de $J_J > 0$ (curvas abaixo).

$$\frac{\lambda_-}{\lambda_+} = \frac{C - D}{C + D} = \frac{1 - D/C}{1 + D/C}. \quad (4.19)$$

Assim, os limites de temperatura dependerão de para onde a razão D/C tenderá. Ainda,

$$\frac{D}{C} = \frac{1}{C} \sqrt{E^2 + 1/a^2} = \sqrt{\tanh^2(\delta) + \frac{1}{a^4 \cosh^2(\delta)}}, \quad (4.20)$$

com $a = e^{\beta J_J}$.

4.1.1 Altas Temperaturas

Nos limites em que $\beta \rightarrow 0^+$, por fácil inspeção da fórmula (4.20),

$$\frac{D}{C} \rightarrow 1. \quad (4.21)$$

Isso implica diretamente que

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^n \rightarrow 0. \quad (4.22)$$

Como $a^2 \tanh(\delta) \rightarrow 0$,

$$F_{+-}^2 \rightarrow 1. \quad (4.23)$$

Portanto,

$$\beta \rightarrow 0^+ \implies G_c(n) \rightarrow 0. \quad (4.24)$$

Isto é esperado, uma vez que o sistema encontra-se, nessa faixa de temperaturas, em grande agitação térmica, de modo que as constantes de interação tenham uma influência menos significativa em seu comportamento.

Os conjuntos de figuras 4.6 e 4.5 apresentam a função de correlação como função da temperatura, em vez de “n”, segurando-se fixos ora o campo externo, ora a constante de interação. Observe-se que o limite de alta temperatura é obedecido independentemente de n , J_J ou h_J : todas as curvas tendem a zero.

4.1.2 Baixas Temperaturas

Nessa faixa de temperaturas, as coisas ficam mais interessantes. Primeiramente, note-se que

$$\beta \rightarrow +\infty \implies \tanh^2(\delta) = \left(\frac{e^\delta - e^{-\delta}}{e^\delta + e^{-\delta}}\right)^2 \rightarrow 1, \quad (4.25)$$

independentemente do sinal de δ . Em segundo, que

$$F_{+-}^2 \rightarrow \begin{cases} 0, & J_J > 0 \\ 1/2, & J_J = 0 \\ 1, & J_J < 0 \end{cases} \quad (4.26)$$

Como $\cosh^2(\delta) \rightarrow e^{2|\delta|}/4$,

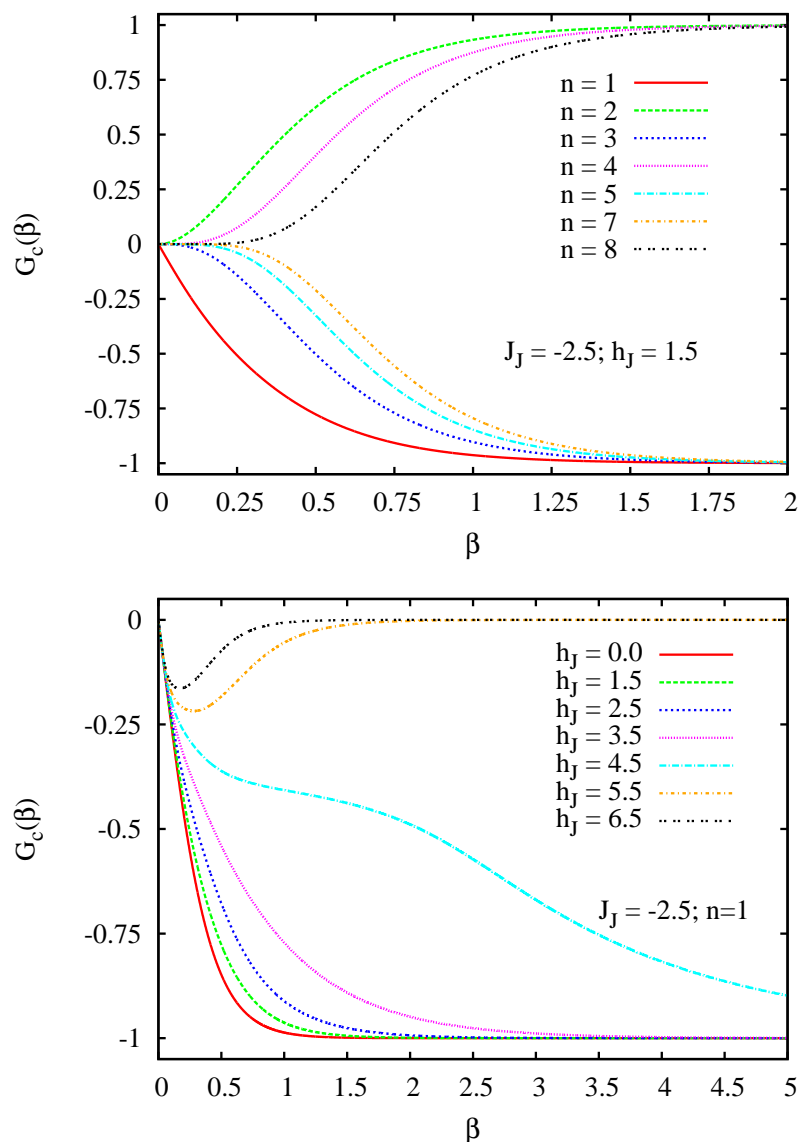


Figura 4.5: Acima: conjunto de curvas de $G_c(n)$ versus β tomando-se fixos $J_J = -2.5$ e $h_J = 1.5$. Abaixo: a mesma constante de interação, $J_J = -2.5$, mas agora variando-se o campo.

$$\frac{D}{C} \rightarrow \sqrt{1 + \frac{4}{e^{2(2\beta J_J + |\delta|)}}}, \quad (4.27)$$

o que implica

$$\frac{D}{C} \rightarrow \begin{cases} 1, & 2J_J + |\delta|/\beta > 0 \\ \sqrt{5}, & 2J_J + |\delta|/\beta = 0, \\ \asymp 2e^{2\beta J_J + |\delta|}, & 2J_J + |\delta|/\beta < 0 \end{cases}, \quad (4.28)$$

