

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

"MODELO DE ISING DECORADO ALEATORIAMENTE"

Miguel Arcanjo Costa

ORIENTADOR: Lindberg Lima Gonçalves

Tese apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre em Ciências.

MARÇO DE 1994.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

C874m Costa, Miguel Arcanjo.

Modelo de Ising decorado aleatoriamente / Miguel Arcanjo Costa. – 1994.
128 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 1994.

Orientação: Prof. Dr. Lindberg Lima Gonçalves.

1. Ising, Modelo de . 2. Anisotropia. I. Título.

CDD 530

DEDICATÓRIA

Aos meus pais

Antônio Rodrigues Costa e

Francisca Pereira Costa

À minha esposa

Maria Rosismar Farias Costa

Ao meu amigo

Paulo Rômulo de Oliveira Frota

e José Pimentel de Lima

AGRADECIMENTOS

. Ao Professor Lindberg Lima Gonçalves pela orientação, paciência e consideração demonstrada durante a realização deste trabalho.

Ao professor Francisco Alcides Germano por possibilitar o uso do computador do seu laboratório para a digitação deste trabalho.

Aos demais professores, que de forma direta ou indireta, contribuíram para a minha formação.

Ao grande amigo José Pimentel de Lima pelo incentivo a mim demonstrado ao longo deste tempo.

Aos colegas Carlos Alberto Pereira, Edina, Welington, Carlos Alberto Feitosa, Cláudia e Raimundo pela amizade e companheirismo desmonstrados durante esse tempo em que convivemos juntos.

. Aos demais colegas do Mestrado e Doutorado pelos bons momentos que passamos juntos.

Aos funcionários do Departamento de Física pela presteza com que sempre me atenderam.

Ao CNPq, que através do programa de Concessão de Bolsas, possibilitou a realização deste Mestrado.

ABSTRACT

In this work, the Ising model on the square lattice randomly decorated (annealed distribution) with a chain of M Ising spins of magnitudes s is studied. The model is considered with and without uniaxial anisotropy and in both cases the exact solution is obtained. The phase diagram is determined for $s \leq 3/2$ and M (finite) arbitrary, and the critical behaviour for arbitrary s in the limit $M \rightarrow \infty$ is also analyzed.

RESUMO

Neste trabalho, é estudado o modelo de Ising na rede quadrada decorado aleatoriamente (distribuição recozida) com uma cadeia de M spins de Ising de magnitudes s . O modelo é considerado com e sem anisotropia uniaxial, e em ambos os casos é obtida a solução exata. O diagrama de fase é determinado para $s \leq 3/2$ e M (finito) arbitrário, e o comportamento crítico também é analisado para s arbitrário no limite $M \rightarrow \infty$.

ÍNDICE

	Página
INTRODUÇÃO GERAL.....	1
CAPÍTULO 1 - MODELO DE ISING SEM ANISOTROPIA UNIAXIAL DECORADO ALEATORIAMENTE	
1.1 - INTRODUÇÃO.....	5
1.2 - A SOLUÇÃO DO MODELO	6
1.3 - RESULTADOS	14
CAPÍTULO 2 - MODELO DE ISING COM ANISOTROPIA UNIAXIAL DECORADO ALEATORIAMENTE	
2.1 - INTRODUÇÃO	32
2.2 - A SOLUÇÃO DO MODELO	33
2.3 - RESULTADOS	38
CAPÍTULO 3 - O LIMITE $M \rightarrow \infty$	
3.1 - INTRODUÇÃO.....	62
3.2 - A SOLUÇÃO DO MODELO	63
3.3 - RESULTADOS	66
CONCLUSÕES	79
APÊNDICE A	82
APÊNDICE B	89
APÊNDICE C	122
REFERÊNCIAS	127

INTRODUÇÃO GERAL

O modelo de Ising foi introduzido por Ising (1925), com o objetivo de descrever o comportamento crítico de materiais ferromagnéticos. A versão unidimensional do modelo com interação de curto alcance, foi resolvida por Ising (1925) o qual mostrou que a energia livre não apresenta comportamento não-analítico, e consequentemente o sistema não exibe transição de fase. A solução para o modelo ferromagnético bidimensional sem campo, foi encontrada por Onsager (1944), que obteve a função de partição e a temperatura de transição, sendo a magnetização espontânea determinada por Yang (1952).

Além dos sistemas magnéticos puros e desordenados, o modelo de Ising pode descrever vários sistemas (Temperley, 1972), tais como: as ligas binárias, gás na rede ("lattice gas"), etc. Além destes, pode descrever sistemas de spins em redes decoradas, que são redes que tem entre cada dois pontos da rede original um ou mais sítios adicionais (Syozzi, 1972). Nos casos de múltipla decoração e interação, considera-se que as variáveis de decoração interagem entre si, e com os sítios da rede ordinária.

O modelo de Ising decorado, foi introduzido por Syozzi (1951) com o objetivo de determinar a relação entre as funções de partição da

rede Kagomé e sua correspondente rede favo de mel. O cálculo para a obtenção de tal relação pode ser feito utilizando-se a técnica transformação-decoração, (Syozzi, 1972), a qual consiste em efetuar o traço sobre as variáveis que decoram uma dada rede, transformando-se sua função de partição, na função de partição do modelo ordinário correspondente, com interações efetivas que dependem da temperatura e dependendo do caso, podem também depender do campo externo aplicado.

Vários fenômenos foram estudados usando-se modelos decorados, entre eles, pode-se citar: diluição (Syozzi, 1965), efeito de interações competitivas e reentrância (Horiguchi e Gonçalves, 1983; Gonçalves e Horiguchi, 1984; dos Santos e Coutinho, 1987), e supercondutividade em altas temperaturas (dos Santos et al., 1989). Nestes estudos tem-se usado com frequência o modelo de Ising decorado sobre a rede quadrada, em virtude deste modelo descrever dentro de uma aproximação aceitável o comportamento destes sistemas.

No estudo de sistemas com impurezas, existem duas formas distintas de abordagem do problema (Brout, 1959), que caracterizam a forma como as impurezas se distribuem no sistema a uma dada temperatura. Esta distribuição está relacionada à forma como o sistema é resfriado de altas temperaturas até a temperatura de interesse. Se o resfriamento é feito de forma rápida (caso "quenched"), as impurezas ficam presas em suas posições, isto é, em uma situação de não equilíbrio e a distribuição obtida é dita temperada. No entanto, se o resfriamento é feito de forma lenta (caso "annealed") tal que as impurezas possam mover-se durante o processo de resfriamento, tem-se uma situação de equilíbrio e a distribuição obtida é chamada de

recozida. Em termos da função de partição, a energia livre, no caso temperado é proporcional a $\langle \log \langle Z \rangle_s \rangle_c$, enquanto que no caso recozido a função de partição é dada por $\log \langle Z \rangle_{s,c}$, onde s designa a média estatística, c a média configuracional sobre a distribuição das impurezas e "log" denota o logarítmico natural.

Sistemas magnéticos com distribuição de impurezas recozidas tem sido objeto de estudo de vários autores (Syozzi, 1972). Muito embora a maioria dos sistemas reais com impurezas sejam descritos mais adequadamente considerando a distribuição de impurezas temperadas, o interesse no estudo de sistemas com distribuições recozidas reside principalmente na maior possibilidade de obtenção de uma solução exata.

O estudo de interações competitivas, sem desordem, em modelos decorados foi considerado por vários autores. Nakano (1968) e Hatori e Nakano (1968) introduziram interações de competição com o objetivo de estudar o comportamento crítico do modelo de Ising antiferromagnético decorado sobre a rede quadrada na presença de uma campo magnético. Estudos mais recentes destas interações competitivas no modelo de Ising na rede quadrada decorada aleatoriamente, foram realizados por dos Santos et al. (1990), Gonçalves (1991), Paul e Mattis (1991), Lyra e Cavalcanti (1992) e Coutinho et al. (1993). Em particular dos Santos et al. (1990), consideraram o efeito da decoração aleatória com cadeias de M spins $1/2$.

Neste trabalho estuda-se o modelo de Ising bidimensional decorado aleatoriamente (distribuição recozida), por uma cadeia de M spins de Ising de magnitudes s com e sem anisotropia uniaxial. O

sistema é resolvido exatamente mapeando-o num modelo de Ising efetivo uniforme na rede quadrada.

No primeiro capítulo discute-se o modelo decorado sem anisotropia uniaxial e no segundo capítulo com anisotropia uniaxial. O comportamento crítico do modelo, para M finito, é explicitamente obtido no primeiro capítulo para $s \leq 3/2$ e no segundo capítulo para $s = 1$ e $3/2$.

No terceiro capítulo considera-se a solução do modelo no limite $M \rightarrow \infty$, normalizando-se adequadamente os parâmetros de interação dos termos de energia decorrentes da decoração da rede. É obtida a solução exata para s arbitrário e o comportamento crítico analisado para $s \leq 5/2$.

Finalmente, são apresentadas as conclusões referentes aos resultados encontrados nos três capítulos precedentes.

CAPÍTULO 1

MODELO DE ISING SEM ANISOTROPIA UNIAXIAL DECORADO ALEATORIAMENTE

1.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo estuda-se o modelo de Ising bidimensional decorado aleatoriamente (distribuição recozida) por uma cadeia de M spins de Ising de magnitude s sem anisotropia uniaxial. O sistema é resolvido exatamente a partir da solução do modelo de Ising bidimensional, sendo obtidas expressões analíticas exatas para $s \leq 3/2$ e M arbitrário.

Trabalhos sobre o comportamento crítico do modelo foram feitos por dos Santos et al. (1990), que estudaram o modelo de Ising bidimensional com distribuição recozida, em que cada ligação foi decorada aleatoriamente por 1, 2 e 3 spins de Ising de magnitude $s=1/2$, e por Goncalves (1991), que estudou o mesmo modelo, no qual cada ligação foi decorada aleatoriamente por apenas um spin de Ising de magnitude s arbitrária.

A partir da solução exata é obtido o diagrama de fase do modelo como função da concentração e do parâmetro de competição, para $s \leq 3/2$ e $M=2$ e 3 . Na seção 1.2 é discutida a solução do modelo e na 1.3 os resultados obtidos.

1.2 A SOLUÇÃO DO MODELO

Hamiltoniana para este caso, considerando-se condições de contorno periódicas para a rede bi-dimensional e para a cadeia de spins que decora uma dada ligação, é dada por:

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{(ij)} \bar{J} \left(\sigma_{ij} \sigma_{i+1j} + \sigma_{ij} \sigma_{i+1j} \right) - \sum_{(ij)} t_{ij, i+1j} \left\{ \sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} X \right. \\
 & \left. X \left(\sigma_{ij} + \delta \sigma_{i+1j} \right) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} \bar{\sigma}_{k+1} + \mu \right\} - \sum_{(ij)} t_{ij, i+1j} X \\
 & X \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} \left(\sigma_{ij} + \delta \sigma_{i+1j} \right) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} \bar{\sigma}_{k+1} + \mu \right] , \quad (1.1)
 \end{aligned}$$

onde $\sigma_{ij} = \pm 1$, $t_{ij, i+1j} = 0, 1$ é a variável de decoração de cada ligação, $\bar{\sigma}_k$ é um spin de Ising de magnitude s , δ e γ são parâmetros arbitrários e μ é o pseudo-potencial químico que controla o número de ligações decoradas.

A função de partição é dada por:

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta H} \right) , \quad (1.2)$$

onde $\beta = \frac{1}{k_B T}$, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura absoluta e Tr , que significa a soma sobre todas as configurações permitidas pelo conjunto de variáveis independentes $\{\sigma_{ij}, \bar{\sigma}_k, t_{ij, i'j'}\}$, é obtido utilizando-se o procedimento adotado por Gonçalves (1991). Assim sendo, efetuando-se a decimação da variável t_{ij} para uma dada ligação conectando os sítios designados por i, j , usando-se uma notação simplificada, obtém-se:

$$\sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left[\beta t_{ij} \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k, ij} (\sigma_i + \delta \sigma_j) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k, ij} \bar{\sigma}_{k+1} + \mu \right] \right] =$$

$$= (2s+1)^M + z \sum_{\{\bar{\sigma}\}} \exp \left[\tilde{K} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k, ij} \bar{\sigma}_{k+1} + h_{ij} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k, ij} \right], \quad (1.3)$$

onde $\tilde{K} = \gamma K$, $K = \beta J$, $h_{ij} = (\sigma_i + \delta \sigma_j) K$ e $z = \exp(\beta \mu)$ é a fugacidade. Para se obter o traço parcial sobre as variáveis $\bar{\sigma}$ no segundo membro da equação (1.3), faz-se uso da técnica da matriz de transferência veja por exemplo McCoy e Wu (1973), cujos elementos são dados por:

$$\langle \bar{\sigma}_{k, ij} | T_{ij} | \bar{\sigma}_{k'} \rangle = e^{\tilde{K} \bar{\sigma}_{k, ij} \bar{\sigma}_{k'} + h_{ij} (\bar{\sigma}_{k, ij} + \bar{\sigma}_{k'}) / 2}, \quad (1.4)$$

onde T_{ij} é a matriz de transferência associada à ligação ij , cuja ordem é $2s+1$. Fazendo-se uso da equação (1.4), pode-se reescrever a

equação (1.3) na forma:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left\{ \beta t_{ij} \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k,ij} (\sigma_i + \delta \sigma_j) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + \mu \right] \right\} = \\
 & = (2s+1)^M + z \sum_{\bar{\sigma}_1} \sum_{\bar{\sigma}_2} \dots \sum_{\bar{\sigma}_M} \langle \bar{\sigma}_1 | T_{ij} | \bar{\sigma}_2 \rangle \langle \bar{\sigma}_2 | T_{ij} | \bar{\sigma}_3 \rangle \dots \langle \bar{\sigma}_M | T_{ij} | \bar{\sigma}_1 \rangle = \\
 & = (2s+1)^M + z \operatorname{Tr} \left(T_{ij}^M \right) \quad (1.5)
 \end{aligned}$$

A diagonalização da matriz de transferência T_{ij} , que permite calcular a expressão anterior, é apresentada no apêndice A. Considera-se somente três valores para s , $s=1/2$, 1 e $3/2$, em virtude da equação polinomial associada à equação de autovalores da matriz T_{ij} só fornecer solução analítica para estes casos.

Usando-se os resultados obtidos nas equações (A.7) e (A.8) para $s=1/2$, (A.18)-(A.20) para $s=1$ e (A.33)-(A.36) para $s=3/2$, pode-se escrever a eq.(1.5) na forma:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left\{ \beta t_{ij} \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k,ij} (\sigma_i + \delta \sigma_j) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + \mu \right] \right\} = \\
 & = r_M e^{\beta J_M \bar{\sigma}_i \sigma_j} \quad (1.6)
 \end{aligned}$$

onde r_M e J'_M são dados por:

$$r_M = \sqrt{f_M(h^+) f_M(h^-)} \quad (1.7)$$

$$J'_M = \frac{k_B T}{2} \ln \left[\frac{f_M(h^+)}{f_M(h^-)} \right] \quad (1.8)$$

com $f_M(x)$ e h^\pm definidos por:

$$f_M(x) = (2s+1)^M \left[1 + z (2s+1)^{-M} \sum_{m=1}^n \lambda_m^M(x) \right] \quad (1.9)$$

$$h^\pm = \frac{1}{2} (1 \pm \delta) K \quad (1.10)$$

onde os autovalores de T_{ij} , λ_m , são dados pelas equações (A.7) e (A.8) para $s=1/2$, (A.18)-(A.20) para $s=1$ e (A.33)-(A.36) para $s=3/2$.

A partir da equação (1.6), pode-se escrever a função de partição na forma:

$$Z = r_M^{2N} \sum_{(\sigma)} e^{-\beta H'} \quad (1.11)$$

onde N é o número de sítios da rede e H' é a Hamiltoniana do modelo de Ising efetivo bidimensional dada por:

$$H' = - \sum_{(ij)} J_{eff} \left(\sigma_{ij} \sigma_{i,j+1} + \sigma_{ij} \sigma_{i+1,j} \right) \quad (1.12)$$

onde

$$J_{\text{eff}} = \bar{J} + J_M' \quad . \quad (1.13)$$

Este resultado mostra que o sistema apresenta o mesmo comportamento crítico do modelo de Ising efetivo.

A fugacidade é determinada fazendo-se a média térmica da variável de decoração t_{ij} igual a fração de ligações decoradas (concentração p), isto é:

$$p \equiv \langle t_{ij} \rangle \quad . \quad (1.14)$$

Para obter-se $\langle t_{ij} \rangle$ usa-se o procedimento adotado por Gonçalves (1991). Assim sendo considerando, para uma determinada ligação, o traço parcial sobre as variáveis $\bar{\sigma}$ e t_{ij} com o uso da equação (1.6), é obtido o seguinte resultado:

$$\sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left[t_{ij} \left(\tilde{K} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + h_{ij} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} + \beta\mu \right) \right] t_{ij} = r_M e^{\beta J_M' \sigma_i \sigma_j} \chi \left(\bar{x}_1 \sigma_i \sigma_j + \bar{x}_2 \right) \quad , \quad (1.15)$$

onde \bar{x}_1 , \bar{x}_2 são definidos por:

$$\bar{x}_1 = \frac{z}{2} \left[\frac{X_M(h^+)}{f_M(h^+)} - \frac{X_M(h^-)}{f_M(h^-)} \right] \quad (1.16)$$

$$\bar{x}_2 = \frac{z}{2} \left[\frac{X_M(h^+)}{f_M(h^+)} + \frac{X_M(h^-)}{f_M(h^-)} \right] \quad (1.17)$$

com

$$X_M(x) = (2s+1)^{-M} \sum_{m=1}^n \lambda_m^M(x) \quad (1.18)$$

Combinando as equações (1.6) , (1.14) e (1.15) obtém-se:

$$p = \bar{x}_1 \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{eff} + \bar{x}_2 = \bar{x}_1 \varepsilon + \bar{x}_2 \quad (1.19)$$

onde $\varepsilon = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{eff}$ é a função de correlação entre dois spins vizinhos mais próximos na rede efetiva do modelo bidimensional.

A temperatura de transição é determinada utilizando-se a solução Onsager (1944):

$$\sinh 2\beta \left[J_{eff}^c(\bar{J}, J_M', z) \right] = \pm 1 \quad (1.20)$$

que corresponde a

$$\beta J_{\text{eff}}^c \equiv K_{\text{eff}}^c = \frac{1}{2} \ln \left[\sqrt{2} \pm 1 \right] \quad (1.21)$$

com a fugacidade sendo dada pela eq.(1.19). O sinal positivo está associado a fase ferromagnético e o sinal negativo a fase antiferromagnética.

Utilizando-se as equações (1.13) e (1.8-1.10) encontra-se que z em função de K_{eff}^c é dado por:

$$z = \frac{C - 1}{X_M(h^+) - CX_M(h^-)} \quad (1.22)$$

onde

$$C = \exp \left[2 (K_{\text{eff}}^c - \beta \bar{J}) \right] \quad (1.23)$$

A partir da equação (1.19) obtém-se também para a fugacidade a expressão:

$$z = \frac{A_M + \sqrt{A_M^2 + 4pB_M}}{B_M} \quad (1.24)$$

onde A_M e B_M são definidos por:

$$A_M = (2p - 1) \left[X_M(h^+) + X_M(h^-) \right] - \varepsilon \left[X_M(h^+) - X_M(h^-) \right] \quad , \quad (1.25)$$

$$B_M = 4(1 - p) X_M(h^+) X_M(h^-) \quad . \quad (1.26)$$

Eliminando-se a fugacidade z , entre as equações (1.22) e (1.24), obtém-se:

$$p = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{C} \right] \frac{(1 + \varepsilon) X_M(h^+) + (1 - \varepsilon) C X_M(h^-)}{X_M(h^+) - X_M(h^-)} \quad . \quad (1.27)$$

Analizando as equações (1.8)-(1.10) vê-se que $J'_M > 0$ para $\delta > 0$, e $J'_M < 0$ para $\delta < 0$ independentemente do sinal de J . Isto significa que para se introduzir competição no sistema, o que permite a existência de fases ferromagnética e antiferromagnética, deve-se considerar sinais contrários para \bar{J} e J'_M independente do sinal de J . Assim sendo, definindo o parâmetro de competição $\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$, para $\delta > 0$ tem-se $\alpha > 0$ e para $\delta < 0$ tem-se $\alpha < 0$. Considerando-se $\delta = 0$ tem-se $J'_M = 0$ e $J_{eff} = \bar{J}$, portanto, neste caso o modelo reproduz os resultados obtidos por Onsager(1944).

A partir da eq.(1.1) pode-se mostrar que a Hamiltoniana é invariante sob a transformação $\alpha \rightarrow -\alpha$ e $\delta \rightarrow -\delta$ e a inversão em sítios alternados dos spins σ ($\sigma \rightarrow -\sigma$) e dos spins $\bar{\sigma}$ ($\bar{\sigma} \rightarrow -\bar{\sigma}$) em cadeias alternadas. Isto significa que ao trocar simultaneamente os sinais de

α e δ são intercambiadas no diagrama de fase as fronteiras ferromagnética com antiferromagnética.

Desta forma para estudar os casos em que os dois tipos de ordem estão presentes, que são os casos de interesse, sem perda de generalidade os resultados serão restritos a $\alpha > 0$ e $\delta > 0$. Neste caso a equação (1.27) que fornece a temperatura crítica (T_c), pode ser reescrita em termos dos parâmetros críticos na forma:

$$p = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K_c}}{t} \right] \frac{(1 + \epsilon_c) X_M(h^+) + t(1 - \epsilon_c) X_M(h^-) e^{2\alpha K_c}}{X_M(h^+) - X_M(h^-)} \quad , \quad (1.28)$$

onde

$$t = \exp(2K_{eff}^c) = \sqrt{2} \pm 1 \quad , \quad \epsilon_c = \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \quad , \quad (1.29)$$

onde ϵ_c é a função de correlação para $T=T_c$, $K_c \equiv \beta_c J$, e onde o sinal $+(-)$ refere-se a fase ferromagnética(antiferromagnética).

1.3 RESULTADOS

O diagrama de fase para uma determinada escolha dos parâmetros que definem o modelo, é obtido resolvendo-se numericamente a equação (1.28). Para determiná-lo se faz necessário calcular

analiticamente as concentrações críticas (p_c), que correspondem a valores de p associados à temperatura crítica $T_c \rightarrow 0$, (Syozzi, 1972), e o parâmetro de competição crítico (α_c) que corresponde ao valor de α abaixo do qual a ordem ferromagnética no estado fundamental pode existir (Gonçalves, 1991). O cálculo analítico realizado para a obtenção destes valores e de α crítico foi efetuado e os resultados são apresentados no apêndice B.

Os resultados apresentados no apêndice B, podem ser sumarizados como são apresentados a seguir. As concentrações críticas para as fronteiras ferromagnética e antiferromagnética somente são definidas para $\alpha \leq \alpha_c$, e os valores das mesmas dependem dos parâmetros que definem o sistema apenas para $\alpha = \alpha_c$. Assim sendo, para $\alpha \neq \alpha_c$, tem-se:

$$p_{1c} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad \text{para } 0 < \alpha < \alpha_c \quad (\text{caso antiferro}) \quad , \quad (1.30)$$

$$p_{2c} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad \text{para } 0 < \alpha < \alpha_c \quad (\text{caso ferro}) \quad , \quad (1.31)$$

$$p_{3c} = \frac{1}{2} \quad \text{para } \alpha = 0 \quad (\text{caso ferro}) \quad . \quad (1.32)$$

Para $\alpha=\alpha_c$ somente existe a fronteira antiferromagnética. Quando a concentração crítica é definida, para $\gamma<0$, dentre os casos estudados apresenta dependência em δ , γ e M somente para $s=3/2$, enquanto que para $\gamma>0$, somente depende de δ e é dada por:

$$p_{4c} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } \delta \neq 1 \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \right) & \text{para } \delta = 1 \end{cases} \quad (1.33)$$

O modelo estudado reproduz os resultados obtidos por Gonçalves (1991), para $M=1$.

Os valores para a concentração crítica $p_{1c}=0.1464\dots$, $p_{2c}=0.8535\dots$ e $p_{3c}=1/2$, que é a concentração de percolação para a rede quadrada pois neste caso o modelo reduz-se ao modelo diluído estudado Syozi (1965), são dados pelas eqs.(1.30)-(1.32) e podem ser vistos como limiares de percolação que caracterizam as classes de universalidade e que não sofrem os efeitos da decoração (Gonçalves, 1991).

A solução da eq.(1.28) foi obtida considerando valores para γ positivos e negativos, sendo escolhido $\gamma>0$ ($\gamma=0.5$) para a maioria dos resultados apresentados pois os mesmos apresentam os aspectos relevantes do modelo. Os resultados também não apresentaram diferenças qualitativas ao ser variado o parâmetro δ , sendo escolhido o valor $\delta=1.5$.

Nas Figs. 1.1-1.6, a temperatura crítica é apresentada como uma função da concentração para $s=1/2$, 1 e $3/2$ para $M=2$ e 3, e alguns valores do parâmetro de competição α . Conclui-se dos resultados mostrados que, para $0 < \alpha < \alpha_c$, independente dos valores de s e M o estado fundamental ferromagnético é estável para $p_{2c} < p \leq 1$ e para $p_{3c} < p < p_{2c}$ o estado fundamental é instável apresentando o sistema um comportamento reentrante (Syozzi, 1972) para determinados valores do parâmetro de competição α . No caso especial $\alpha=0$, o estado fundamental da fase ferromagnética é estável para $p_{3c}=0.5 < p < 1$, independente dos parâmetros. Conclui-se também que para $\alpha > \alpha_c$ o estado fundamental antiferromagnético é estável independentemente de s e M , para qualquer valor de p , e para $0 < \alpha \leq \alpha_c$ o sistema somente apresenta ordem antiferromagnética no estado fundamental para $0 < p \leq p_{1c}$, possuindo porém, comportamento multi-reentrante para $\alpha > \alpha_c$. Deve ser notado que para $s=1/2$ esta reentrância múltipla é observada para $M=2$ e 3, e não existe para $M=1$ (dos Santos et al., 1990).

Nas Figs. 1.7 - 1.12, a temperatura crítica é dada como uma função do parâmetro de competição α , para $s=1/2$, 1 e $3/2$ para $M=2$ e 3 e alguns valores da concentração p . Observa-se que independentemente dos valores de M e s , a fase ferromagnética é estável para $0 < \alpha < \alpha_c$ e $p_{2c} < p \leq 1$ e para $p_{3c} < p \leq p_{2c}$ a fase ferromagnética é instável, exibindo o modelo o fenômeno de reentrância. Por outro lado, a fase antiferromagnética também é estável independentemente dos valores de s e M , para $0 < \alpha < \alpha_c$ e $0 \leq p \leq p_{1c}$, e para $\alpha > \alpha_c$ quando $p_{2c} < p \leq 1$. Entretanto, pode ser observado que o fenômeno de multi-reentrância está presente na fase antiferromagnética para $\alpha > \alpha_c$.

Na Fig. 1.13, a temperatura crítica é mostrada como função da concentração para $\delta=0.5$, $\gamma=-0.5$, $\alpha=\alpha_c$ e $s=3/2$ e $M=3, 5, 7$ e 9 . Como pode-se notar a concentração crítica é não-universal, e os valores apresentados são consistentes com os resultados apresentados no Apêndice B.

A solução do modelo foi obtida para M arbitrário, porém os resultados foram apresentados somente para $M \leq 3$, tendo em vista que os resultados para $M > 3$, não mostraram diferenças qualitativas em relação aos anteriores.