acarretando,

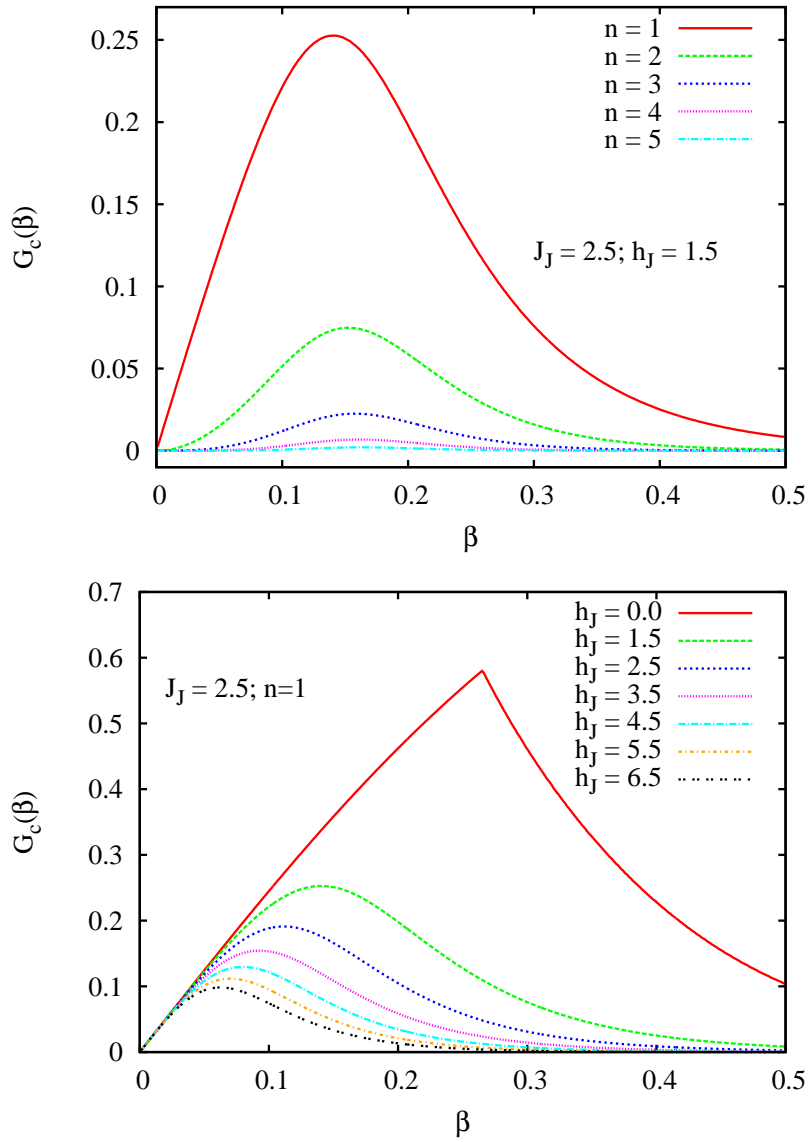


Figura 4.6: Na figura superior: $J_J = 2.5$, positivo com $h_J = 1.5$ e no outro gráfico, variando-se o campo.

$$\beta \rightarrow +\infty \implies G_c(n) \rightarrow \begin{cases} 0, & J_J \geq 0 \\ \alpha \cos(n\pi), & J_J < 0 \end{cases}, \quad (4.29)$$

evidenciando um regime oscilatório no caso competitivo, e

$$\alpha = \begin{cases} 1, & 2J_J + |m + h_J| < 0 \\ (0.382)^n, & 2J_J + |m + h_J| = 0 \\ 0, & 2J_J + |m + h_J| > 0. \end{cases} \quad (4.30)$$

No caso competitivo, os dois limites encontrados são facilmente verificáveis na Figura 4.7 abaixo, que representa o primeiro dos três casos do conjunto de equações (4.30).

Voltando ao conjunto de gráficos da Figura 4.6, mais especificamente o superior, vemos um exemplo do comportamento limítrofe em altas temperaturas da função de correlação. Observar que no caso competitivo, é o aumento do campo que determina a situação limítrofe. Para baixos valores do campo, as correlações flutuarão para um estado de oscilação pura e sem amortecimento. Conforme os campos aumentam, porém, o sistema tende a descorrelacionar-se a baixas temperaturas.

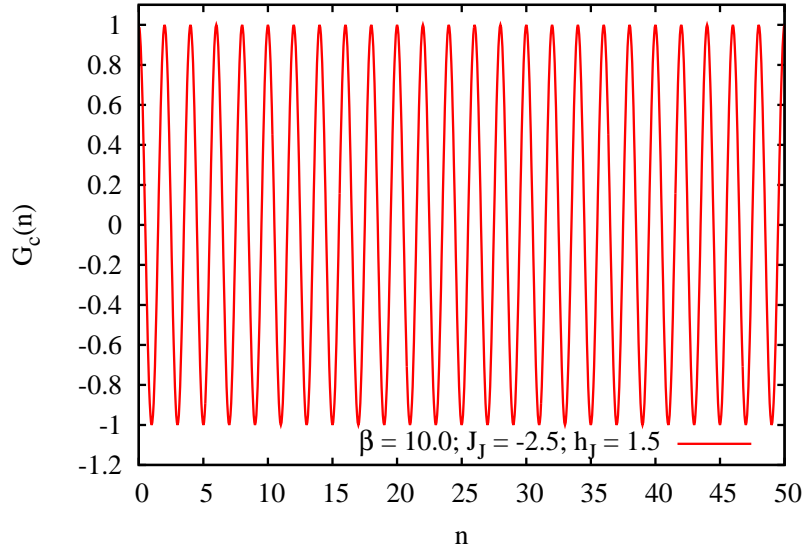


Figura 4.7: Limite em que $2J_J + |m + h_J| < 0$, no ponto $(\beta = 10.0, J_J = -2.5, h_J = 1.5)$.

Repare ainda que, na Figura 4.6, há uma cúspide na curva em que o campo é tomado como ausente. O comportamento é padrão, e revela-se presente também para outras constantes de interação, a campo nulo, conforme Figura 4.8 abaixo.

As cúspides possuem propriedades nas transições de fases, sendo evidências destas. Se tomarmos a expressão (4.8), pode-se facilmente demonstrar que

$$G_c(n) \propto \frac{\partial^2}{\partial h_J^2} f. \quad (4.31)$$

Portanto, uma descontinuidade na função de correlação tem influências diretas sobre a função primitiva, $\partial f / \partial h_J$, a qual, por sua vez, relaciona-se com a magnetização:

$$\frac{\partial f}{\partial h_J} \propto m. \quad (4.32)$$

Assim, a cúspide em campo nulo, que é uma singularidade de primeira ordem, indicará que a função primitiva é contínua e suave, corroborando com a existência de uma transição de fases de segunda ordem.

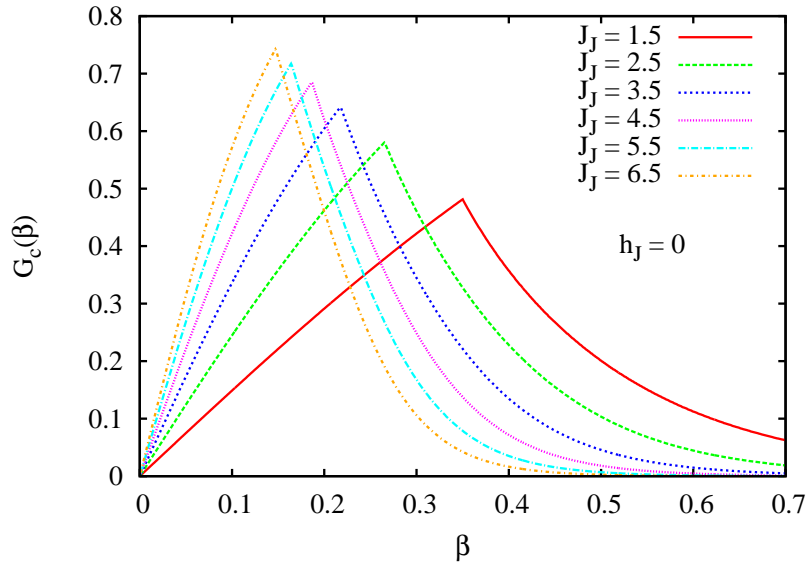


Figura 4.8: Gráfico da função de correlação dependente da temperatura para diversos valores da constante de interação J_J . A cúspide é assinatura de uma transição de fases.

4.2 Estado Ferromagnético Pleno

No estado ferromagnético totalmente ordenado, tem-se que $m = \pm 1$. Isso naturalmente implicará que todos os spins tenham o mesmo valor, $s_i = \pm 1$, $\forall i \in 1, \dots, N$, respectivamente.²

Ao partir da definição da função de correlação conectada, (4.2),

$$G_c^F(n) = \langle (\pm 1)(\pm 1) \rangle - \langle \pm 1 \rangle \langle \pm 1 \rangle = 1 - 1 = 0. \quad (4.33)$$

Em suma,

$$m = \pm 1 \implies G_c^F(n) = 0, \quad \forall n \in \mathbf{N}, \quad (4.34)$$

em que o superescrito F atenta para o caso ferromagnético. Quando a ordem é máxima, o sistema estará totalmente descorrelacionado, implicando que as interações não são efetivas se comparadas ao campo externo (no caso de estar presente), ou ainda sendo possível que a agitação térmica do sistema ainda não é tão grande a ponto de desequilibrar o sistema.

O contrário não é necessariamente verdade, isto é, nem sempre é verdade que $G_c(n) = 0 \implies m = \pm 1$.

² $m = \pm 1 \implies \sum_i^N s_i = \pm N \implies \sum_i s_i = \pm N \implies s_i = \pm 1, \quad \forall i.$

4.3 O Regime Oscilatório

Preliminarmente, haverá a demonstração de que $J_J < 0 \Leftrightarrow \lambda_- < 0$. Exigindo que o autovalor seja negativo,

$$\lambda_- < 0 \Leftrightarrow C - D < 0 \Leftrightarrow C < D \Leftrightarrow C^2 < D^2. \quad (4.35)$$

Lembrando que $D^2 = E^2 + 1/a^2$, e que $C^2 - E^2 = a^2$,

$$\lambda_- < 0 \Leftrightarrow 2 \sinh(2\beta J_J) < 0. \quad (4.36)$$

Portanto, $\lambda_- < 0 \Leftrightarrow J_J < 0$, contanto que não haja o estado ordenado (em que a função de correlação é nula, tal acima provado).

Por outro lado, ao exigir-se que $\lambda_- < 0$,

$$0 > \lambda_- = -|\lambda_-| \implies G_c(n) = F_{+-}^2 \left(\frac{|\lambda_-|}{\lambda_+} \right)^n = F_{+-}^2 \left| \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right|^n (-1)^n. \quad (4.37)$$

Se $|\lambda_-/\lambda_+| \equiv e^{-\alpha}$, sendo $\alpha > 0$, a função de correlação conectada adquire a forma³:

$$G_c(n, \lambda_- < 0) = F_{+-}^2 e^{-\alpha n} \cos(n\pi), \quad (4.38)$$

evidentemente um regime oscilatório amortecido.

É fácil ver que $G_c(n) \propto \cos(n\pi) \implies \lambda_- < 0$:

$$G_c(n) \propto \cos(n\pi) \Leftrightarrow F_{+-}^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n \propto \cos(n\pi) \quad (4.39)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n \propto \cos(n\pi) = (-1)^n \Leftrightarrow \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \propto -1 \implies \lambda_- < 0. \quad (4.40)$$

Assim,

$$\therefore J_J < 0 \Leftrightarrow G_c(n) \propto \cos(n\pi), \quad (4.41)$$

ficando provado que o regime oscilatório está intrinsecamente relacionado ao caráter competitivo.

Toda a demonstração independe do campo: as correlações oscilarão independentemente da presença de um campo externo.

Na maior parte dos sistemas, existe uma curva muito bem definida separando os regimes oscilatórios da função de correlação dos regimes não oscilatórios [27, 28], mas no

³Sendo a razão entre os autovalores uma soma com produtos de exponenciais, é razoável assumir que o resultado seja, também, uma exponencial.

presente caso, é o eixo $J_J = 0$, como confirmado computacionalmente, desde que o caso seja competitivo, haverá um decaimento oscilatório na função de correlação. Sempre será um decaimento, uma vez que a razão $|\lambda_-/\lambda_+|^n$ tenderá a cair com n (exponencialmente, pois é uma soma de exponenciais), já que $|\lambda_-/\lambda_+| < 1$ (no caso em que $2J_J + |m + h_J| < 0$ haverá uma oscilação constante).

Capítulo 5

Conclusões

Como demonstrado neste trabalho, o modelo de Ising unidimensional estendido com interações competitivas e campo externo demonstra comportamentos particulares no parâmetro de ordem, a magnetização, muito embora não se possa caracterizar como reentrância, já que não há a repetição de fases no diagrama de fases. Porém, o comportamento singular estende-se a outras quantidades associadas ao modelo. Um estudo fora conduzido em variáveis reduzidas a fim de salientar-se a dependência explícita na temperatura. O modelo apresenta um rico comportamento de fases, com transições de primeira e segunda ordem, separadas por um ponto tricrítico no caso de campo externo nulo. A solução exata do modelo permite determinar as linhas de transição e pontos críticos sem aproximações analíticas. No campo das correlações, verificou-se que estas apresentam fases moduladas para o caso das interações competindo, e meros decaimentos exponenciais para o caso contrário.

Ainda precisam salientar-se, por exemplo, os resultados da entropia termodinâmica e como afeta o comportamento do parâmetro de ordem, e também como se relaciona com as outras grandezas estudadas nesse trabalho. Outro fator intrigante é o significado físico das funções de correlação quando em comportamento oscilatório. O fato de a magnetização nulificar-se na presença de campo e em baixas temperaturas é uma provável presença de um estado antiferromagnético, tornando vital o estudo do *ground state* do hamiltoniano. A oscilação das correlações parece ser assinatura da presença dessa fase.

Apêndice A

A Derivada da Equação de Magnetização

Para derivar implicitamente $mD = E$, primeiramente serão provadas uma série de derivadas parciais.