Nas regiões onde o sistema apresenta comportamento reentrante, o ponto crítico reentrante do contorno de fase para os diagramas mostrados nas Figs.1.1 - 1.13, pode ser determinado, considerando-se a equação (1.28), escrita na forma de $F(p, T_c) = 0$ e $F(\alpha, T_c) = 0$, sujeita às condições adicionais:

$$\frac{dp}{dT_c} = 0 \quad \text{para } T_c \times p \quad , \quad (1.34)$$

$$\frac{d\alpha}{dT_c} = 0 \quad \text{para } T_c \times \alpha \quad . \quad (1.35)$$

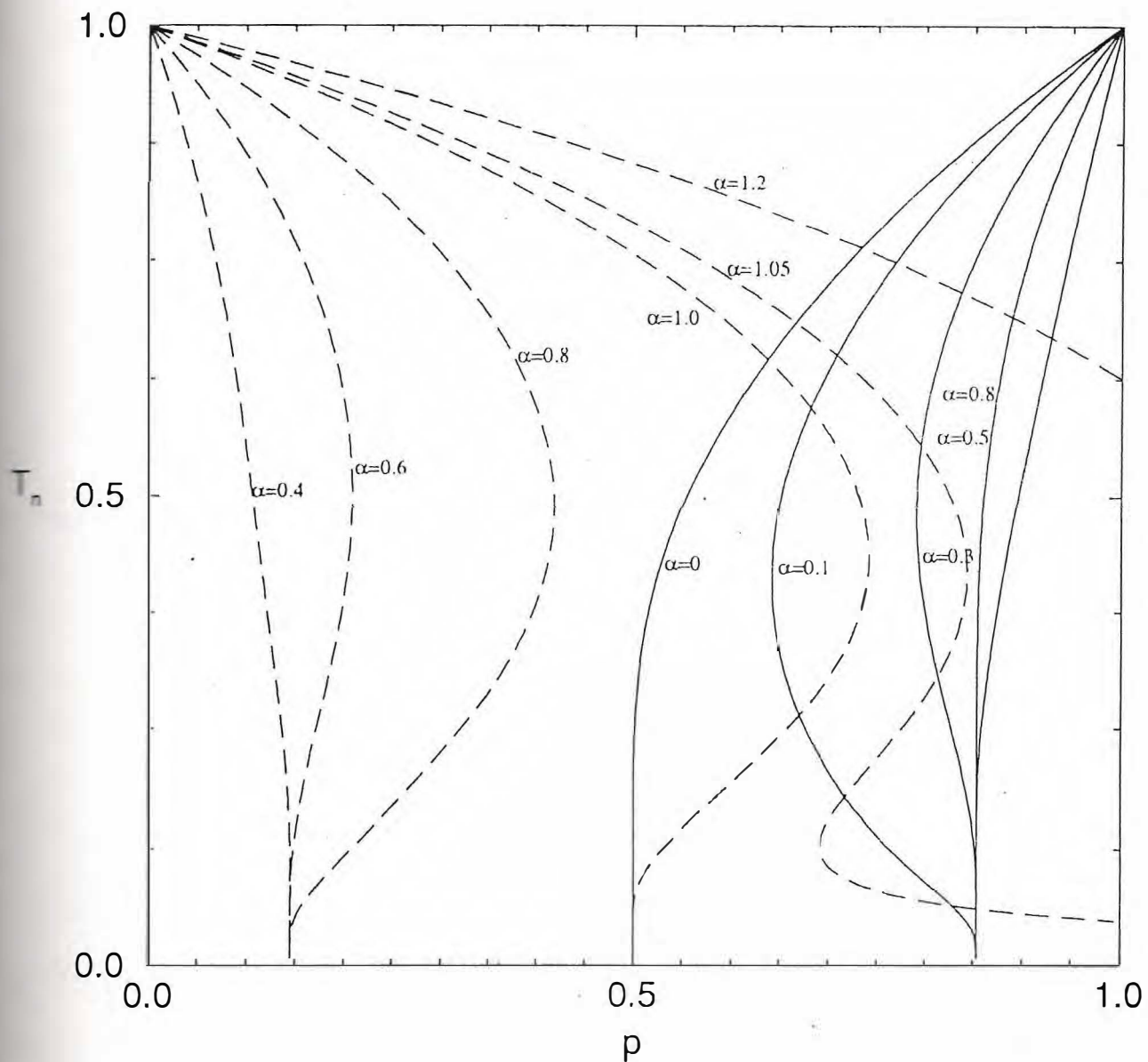


Fig. 1.1 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=1/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

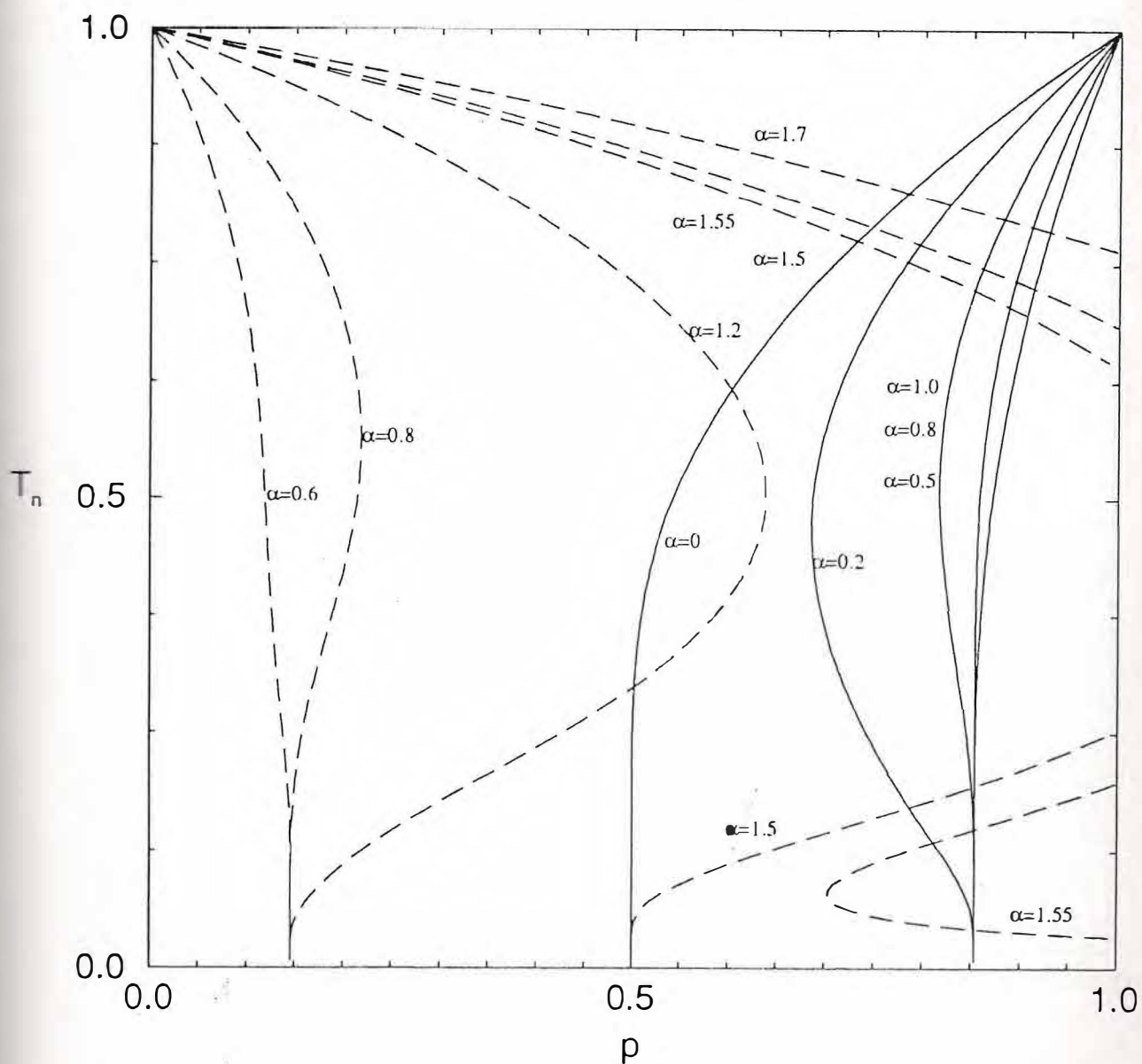


Fig. 1.2 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=1/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

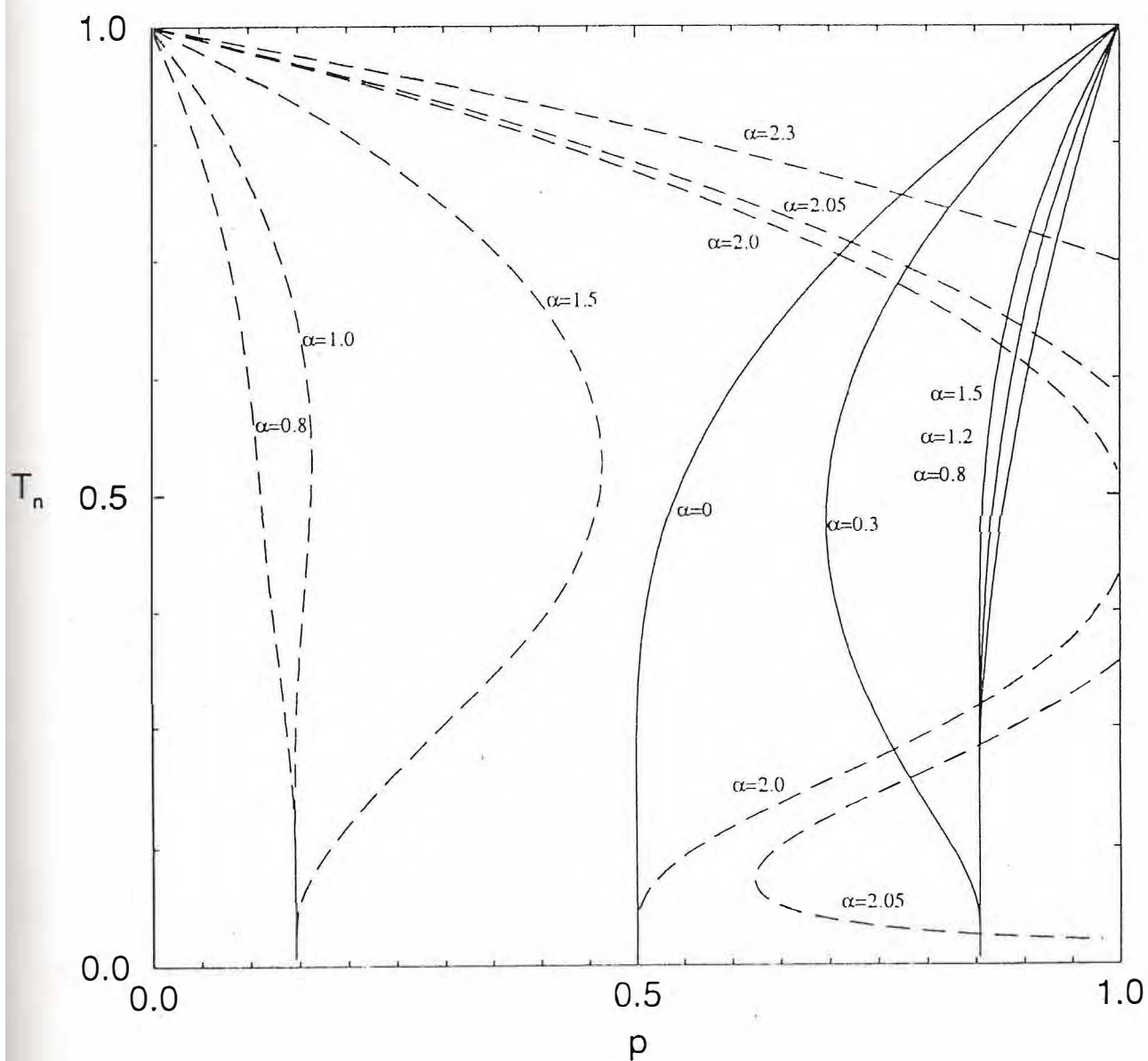


Fig. 1.3 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=1$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

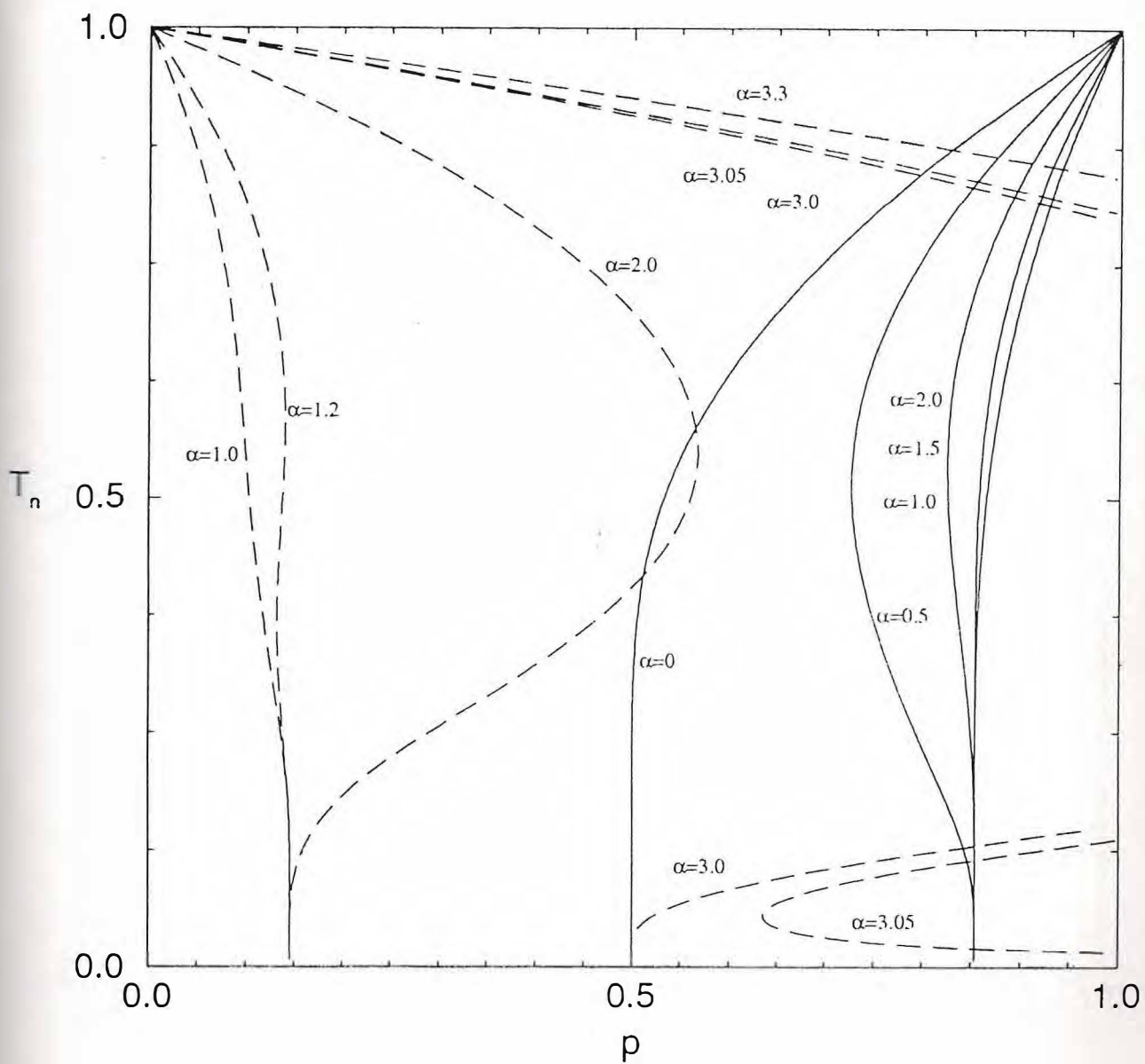


Fig. 1.4 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\gamma = 0.5$, $\delta = 1.5$, $s = 1$ e $M = 3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

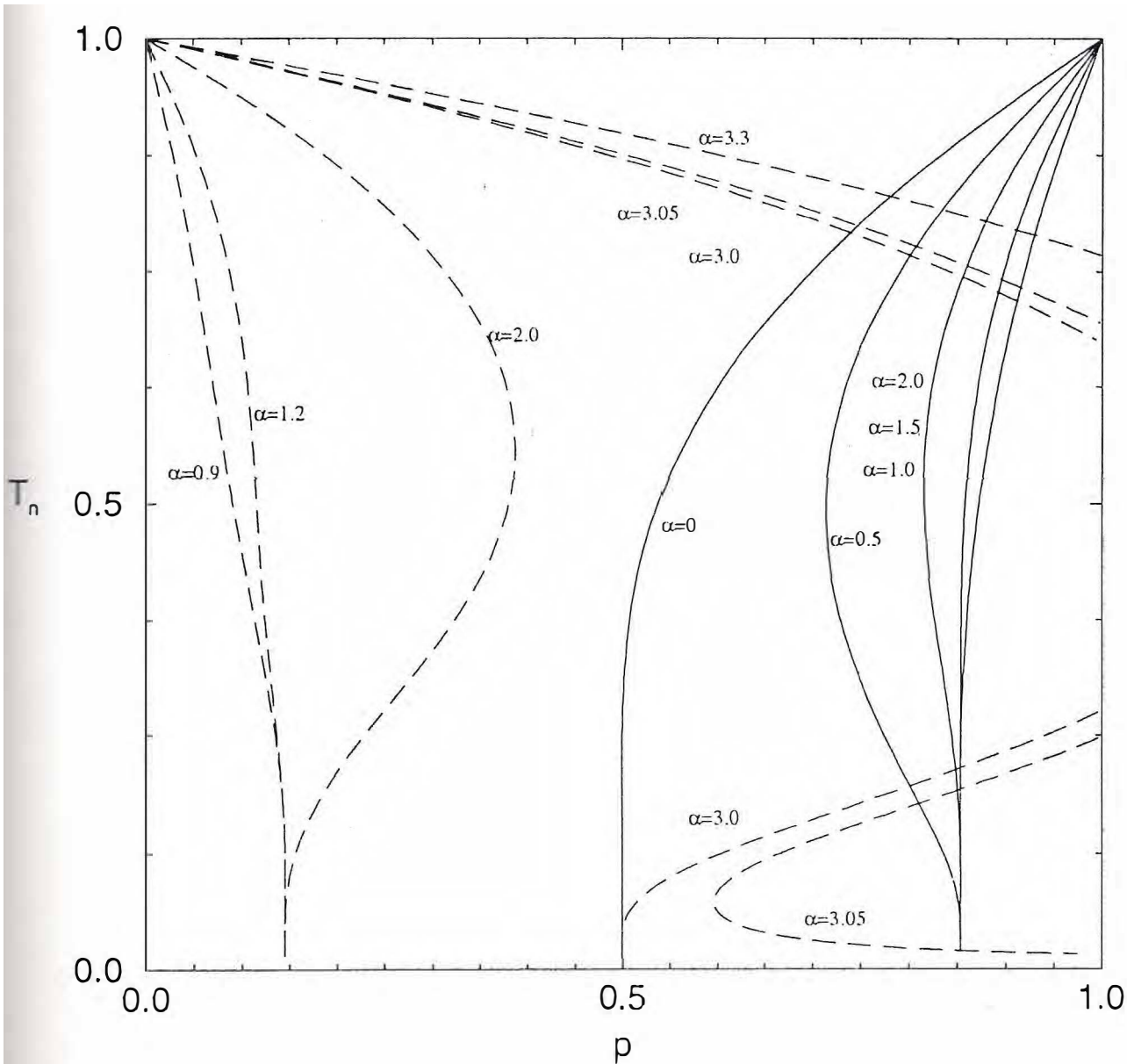


Fig. 1.5 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=3/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

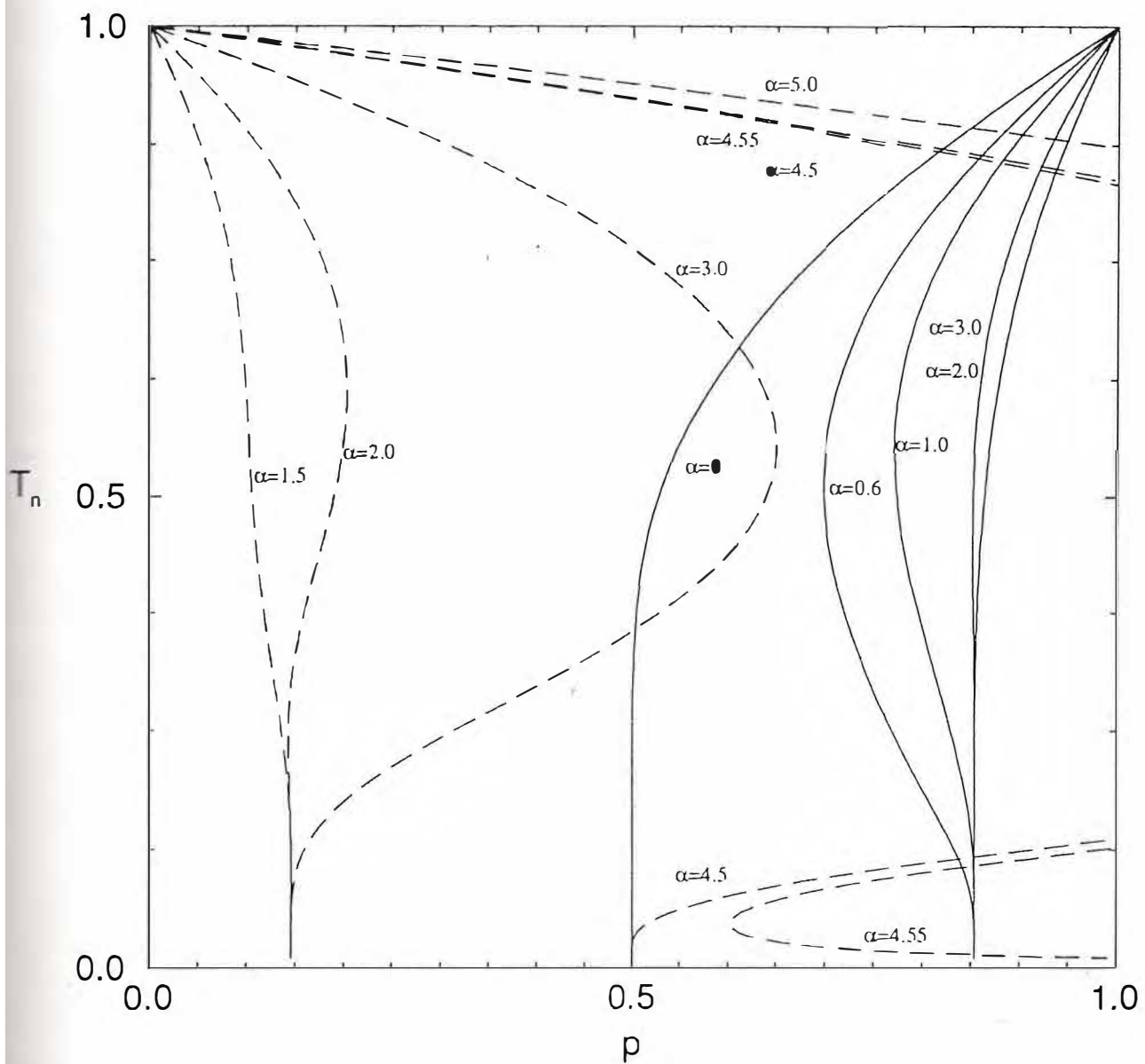


Fig. 1.6 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=3/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

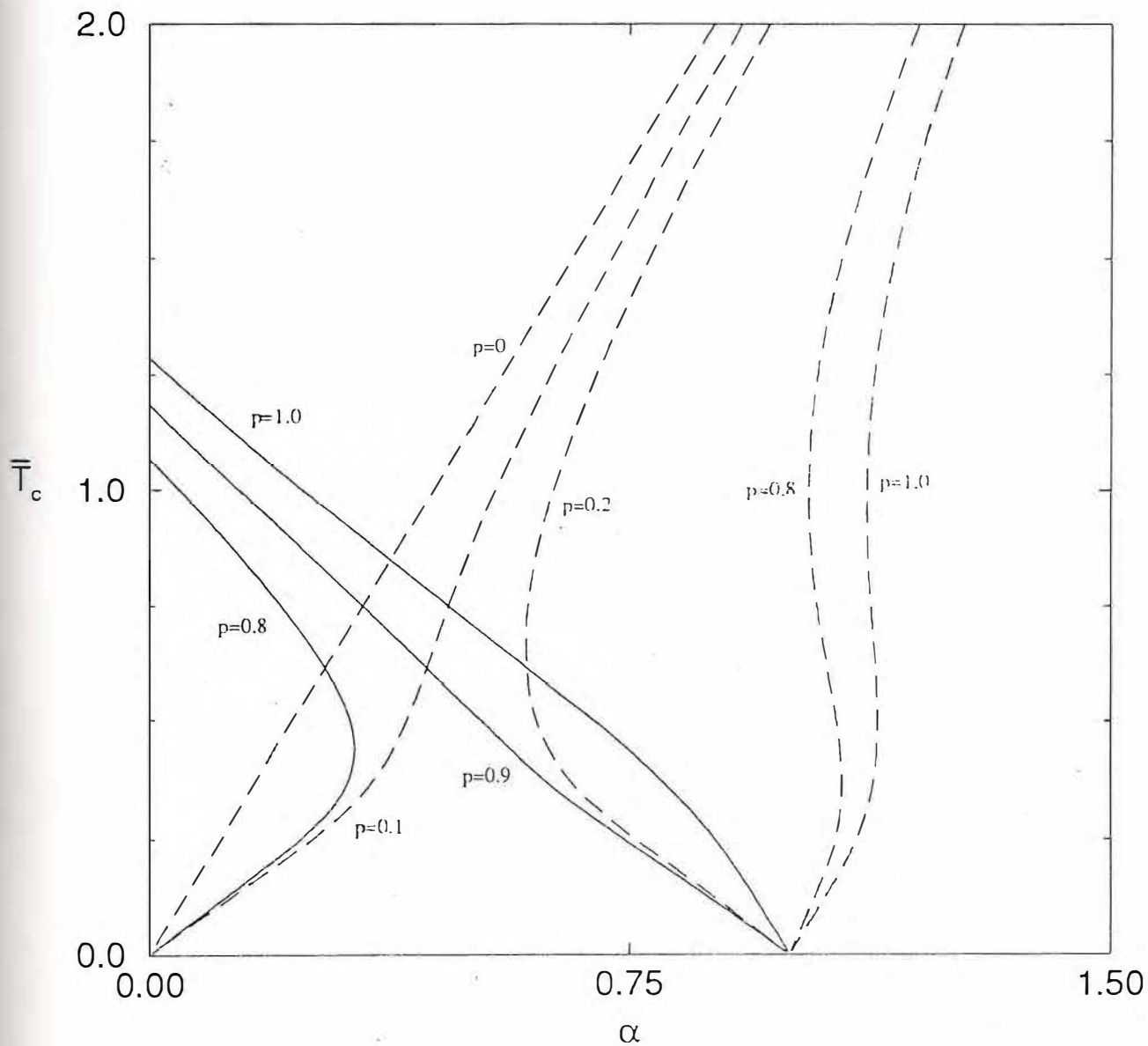


Fig. 1.7 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=1/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

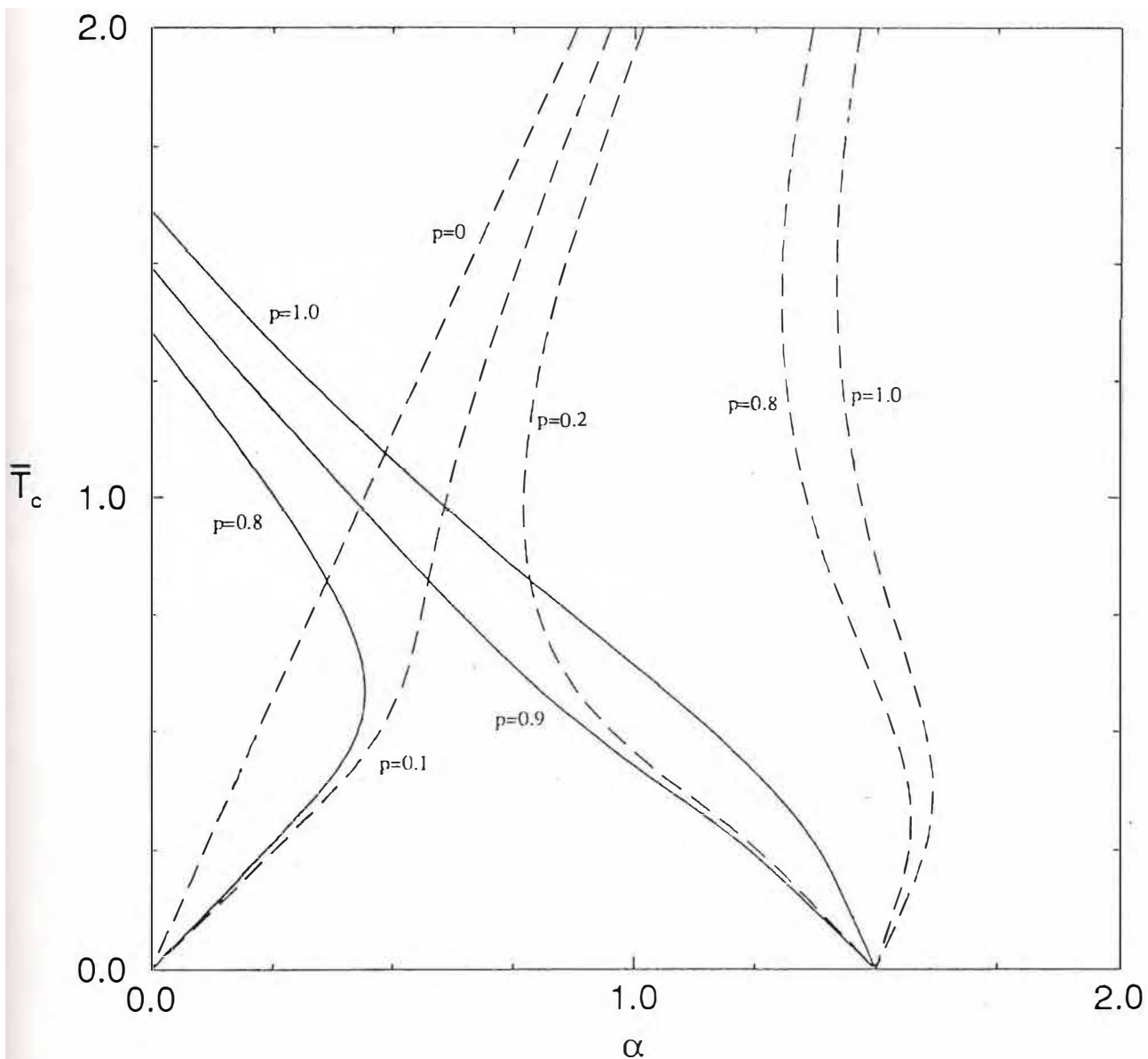


Fig. 1.8 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=1/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