A derivada de δ é a de mais simples demonstração:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \delta}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta m + \beta h_J); \\ &= m + \beta \frac{\partial m}{\partial \beta} + h_J; \\ &= \frac{\delta}{\beta} + \beta \frac{\partial m}{\partial \beta},\end{aligned}\tag{A.1}$$

e h_J é considerado como fixo. Imediatamente, deduz-se a derivada de $F(\beta) := \exp(-\beta J_J)$:

$$\frac{\partial F}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta J_J} = -J_J F.\tag{A.2}$$

A derivada de $E(\beta)$ calcula-se a seguir:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta} e^{\beta J_J} \sinh(\delta), \\ &= \sinh(\delta) \frac{\partial}{\partial \beta} e^{\beta J_J} + e^{\beta J_J} \frac{\partial}{\partial \beta} \sinh(\delta), \\ &= J_J e^{\beta J_J} \sinh(\delta) + \left(\frac{\partial \delta}{\partial \beta} \right) e^{\beta J_J} \cosh(\delta).\end{aligned}\tag{A.3}$$

Utilizando a igualdade (A.1), e lembrando-se da definição de $C(\beta)$, obtém-se que

$$\frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} = J_J E(\beta) + \frac{\delta}{\beta} C(\beta) + \beta C(\beta) \left(\frac{\partial m}{\partial \beta} \right).\tag{A.4}$$

Por último, será necessário derivar $D(\beta)$. Executando-a,

$$\begin{aligned}\frac{\partial D(\beta)}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta} \sqrt{E^2 + F^2}, \\ &= \frac{1}{2D} \left(2E \frac{\partial E}{\partial \beta} + 2F \frac{\partial F}{\partial \beta} \right), \\ &= \frac{E}{D} \frac{\partial E}{\partial \beta} + \frac{F}{D} \frac{\partial F}{\partial \beta}.\end{aligned}\tag{A.5}$$

Lembrando das equações (A.2) e (A.3),

$$\frac{\partial D(\beta)}{\partial \beta} = J_J \frac{E^2}{D} + \frac{\delta}{\beta} \frac{EC}{D} + \beta \frac{CE}{D} \left(\frac{\partial m}{\partial \beta} \right) - J_J \frac{F^2}{D},\tag{A.6}$$

a qual pode ser facilmente reescrita como

$$\frac{1}{D} \frac{\partial D}{\partial \beta} = J_J E'^2 + \frac{\delta}{\beta} E' C' + \beta C' E' \left(\frac{\partial m}{\partial \beta} \right) - J_J F'^2,\tag{A.7}$$

onde o sinal apóstrofo remete a uma divisão por D .

Com todas as derivadas em mãos, finalmente a equação de magnetização, $mD = E$ (que também pode ser reescrita como $m = E'$, notar), implicitamente deriva-se, escrevendo-se,

$$\frac{m}{D} \frac{\partial D}{\partial \beta} + 1 = \frac{1}{D} \frac{\partial E}{\partial \beta}.\tag{A.8}$$

Substituindo equações (A.7) e (A.4) em (A.8), e performando alguma álgebra, chega-se à forma final da derivada da magnetização:

$$\frac{\partial m}{\partial \beta} = \frac{(E'^2 - 1)(\delta C' / \beta + 2J_J E')}{(E'^2 - 1)\beta C' - E'}.\tag{A.9}$$

Apêndice B

Não Divergência de $(E'^2 - 1)\beta C' - E'$

Na análise da derivada, foi assumido um pressuposto de que divergência alguma acontecia quando assumíamos o numerador nulo.

Chamando o denominador de $Y(m) := (E'^2 - 1)\beta C' - E'$, vê-se que

$$Y(m = \pm 1) = -E' = \mp 1, \quad (\text{B.1})$$

não divergindo. Para início de conversa, das definições de E e C , temos que

$$\frac{C}{\cosh(\delta)} = e^{\beta J_J}, \text{ e } \frac{E}{\sinh(\delta)} = e^{\beta J_J}. \quad (\text{B.2})$$

Logo,

$$\frac{C}{\cosh(\delta)} = \frac{E}{\sinh(\delta)} \Leftrightarrow \frac{C'}{\cosh(\delta)} = \frac{E'}{\sinh(\delta)}. \quad (\text{B.3})$$

Sendo $E' = m$ (equação de magnetização),

$$C' = m \coth(\delta). \quad (\text{B.4})$$

Substituindo na expressão para a derivada,

$$\frac{\partial m}{\partial \beta} = \frac{(m^2 - 1) \left(\frac{\delta}{\beta} \coth(\delta) + 2J_J \right)}{\beta (m^2 - 1) \coth(\delta) - 1}. \quad (\text{B.5})$$

Agora, no caso da transição de primeira ordem, $E'^2 - 1 \rightarrow 0$ implica diretamente que $m \rightarrow \pm 1$. Logo, é imediato que $\delta \rightarrow h_J \pm 1$. A função cotangente hiperbólica apresenta uma divergência apenas quando seu argumento se anula. No caso, quando $h_J \rightarrow \pm 1$. Se esse não for o caso, possuirá um argumento finito e

$$\frac{\partial m}{\partial \beta} \approx \frac{0}{-1} = 0. \quad (\text{B.6})$$

Quando, porém, o campo adquire os valores da magnetização, vamos analisar a seguinte equação alternativa, obtida a partir da divisão, de ambos numerador e denominador, por $(m^2 - 1) \coth(\delta)$:

$$\frac{\partial m}{\partial \beta} = \frac{(m + h_J) + \frac{2J_J}{(m^2 - 1) \coth(\delta)}}{\beta - \frac{1}{(m^2 - 1) \coth(\delta)}}. \quad (\text{B.7})$$

Definindo $q(m) := \frac{m^2 - 1}{\tanh(\delta)}$, temos de calcular o limite:

$$\lim_{m \rightarrow \pm 1} \lim_{h_J \rightarrow \pm 1} q(m) = \lim_{m \rightarrow \pm 1} \frac{m^2 - 1}{\tanh \beta (m \pm 1)}. \quad (\text{B.8})$$

Como ambos, numerador e denominador tendem a zero, temos uma situação em que a regra de L'Hôpital é aplicável:

$$\lim_{m \rightarrow \pm 1} q(m) = \lim_{m \rightarrow \pm 1} \frac{2m}{\beta \operatorname{sech}^2(\delta)} = \pm \frac{2}{\beta} \implies \lim_{m, h_J \rightarrow \pm 1} \frac{1}{q(m)} = \pm \frac{\beta}{2}. \quad (\text{B.9})$$

Com isso,

$$\lim_{m, h_J \rightarrow \pm 1} \frac{\partial m}{\partial \beta} = \frac{\pm J_J}{1 \pm \frac{1}{2}}, \quad (\text{B.10})$$

sendo, assim, não divergente.