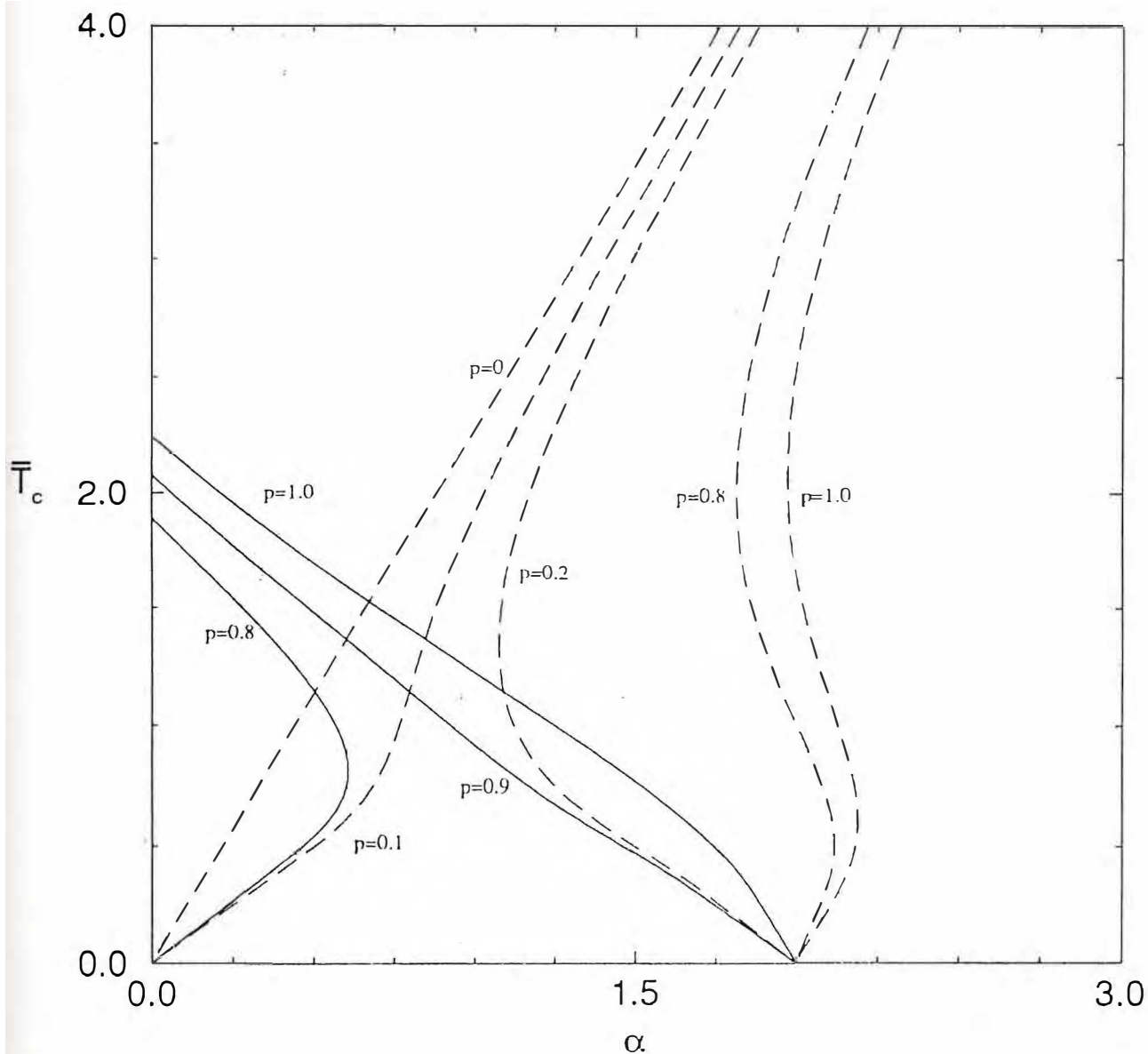


Fig. 1.9 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=1$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

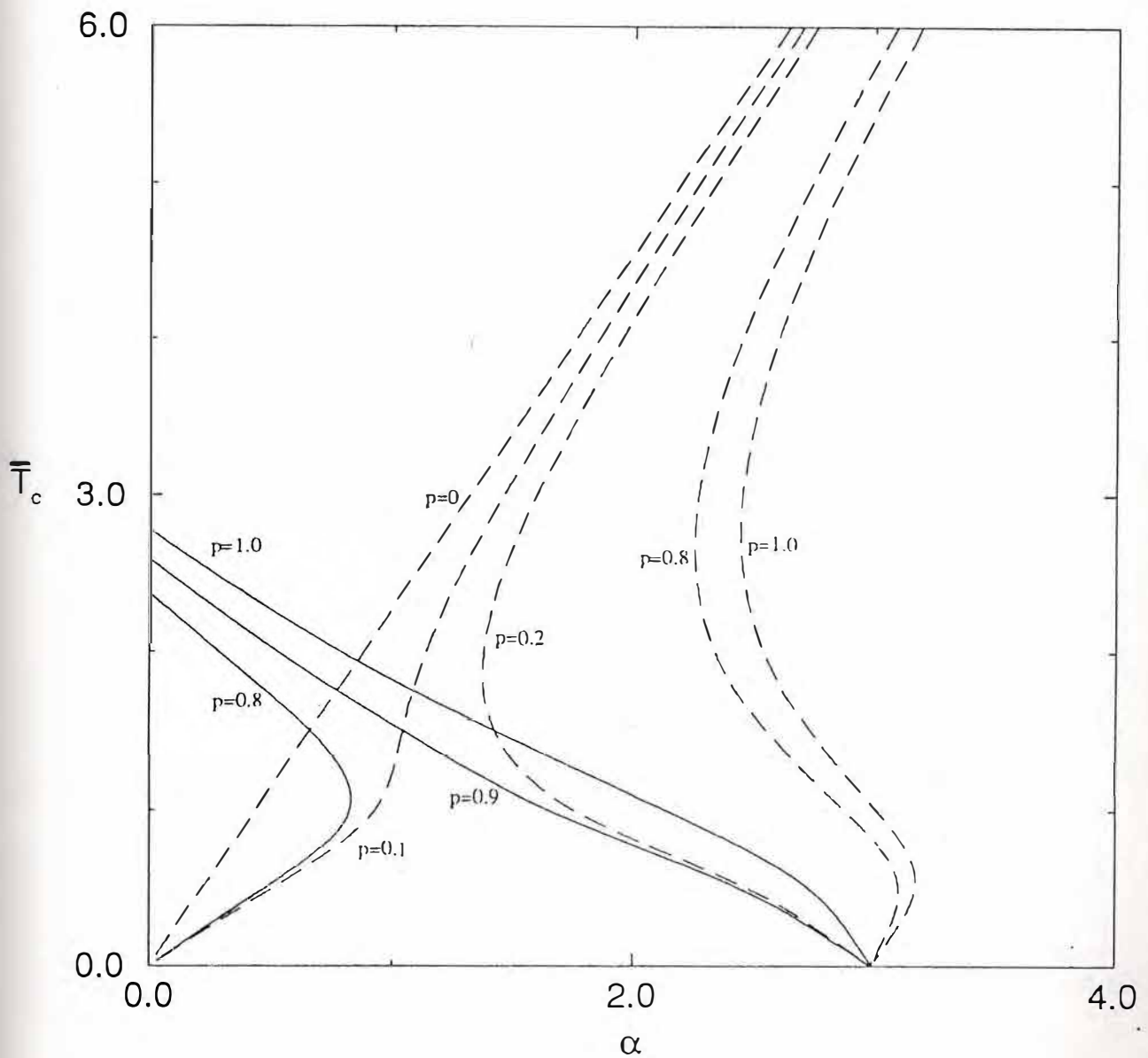


Fig. 1.10 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=1$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

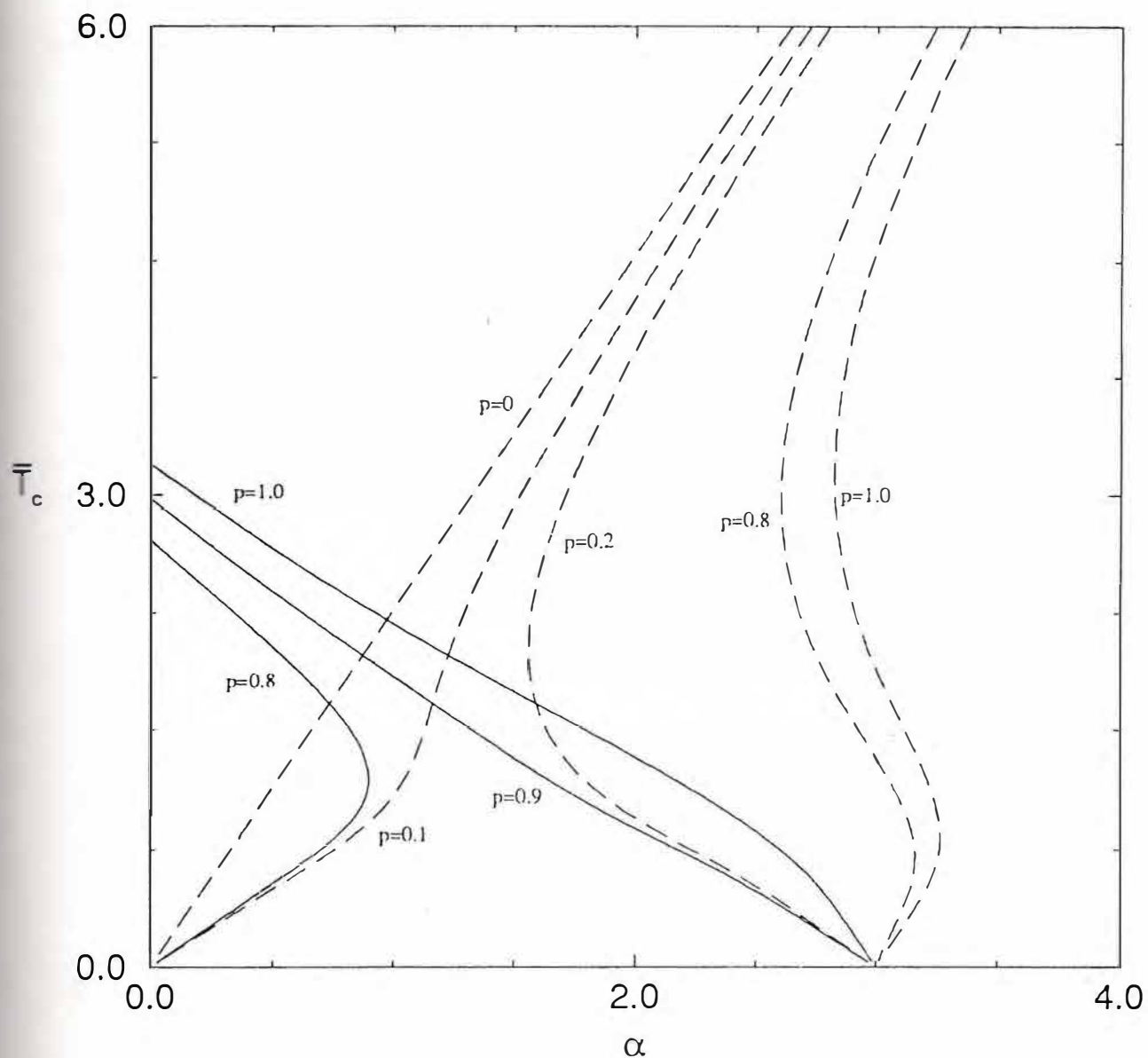


Fig. 1.11 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=3/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

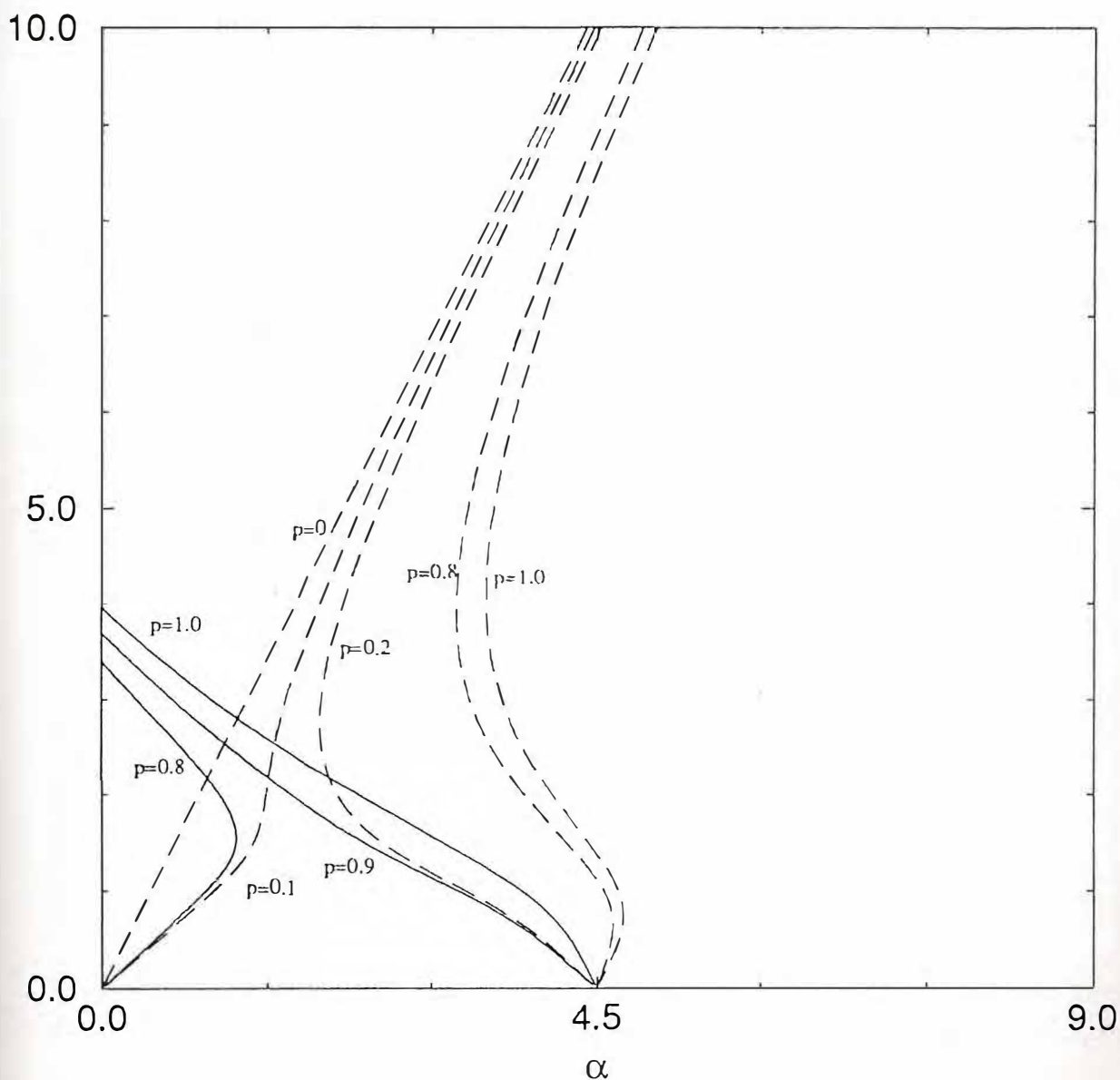


Fig. 1.12- Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\gamma=0.5$, $\delta=1.5$, $s=3/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

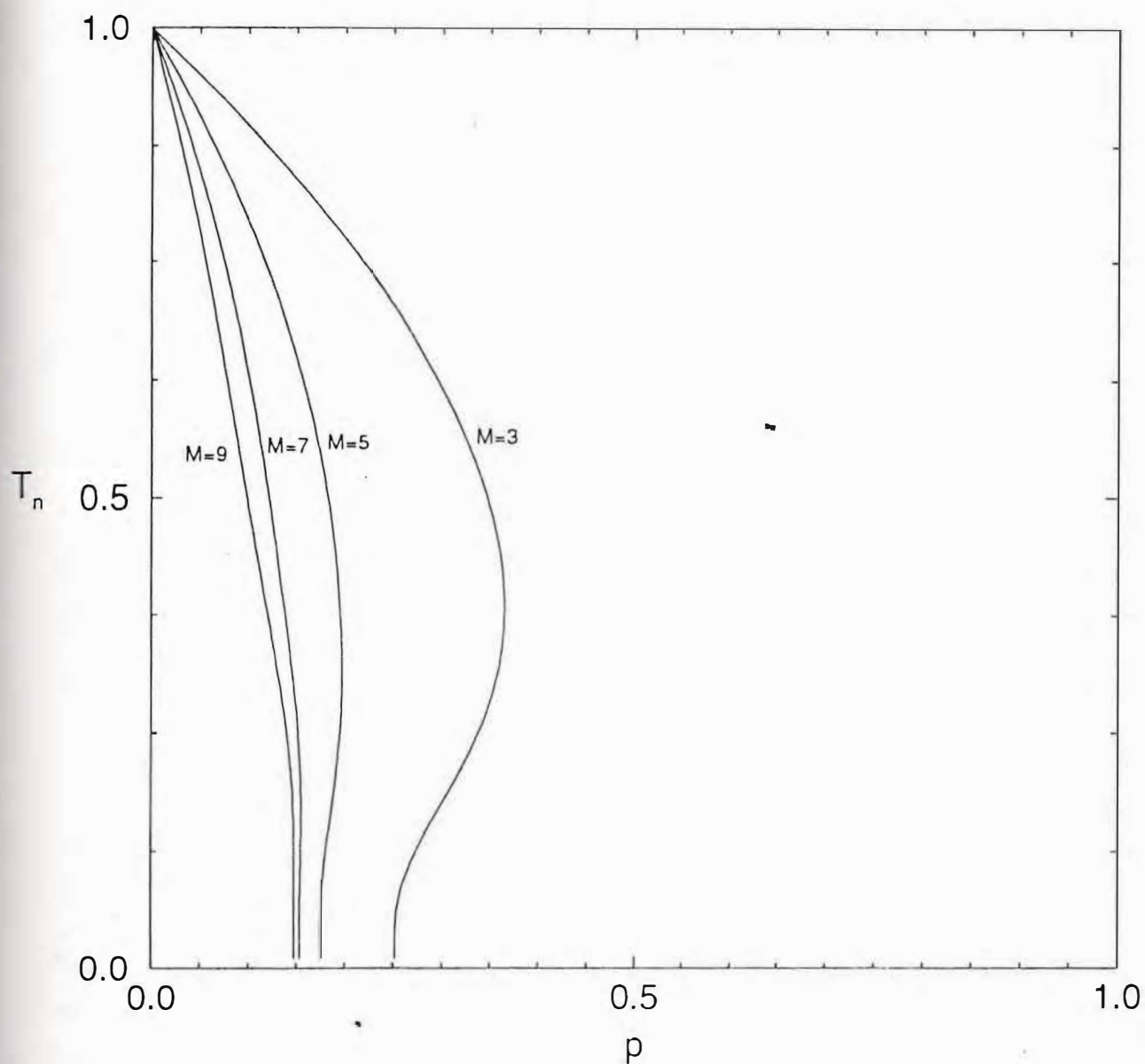


Fig. 1.13 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para $\alpha = \alpha_c = 0.75$ ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\gamma = -0.5$, $\delta = 0.5$, $s = 3/2$ e vários valores de M . As curvas definem as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

2.1 INTRODUÇÃO

O modelo estudado no capítulo anterior, com a presença de anisotropia uniaxial é objeto de estudo neste capítulo. A solução exata para o sistema pode ser obtida de maneira análoga àquela obtida para o modelo sem anisotropia uniaxial, isto é, mapeando-o num modelo de Ising efetivo bidimensional. Este modelo, para $M=1$, foi recentemente estudado por Coutinho et al. (1993) para diferentes valores de s .

Considera-se neste capítulo o modelo com M arbitrário constituindo uma extensão do resultado acima mencionado. O diagrama de fase é determinado usando-se a solução exata obtida para M arbitrário e $s=1$ e $3/2$, sendo apresentado resultados explícitos para $M=2$ e 3 . Na seção 2.2 é obtida a solução para modelo e na 2.3 são apresentados os resultados.

2.2 A SOLUÇÃO DO MODELO

A Hamiltoniana para este caso, usando-se condições de contorno periódicas tanto para a rede bi-dimensional quanto para a cadeia de spins que decora uma dada ligação, é definida por:

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{(ij)} \bar{J} (\sigma_{ij} \sigma_{i+1j} + \sigma_{ij} \sigma_{i+1j}) - \sum_{(ij)} t_{ij, i+1j} \left\{ \sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} X \right. \\
 & X (\sigma_{ij} + \delta \sigma_{i+1j}) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} \bar{\sigma}_{k+1} + \sum_{k=1}^M D \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j}^2 + \mu \left. \right\} - \\
 & - \sum_{(ij)} t_{ij, i+1j} \left\{ \sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} (\sigma_{ij} + \delta \sigma_{i+1j}) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j} \bar{\sigma}_{k+1} + \right. \\
 & \left. + \sum_{k=1}^M D \bar{\sigma}_{k, ij, i+1j}^2 + \mu \right\} , \tag{2.1}
 \end{aligned}$$

onde, como no caso anterior, $\sigma_{ij} = \pm 1$, $t_{ij, i'j'} = 0, 1$ é a variável de decoração de cada ligação, $\bar{\sigma}_k$ é um spin de Ising de magnitude s , δ e γ são parâmetros arbitrários e μ é o pseudo-potencial químico que controla o número de ligações decoradas e D é a constante de anisotropia.

A função de partição é obtida seguindo o mesmo procedimento usado no Capítulo 1. Portanto, efetuando-se a decimação da variável t_{ij} para uma dada ligação conectando os sítios designados por i, j , fazendo-se uso da notação simplificada, obtém-se:

$$\sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left\{ \beta t_{ij} \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k,ij} (\sigma_i + \delta \sigma_j) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + \sum_{k=1}^M D \bar{\sigma}_{k,ij}^2 + \mu \right] \right\} =$$

$$= (2s+1)^M + z \sum_{\{\bar{\sigma}\}} \exp \left[\tilde{K} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + h_{ij} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} + \tilde{D} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij}^2 \right], \quad (2.2)$$

onde $\tilde{K} = \gamma K$, $K = \beta J$, $h_{ij} = (\sigma_i + \delta \sigma_j) K$, $\tilde{D} = \omega K$ ($\omega = D/J$) e $z = \exp(\beta \mu)$ é a fugacidade. Analogamente ao caso anterior, para obter-se o traço parcial sobre as variáveis $\bar{\sigma}$ indicado na equação (2.2), será utilizado o método da matriz de transferência (McCoy e Wu, 1973), cujos elementos são definidos por:

$$\langle \bar{\sigma}_{k,ij} | T_{ij} | \bar{\sigma}_{k-} \rangle = e^{\tilde{K} \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k-} + h_{ij} (\bar{\sigma}_{k,ij} + \bar{\sigma}_{k-}) / 2 + \tilde{D} (\bar{\sigma}_{k,ij}^2 + \bar{\sigma}_{k-}^2) / 2}, \quad (2.3)$$

onde T_{ij} é a matriz de transferência associada à ligação ij , cuja ordem é $2s+1$.

A diagonalização da matriz de transferência T_{ij} , que permite calcular a expressão anterior, é apresentada no apêndice A onde são considerados, como no caso sem anisotropia uniaxial, apenas três valores para s , $s \leq 3/2$.

Usando-se os resultados obtidos nas eqs. (A.18)-(A.20) para $s=1$ e (A.33)-(A.36) para $s=3/2$, a eq. (2.3) pode ser escrita na forma:

$$\sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left[\beta t_{ij} \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k, ij} (\sigma_i + \delta \sigma_j) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k, ij} \bar{\sigma}_{k+1} + \sum_{k=1}^M D \bar{\sigma}_{k, ij}^2 + \mu \right] \right] =$$

$$= r_M e^{\beta J'_M \sigma_i \sigma_j} \quad , \quad (2.4)$$

com r_M e J'_M sendo definidos por:

$$r_M = \sqrt{f_M(h^+) f_M(h^-)} \quad , \quad (2.5)$$

$$J'_M = \frac{k_B T}{2} \ln \left[\frac{f_M(h^+)}{f_M(h^-)} \right] \quad , \quad (2.6)$$

onde $f_M(x)$ e h^\pm são dados pelas eqs. (1.9) e (1.10) respectivamente, e os autovalores de T_{ij} , λ_m , são dados pelas equações (A.18)-(A.20) para $s=1$ e (A.3)-(A.36) para $s=3/2$.

Usando-se os resultados anteriores conclui-se que o modelo é mapeado num modelo de Ising efetivo na rede quadrada, cuja Hamiltoniana é dada por:

$$H^* = - \sum_{(ij)} J_{eff} (\sigma_{ij} \sigma_{i,j+1} + \sigma_{ij} \sigma_{i+1,j}) \quad , \quad (2.7)$$

onde

$$J_{\text{eff}} = \bar{J} + J'_M \quad (2.8)$$

A fugacidade é obtida considerando-se a eq.(1.14), sendo a média térmica da variável de decoração t_{ij} obtida usando-se o mesmo procedimento do capítulo anterior. Deste modo, para uma determinada ligação ij , considerando-se o traço parcial sobre as variáveis $\bar{\sigma}$ e t_{ij} obtém-se:

$$\begin{aligned} \sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left[t_{ij} \left(\bar{K} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + h_{ij} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} + \bar{D} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij}^2 + \mu \right) \right] t_{ij} = \\ = r_M e^{\beta J'_M \sigma_i \sigma_j} \left(\bar{x}_1 \sigma_i \sigma_j + \bar{x}_2 \right) \quad (2.9) \end{aligned}$$

onde \bar{x}_1 e \bar{x}_2 são definidos pelas eqs.(1.16) e (1.17), respectivamente. Operando-se com as equações (2.4), (1.14) e (2.9), tem-se:

$$p = \bar{x}_1 \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\text{eff}} + \bar{x}_2 = \bar{x}_1 \varepsilon + \bar{x}_2 \quad (2.10)$$

onde $\varepsilon = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\text{eff}}$ é a função de correlação entre dois spins vizinhos mais próximos na rede efetiva do modelo bidimensional.

A temperatura de transição é então obtida utilizando-se a solução de Onsager (1944) :

$$\sinh 2\beta \left[J_{\text{eff}}^c(\bar{J}, J_M', z) \right] = \pm 1 \quad , \quad (2.11)$$

que corresponde a

$$\beta J_{\text{eff}}^c = K_{\text{eff}}^c = \frac{1}{2} \ln \left(\sqrt{2} \pm 1 \right) \quad , \quad (2.12)$$

onde a fugacidade é definida pela equação (2.10). O sinal positivo está associado a fase ferromagnética e o sinal negativo a fase antiferromagnética.

Usando-se as equações (2.6), (2.8) e (1.8-1.10), onde foi eliminada a fugacidade, pode-se então escrever que a temperatura crítica é dada pela equação:

$$p = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{e^{-2\alpha K_c}}{t} \right) \frac{(1 + \varepsilon_c) X_M(h^+) + t(1 - \varepsilon_c) X_M(h^-) e^{2\alpha K_c}}{X_M(h^+) - X_M(h^-)} \quad , \quad (2.13)$$

onde

$$t = \exp(2K_{\text{eff}}^c) = \sqrt{2} \pm 1 \quad , \quad \varepsilon_c = \pm \frac{\sqrt{2}}{2} \quad , \quad (2.14)$$

onde ε_c é a função de correlação para $T=T_c$ (T_c é a temperatura crítica).

2.3 RESULTADOS

Como no caso anterior, das equações (2.8)-(2.10) conclui-se que para se introduzir competição no sistema, a fim de obter-se as fases ferromagnética e antiferromagnética, deve-se utilizar também sinais opostos para \bar{J} e J_M' independente do sinal de J . O parâmetro de competição α , introduzido no Cap.1 e igual a $-\bar{J}/|J|$, é considerado positivo para $\delta > 0$, e negativo para $\delta < 0$. Como no Capítulo 1, para $\delta = 0$, tem-se $J_{eff} = \bar{J}$, portanto, neste caso reproduz-se os resultados obtidos por Onsager(1944).

A Hamiltoniana definida pela equação (2.1) exibe a mesma invariância da Hamiltoniana do modelo anterior, e os resultados para o modelo como no caso previamente estudado, se restringem ao caso $\alpha > 0$ e $\delta > 0$.

Os parâmetros críticos do modelo, p_c e α_c , são obtidos usando-se o mesmo procedimento adotado no Cap.1., isto é, tomando-se o limite $T_c \rightarrow 0$ na equação (2.13), e são apresentados no apêndice B. Tais resultados para a concentração crítica, dependem dos parâmetros que caracterizam o modelo somente para $\alpha = \alpha_c$. Para $\alpha \neq \alpha_c$ os resultados obtidos são idênticos aos obtidos no modelo anterior. Desta forma, obtém-se:

$$p_{1c} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad \text{para } 0 < \alpha < \alpha_c \quad (\text{caso antiferro}) \quad , \quad (2.15)$$

$$p_{2c} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad \text{para } 0 < \alpha < \alpha_c \quad (\text{caso ferro}) \quad , \quad (2.16)$$

$$p_{3c} = \frac{1}{2} \quad \text{para } \alpha = 0 \quad (\text{caso ferro}) \quad . \quad (2.17)$$

Para $\alpha=\alpha_c$ o sistema apresenta ordem somente na fase antiferromagnética. Quando existe concentração crítica, esta apresenta dependência nos parâmetros s , M , δ , γ e ω , apenas quando $\omega+2\gamma+(1+\delta)\leq 0$ para $s=1$, e $2\omega+3\gamma+(1+\delta)\leq 0$ para $s=3/2$. Quando $\omega+2\gamma+(1-\delta)>0$ e $s=1$, $2\omega+3\gamma+(1-\delta)>0$ e $s=3/2$, os resultados dependem exclusivamente de δ , e a concentração crítica é definida por:

$$p_{4c} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } \delta \neq 1 \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \right) & \text{para } \delta = 1 \end{cases} \quad (2.18)$$

Os resultados para a concentração crítica $p_{1c}=0.1464\dots$, $p_{2c}=0.8535\dots$ e $p_{3c}=1/2$ (obtida para $\alpha=0$ correspondendo a concentração de percolação encontrada por (Syozzi, 1965), são dados pelas eqs.(2.15)-(2.18), como no caso anterior podem ser considerados como universais visto que independem da decoração.

A solução da equação (2.13) foi obtida considerando-se valores positivos e negativos para γ e ω . Somente são apresentados resultados para $\omega>0$ ($\omega=0.5$) e $\gamma=\pm 0.5$ em virtude dos mesmos apresentarem as características mais importantes do modelo. Os resultados, como no Cap.1., não mostraram diferenças qualitativas ao ser variado o parâmetro δ , sendo escolhido o valor $\delta=1.5$. Para $M=1$, os resultados são idênticos aos obtidos por Coutinho et al. (1993).

Nas Figs. 2.1-2.8, a temperatura crítica é considerada como uma função da concentração p , para $s=1$ e $3/2$ para $M=2$ e 3 , $\gamma=\pm 0.5$ e

alguns valores do parâmetro de competição α . A partir dos resultados encontrados nota-se que independente dos valores de s e M a fase ferromagnética é estável para $p_{2c} < p < 1$, entretanto, para $p_{3c} < p < p_{2c}$ a fase ferromagnética exibe o fenômeno de reentrância para determinados valores do parâmetro de competição α ($0 < \alpha < \alpha_c$). Contudo, para $\alpha = 0$ a fase ferromagnética é estável para $p_{3c} < p < 1$ independentemente dos parâmetros. Verifica-se ainda que para $\alpha > \alpha_c$ a fase antiferromagnética é estável independentemente de s e M , para qualquer valor de p , e para $0 < \alpha < \alpha_c$ o sistema apresenta ordem no estado fundamental apenas para $0 < p \leq p_{1c}$, apresentando porém, comportamento multi-reentrante para $0.5 < p < 1$, para $\gamma > 0$, e para $\gamma < 0$ tal comportamento existe apenas para $M=2$ e $s=1$.