Já quando a outra parte do numerador, correspondente à transição de segunda ordem, anula-se, tem-se:

$$\frac{\delta}{\beta} C' + 2J_J E' = 0 \implies \frac{E'}{C'} = -\frac{\delta}{2\beta J_J}, \quad (\text{B.11})$$

de modo que

$$Y(m \neq \pm 1) = C' \left[(E'^2 - 1) \beta - \frac{E'}{C'} \right]. \quad (\text{B.12})$$

Manipulando-se a equação última, e lembrando (como sempre), que $m = E'$,

$$Y(m \neq \pm 1) = C' \left[\left(m + \frac{1}{4h_J} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{8h_J^2} \right) \right]. \quad (\text{B.13})$$

Observe que, sendo fixos a temperatura, o campo e a razão das interações, $Y(m \neq \pm 1) \not\rightarrow \pm \infty$. Assim sendo, a única forma de divergência é a ocorrência de um zero no denominador. Observe ainda que, da equação (54), temos que C' anular-se-ia apenas se $m \rightarrow 0$, uma vez que a função cotangente hiperbólico nunca se anula, nem tende a, zero. Se isso ocorre, é necessário tomar o limite da expressão inteira da derivada, o que será feito por último. Supondo, então, que C' seja bem comportada, supomos que exista alguma situação onde

$$\left[\left(m + \frac{1}{4h_J} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{8h_J^2} \right) \right] \rightarrow 0. \quad (\text{B.14})$$

Dessa forma, é necessário que

$$m^2 + \frac{1}{2h_J} - \frac{1}{2} = 0, \quad (\text{B.15})$$

o que leva a:

$$m = \frac{1}{4h_J} \left[-1 \pm \text{sign}(h_J) \sqrt{1 - 8h_J^2} \right]. \quad (\text{B.16})$$

Como uma primeira condição de existência, temos que:

$$|h_J| \leq \frac{1}{2\sqrt{2}} = 0.3535. \quad (\text{B.17})$$

Por outro lado, aplicando a condição de existência física de que $|m| \leq 1$,

$$|m| \leq 1 \implies \frac{1}{|4h_J|} \left| -1 \pm \sqrt{1 - 8h_J^2} \right| \leq 1, \quad (\text{B.18})$$

a qual, após alguma manipulação algébrica, converte-se facilmente em

$$(h_J^2)^2 + \frac{1}{16}(h_J^2) - 1 \geq 0. \quad (\text{B.19})$$

Essa equação biquadrada satisfaz a desigualdade no intervalo $(-\infty, h_{J,1}^2 = -0.5322] \cup [h_{J,2}^2 = 0.4697, +\infty)$. Como $h_J^2 \geq 0$, o primeiro intervalo é descartado. Assim, sobra a condição de que

$$|h_J| \geq 0.6853. \quad (\text{B.20})$$

Observe que as duas condições de existência são mutuamente excludentes. Assim, na situação em que $m \rightarrow 0$, $Y(m) \rightarrow 0$.

Efetuando o limite de toda a equação da derivada quando $m \rightarrow 0$,

$$\lim_{m \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial \beta} = \lim_{m \rightarrow 0} \frac{(m^2 - 1) [(m + h_J) \coth[\beta(m + h_J)] + 2\beta J_J]}{(m^2 - 1)\beta(m + h_J) \coth[\beta(m + h_J)] - m}, \quad (\text{B.21})$$

levando facilmente a

$$\lim_{m \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial \beta} = 1 - \frac{2J_J}{h_J \coth(\beta h_J)}. \quad (\text{B.22})$$

Uma possibilidade de divergência ainda surgiria quando $h_J \rightarrow 0$, mas nessa situação

$$\lim_{m, h_J \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial \beta} = 1 - 2\beta J_J. \quad (\text{B.23})$$

E, além disso, como já demonstrado antes, não há a nulidade do numerador nessa situação.

Assim, não há divergência quando as transições ocorrem.

Apêndice C

Expansão da Energia Livre

Primeiramente, cunhe-se que

$$B(m) = -\log \left[e^{\beta J_J} \cosh(\beta m + \beta h) + \sqrt{e^{2\beta J_J} \sinh(\beta m + \beta h) + e^{-2\beta J_J}} \right], \quad (\text{C.1})$$

de modo que

$$f(m) = \frac{1}{2} \beta m^2 + B(m). \quad (\text{C.2})$$

Quando a magnetização é muito próxima do zero, a função $B(m)$ pode ser expandida numa série de potências de Taylor ao redor da origem,

$$B(m) = \sum_k g^{(k)}(0) m^k, \quad (\text{C.3})$$

onde

$$g^{(k)}(m) = \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial m^k} B(m). \quad (\text{C.4})$$

Para facilitar o cálculo da expansão, utilizaremos a notação estabelecida pelo conjunto de equações (2.35),

$$\begin{aligned}
a &:= e^{\beta J_J}; \\
A(m) &= \frac{1}{2}\beta m^2 \\
C(m) &= b \cosh(\beta m); \\
E(m) &= b \sinh(\beta m);
\end{aligned} \tag{C.5}$$

$$\begin{aligned}
D(m) &= \sqrt{E^2(m) + \frac{1}{b^2}}; \\
B(m) &= -\log [C(m) + D(m)].
\end{aligned} \tag{C.6}$$

A energia livre é reexpressa como

$$f(m) = A(m) + B(m) = A(m) + \sum_k g^k(0)m^k, \tag{C.7}$$

e pode ser truncada em qualquer ordem. Observe ainda que,

$$\begin{aligned}
C(0) &= a; \\
E(0) &= 0;
\end{aligned} \tag{C.8}$$

$$D(0) = \frac{1}{a}. \tag{C.9}$$

Também necessitaremos das seguintes derivadas:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial C(m)}{\partial m} &= \beta E(m); \\
\frac{\partial E(m)}{\partial m} &= \beta C(m); \\
\frac{\partial D(m)}{\partial m} &= \beta \frac{C(m)E(m)}{D(m)},
\end{aligned} \tag{C.10}$$

facilmente verificadas das relações (C.5) acima.

Expansão de $f(\mathbf{m})$. Devido à simetria do sistema à ausência de campo, que é a simetria frente à inversão do spin, espera-se que os termos ímpares da série de $B(m)$ sejam nulos.

Também é imprescindível manter em mente que

$$B(0) = -\log [2 \cosh(\beta J_J)]. \tag{C.11}$$

Derivando $B(m)$ uma vez (das relações (C.5)),

$$\frac{\partial B(m)}{\partial m} = -\frac{\partial}{\partial m} \log [C(m) + D(m)], \quad (\text{C.12})$$

$$= -\frac{1}{C(m) + D(m)} \left[\frac{\partial C(m)}{\partial m} + \frac{\partial D(m)}{\partial m} \right], \quad (\text{C.13})$$

$$= -\frac{aE(m)}{C(m) + D(m)} \left[1 + \frac{C(m)}{D(m)} \right], \quad (\text{C.14})$$

$$= -\beta \frac{E(m)}{D(m)}. \quad (\text{C.15})$$

Assim,

$$\left. \frac{\partial B(m)}{\partial m} \right]_{m=0} = 0, \quad \therefore g^{(1)}(0) = 0. \quad (\text{C.16})$$

Tomando a equação (C.15),

$$\frac{\partial^2 B(m)}{\partial m^2} = \frac{\partial}{\partial m} \left[-\beta \frac{E(m)}{D(m)} \right]. \quad (\text{C.17})$$

$$= -\beta^2 \frac{C(m)}{D(m)} \left[1 - \left(\frac{E(m)}{D(m)} \right)^2 \right], \quad (\text{C.18})$$

Ou ainda, como $D^2(m) - E^2(m) = 1/a^2$ (verifique nas relações (C.5)),

$$\frac{\partial^2 B(m)}{\partial m^2} = -\left(\frac{\beta}{a} \right)^2 \frac{C(m)}{D^3(m)}. \quad (\text{C.19})$$

Portanto,

$$B^{(2)}(0) = -\frac{\beta^2}{a^2} a1/a^3 = -(\beta a)^2, \quad (\text{C.20})$$

e,

$$\therefore g^{(2)}(0) = -\frac{1}{2} \beta^2 e^{2\beta J}. \quad (\text{C.21})$$

Derivando novamente a equação (C.18),

$$\frac{\partial^3 B(m)}{\partial m^3} = -\frac{\beta^2}{b^2} \{C(m) [D(m)]^{-3}\}, \quad (\text{C.22})$$

$$= -\frac{\beta^3}{b^2} \frac{E(m)}{D^3(m)} \left[1 - 3 \left(\frac{C(m)}{D(m)} \right)^2 \right]. \quad (\text{C.23})$$

Como esperado,

$$\left. \frac{\partial^3 B(m)}{\partial m^3} \right]_{m=0} = 0, \quad \therefore g^{(3)}(0) = 0. \quad (\text{C.24})$$

Da equação (C.23),

$$\frac{\partial^4 B(m)}{\partial m^4} = -\frac{\beta^3}{b^2} \left[\frac{\partial}{\partial m} \frac{E(m)}{D^3(m)} - 3 \frac{C^2(m)E(m)}{D^5(m)} \right], \quad (\text{C.25})$$

$$= -\frac{\beta^4}{b^2} \left[\frac{C(m)}{D^3(m)} - 3 \frac{C(m)E^2(m)}{D^5(m)} - 6 \frac{C(m)E^2(m)}{D^5(m)} + \right. \\ \left. - 3 \frac{C^3(m)}{D^5(m)} + 15 \frac{C^3(m)E^2(m)}{D^7(m)} \right]. \quad (\text{C.26})$$

Rearranjando os termos,

$$\frac{\partial^4 B(m)}{\partial m^4} = -\frac{\beta^4}{a^2} \frac{C(m)}{D^3(m)} \left\{ 1 - 9 \frac{E^2(m)}{D^2(m)} - 3 \frac{C^2(m)}{D^2(m)} \left[1 - 5 \frac{E^2(m)}{D^2(m)} \right] \right\}, \quad (\text{C.27})$$

ou,

$$B^{(4)}(0) = -\beta^4 a^2 (1 - 3b^4), \quad \therefore g^{(4)}(0) = -\frac{1}{24} \beta^4 e^{2\beta J_J} (1 - 3e^{4\beta J_J}). \quad (\text{C.28})$$

A fim de poupar o leitor de longo cálculo, apenas apresentamos os resultados para as derivadas quinta e sexta, a saber,

$$B^{(5)}(0) = 0, \quad \therefore g^{(5)}(0) = 0, \quad (\text{C.29})$$

$$B^{(6)}(0) = -\beta^6 a^2 (45a^8 - 30a^4 + 1), \\ \therefore g^{(6)}(0) = -\frac{1}{720} \beta^6 e^{2\beta J_J} (45e^{8\beta J_J} - 30e^{4\beta J_J} + 1). \quad (\text{C.30})$$

Assim, a expressão que governa a energia livre em sua forma expandida, vale, ao juntarmos as equações (C.5),(C.7),(C.11),(C.16), (C.21), (C.24), (C.28), (C.29) e (C.30),

$$f(m) = -\log [2 \cosh(\beta J_J)] + \frac{1}{2} \beta (1 - \beta e^{2\beta J_J}) m^2 + \\ + \frac{1}{24} \beta^4 e^{2\beta J_J} (3e^{4\beta J_J} - 1) m^4 + \\ - \frac{1}{720} \beta^6 e^{2\beta J_J} (45e^{8\beta J_J} - 30e^{4\beta J_J} + 1) m^6 + O(m^8). \quad (\text{C.31})$$

Apêndice D

Correlações

Partindo da equação (4.15), sabe-se que no infinito, convém trabalhar na base em que a matriz de transferência é diagonal, diga-se, a base dos autovetores $\{|-\rangle, |+\rangle\}$, que expandem o espaço de fases do Hamiltoniano \mathcal{H} . Ter-se-á:

$$\langle \pm | \pm \rangle = 1, \langle \pm | \mp \rangle = 0, \quad (\text{D.1})$$

isto é, é um conjunto ortonormal, o qual, por varrer todo o espaço de configurações acessíveis ao sistema, também obedece ao teorema algébrico da completude,

$$\sum_{i=-}^{+} |i\rangle \langle i| = \mathbf{I}, \quad (\text{D.2})$$

\mathbf{I} sendo a matriz identidade. Cabe lembrar que no limite termodinâmico são válidas as igualdades seguintes:

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} T_{ij} = \lambda_i \delta_{ij} \quad (\text{D.3})$$

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \mathcal{Z} = \lambda_+^N. \quad (\text{D.4})$$

Agora, a operação de traço, que é invariante frente a mudanças de base, é simplesmente a soma dos elementos diagonais da matriz resultante dos produtos dessas equações, levando a função de correlação $G_c(n)$, a:

$$\begin{aligned} G_c(n) &= \frac{1}{\lambda_+^N} \sum_{k=-}^{+} \langle k | \sigma_z \cdot \mathbf{T}^n \cdot \sigma_z \cdot \mathbf{T}^{N-n} | k \rangle + \\ &\quad - \frac{1}{\lambda_+^{2N}} \sum_{k=-}^{+} \langle k | \sigma_z \cdot \mathbf{T}^N | k \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Tendo em vista que $\{|-\rangle, |+\rangle\}$ é o conjunto dos autovetores de \mathbf{T} ,

$$\mathbf{T}|\pm\rangle = \lambda_{\pm}|\pm\rangle, \quad (\text{D.6})$$

$G_c(n)$ se reescreve como

$$\begin{aligned} G_c(n) &= \frac{1}{\lambda_+^N} \sum_{k=-}^+ \lambda_k^{N-n} \langle k|\sigma_z \cdot \mathbf{T}^n \cdot \sigma_z|k\rangle + \\ &\quad - \frac{1}{\lambda_+^{2N}} \left[\sum_{k=-}^+ \lambda_k^N \langle k|\sigma_z|k\rangle \right]^2. \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Inserindo o teorema da completude no produto matricial entre \mathbf{T}^n e a matriz de Pauli,

$$\begin{aligned} G_c(n) &= \frac{1}{\lambda_+^N} \sum_{k,r} \lambda_k^{N-n} \langle k|\sigma_z \cdot \mathbf{T}^n|r\rangle \langle r|\sigma_z|k\rangle + \\ &\quad - \frac{1}{\lambda_+^{2N}} \left[\sum_{k=-}^+ \lambda_k^N \langle k|\sigma_z|k\rangle \right]^2. \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Por definir-se

$$F_{kr} := \langle k|\sigma_z|r\rangle, \quad (\text{D.9})$$

tem-se:

$$G_c(n) = \frac{1}{\lambda_+^N} \sum_{k,r} F_{rk} F_{kr} \lambda_k^{N-n} \lambda_r^n - \frac{1}{\lambda_+^{2N}} \left[\sum_k F_{kk} \lambda_k^N \right]^2, \quad (\text{D.10})$$

ou ainda

$$G_c(n) = \sum_{k,r} (F_{rk} F_{kr}) \left(\frac{\lambda_r}{\lambda_k} \right)^n \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_+} \right)^N - \left[\sum_k F_{kk} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_+} \right)^N \right]^2. \quad (\text{D.11})$$