Nas Figs. 2.9 - 2.16, a temperatura crítica é plotada como uma função do parâmetro de competição α , para $s=1$ e $3/2$ para $M=2$ e 3 , $\gamma = \pm 0.5$ e alguns valores da concentração p . Nota-se que independentemente dos valores de M e s , o estado fundamental da fase ferromagnética é estável quando $0 < \alpha < \alpha_c$ para $p_{2c} < p \leq 1$ e para $p_{3c} < p \leq p_{2c}$ o estado fundamental é instável, apresentando o sistema comportamento reentrante. Por outro lado, o estado fundamental da fase antiferromagnética também é estável independentemente dos valores de s e M , para $0 < \alpha < \alpha_c$ e $0 \leq p \leq p_{1c}$, e para $\alpha > \alpha_c$ quando $p_{2c} < p \leq 1$. Entretanto, para $\alpha > \alpha_c$ um comportamento multi-reentrante está presente no estado fundamental antiferromagnético para $\gamma > 0$, e para $\gamma = -0.5$, $s=1$ e $M=2$.

Nas Figs. 2.17 - 2.20, a temperatura crítica é dada como uma função da concentração p , para $\alpha = \alpha_c$, quando $\delta = 0.5$, $\gamma = -0.5$, $\omega = -0.5$ ou $\delta = 2.0$, $\gamma = -0.5$, $\omega = -0.75$, para $s=1$ e $3/2$ e $M=2$ e 3 . Os resultados apresentados mostram a dependência da concentração crítica com os

vários parâmetros, o que caracteriza um comportamento não-universal. Deve ser notado que enquanto para $D \neq 0$ as concentrações críticas apresentaram um comportamento não-universal para $s \geq 1/2$, para $D=0$ este comportamento somente foi verificado para $s=3/2$.

Convém salientar também que os resultados obtidos para $M > 3$ como no caso anterior, são semelhantes aos apresentados nas Figs. 2.1-2.20 para $M \leq 3$.

Nas regiões onde o sistema apresenta comportamento reentrante, o ponto crítico reentrante do contorno de fase para os diagramas mostrados nas Figs. 2.1-2.20, pode ser determinado usando-se o mesmo procedimento utilizado no caso anterior.

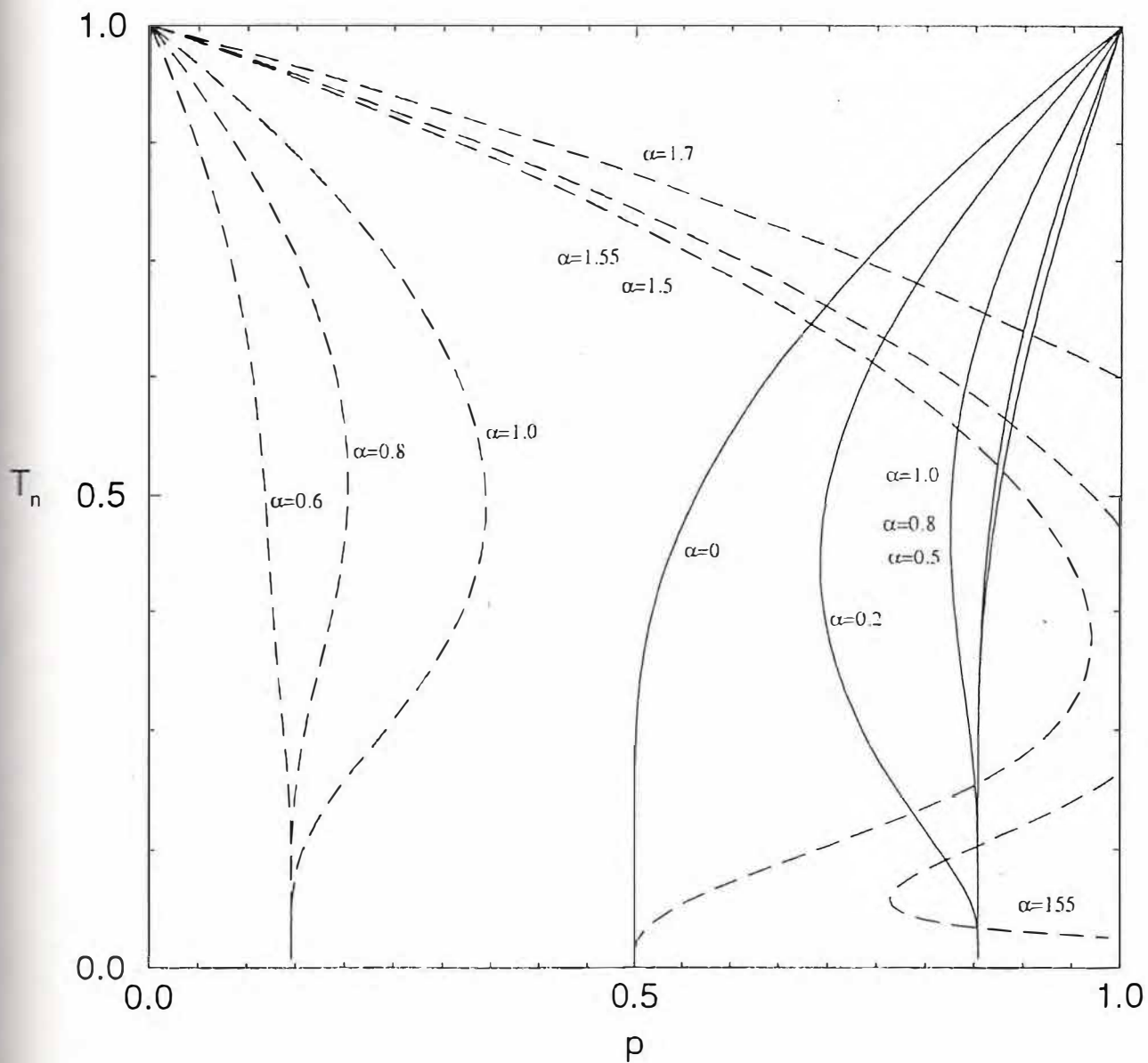


Fig. 2.1 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=1$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

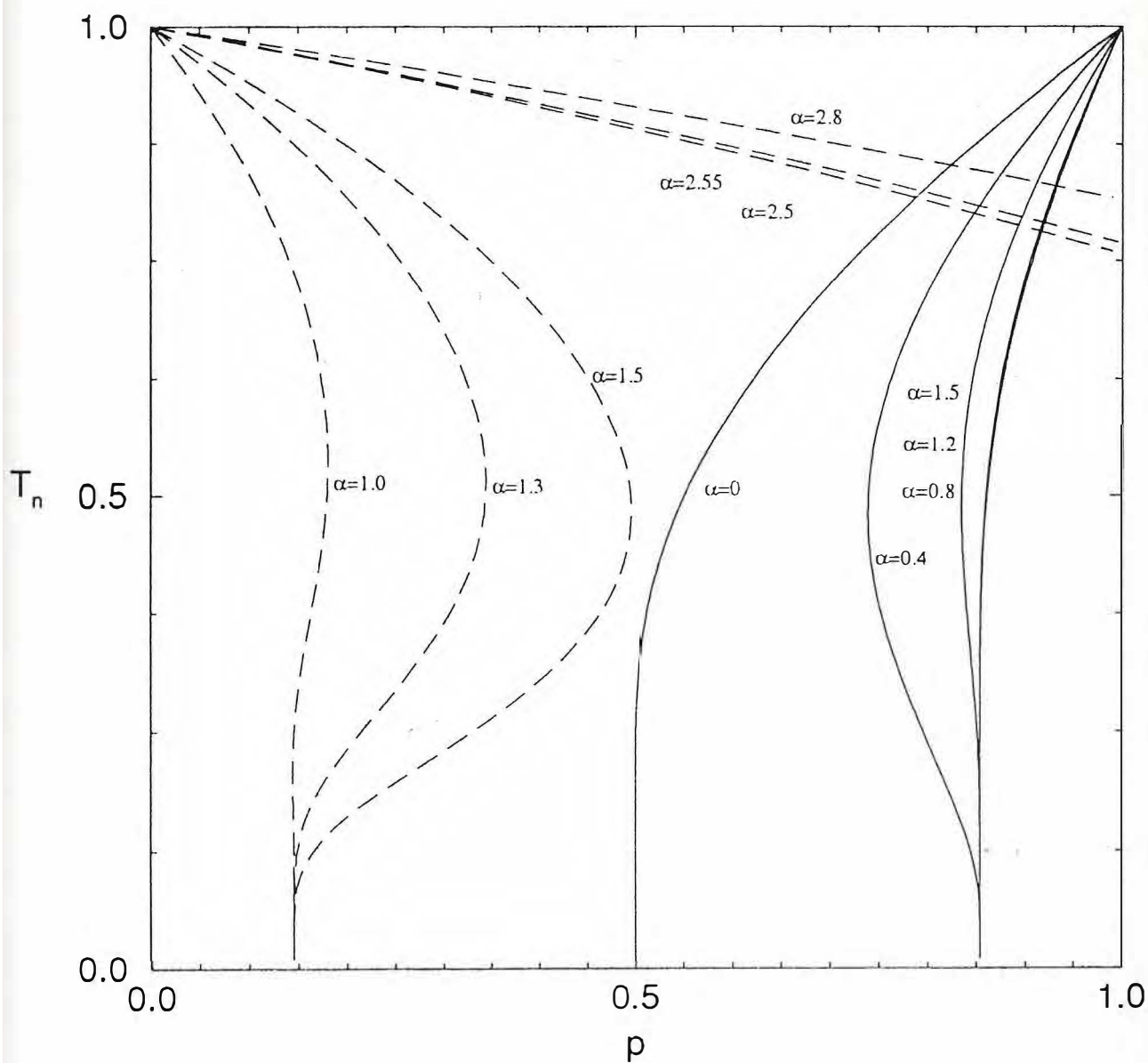


Fig. 2.2 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=1$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

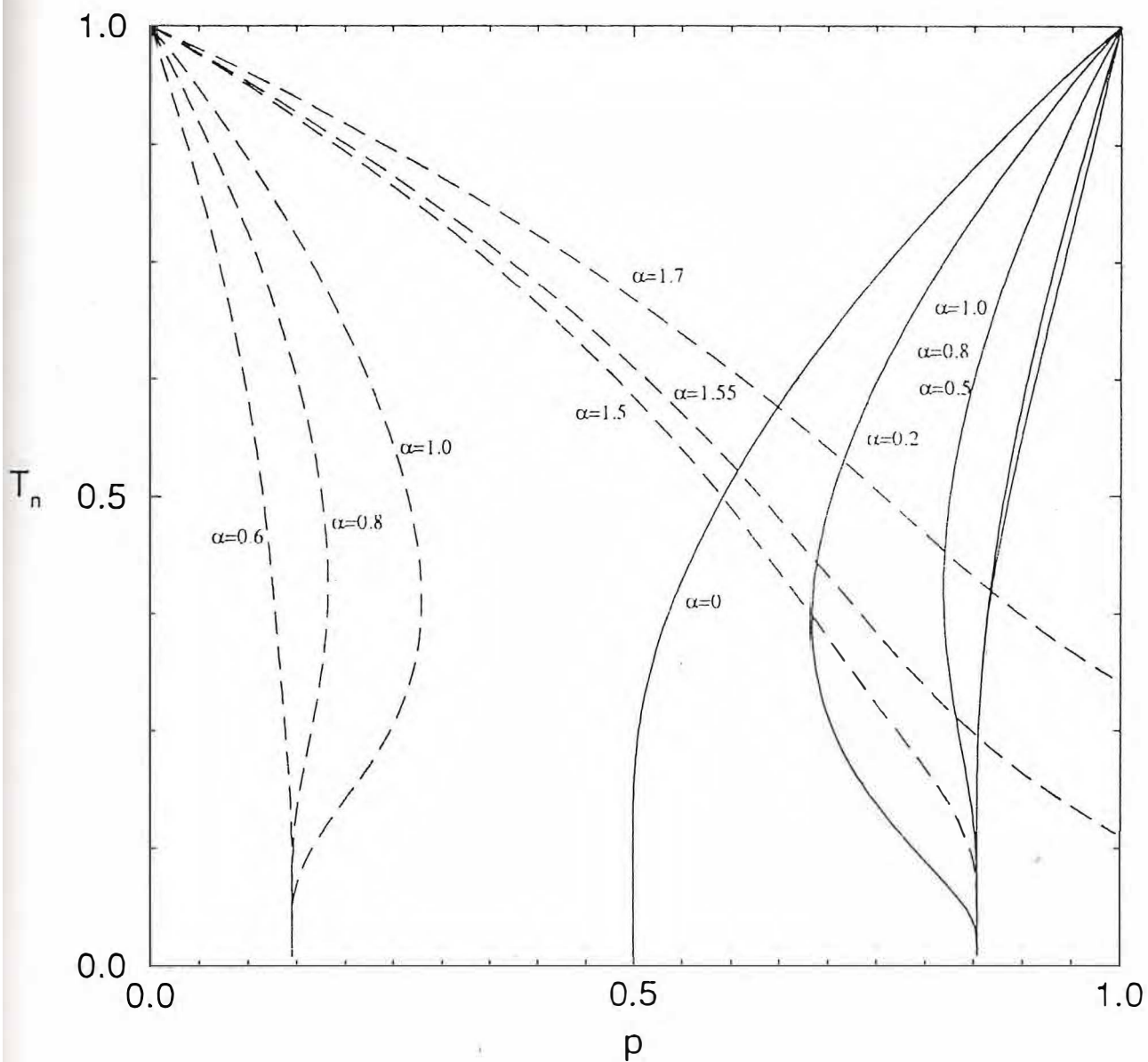


Fig. 2.3 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=3/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

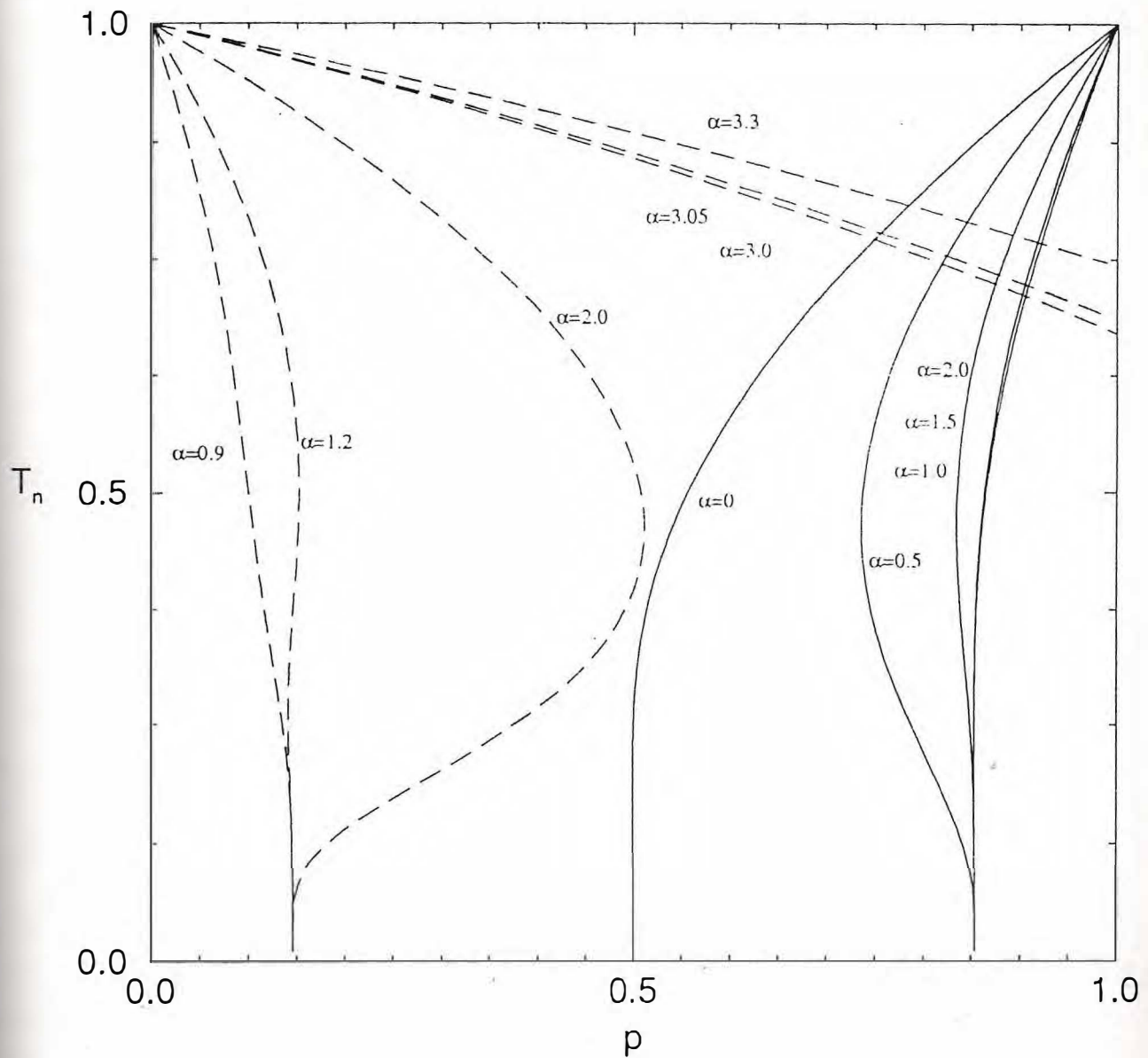


Fig. 2.4 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=3/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

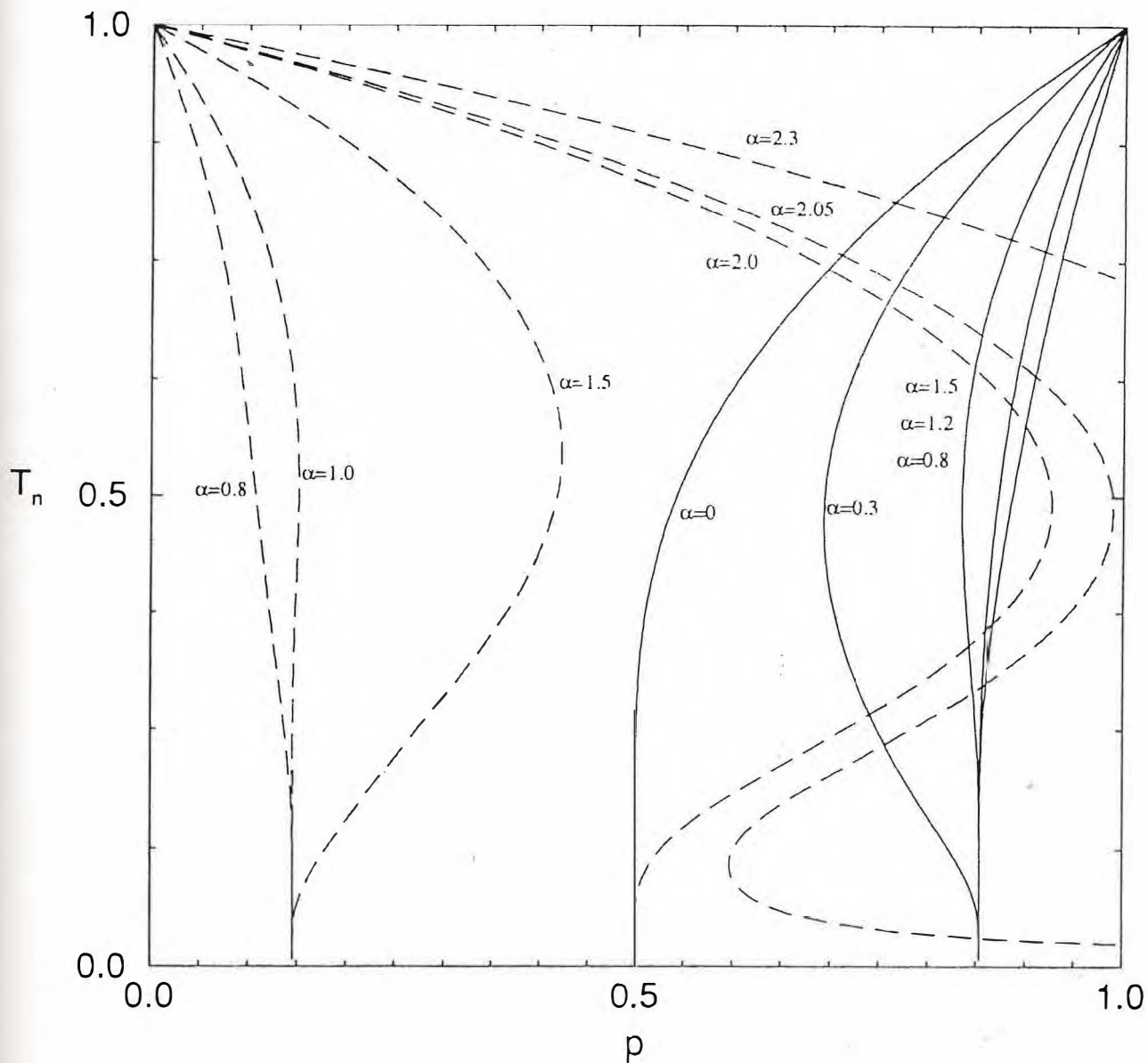


Fig. 2.5 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=1$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

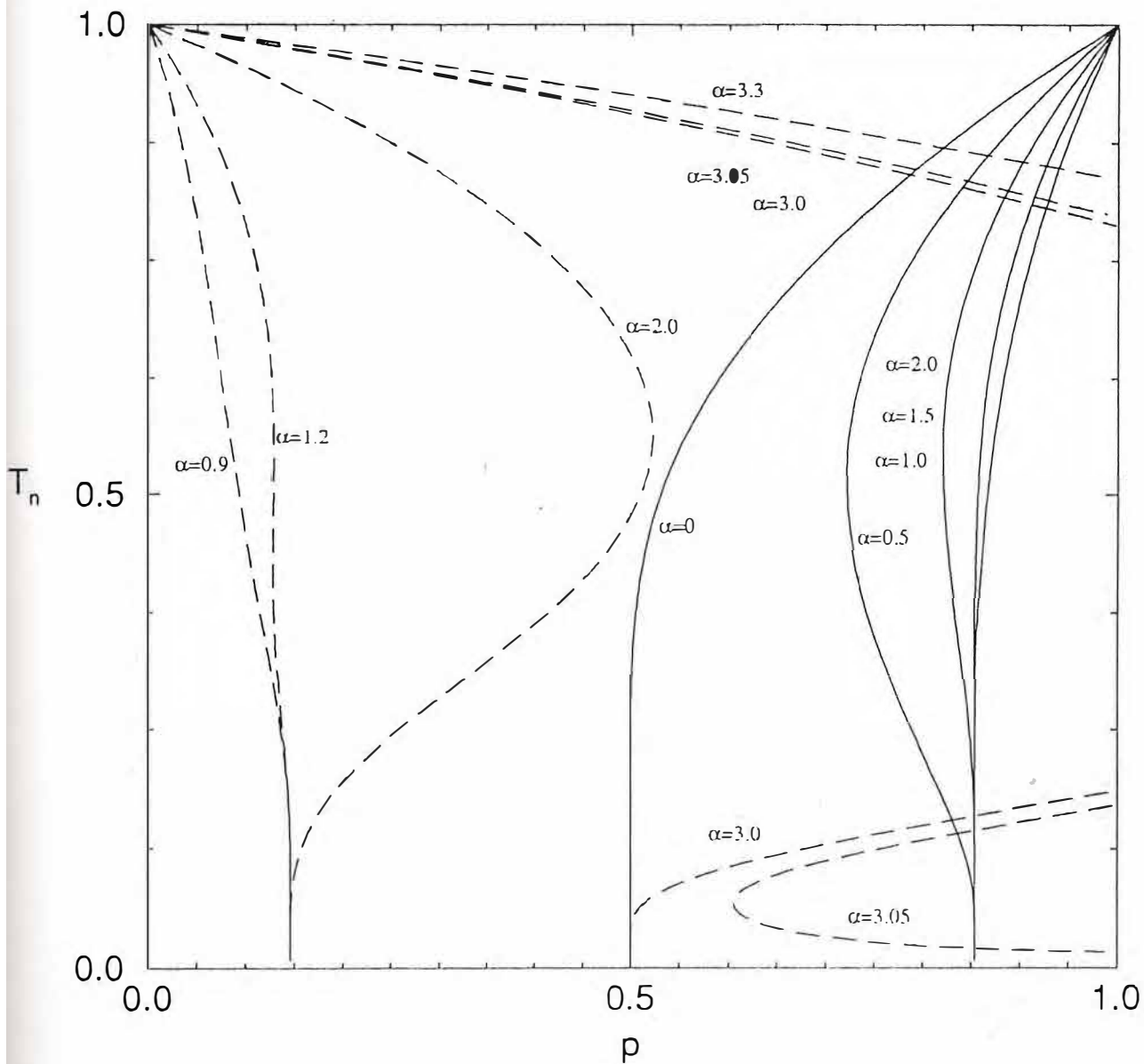


Fig. 2.6 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=1$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

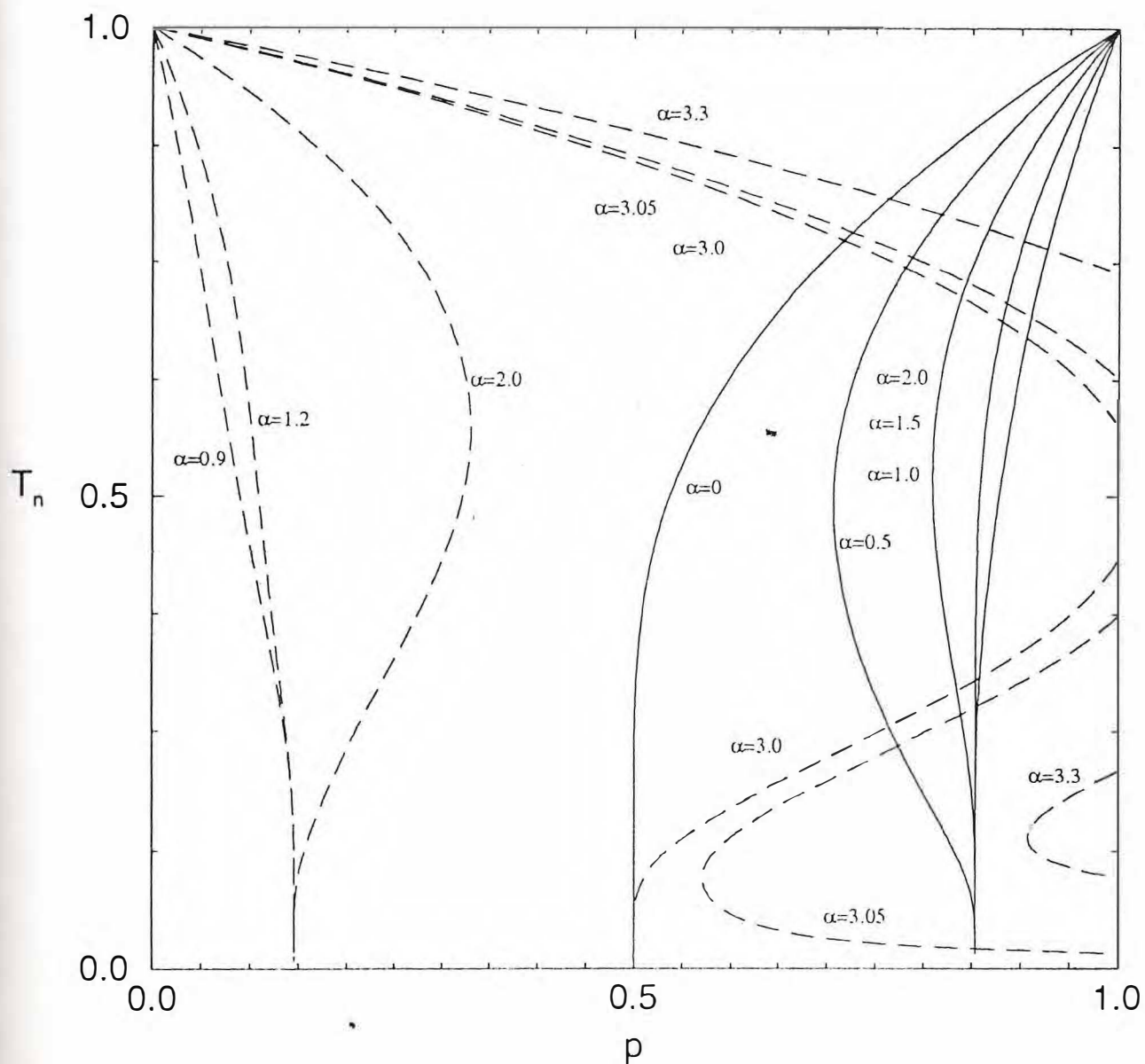


Fig. 2.7 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=3/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

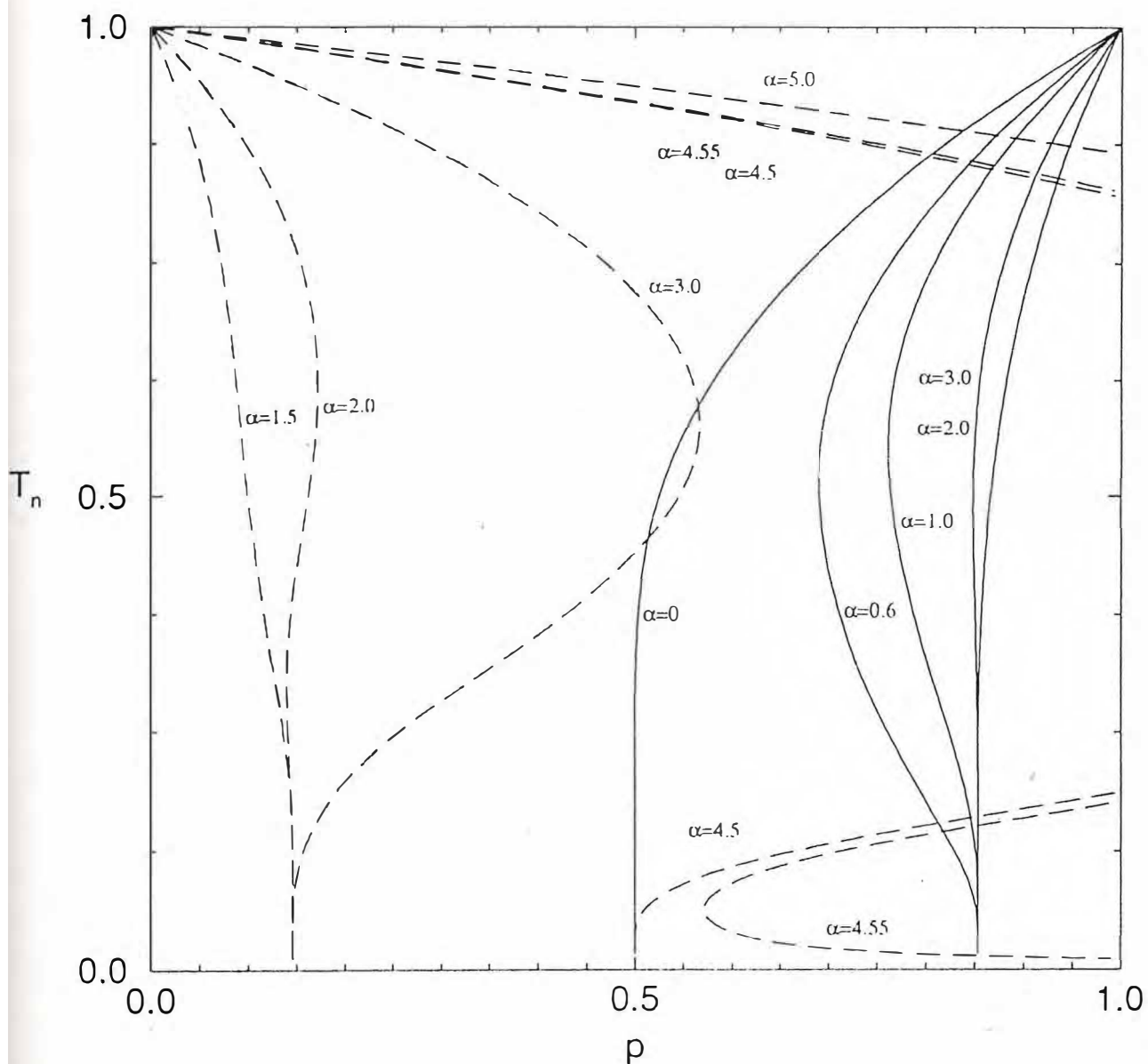


Fig. 2.8 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=3/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

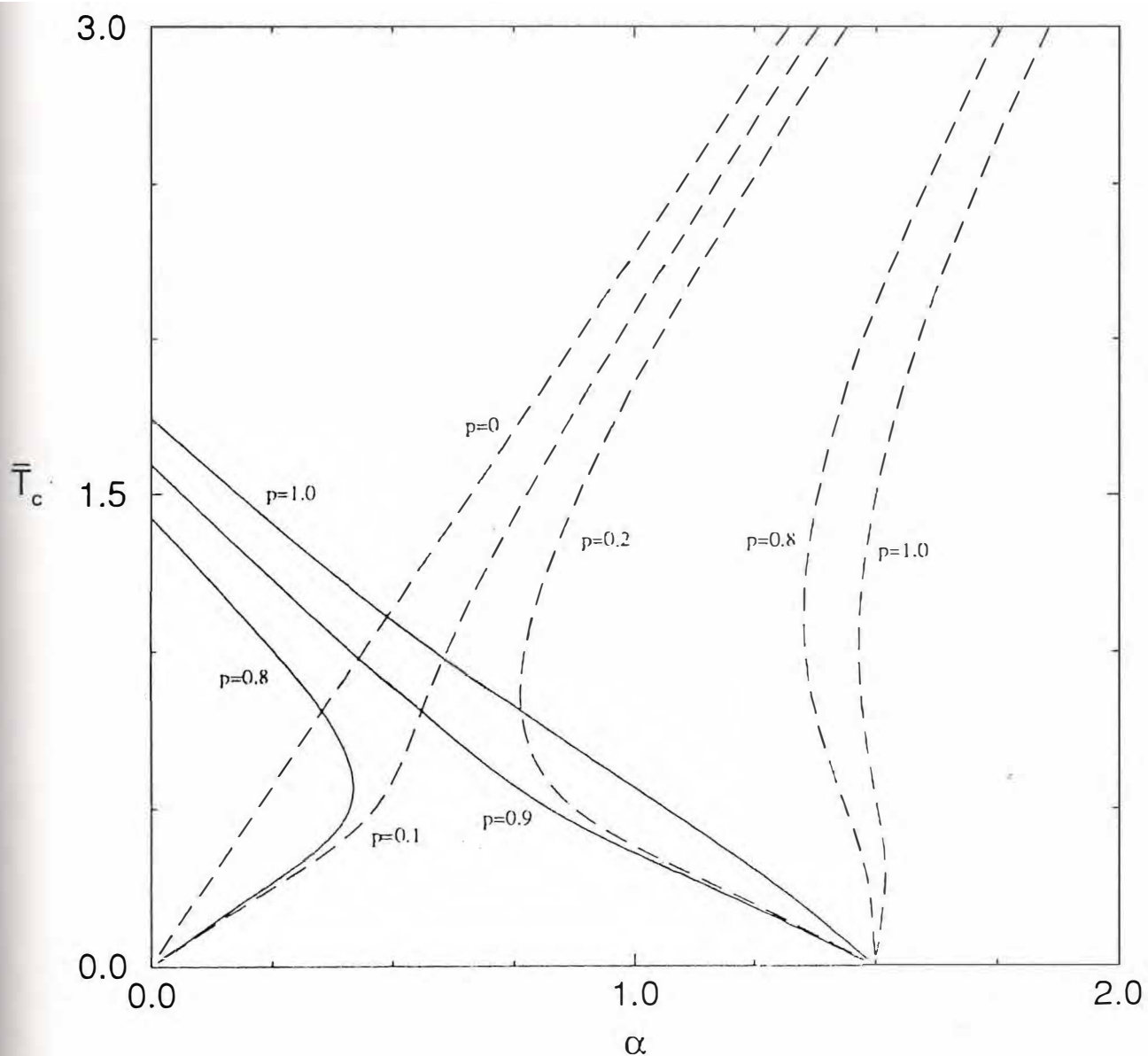


Fig. 2.9 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=1$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

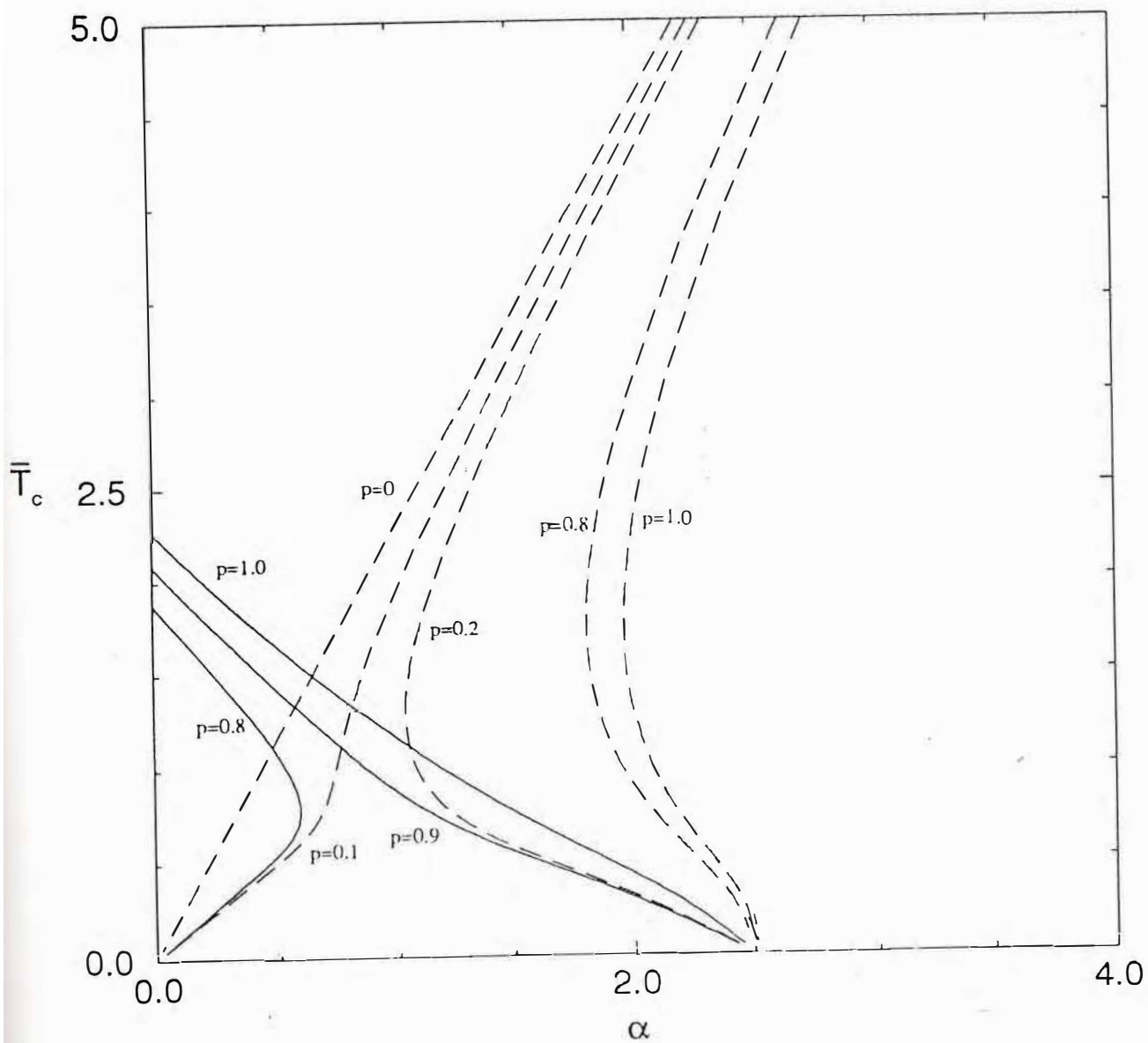


Fig. 2.10 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=1$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

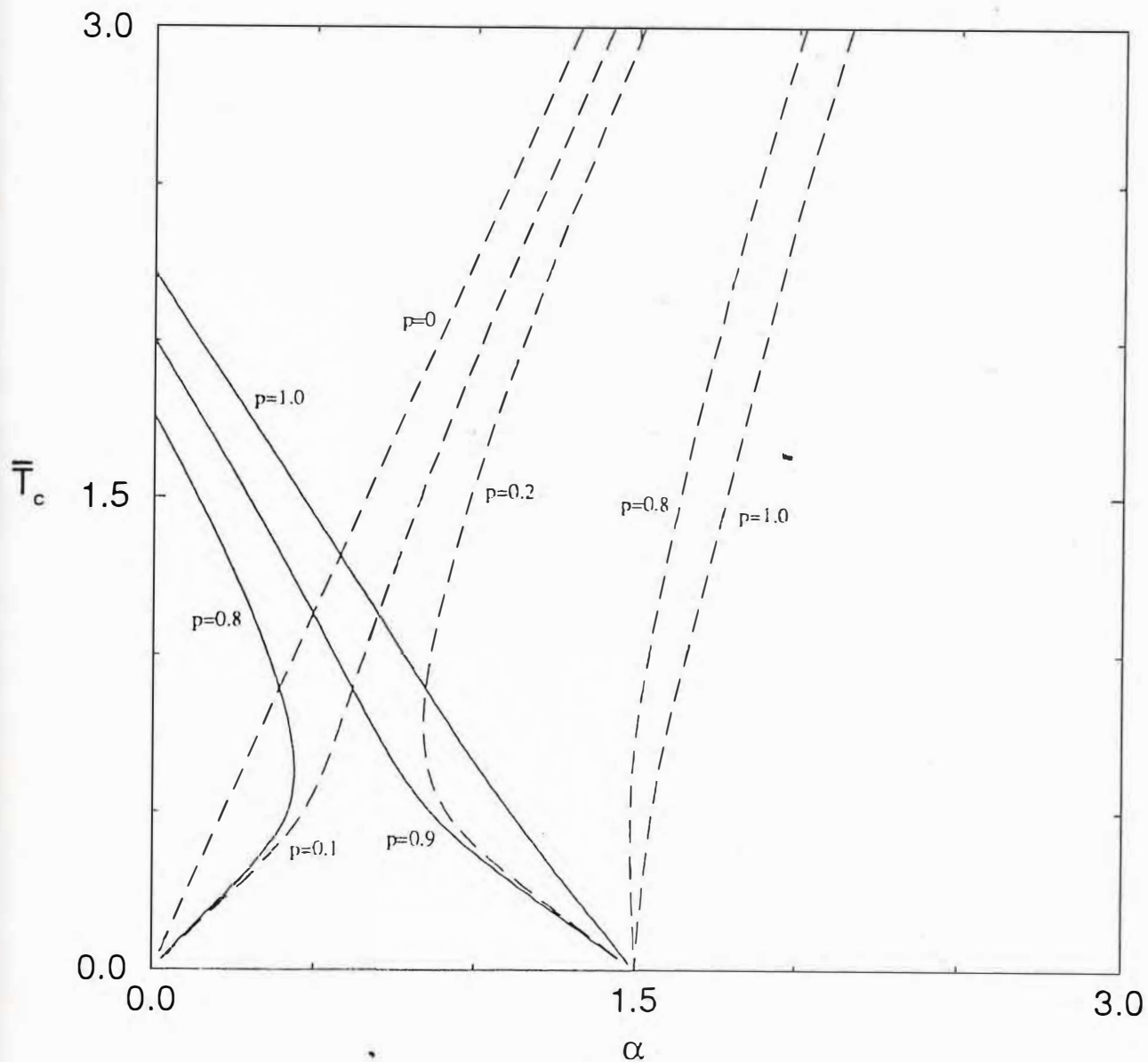


Fig. 2.11 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=3/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

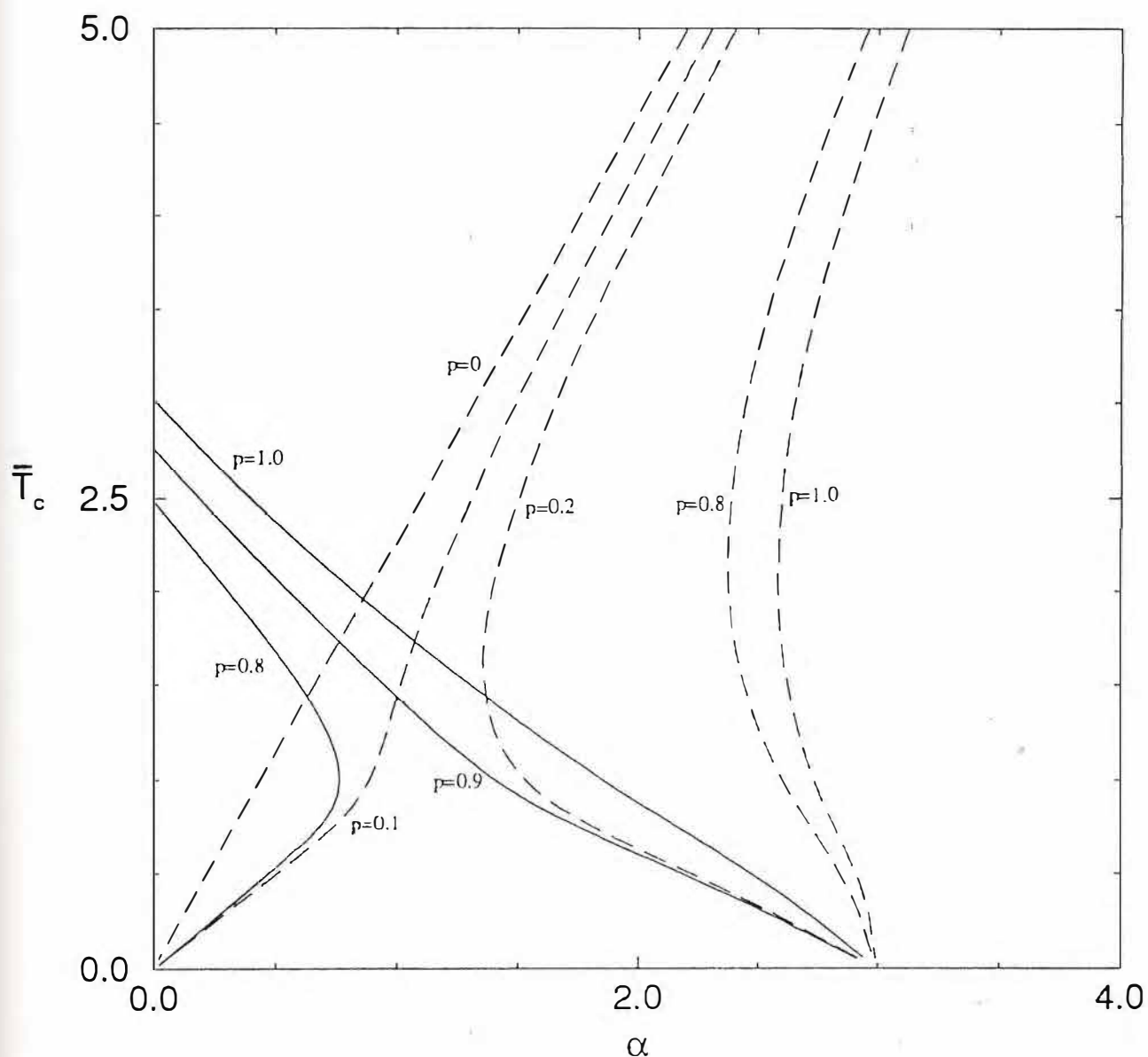


Fig. 2.12 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=-0.5$, $s=3/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

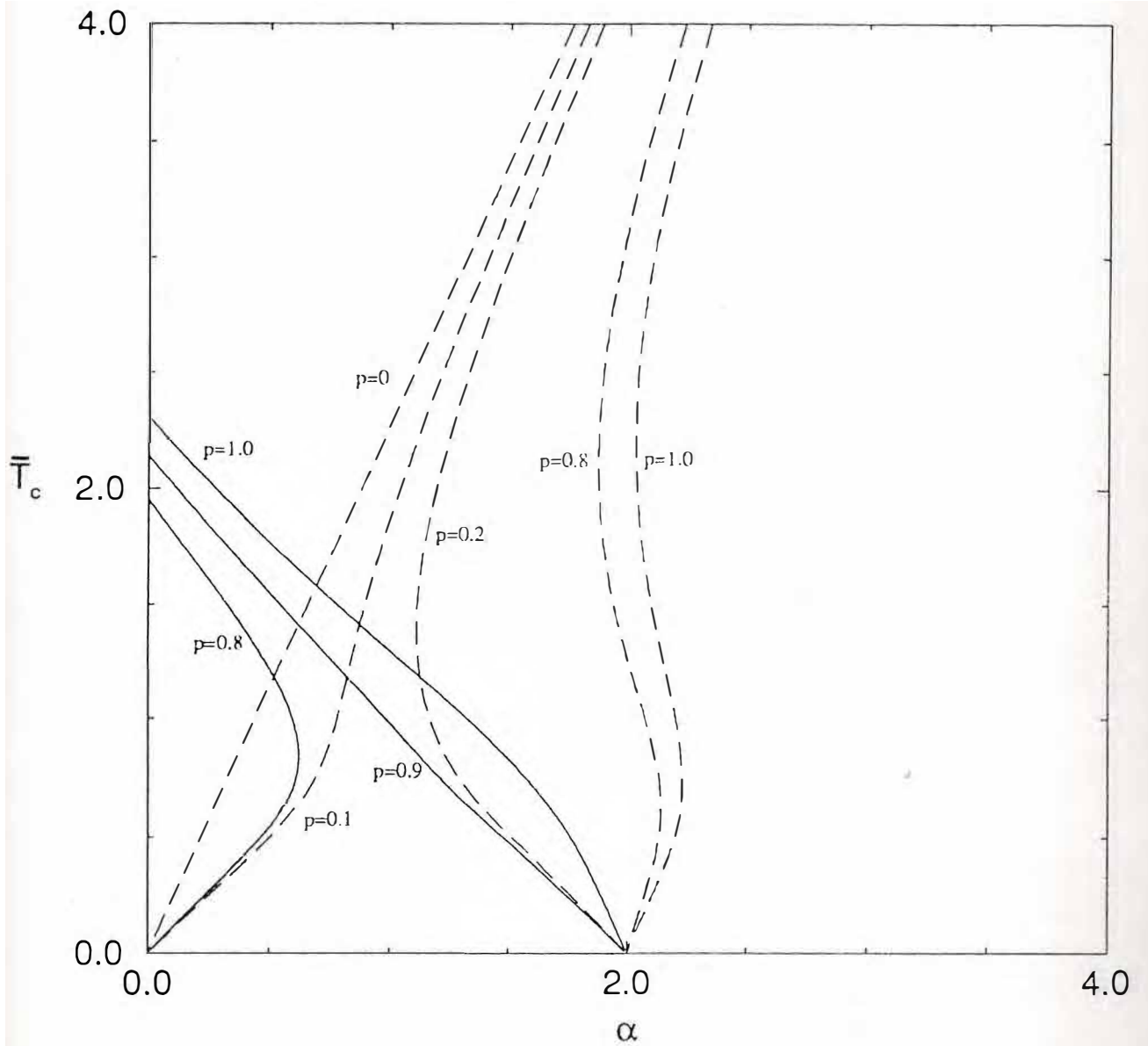


Fig. 2.13 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas) com $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=1$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

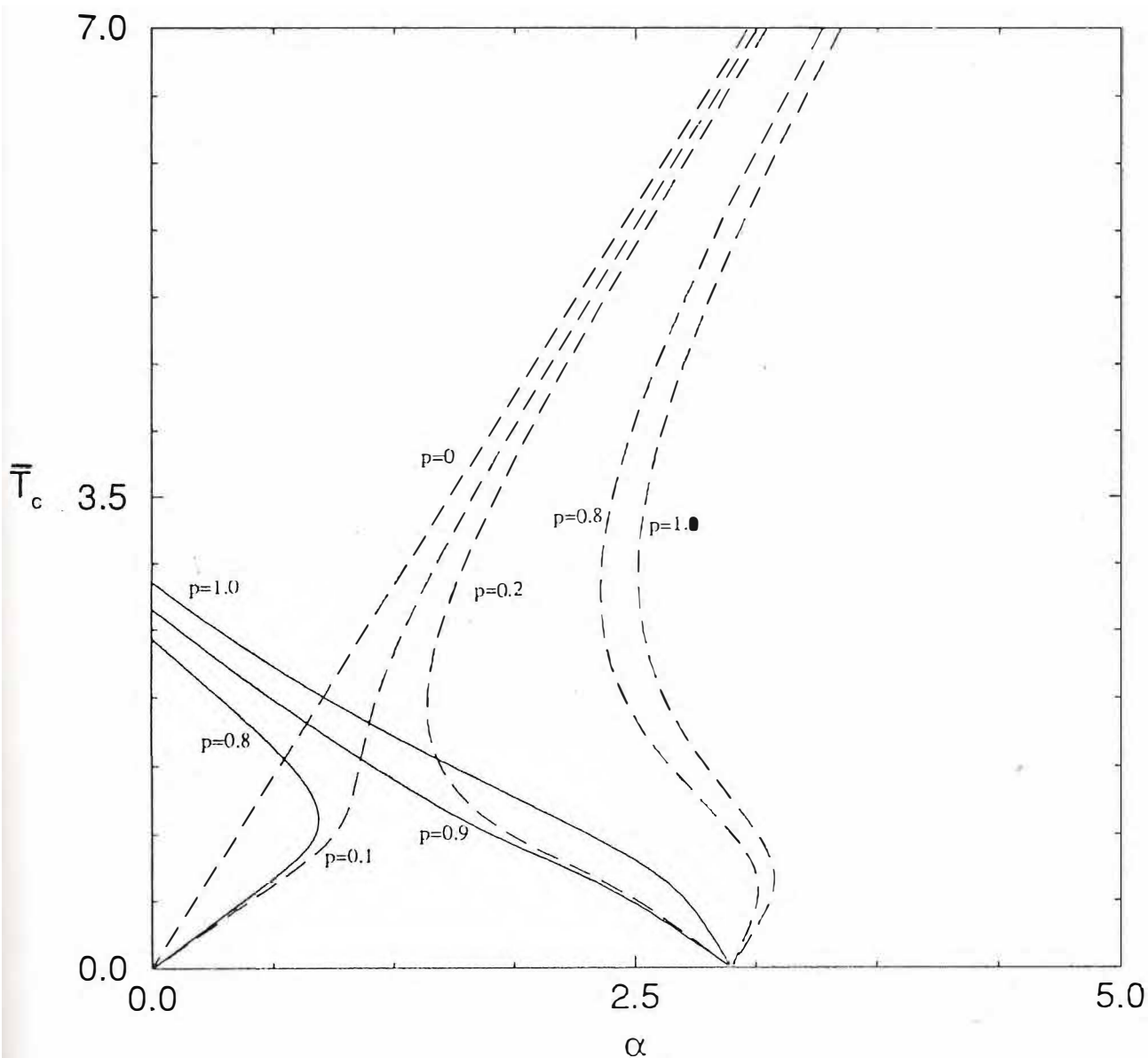


Fig. 2.14 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=1$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

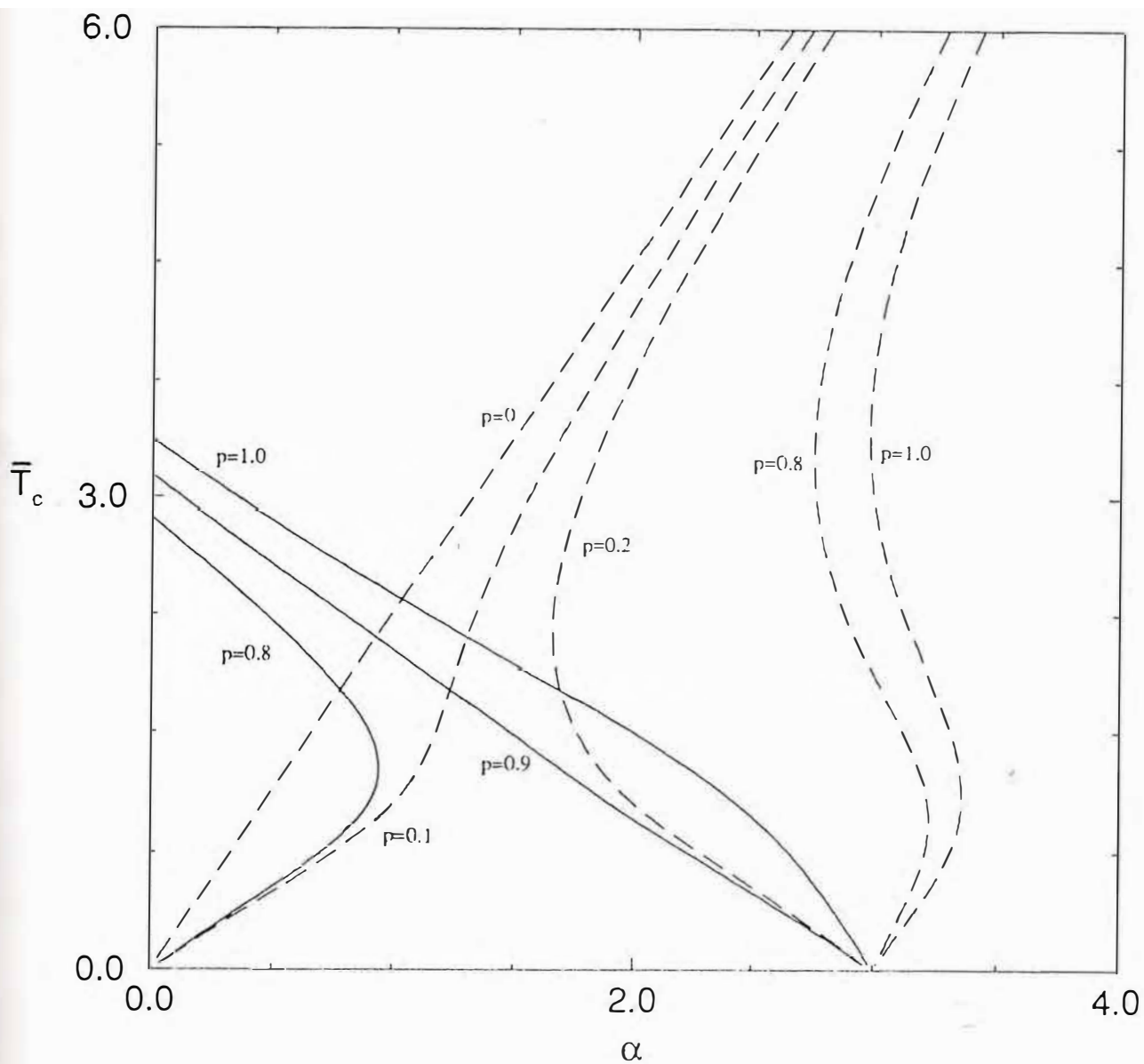


Fig. 2.15 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=3/2$ e $M=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