Tendo ainda em vista que, em $N \rightarrow +\infty$,

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \rightarrow 0, \quad \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_-} \right)^N \rightarrow 1; \quad (\text{D.12})$$

é evidente que

$$G_c(n) = F_{++}^2 + F_{-+} F_{+-} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n - F_{++}^2, \quad (\text{D.13})$$

para obter-se, finalmente:

$$G_c(n) = F_{-+}F_{+-} \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n, 1 \leq \forall n \leq (N \in \mathbf{N}). \quad (\text{D.14})$$

Para o cálculo de F_{+-}^2 , consideremos a seguinte prova de que $\mathbf{F} = \mathbf{F}^T$.

Dado que

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & +1 \end{pmatrix}, \quad (\text{D.15})$$

e

$$|\pm\rangle = \begin{pmatrix} u_{\pm} \\ v_{\pm} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.16})$$

é óbvio que:

$$\sigma_z |+\rangle = \begin{pmatrix} -u_+ \\ v_+ \end{pmatrix}, \quad (\text{D.17})$$

de modo que

$$\langle -|\sigma_z|+\rangle = \begin{pmatrix} u_- & v_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -u_+ \\ v_+ \end{pmatrix} = -u_-u_+ + v_-v_+. \quad (\text{D.18})$$

Por outro lado,

$$\langle +|\sigma_z|-\rangle = \begin{pmatrix} u_+ & v_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -u_- \\ v_- \end{pmatrix} = -u_-u_+ + v_-v_+. \quad (\text{D.19})$$

Portanto,

$$F_{-+} = F_{+-} \implies \mathbf{F} = \mathbf{F}^T. \quad (\text{D.20})$$

Com isso,

$$G_c(n) = F_{-+}^2 \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n, 1 \leq \forall (n \in \mathbf{N}) \leq N. \quad (\text{D.21})$$

Ainda para obter a expressão final de F_{+-}^2 , serão necessários os autovetores da matriz de transferência \mathbf{T} . Para tanto, saluta transportar a matriz (2.18) à seguinte notação:

$$a = e^{\beta J}, b := e^{-\delta} \implies \mathbf{T} = \begin{pmatrix} ab & \frac{b}{a} \\ \frac{1}{ab} & \frac{a}{b} \end{pmatrix}. \quad (\text{D.22})$$

Os autovetores obedecem à equação (D.6), $\mathbf{T}|\pm\rangle = \lambda_{\pm}|\pm\rangle$, a qual, vertida em notação matricial,

$$\begin{pmatrix} ab & \frac{b}{a} \\ \frac{1}{ab} & \frac{a}{b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\pm} \\ v_{\pm} \end{pmatrix} = \lambda_{\pm} \begin{pmatrix} u_{\pm} \\ v_{\pm} \end{pmatrix}, \quad (\text{D.23})$$

igualar-se ao sistema de equações lineares

$$\begin{cases} (ab - \lambda_{\pm})u_{\pm} + \frac{b}{a}v_{\pm} = 0 \\ \frac{1}{ab}u_{\pm} + \left(\frac{a}{b} - \lambda_{\pm}\right)v_{\pm} = 0 \end{cases} \quad (\text{D.24})$$

Ambas as equações, quando combinadas, ofertam os autovalores λ_{\pm} , os quais já existem calculados, $\lambda_{\pm} = C \pm D$. Agora, tomando-se, por exemplo, o segundo do conjunto de equações,

$$u_{\pm} = -ab \left(\frac{a}{b} - \lambda_{\pm}\right) v_{\pm}, \quad (\text{D.25})$$

em que uma das variáveis é eliminada em função da outra. Por último, v_{\pm} , origina-se da condição de ortonormalidade, $\langle \pm | \pm \rangle = 1$:

$$v_{\pm}^2 = \frac{1}{1 + a^2 b^2 \left(\frac{a}{b} - \lambda_{\pm}\right)^2}. \quad (\text{D.26})$$

Dado que

$$(D.25), (D.19) \implies F_{+-}^2 = \left[1 - a^2 b^2 \left(\frac{a}{b} - \lambda_{+}\right) \left(\frac{a}{b} - \lambda_{-}\right)\right]^2 v_{-}^2 v_{+}^2, \quad (\text{D.27})$$

e que

$$(D.26) \implies F_{+-}^2 = \frac{\left[1 - a^2 b^2 \left(\frac{a}{b} - \lambda_{+}\right) \left(\frac{a}{b} - \lambda_{-}\right)\right]^2}{\left[1 + a^2 b^2 \left(\frac{a}{b} - \lambda_{+}\right)^2\right] \left[1 + a^2 b^2 \left(\frac{a}{b} - \lambda_{-}\right)^2\right]}, \quad (\text{D.28})$$

e ainda (D.6),

$$(D.6) \implies ab - \lambda_{\pm} = E \mp D, \quad (\text{D.29})$$

justificado que, na nova notação, $C = a(b + 1/b)/2$ e $E = a(b - 1/b)/2$. Seguindo,

$$F_{+-}^2 = \frac{\left[1 - a^2 b^2 (E^2 - D^2)\right]^2}{1 + a^2 b^2 [(E + D)^2 + (E - D)^2] + a^4 b^4 [E^2 - D^2]}, \quad (\text{D.30})$$

somado ao fato de que $D^2 = E^2 + 1/a^2$, apenas resta

$$F_{+-}^2 = \frac{[1 + b^2]^2}{1 + 2a^2 b^2 [E^2 + D^2] + b^4}; \quad (\text{D.31})$$

como

$$[1 + b^2]^2 = 4 \frac{b^2}{a^2} C^2, \quad (\text{D.32})$$

é imediato que

$$F_{+-}^2 = 4 \frac{\frac{C^2}{a^2}}{\frac{1}{b^2} + b^2 + 2a^2 \left[2E^2 + \frac{1}{a^2} \right]} = \frac{4C^2/a^2}{4C^2/a^2 + 4a^2E^2}, \quad (\text{D.33})$$

ou, ainda,

$$F_{+-}^2 = \frac{1}{1 + a^4 \left(\frac{E}{C} \right)^2}. \quad (\text{D.34})$$