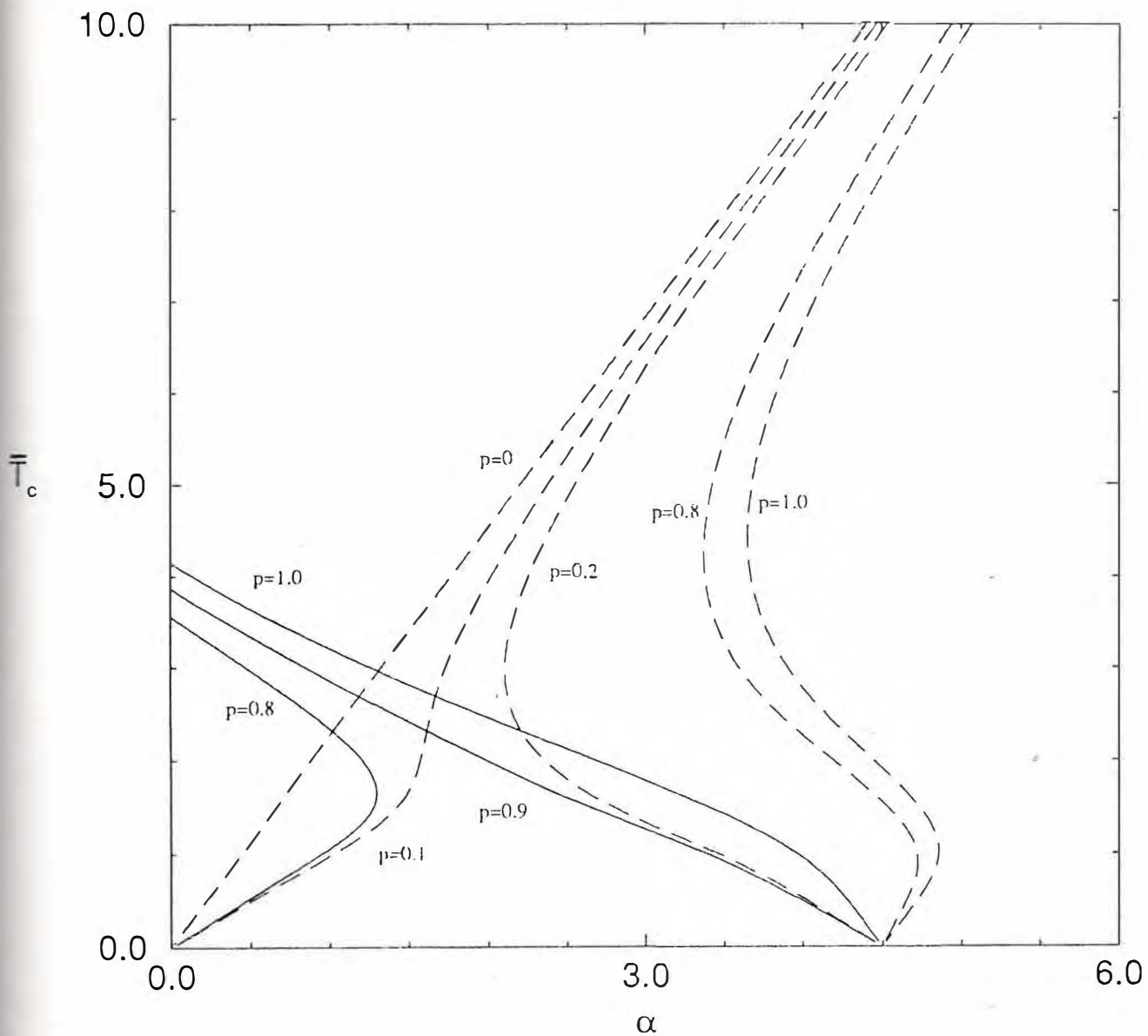


Fig. 2.16 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$, $\omega=0.5$, $\gamma=0.5$, $s=3/2$ e $M=3$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

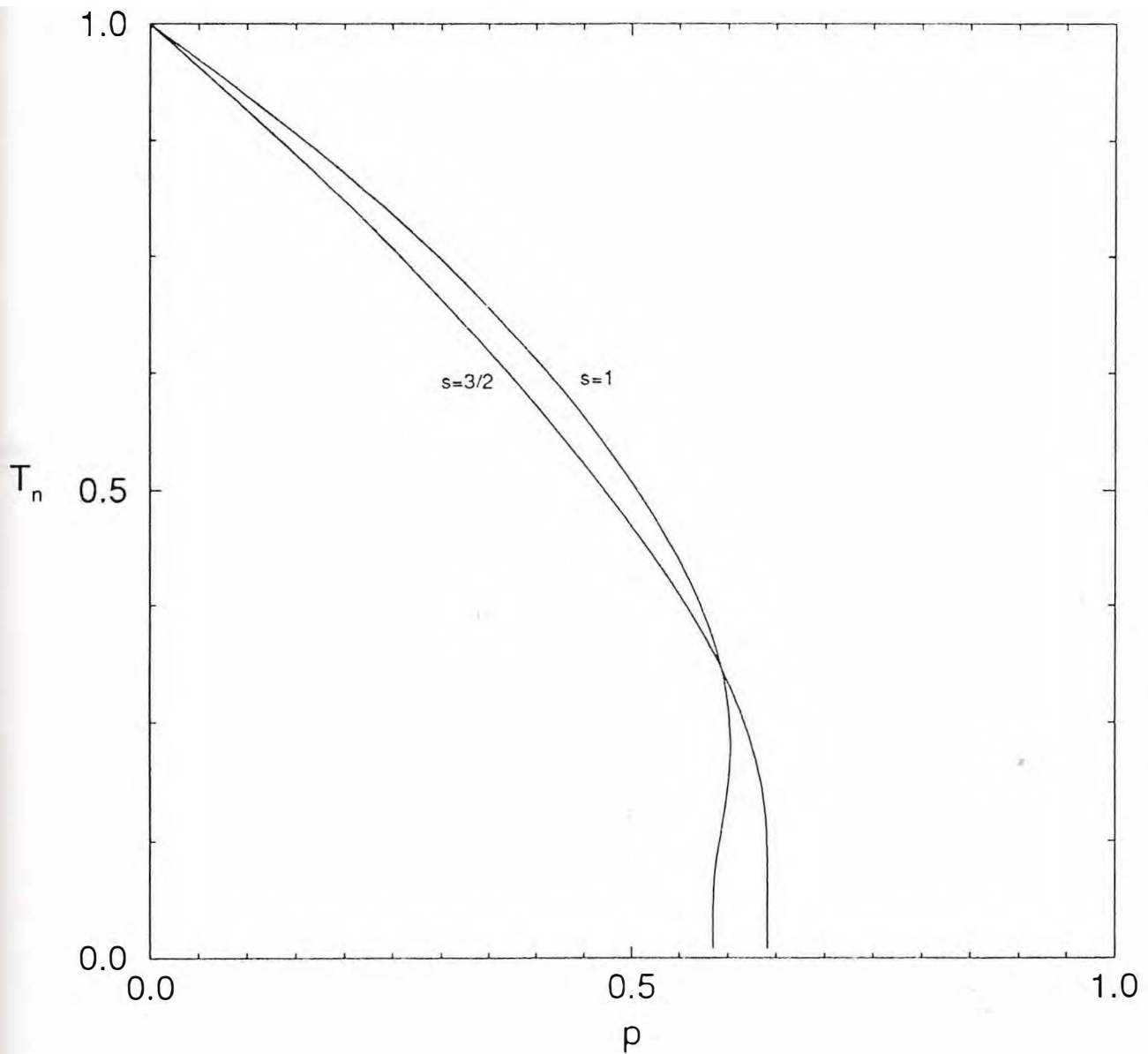


Fig. 2.17 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para $\alpha=\alpha_c(\alpha\equiv-\bar{J}/|J|)$, $\delta=0.5$, $\gamma=-0.5$, $\omega=-0.5$, $s=1(\alpha_c=0.5)$ e $3/2(\alpha_c=0.5)$ e $M=2$. As curvas definem as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n\equiv T_c(p)/T_c(0)$.

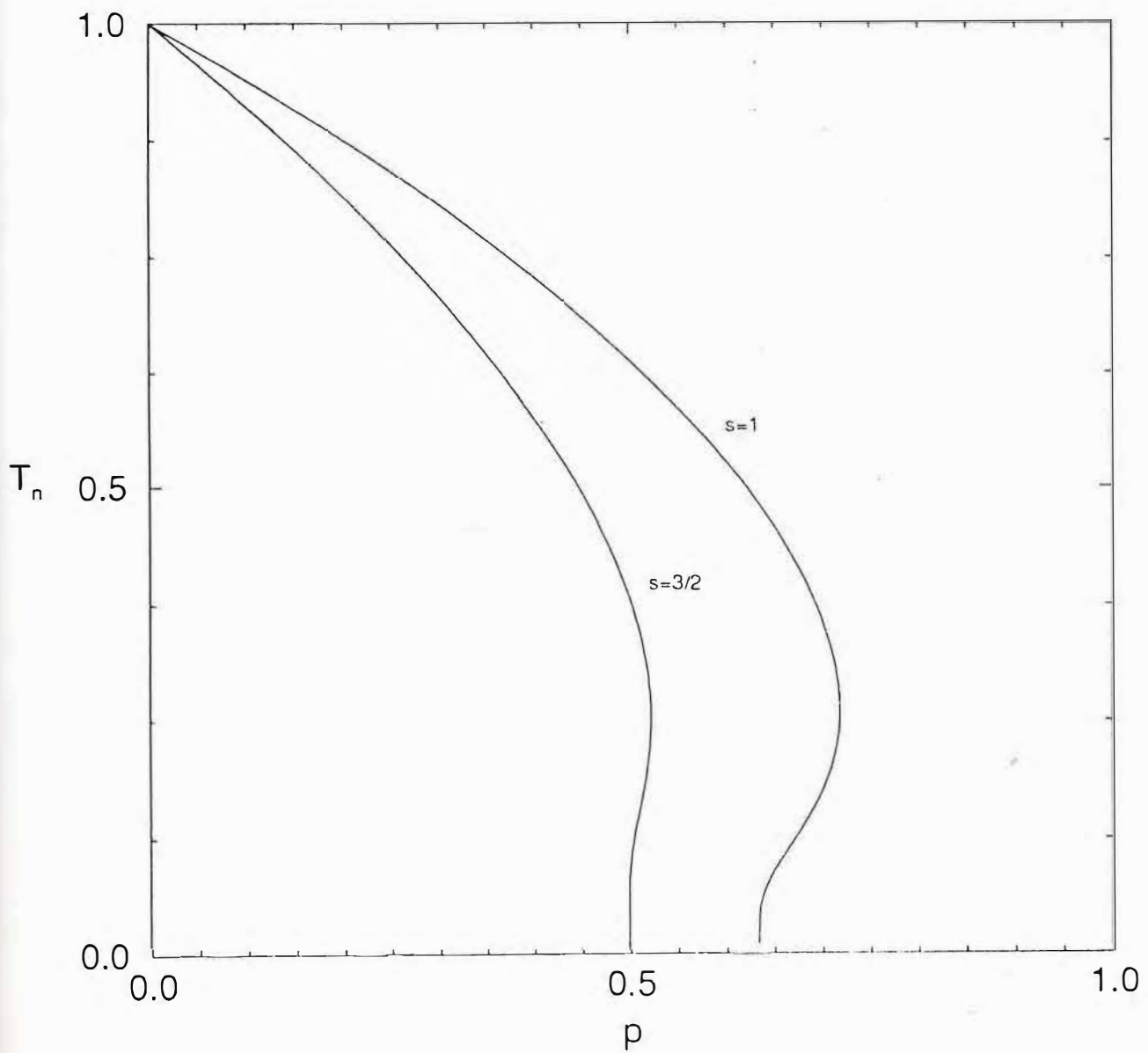


Fig. 2.18 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para $\alpha = \alpha_c (\alpha \equiv -\bar{J}/|J|)$, $\delta = 0.5$, $\gamma = -0.5$, $\omega = -0.5$, $s=1 (\alpha_c = 1.625)$ e $3/2 (\alpha_c = 1.5)$ e $M=3$. As curvas definem as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

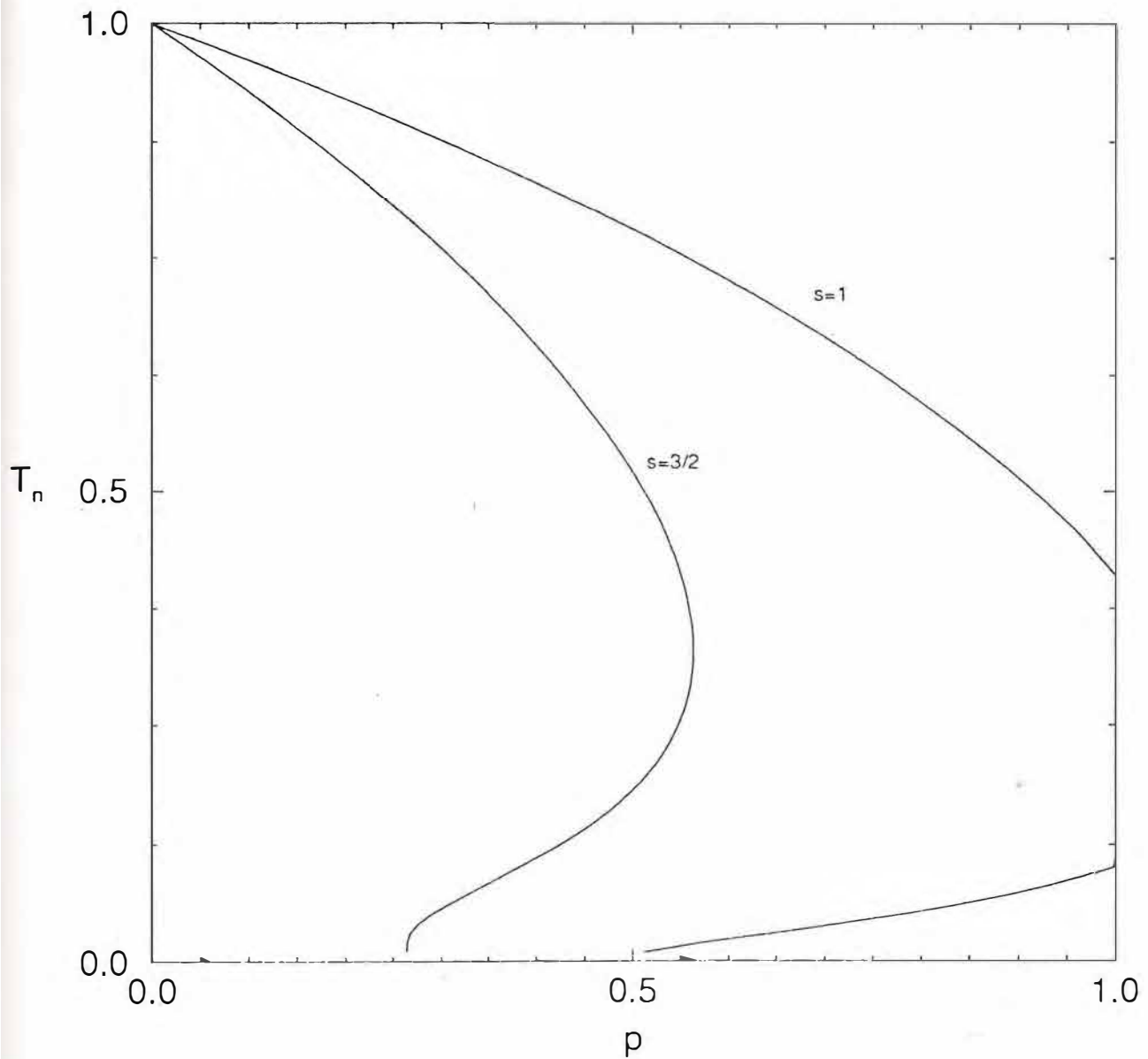


Fig. 2.19 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para $\alpha = \alpha_c (\alpha \equiv -\bar{J}/|J|)$, $\delta = 2.0$, $\gamma = -0.5$, $\omega = -0.75$, $s = 1 (\alpha_c = 0.75)$ e $3/2 (\alpha_c = 0.75)$ e $M = 2$. As curvas definem as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

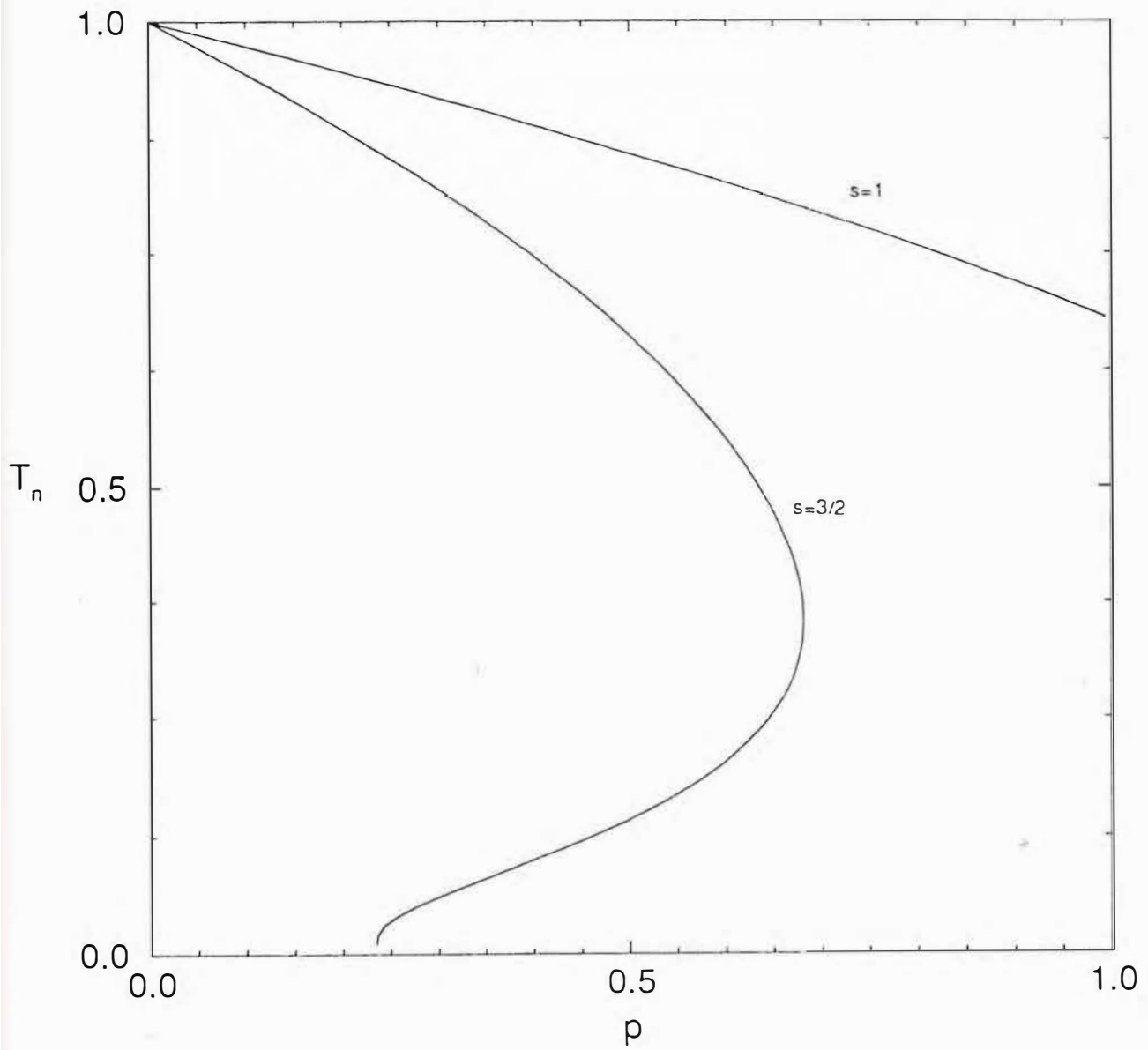


Fig. 2.20 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para $\alpha = \alpha_c (\alpha = -\bar{J}/|J|)$, $\delta = 2.0$, $\gamma = -0.5$, $\omega = -0.75$, $s = 1 (\alpha_c = 2.5)$ e $3/2 (\alpha_c = 2.25)$ e $M = 3$. As curvas definem as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

CAPÍTULO 3

O LIMITE $M \rightarrow \infty$

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo discute-se os resultados obtidos nos capítulos anteriores no limite $M \rightarrow \infty$. O limite é obtido normalizando-se adequadamente os termos de interação que envolvem os spins da cadeia que decoram a rede, de forma a obter-se resultados finitos. A solução do modelo neste caso é obtida para s arbitrário, sendo mostrado através de expansão em série que o resultado é exato.

A partir da solução obtida é levantado o diagrama de fase para os sistemas para $s \leq 5/2$. Na seção 3.2 é estudada a solução para o sistema no caso mais geral com anisotropia uniaxial não nula e na 3.3 são apresentados os resultados para $s \leq 5/2$.

3.2 A SOLUÇÃO DO MODELO

A solução é obtida utilizando-se o mesmo procedimento utilizado nos capítulos anteriores. Assim sendo, a partir da eq.(2.2) pode-se escrever:

$$\sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left\{ \beta t_{ij} \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k,ij} (\sigma_i + \delta \sigma_j) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + \sum_{k=1}^M D \bar{\sigma}_{kij}^2 + \mu \right] \right\} =$$

$$= (2s + 1)^M + z \text{Tr} \left(e^{H_{ij}} \right) \quad , \quad (3.1)$$

onde H_{ij} é definido por:

$$H_{ij} = \tilde{K} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + h_{ij} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} + \tilde{D} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij}^2 \quad , \quad (3.2)$$

com $\tilde{K} = \gamma K$, $K = \beta J$, $h_{ij} = (\sigma_i + \delta \sigma_j) K$ e $\tilde{D} = \omega K$ ($\omega = D/J$). O cálculo do traço parcial sobre as variáveis $\bar{\sigma}$ indicado na equação (3.1), pode ser obtido fazendo-se uso do método de expansão em série Stanley (1971), e foi realizado no apêndice C.

Considerando-se a equação (C.24) obtida no apêndice C, pode-se reescrever a eq.(3.1) na seguinte forma:

$$\sum_{\{\bar{\sigma}\}, t_{ij}} \exp \left\{ \beta t_{ij} \left[\sum_{k=1}^M J \bar{\sigma}_{k,ij} (\sigma_i + \delta \sigma_j) + \sum_{k=1}^M \gamma J \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} + \sum_{k=1}^M D \bar{\sigma}_{k,ij}^2 + \mu \right] \right\} =$$

$$= r e^{\beta J' \sigma_i \sigma_j} \quad , \quad (3.3)$$

onde r e J' são dados por:

$$r = \sqrt{g(2h^+)g(2h^-)} \quad , \quad (3.4)$$

$$J' = \frac{k_B T}{2} \ln \left[\frac{g(2h^+)}{g(2h^-)} \right] \quad , \quad (3.5)$$

onde h^\pm é dado pela eq.(1.10) e a função $g(x)$ é definida como:

$$g(x) = (2s+1)^M \left[1 + z e^{v(x)} \right] \quad , \quad (3.6)$$

com

$$v(x) = \frac{1}{18} \bar{K}^2 (s(s+1))^2 + \frac{1}{3} [s(s+1)] \left(\frac{1}{2} x^2 + \bar{D} \right) \quad . \quad (3.7)$$

Usando-se a equação (3.3) pode-se escrever a função de partição, eq.(2.2), na forma:

$$Z = r^{2N} \sum_{(\sigma)} e^{-\beta H'} \quad (3.8)$$

onde N é o número de sítios da rede e H' é a Hamiltoniana do modelo de Ising efetivo uniforme definida por:

$$H' = - \sum_{(ij)} J_{\text{eff}} \left[\sigma_{ij} \sigma_{ij+1} + \sigma_{ij} \sigma_{i+1j} \right] \quad (3.9)$$

onde J_{eff} é definido por:

$$J_{\text{eff}} = \bar{J} + J' \quad (3.10)$$

A partir dos resultados apresentados nas eqs.(2.9) a (2.12), e substituindo-se nestas equações a função $f(x)$ por $g(x)$, pode-se escrever imediatamente, que a temperatura crítica é dada pela equação:

$$p = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K_c}}{t} \right] \frac{(1 + \epsilon_c) U(2h^+) + t(1 - \epsilon_c) U(2h^-) e^{2\alpha K_c}}{U(2h^+) - U(2h^-)} \quad (3.11)$$

onde $U(x)$ é dado por:

$$U(x) = [2s+1]^M e^{V(x)} \quad (3.12)$$

e onde t e ϵ_c são definidos na equação (1.29), e α , como nos casos anteriores, é igual a $-\bar{J}/|J|$.

3.3 RESULTADOS

Como nos capítulos anteriores o diagrama de fase é obtido resolvendo-se numericamente a equação (3.11), considerando-se $\alpha > 0$ e $\delta > 0$ de forma a obter-se os contornos de fase ferromagnética e antiferromagnética. Desta forma, considerando-se as equações (3.11) e (3.12), tem-se a seguinte equação:

$$p = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K_c}}{t} \right] \frac{(1 + \epsilon_c) + t(1 - \epsilon_c)e^{2\alpha K_c - 2\delta K_c^2 s(s+1)/3}}{1 - e^{-2\delta K_c^2 s(s+1)/3}}, \quad (3.13)$$

Este resultado mostra que o diagrama de fase para o modelo com e sem anisotropia uniaxial são idênticos, uma vez que a eq. (3.13) não exibe dependência no parâmetro ω , associado a constante de anisotropia D. Da eq.(3.13), conclui-se ainda que os resultados também não dependem de γ , parâmetro associado a constante de interação entre os spins que decoram a rede, e que α_c (α crítico) $\rightarrow \infty$. Tendo em vista que α crítico corresponde ao valor de α abaixo do qual a fase ferromagnética pode existir (Gonçalves, 1991), pode-se concluir que o estado fundamental de sistema pode apresentar ordem ferromagnética para qualquer valor de α .

Assim sendo para $\alpha \geq 0$, substituindo-se os valores explícitos de t e ϵ_c dados pela equação (1.29) na equação (3.13), conclui-se que a concentração crítica não depende dos parâmetros e é dada por:

$$p_{1c} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad \text{para } \alpha > 0 \quad (\text{caso antiferromagnético}) \quad , \quad (3.14)$$

$$p_{2c} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{2} \right) \quad \text{para } \alpha > 0 \quad (\text{caso ferromagnético}) \quad , \quad (3.15)$$

$$p_{3c} = \frac{1}{2} \quad \text{para } \alpha = 0 \quad (\text{caso ferromagnética}) \quad . \quad (3.16)$$

Os resultados apresentados nas equações (3.14)-(3.15), correspondem aos mesmos valores para a concentração crítica encontrados nos capítulos anteriores, onde $p_{1c}=0.1464\dots$, $p_{2c}=0.8535\dots$ e $p_{3c}=1/2$, que corresponde a concentração de percolação para a rede quadrada, e neste caso o sistema se reduz ao sistema diluído estudado por Syozi, (1965). Por outro lado, como estes resultados são independentes de quaisquer dos parâmetros que definem o modelo, conclui-se que no limite $M \rightarrow \infty$ o sistema apresenta um comportamento universal no que concerne às concentrações críticas.

A solução exata obtida para o sistema, só depende dos valores de s e de δ , e como os resultados obtidos não são afetados significativamente quando o parâmetro δ é variado, serão apresentados resultados somente para $\delta=1.5$ e $s \leq 5/2$.

As Figs.3.1-3.5 mostram os diagramas de fase da temperatura crítica em função da concentração para $s=1/2, 1, 3/2, 2$ e $5/2$, e

alguns valores do parâmetro de competição α , onde cada figura está associada a um valor do de s . Nota-se que independentemente do valor de s a fase ferromagnética é estável para $p_{2c} < p < 1$, enquanto que a fase antiferromagnética é estável apenas para $0 < p < p_{1c}$. Comportamento reentrante com duas temperaturas de transição é observado na fase ferromagnética para $p_{3c} < p < p_{2c}$ e na fase antiferromagnética para $p_{1c} < p < 1$.

Nas Figs.3.6-3.10, a temperatura crítica é dada como uma função do parâmetro de competição α , para $s=1/2, 1, 3/2, 2$ e $5/2$, e alguns valores da concentração p , onde a cada figura corresponde também um valor de s . Independentemente do valor de s , o estado fundamental ferromagnético é estável para $p_{2c} < p \leq 1$, enquanto que o estado fundamental antiferromagnético é estável apenas para $0 < p < p_{1c}$. O fenômeno de reentrância está presente no estado fundamental ferromagnético para $p_{3c} < p < p_{2c}$, e $p_{1c} < p \leq 1$ no estado fundamental antiferromagnético.

Todas as linhas mostradas nas Figs.3.1-3.5, são normalizadas com diferentes fatores de escala, isto é, com a temperatura crítica para um dado α em $p=0(1)$ para as fronteiras antiferromagnética(ferromagnética), respectivamente. Portanto não existe cruzamento real entre as fronteiras ferromagnética e antiferromagnética para um dado α como é aparente nas Figs.3.3-3.5.

Nas regiões onde o sistema apresenta o fenômeno de reentrância, o ponto crítico reentrante do contorno de fase para os diagramas mostrados nas Figs.3.1-3.10, pode ser determinado de maneira análoga àquela obtida no Cap.1.

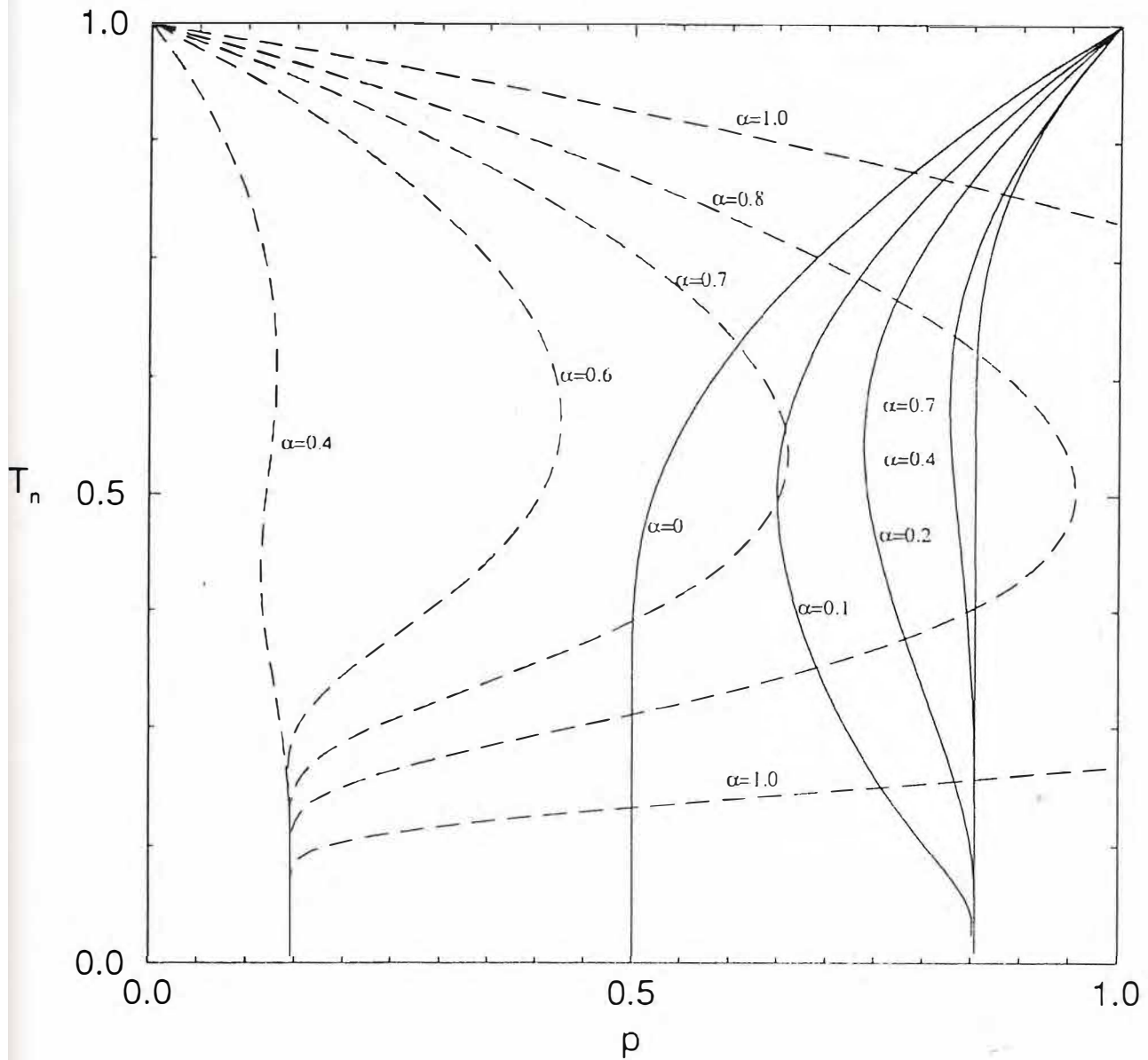


Fig. 3.1 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$ e $s=1/2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

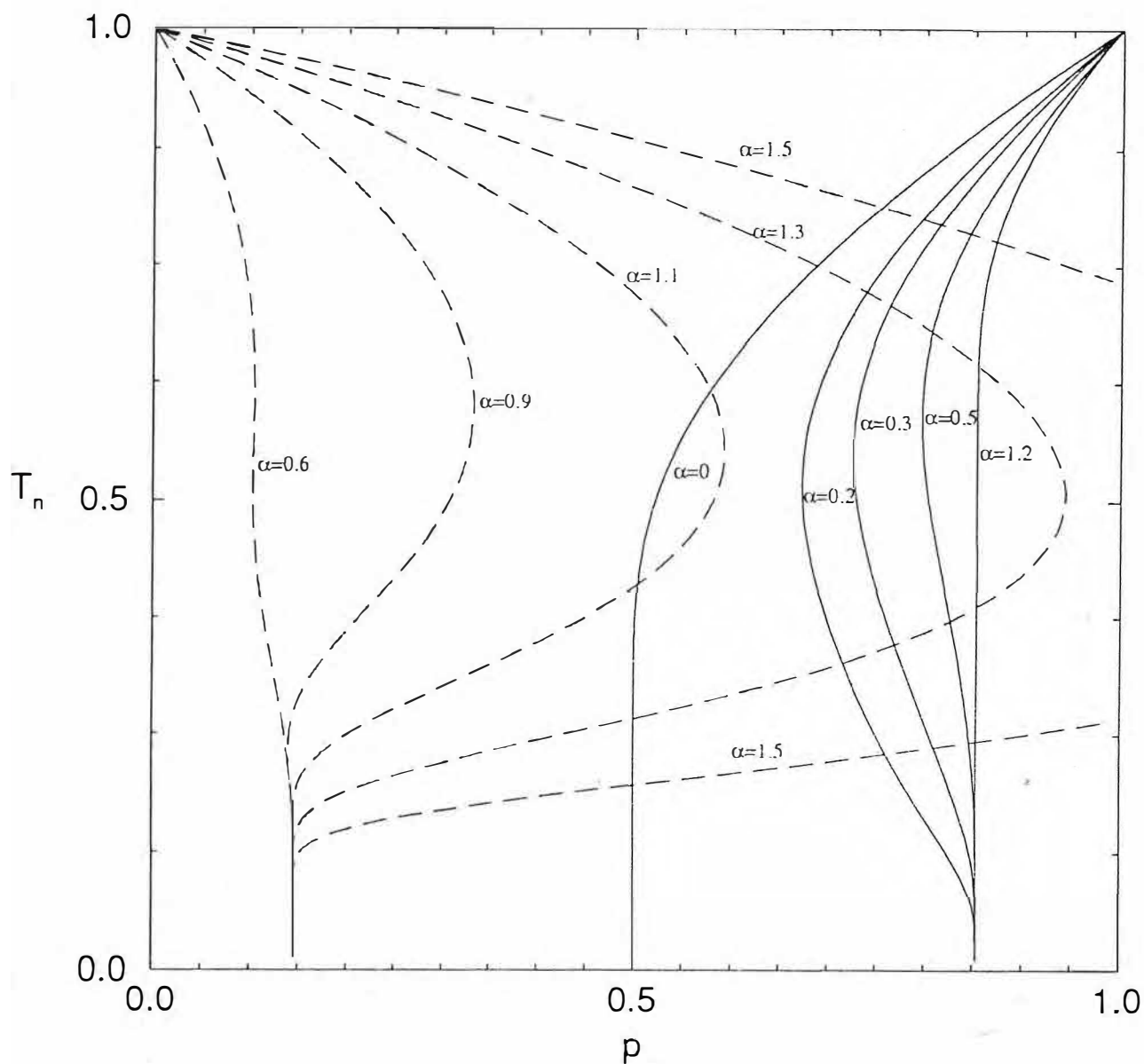


Fig. 3.2 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha = -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$ e $s=1$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

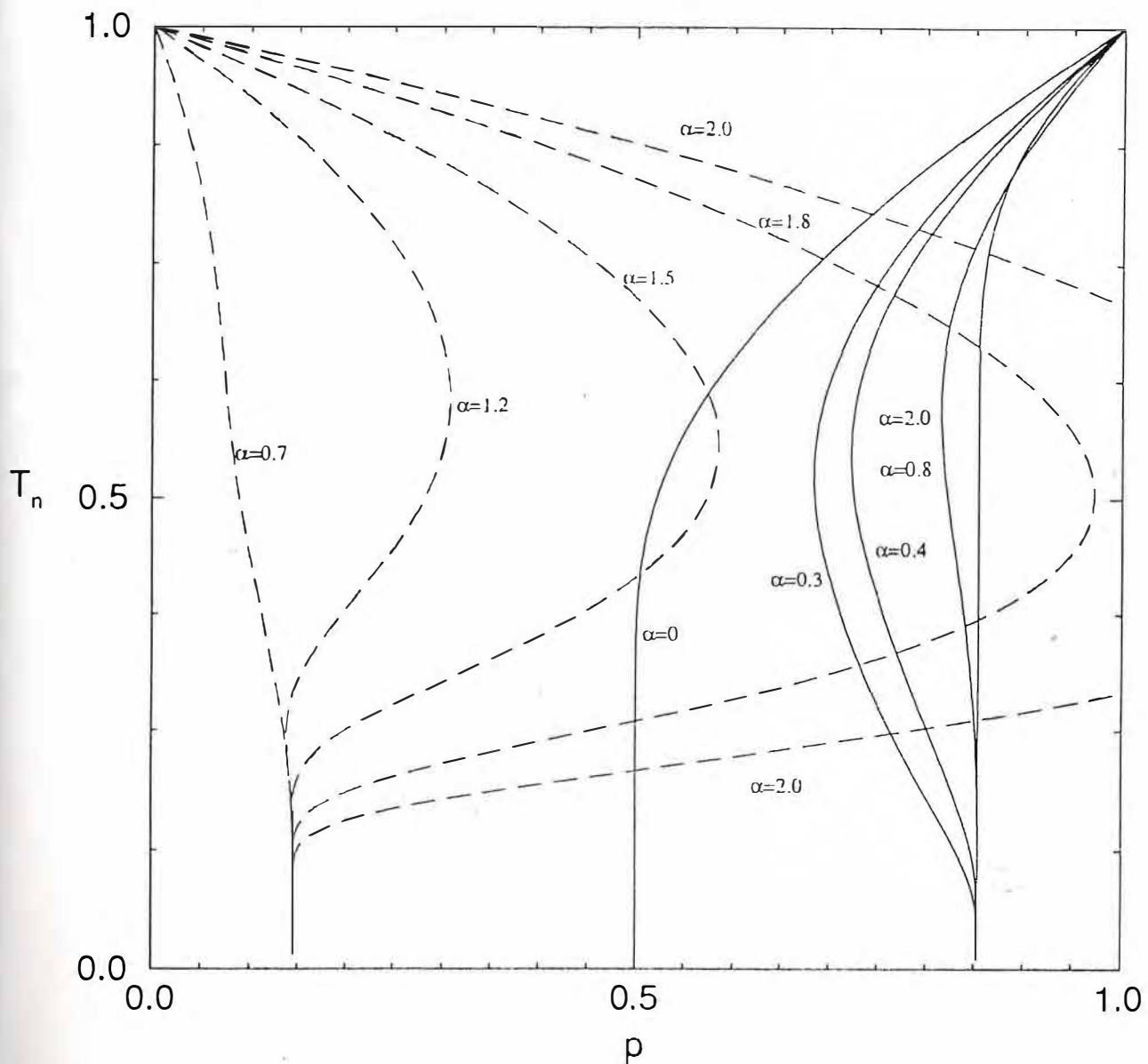


Fig. 3.3 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$ e $s=3/2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n \equiv T_c(p)/T_c(0)$.

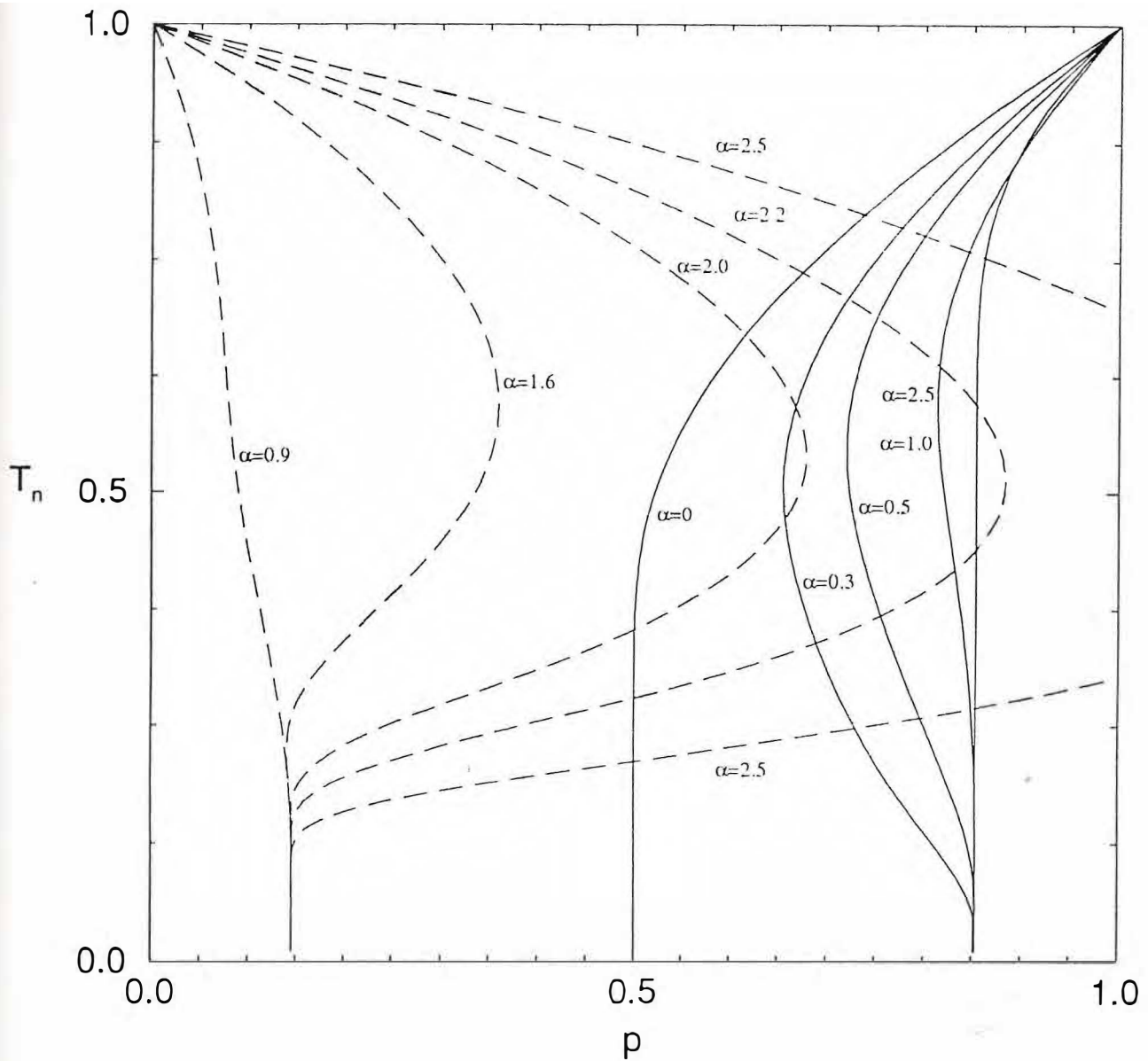


Fig. 3.4 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$ e $s=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

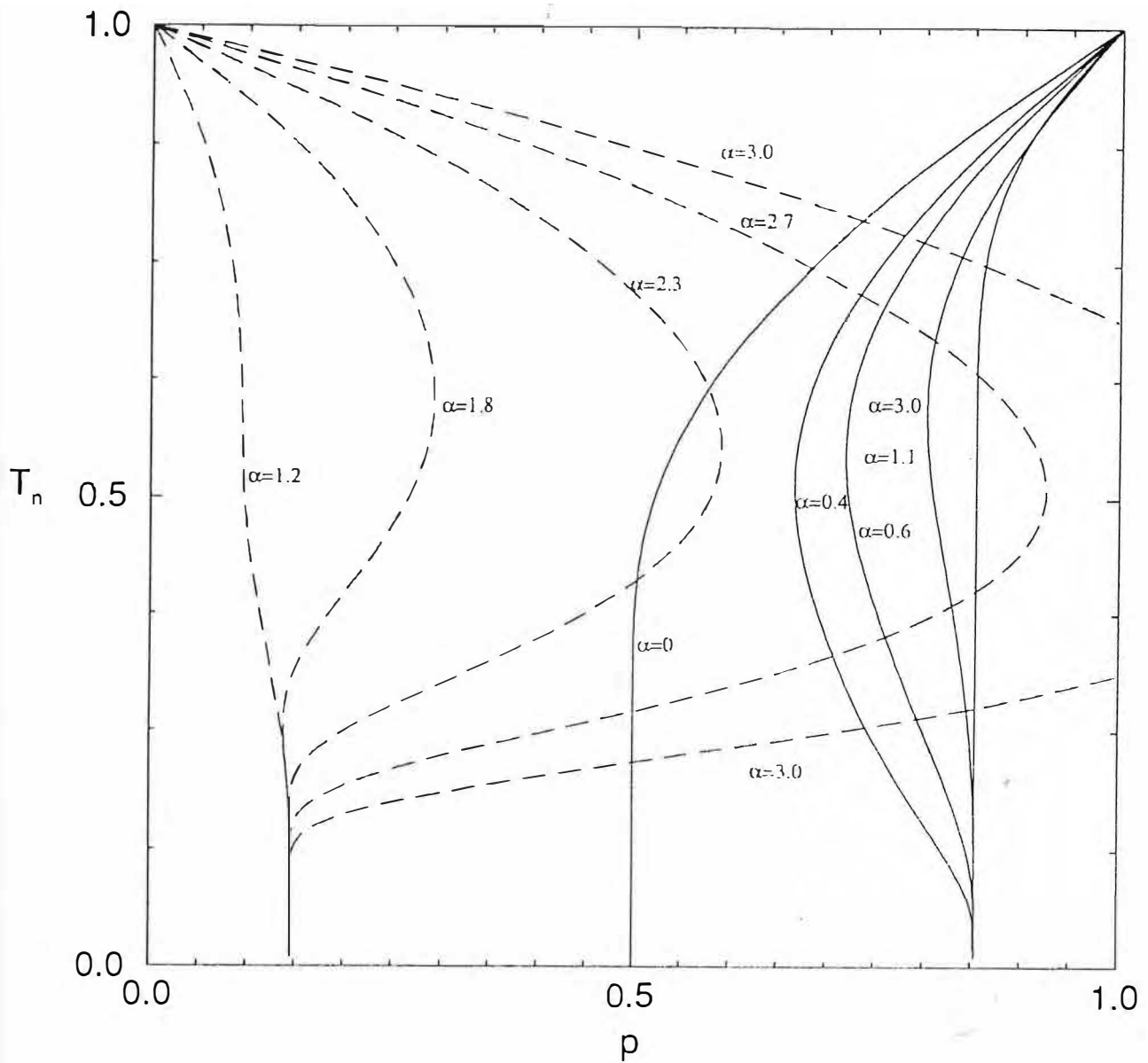


Fig. 3.5 - Temperatura crítica normalizada T_n como função de p (concentração de ligações decoradas) para vários valores de α ($\alpha \equiv -\bar{J}/|J|$), $\delta=1.5$ e $s=5/2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(1)$, e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas com $T_n = T_c(p)/T_c(0)$.

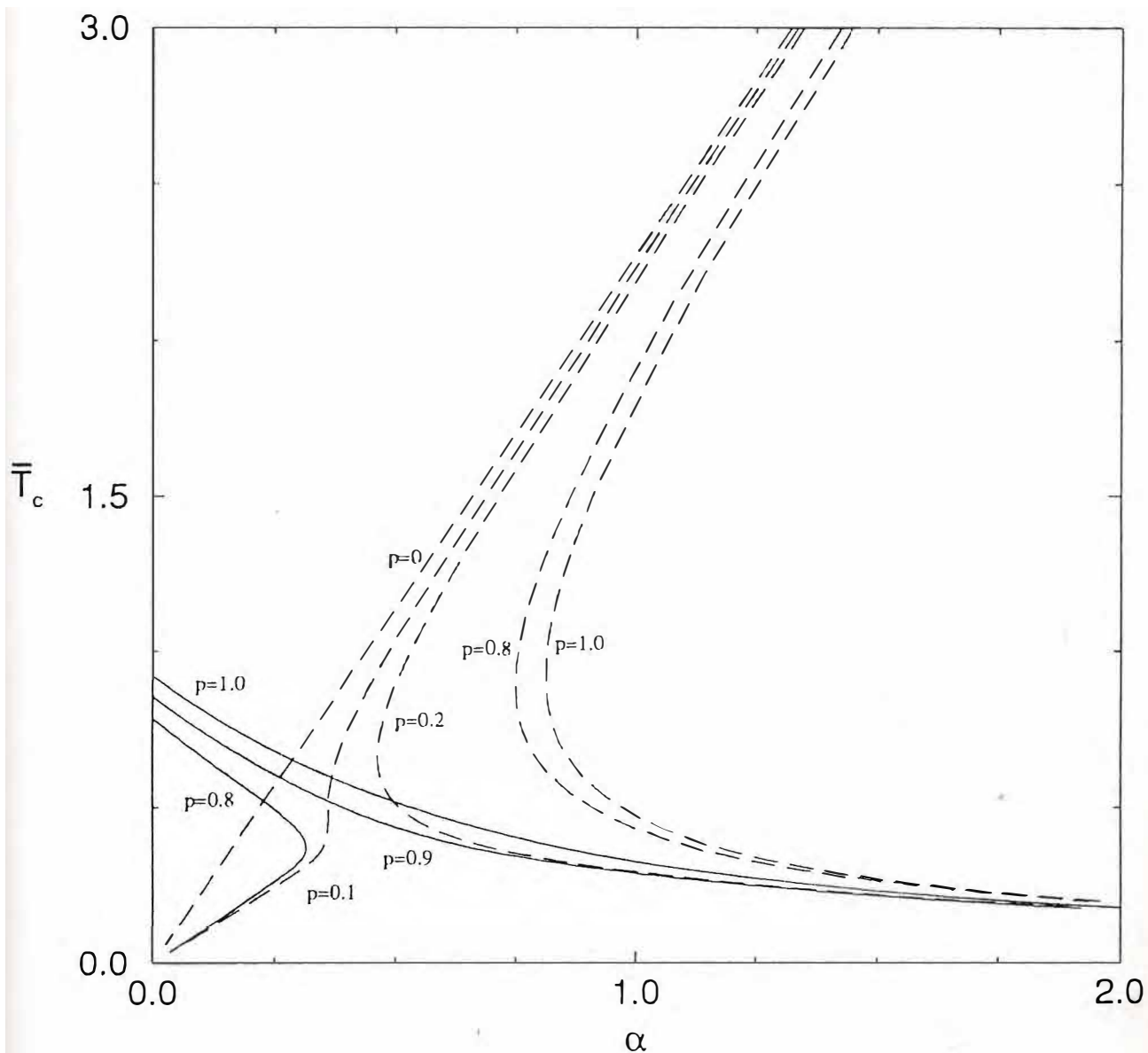


Fig. 3.6 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$ e $s=1/2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

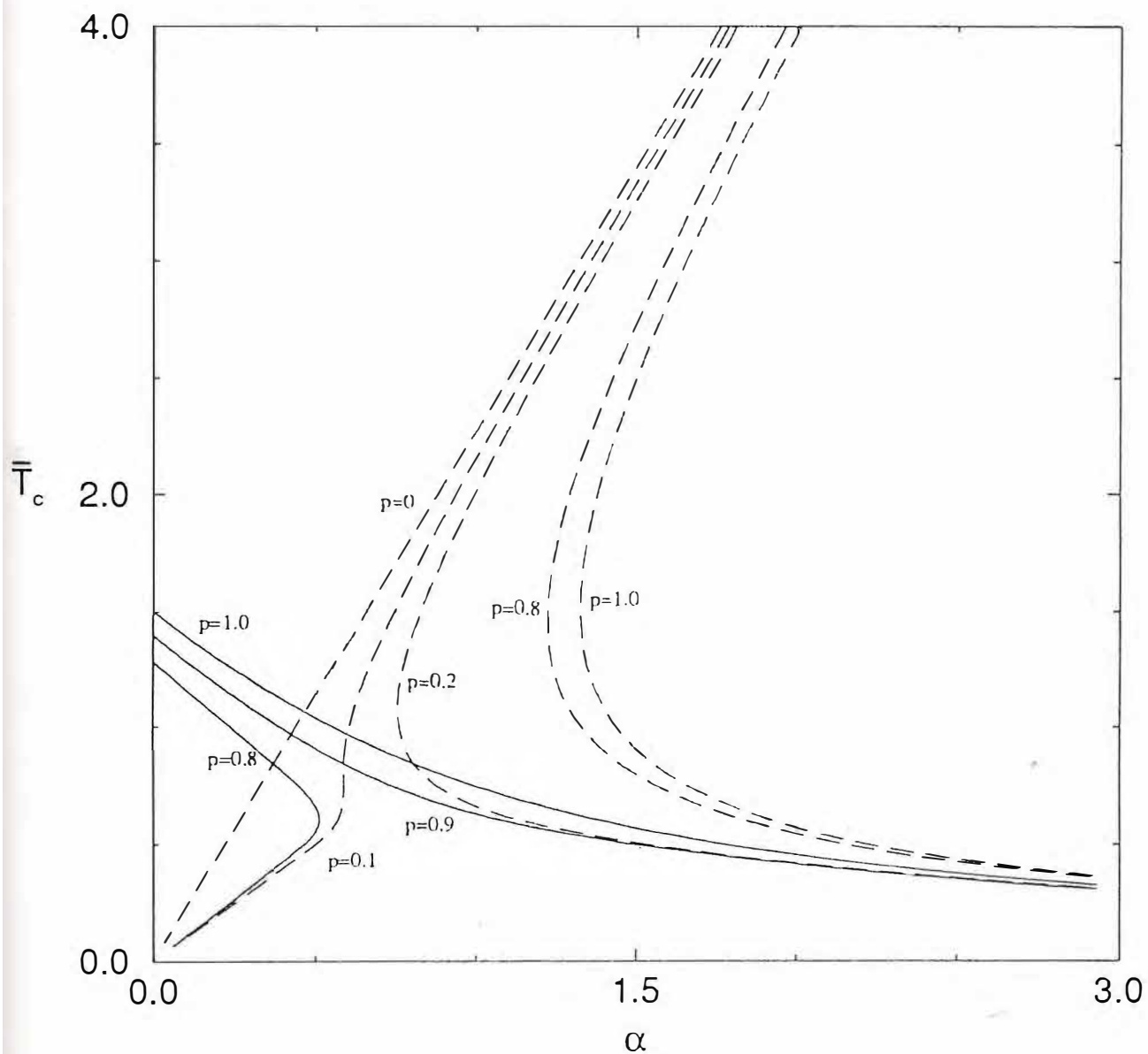


Fig. 3.7 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$ e $s=1$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e as linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

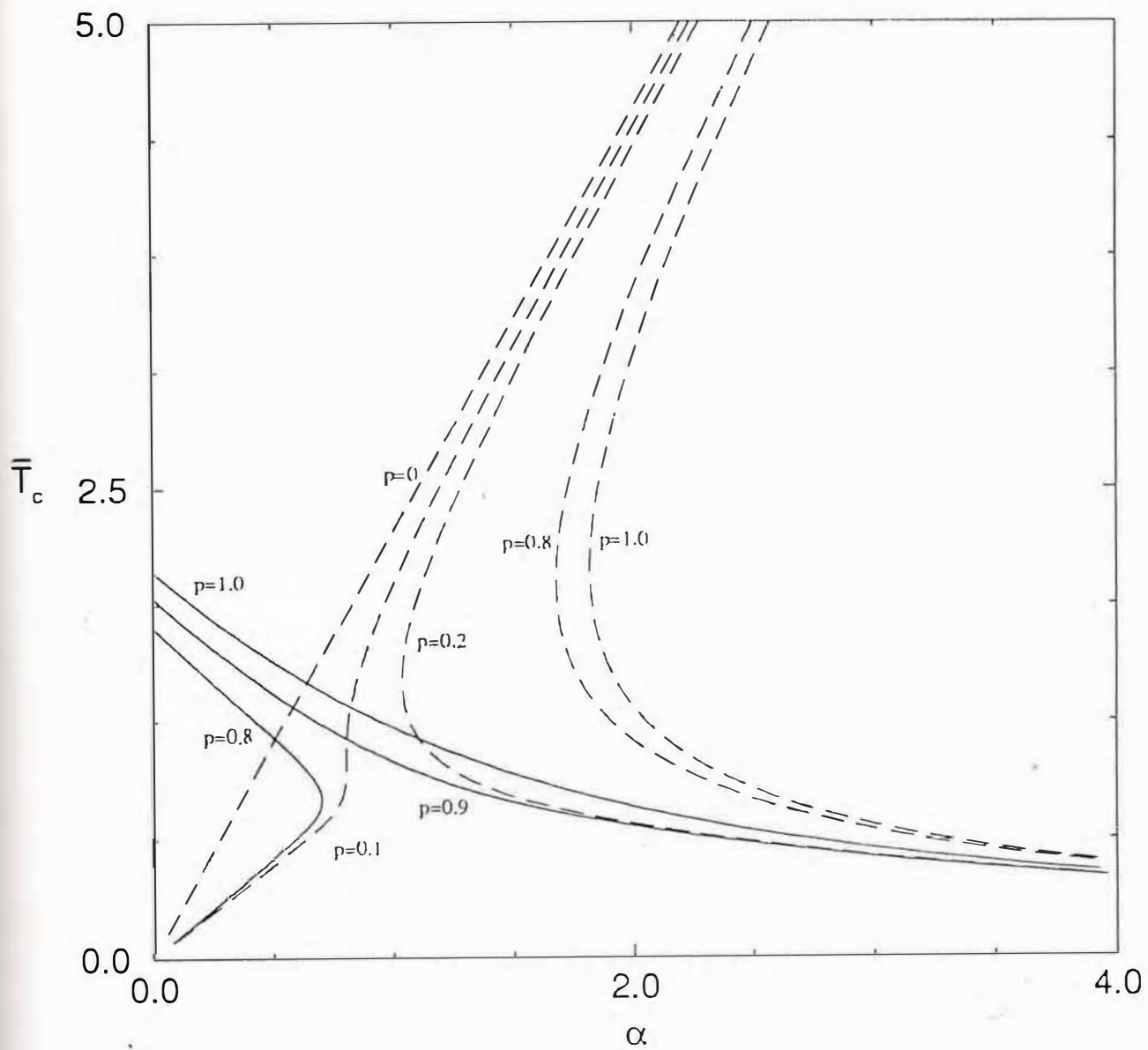


Fig. 3.8 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c = k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha = -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta = 1.5$ e $s = 3/2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