Dessa fórmula, tem-se que F_{+-}^2 nunca diverge sendo sempre um número no intervalo $(0, 1]$, uma função suave. Visto que

$$\frac{E}{C} = \tanh(\delta), \quad (\text{D.35})$$

finalmente chega-se a:

$$\because \cot(x) = e^{2\beta J_J} \tanh(\delta) \therefore F_{+-}^2 = \text{sen}^2(x), \quad (\text{D.36})$$

em que x representa uma variável intermediária. Já a função de correlação conectada completa lê-se tal que

$$G_c(n) = \text{sen}^2 \left[\text{acth} \left(e^{2\beta J_J} \tanh(\delta) \right) \right] \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n. \quad (\text{D.37})$$

Referências Bibliográficas

- [1] M. Grousson, G. Tarjus, and P. Viot. *Monte Carlo Study of the Three-dimensional Coulomb Frustrated Ising Ferromagnet*. Phys. Rev. E **64**, 036109 (2001).
- [2] M. Seul and D. Andelman. *Domain Shapes and Patterns: the Phenomenology of Modulated Phases*. Science **267**, 476 – 483 (1995).
- [3] O. Portman, A. Vaterlaus, and D. Pescia. *An Inverse Transition of Magnetic Domain Pattern in Ultrathin Films*. Nature **422**, 701 - 704 (2003).
- [4] S. A. Cannas, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit. *Stripe-Tetragonal First Order Phase Transition in Ultrathin Magnetic Films*. Phys. Rev. B **69**, 092409 (2004).
- [5] A. I. Guerrero, D. A. Stariolo and Noé Almarza. *Nematic phase in the J_1 - J_2 square-lattice Ising model in an external field* Phys. Rev. E **91**, 052123 (2015).
- [6] A. Mendoza Coto and D. A. Stariolo. *Coarse-grained models of stripe forming systems: phase diagrams, anomalies, and scaling hypothesis* Phys. Rev. E **86**, 051130 (2012).
- [7] S. A. Cannas, M. Carubelli, O. V. Billoni and D. A. Stariolo. *Inverse transition in a two-dimensional dipolar frustrated ferromagnet* Phys. Rev. B **84**, 014404 (2011).
- [8] L. Nicolao and D. A. Stariolo. *Langevin Simultions of a Model for Ultrathin Magnetic Films*. Phys. Rev. B **76**(5), 054453 (2007).
- [9] S. A. Kivelson, E. Fradkin, and V. J. Emery. *Electronic Liquid-crystal Phases of a Dopped Mott Insulator*. Nature **393**, 550 (1998).
- [10] G. Malescio and G. Pellicane. *Stripe Patterns in Two-dimensional Systems with Core-corona Molecular Architecture*. Phys. Rev. E **70**(2), 021202 (2004).
- [11] A. Imperio and L. Reatto. *Microphase separation in two-dimensional systems with competing interactions*. The Journal of Chemical Physics **124**(16), 164712 (2006).

- [12] N. Osterman, D. Babič, I. Poberaj, J. Dobnikar, and P. Ziherl. *Observation of Condensed Phases of Quasiplanar Core-Softened Colloids*. Phys. Rev. Lett. **99**(24), 248301, (Dec 2007).
- [13] M. A. Glaser, G. M. Grason, R. D. Kamien, A. Kosšmrlj, C. D. Santangelo, and P. Ziherl. *Soft Spheres Make More Mesophases*. EPL (Europhysics Letters), **78**(4), 46004 (2007).
- [14] M. Carubelli, O. V. Billoni, S. A. Pighín, S. A. Cannas, D. A. Stariolo, and F. A. Tamarit. *The Spin Reorientation Transition Phase Diagram of Ultrathin Ferromagnetic Films*. Phys. Rev. B (77), 134417 (2008).
- [15] J. F. Nagle. *Ising Chain With Competing Interactions*. Phys. Rev. A **2**(5), 2124-2128 (Nov 1970).
- [16] J. C. Bonner and J. F. Nagle. *Phase Behavior of Models With Competing Interactions*. Journal of Applied Physics **42**(4), 1280-1282 (1971).
- [17] M. Kardar. *Crossover to Equivalent-Neighbor Multicritical Behavior in Arbitrary Dimensions*. Phys. Rev. B **28**(1), 244-246 (Jul 1983).
- [18] O. Portmann, A. Gölzer, N. Saratz, O. V. Billoni, D. Pescia, and A. Vindigni. *Scaling Hypothesis for Modulated Systems*. Phys. Rev. B **82**(18), 184409 (Nov 2010).
- [19] N. Saratz, A. Lichtenberger, O. Portmann, U. Ramsperger, A. Vindigni, and D. Pescia. *Experimental Phase Diagram of Perpendicularly Magnetized Ultrathin Ferromagnetic Films*. Phys. Rev. Lett. **104**(7), 077203 (Feb 2010).
- [20] N. Saratz, U. Ramsperger, A. Vindigni, and D. Pescia. *Irreversibility, Reversibility, and Thermal Equilibrium in Domain Patterns of Fe Films with Perpendicular Magnetization*. Phys. Rev. B **82**(18), 184416 (Nov 2010).
- [21] N. Alves Jr. and C. S. O. Yokoi. *Spin Pair Correlation of the ANNNI Chain in a Field*. Brazilian Journal of Physics **30**(4), 667-670 (Dec 2000).
- [22] W. Selke. *The ANNNI Model - Theoretical Analysis and Experimental Application*. Phys. Rep. **170**(4), 213-264 (1988).
- [23] C. S. O. Yokoi, M. D. Countinho-Filho, and S. R. Salinas. *Ising Model with Competing Axial Interactions in the Presence of a Field: a Mean Field Treatment*. Phys. Rev. B **24**(7), 4047-4061 (Oct 1981).

- [24] P. Bak and J. von Boehm. *Ising Model with Solitons, Phasons, and the "Devil's Staircase"*. Phys. Rev. B **21**(11), 5297-5320 (Jun 1980).
- [25] S. A. Cannas, M. Carubelli, O. V. Billoni and D. A. Stariolo. *Inverse transition in a two-dimensional dipolar frustrated ferromagnet*. Phys. Rev. B **84**, 014404 (2011).
- [26] L. Araújo Velasque, D. A. Stariolo and O. V. Billoni. *Inverse transition in the dipolar frustrated Ising ferromagnet: The role of domain walls*. Phys. Rev. B **90**(21), 214408 (2014).
- [27] J. Stephenson. *Ising Model with Antiferromagnetic Next-Nearest-Neighbor Coupling: Spin Correlations and Disorder Points*. Phys. Rev. B **1**, 4405 (1970).
- [28] P. Ruján. *Order and Disorder Lines in Systems with Competing Interactions III. Exact Results from Stochastic Crystal Growth*. Journal of Statistical Physics **34**, 615 (1984).