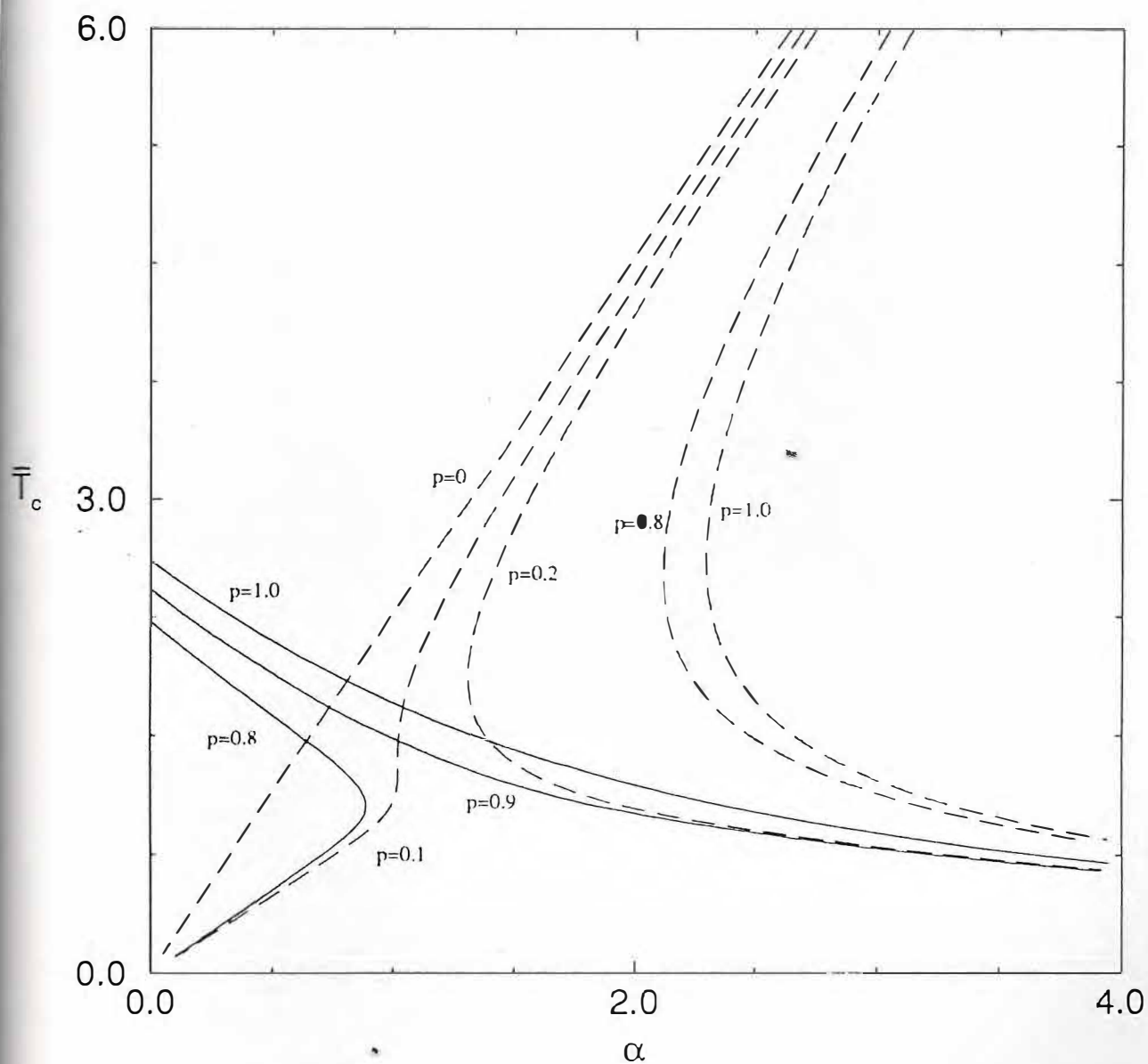


Fig. 3.9 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c = k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha = -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$ e $s=2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

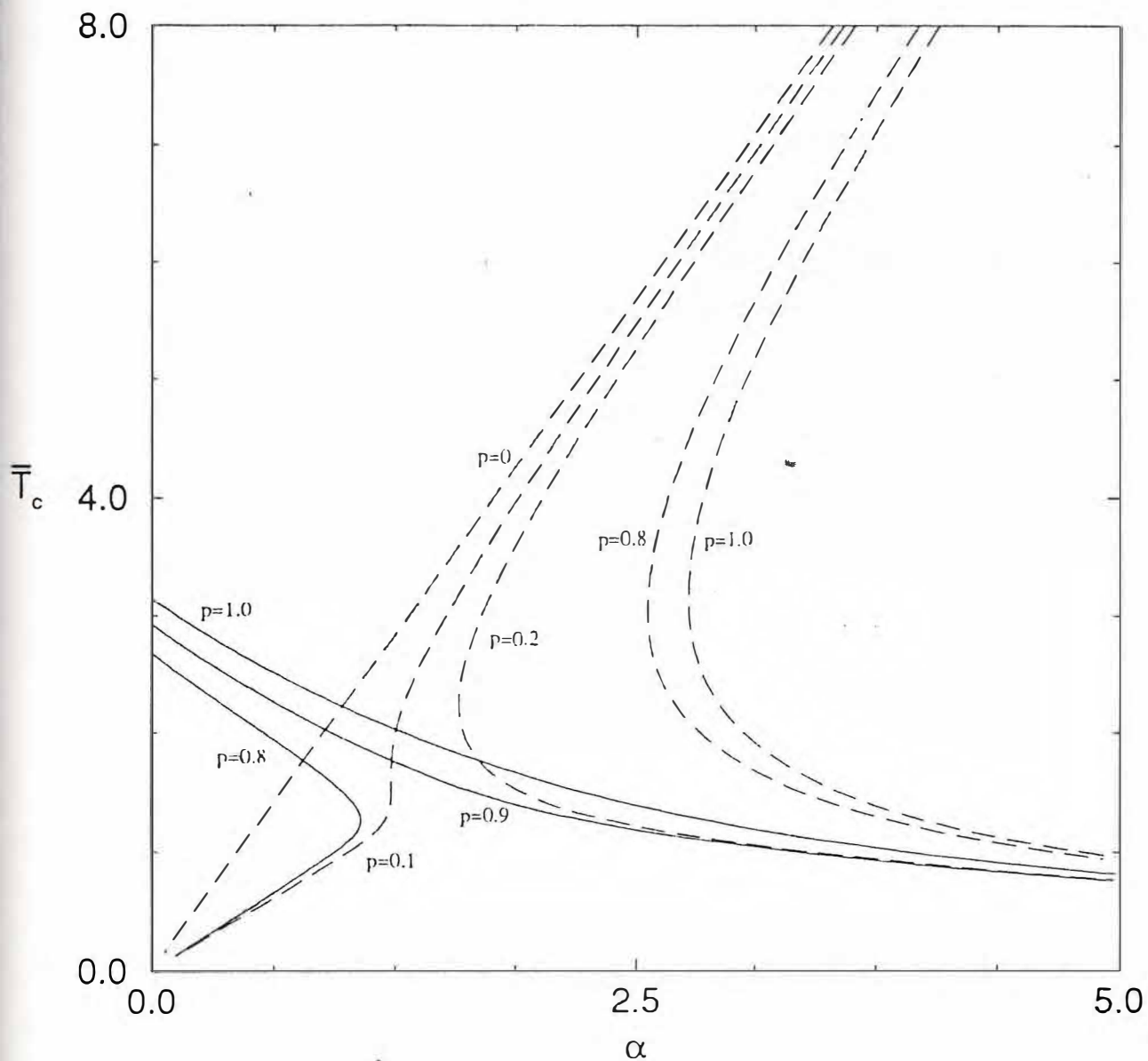


Fig. 3.10 - Temperatura crítica \bar{T}_c ($\bar{T}_c \equiv k_B T_c / J$) como função de α ($\alpha \equiv -\bar{J} / |J|$) para vários p (concentração de ligações decoradas), $\delta=1.5$ e $s=5/2$. As linhas contínuas definem as fronteiras ferromagnéticas e linhas tracejadas as fronteiras antiferromagnéticas.

CONCLUSÕES

Foi estudado o comportamento crítico do modelo de Ising sobre a rede quadrada, com e sem anisotropia uniaxial, decorado aleatoriamente com uma cadeia de M spins de Ising de magnitudes s . As variáveis de decoração de cada ligação foram consideradas satisfazendo uma distribuição recozida ("annealed"), e a solução exata do modelo foi obtida mapeando-o num modelo de Ising efetivo uniforme bidimensional, utilizando-se um processo de decimação sobre os spins que decoram cada ligação.

Os resultados para M arbitrário e finito foram restritos a $s \leq 3/2$, uma vez que não existe solução analítica para a equação que fornece os autovalores da matriz de transferência associada a uma dada ligação quando $s \geq 2$.

O $\lim_{M \rightarrow \infty}$ foi obtido considerando-se a expansão da função de partição em série de potências dos termos da Hamiltoniana que contém a decoração, e calculando-se os traços parciais da série até quarta ordem. Afim de obter-se resultados finitos para a energia, as constantes de interação relativas ao termo de decoração J e D foram normalizadas com M , $J \rightarrow J/\sqrt{M}$ e $D \rightarrow D/M$, sendo possível encontrar para a função de partição uma expressão exata.

Em todos os casos estudados foi determinado explicitamente o diagrama de fases para os valores mais representativos dos parâmetros sendo apresentado ainda o cálculo dos parâmetros críticos,

(concentração crítica) e α_c (parâmetro de competição crítico).

No modelo sem anisotropia uniaxial com M finito, tem-se que, para $0 < \alpha < \alpha_c$, os valores obtidos para a concentração crítica, $p_c = (1 - \sqrt{2}/2)/2$, $p_c = (1 + \sqrt{2}/2)/2$ e $p_c = 1/2$, são universais, uma vez que os mesmos não dependem dos parâmetros que definem o sistema físico. Por outro lado, para $\alpha = \alpha_c$, esta universalidade é violada para $s \geq 3/2$, pois p_c passa a depender de s e M .

A partir dos diagramas de fase apresentados, verifica-se também que existem diferentes intervalos de p em que o estado fundamental das fases ferromagnética e antiferromagnética são estáveis. No caso da fase ferromagnética, o estado fundamental é estável para $(1 + \sqrt{2}/2)/2 < p < 1$, e este intervalo independe dos parâmetros que caracterizam o modelo, enquanto que para a fase antiferromagnética, para $\alpha < \alpha_c$, somente é estável para $0 < p < (1 - \sqrt{2}/2)/2$, e independe de p para $\alpha > \alpha_c$. O fenômeno de reentrância somente aparece na fase ferromagnético quando $\alpha < \alpha_c$ para $0.5 < p < (1 + \sqrt{2}/2)/2$, e na fase antiferromagnético, quando $\alpha \leq \alpha_c$, tal fenômeno ocorre para $p > (1 - \sqrt{2}/2)/2$, sendo observado um comportamento multi-reentrante quando $\alpha > \alpha_c$ para $0.5 < p < 1$.

Para o modelo com anisotropia uniaxial e também com M finito, foram obtidos para a concentração crítica, quando $0 < \alpha < \alpha_c$, os mesmos resultados universais apresentados no caso anterior. Entretanto, para $\alpha = \alpha_c$, a não-universalidade foi observada para $s > 1/2$. Nas fases ferromagnética e antiferromagnética, as regiões de estabilidade do estado fundamental e de aparecimento de comportamento reentrante são idênticas as do modelo sem anisotropia uniaxial, sendo

que, na fase antiferromagnética, o comportamento multi-reentrante é mais pronunciado quando γ e ω tem sinais contrários.

No caso $M \rightarrow \infty$, os resultados para p_c , definidos para $\alpha > 0$, são universais e iguais a $p_c = (1 - \sqrt{2}/2)/2$, $p_c = (1 + \sqrt{2}/2)/2$ e $p_c = 1/2$. Conclui-se ainda que o estado fundamental ferromagnético é estável para $(1 + \sqrt{2}/2)/2 < p < 1$, enquanto que o estado fundamental antiferromagnético é estável, para $0 < p < (1 - \sqrt{2}/2)/2$.

Finalmente, pode-se ainda concluir dos resultados apresentados, que a temperatura crítica, como esperado, aumenta com s e M .

APÊNDICE A

DIAGONALIZAÇÃO DA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA T_{ij}

Os elementos da matriz de transferência T_{ij} associada a uma dada ligação ij , no caso mais geral com anisotropia uniaxial D diferente de zero, são dados pela equação (2.3) para valores arbitrários de s . Como se pode observar a matriz T_{ij} é simétrica, logo pode-se diagonalizá-la através de uma transformação de similaridade, $U^{-1}T_{ij}U$, onde U é uma matriz escolhida convenientemente para cada valor de s .

Para $s=1/2$, a matriz T_{ij} é definida por:

$$T_{ij} = \begin{bmatrix} acb_{ij} & a^{-1}c \\ a^{-1}c & acb_{ij}^{-1} \end{bmatrix} \quad (A.1)$$

onde

$$a = \exp(\bar{K}) \quad , \quad b_{ij} = \exp(h_{ij}/2) \quad e \quad c = \exp(\bar{D}) \quad , \quad (A.2)$$

com \bar{K} e \bar{D} dados por:

$$\bar{K} = \frac{1}{4}\tilde{K} \quad e \quad \bar{D} = \frac{1}{4}\tilde{D} \quad . \quad (A.3)$$

Assim, para $s=1/2$, tem-se:

$$U^{-1}T_{ij}U = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \quad , \quad (A.4)$$

onde λ_1 e λ_2 são os autovalores da matriz T_{ij} . Estes autovalores são obtidos a partir da equação de autovalores dada por:

$$\begin{vmatrix} acb_{ij} - \lambda & a^{-1}c \\ a^{-1}c & acb_{ij}^{-1} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad , \quad (A.5)$$

Desenvolvendo o determinante dado pela equação (A.5), encontra-se a seguinte equação:

$$\lambda^2 - ac \left(b_{ij} + b_{ij}^{-1} \right) \lambda + c^2 \left(a^2 - a^{-2} \right) = 0 \quad , \quad (A.6)$$

a equação (A.6) se reduz ao resultado obtido por McCoy e Wu (1973), para $D=0$ e cuja solução é dada por:

$$\lambda_1(h_{ij}) = ac \left\{ \cosh(h_{ij}/2) + \sqrt{\sinh^2(h_{ij}/2) + \exp(-4\bar{K})} \right\} \quad , \quad (A.7)$$

$$\lambda_2(h_{ij}) = ac \left\{ \cosh(h_{ij}/2) - \sqrt{\sinh^2(h_{ij}/2) + \exp(-4\bar{K})} \right\} \quad , \quad (A.8)$$

Para $s=1$, a matriz T_{ij} é dada por:

$$T_{ij} = \begin{bmatrix} a'c'b_{ij}^2 & c'b_{ij} & a'^{-1}c' \\ c'b_{ij} & 1 & c'b_{ij}^{-1} \\ a'^{-1}c' & c'b_{ij}^{-1} & a'c'b_{ij}^{-2} \end{bmatrix} \quad , \quad (A.9)$$

onde

$$a' = \exp(4\bar{K}) \quad , \quad b_{ij} = \exp(h_{ij}/2) \quad \text{e} \quad c' = \exp(4\bar{D}) \quad . \quad (A.10)$$

Para este caso tem-se:

$$U^{-1}T_{ij}U = \begin{bmatrix} \lambda'_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda'_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda'_3 \end{bmatrix} \quad , \quad (A.11)$$

onde λ'_1 , λ'_2 e λ'_3 são os autovalores da matriz T_{ij} . Estes autovalores são obtidos a partir da equação de autovalores dada por:

$$\begin{vmatrix} a'c'b_{ij}^2 - \lambda' & b_{ij}c' & a'^{-1}c' \\ c'b_{ij} & 1 - \lambda' & c'b_{ij}^{-1} \\ a'^{-1}c' & c'b_{ij}^{-1} & a'c'b_{ij}^{-2} - \lambda' \end{vmatrix} = 0 \quad . \quad (A.12)$$

Desenvolvendo-se o determinante dado pela equação (A.12), encontra-se a seguinte equação:

$$\lambda'^3 - \left[1 + c'a' \left(b'_{ij}{}^2 + b'_{ij}{}^{-2} \right) \right] \lambda'^2 + \left[c'^2 \left(a'^2 - a'^{-2} \right) + c' \left(a' - 1 \right) \right] X \left(b'_{ij}{}^2 + b'_{ij}{}^{-2} \right) \lambda' + c'^2 \left[2 \left(a' - a'^{-1} \right) - \left(a'^2 - a'^{-2} \right) \right] = 0 \quad . \quad (\text{A.13})$$

A equação (A.13), reduz-se ao resultado obtido por Suzuki et al. (1967) quando $D=0$. A equação anterior pode ser reescrita na forma:

$$\lambda'^3 + 3A(h_{ij})\lambda'^2 + 3B(h_{ij})\lambda' + 2C = 0 \quad , \quad (\text{A.14})$$

onde $A(x)$, $B(x)$ e C são definidos por:

$$A(x) = - \frac{2}{3} \left[\frac{1}{2} + a'c' \cosh(2x) \right] \quad , \quad (\text{A.15})$$

$$B(x) = \frac{2}{3} \left[c'^2 \sinh(2\bar{K}) + c' \left(a' - 1 \right) \cosh(2x) \right] \quad , \quad (\text{A.16})$$

$$C = c'^2 \left[2 \sinh(\bar{K}) - \sinh(2\bar{K}) \right] \quad . \quad (\text{A.17})$$

A solução trigonométrica para equações cúbicas (Birkhoff e Maclane, 1977) é dada por:

$$\lambda'_1(x) = 2\alpha_1 \cos \left[\frac{1}{3} \left(\theta_0(x) \right) \right] - A(x) \quad , \quad (\text{A.18})$$

$$\lambda'_2(x) = 2\alpha_1 \cos \left[\frac{1}{3} \left(\theta_0(x) + 2\pi \right) \right] - A(x) \quad , \quad (\text{A.19})$$

$$\lambda'_3(x) = 2\alpha_1 \cos \left[\frac{1}{3} \left(\theta_0(x) + 4\pi \right) \right] - A(x) \quad , \quad (\text{A.20})$$

com

$$\theta_0(x) = \arccos \left[\alpha_2(x) / \alpha_1^3(x) \right] , \quad (\text{A.21})$$

$$\alpha_1(x) = \sqrt{A^2(x) - B(x)} , \quad (\text{A.22})$$

$$\alpha_2(x) = \frac{3}{2} A(x)B(x) - A^3(x) - C . \quad (\text{A.23})$$

Para $s=3/2$, a matriz T_{ij} é definida por

$$T_{ij} = \begin{bmatrix} a^9 c^9 b_{ij}^3 & a^3 c^5 b_{ij}^2 & a^{-3} c^5 b_{ij} & a^{-9} c^9 \\ a^3 c^5 b_{ij}^2 & a c b_{ij} & a^{-1} c & a^{-3} c^5 b_{ij}^{-1} \\ a^{-3} c^5 b_{ij} & a^{-1} c & a c b_{ij}^{-1} & a^3 c^5 b_{ij}^{-2} \\ a^{-9} c^9 & a^{-3} c^5 b_{ij}^{-1} & a^3 c^5 b_{ij}^{-2} & a^9 c^9 b_{ij}^{-3} \end{bmatrix} . \quad (\text{A.24})$$

Neste caso tem-se:

$$U^{-1} T_{ij} U = \begin{bmatrix} \lambda_1' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3' & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4' \end{bmatrix} , \quad (\text{A.25})$$

onde λ_1' , λ_2' , λ_3' e λ_4' são obtidos a partir da equação dada por:

$$\begin{vmatrix} a^9 c^9 b_{ij}^3 - \lambda'' & a^3 c^5 b_{ij}^2 & a^{-3} c^5 b_{ij} & a^{-9} c^9 \\ a^3 c^5 b_{ij}^2 & a c b_{ij} - \lambda'' & a^{-1} c & a^{-3} c^5 b_{ij}^{-1} \\ a^{-3} c^5 b_{ij} & a^{-1} c & a c b_{ij}^{-1} - \lambda'' & a^3 c^5 b_{ij}^{-2} \\ a^{-9} c^9 & a^{-3} c^5 b_{ij}^{-1} & a^3 c^5 b_{ij}^{-2} & a^9 c^9 b_{ij}^{-3} - \lambda'' \end{vmatrix} = 0 . \quad (\text{A.26})$$

Desenvolvendo-se o determinante indicado na equação anterior encontra-se a seguinte relação:

$$\begin{aligned}
& \lambda''''^4 + \left[a^9 c^9 (b_{ij}^3 + b_{ij}^{-3}) + ac (b_{ij} + b_{ij}^{-1}) \right] \lambda''''^3 + \left\{ c^{10} (a^{10} - a^6) x \right. \\
& x \left. (b_{ij}^4 + b_{ij}^{-4}) + c^{10} (a^{10} - a^{-6}) (b_{ij}^2 + b_{ij}^{-2}) + c^{18} (a^{18} - a^{-18}) + \right. \\
& \left. + c^2 (a^2 - a^{-2}) \right\} \lambda''''^2 + \left\{ c^{11} (a^{11} - 2a^7 + 2a^{-1} - a^{-5}) (b_{ij}^3 + b_{ij}^{-3}) + \right. \\
& \left. + c^{19} (a^{19} - a^{15} - a^3 + 2a^{-9} - a^{-17}) (b_{ij} + b_{ij}^{-1}) \right\} \lambda'''' + \\
& + c^{20} \left\{ (a^{20} + a^{-20}) - 3(a^{16} + a^{-16}) + (a^{12} + a^{-12}) + 4(a^8 + a^{-8}) + \right. \\
& \left. - 2(a^4 + a^{-4}) - 1 \right\} = 0 \quad , \quad (A.27)
\end{aligned}$$

o qual foi obtido utilizando-se o programa de manipulação simbólica REDUCE (Rayna, 1987) e também reproduz o resultado obtido por Suzuki et al. (1967) quando $D=0$. Esta equação pode ser reescrita na forma:

$$\lambda''''^4 - 4A'(h_{ij}) \lambda''''^3 + B'(h_{ij}) \lambda''''^2 + C'(h_{ij}) \lambda'''' + D' = 0 \quad , \quad (A.28)$$

onde

$$A'(x) = -\frac{1}{2} \left[a^9 c^9 \cosh(3x) + ac \cosh(x) \right] \quad , \quad (A.29)$$

$$\begin{aligned}
B'(x) = 2 \left\{ c^{10} (a^{10} - a^{-10}) \cosh(4x) + c^{10} (a^{10} - a^{-6}) \cosh(2x) + \right. \\
\left. + c^{18} \sinh(18\bar{K}) + c^2 \sinh(2\bar{K}) \right\} \quad , \quad (A.30)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C'(x) = 2 \left\{ c^{11} (a^{11} - a^{-7} + 2a^{-1} - a^{-5}) \cosh(3x) + \right. \\
\left. + c^{19} (a^{19} - a^{15} - a^3 + 2a^{-9} - a^{-17}) \cosh(x) \right\} \quad , \quad (A.31)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
D' = 2c^{20} \left\{ \cosh(20\bar{K}) - 3\cosh(16\bar{K}) + \cosh(12\bar{K}) + 4\cosh(8\bar{K}) + \right. \\
\left. - 2\cosh(4\bar{K}) - 1 \right\} \quad , \quad (A.32)
\end{aligned}$$

cuja solução (veja por exemplo Birkhoff e Maclane, 1977) é dada por:

$$\lambda_1'(x) = \frac{1}{2} p(x) + \sqrt{\left[\frac{1}{2} p(x)\right]^2 - \left[\frac{1}{2} u_1(x) + q(x)\right]} - A'(x) \quad , \quad (\text{A.33})$$

$$\lambda_2'(x) = \frac{1}{2} p(x) - \sqrt{\left[\frac{1}{2} p(x)\right]^2 - \left[\frac{1}{2} u_1(x) + q(x)\right]} - A'(x) \quad , \quad (\text{A.34})$$

$$\lambda_3'(x) = -\frac{1}{2} p(x) + \sqrt{\left[\frac{1}{2} p(x)\right]^2 - \left[\frac{1}{2} u_1(x) - q(x)\right]} - A'(x) \quad , \quad (\text{A.35})$$

$$\lambda_4'(x) = -\frac{1}{2} p(x) - \sqrt{\left[\frac{1}{2} p(x)\right]^2 - \left[\frac{1}{2} u_1(x) - q(x)\right]} - A'(x) \quad , \quad (\text{A.36})$$

onde $p(x)$, $q(x)$ e $u_1(x)$ são definidos por:

$$p(x) = \sqrt{u_1(x) - \left[B'(x) - 6A'^2(x)B'(x)\right]} \quad , \quad (\text{A.37})$$

$$q(x) = \frac{1}{2} \frac{B'(x) - 2A'(x)B'(x) + 8A'^3(x)}{p(x)} \quad , \quad (\text{A.38})$$

$$u_1(x) = \begin{cases} \left[\alpha_2'(x) + \sqrt{\Delta} \right]^{1/3} + \left[\alpha_2'(x) - \sqrt{\Delta} \right]^{1/3} - a'(x) & \text{para } \Delta > 0, \\ 2 \left[\alpha_2'(x) \right]^{1/3} - a'(x) & \text{para } \Delta = 0, \\ 2\alpha_1(x) \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\alpha_2'(x) / \alpha_1'^3(x) \right) \right] - a'(x) & \text{para } \Delta < 0, \end{cases} \quad (\text{A.39})$$

com $a'(x)$, $b'(x)$ e $c'(x)$ dados por:

$$a'(x) = -\frac{1}{3} \left[B'(x) - 6A'^2(x)B'(x) \right], \quad (\text{A.40})$$

$$b'(x) = -\frac{4}{3} \left[D'(x) - A'(x)C'(x) + A'^2(x)B'(x) - 3A'^4(x) \right], \quad (\text{A.41})$$

$$c'(x) = \frac{1}{2} \left\{ 4 \left[B'(x) - 6A'^2(x)B'(x) \right] \left\{ D'(x) - A'(x)C'(x) + A'^2(x)B'(x) - 3A'^4(x) \right\} - \left[C'(x) - 2A'(x)B'(x) + 3A'^3(x) \right]^2 \right\}, \quad (\text{A.42})$$

onde a dependência de $\alpha_1'(x)$ e $\alpha_2'(x)$ com $a'(x)$, $b'(x)$ e $c'(x)$ é idêntica àquela obtida para $\alpha_1(x)$, eq.(A.22), e $\alpha_2(x)$, eq.(A.23), trocando os termos sem prima pelos com prima dados pelas eqs.(A.40)-(A.42), onde tem-se definido Δ ($\Delta = \alpha_2'^2(x) - \alpha_1'^6(x)$).

APÊNDICE B

CÁLCULO DAS CONCENTRAÇÕES CRÍTICAS

Para se obter as concentrações críticas em função dos parâmetros de interação, toma-se o limite $T \rightarrow 0$ na eq.(1.28), levando-se em consideração a eq.(1.18) e os resultados obtidos para a diagonalização da matriz T_{ij} , apresentados no apêndice A. O cálculo das citadas concentrações para o modelo será efetuado, considerando-se dois casos, $s=1/2$ sem anisotropia uniaxial e $s=1$ e $3/2$ com anisotropia uniaxial.

Deve ser notado que a concentração crítica não é definida para os valores dos parâmetros nos quais o sistema não apresenta ordem no estado fundamental.

B1 MODELO SEM ANISOTROPIA UNIAXIAL

Para $s=1/2$, tomando-se o limite $T \rightarrow 0$ na eq.(1.18), tem-se os seguintes termos dominantes para $X_H(h^-)$ e $X_H(h^+)$:

$$X_H(h^-) \cong \begin{cases} a_H e^{\pm Mh^-} & \text{para } \gamma \pm (1 - \delta) \geq 0 , \\ [1 + (-1)^N] e^{-2M\bar{K}} & \text{para } \gamma \pm (1 - \delta) < 0 , \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

$$X_H(h^+) \cong \begin{cases} b_H e^{Mh^+} & \text{para } \gamma + 1 + \delta \geq 0 , \\ [1 + (-1)^N] e^{-2M\bar{K}} & \text{para } \gamma + 1 + \delta < 0 , \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

onde a_H e b_H são dados por:

$$a_H = \begin{cases} 1 & \text{para } \gamma \pm (1 - \delta) > 0, \\ (2)^{-H} \left[(1 + \sqrt{5})^H + (1 - \sqrt{5})^H \right] & \text{para } \gamma \pm (1 - \delta) = 0, \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

$$b_H = \begin{cases} 1 & \text{para } \gamma + 1 + \delta > 0, \\ (2)^{-H} \left[(1 + \sqrt{5})^H + (1 - \sqrt{5})^H \right] & \text{para } \gamma + 1 + \delta = 0 \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

onde sinal que precede h^- e o parênteses $(1-\delta)$ na eq.(B.1) é considerado positivo se $0 \leq \delta < 1$, e negativo se $\delta \geq 1$. Por simplicidade, não será considerado o índice crítico(c) nos parâmetros críticos, ε e K , presentes na equação que fornece a temperatura crítica. Para $\gamma \pm (1-\delta) \geq 0$ e $\gamma + 1 + \delta \geq 0$, a substituição das eqs.(1.10), (B.1) e (B.2), na eq.(1.28) fornece a seguinte equação:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K} (1+\varepsilon) + (a_H/b_H) t(1-\varepsilon) e^{[2\alpha - M(1+\delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - (a_H/b_H) e^{-MK(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2}} \right]. \quad (\text{B.5})$$

O valor de α crítico (α_c), a partir do qual o estado fundamental ferromagnético não apresenta ordem, pode ser obtido da eq.(B.5), tomando-se o valor 1 para a função exponencial que multiplica o fator $t(1-\varepsilon)$. Desta forma pode-se escrever:

$$\alpha_c = \begin{cases} u\delta M & \text{para } 0 \leq \delta < 1 \\ uM & \text{para } \delta \geq 1 \end{cases}, \quad (\text{B.6})$$

onde neste caso $u=1/2$.

Para $\alpha \neq \alpha_c$, com a substituição dos valores explícitos de t e ε dados pela eq.(1.29) na eq.(B.5), obtém-se para a concentração crítica os seguintes valores:

$$p_c^\pm = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \right] \quad \text{para } 0 < \alpha < \alpha_c \quad , \quad (B.7)$$

$$p_c = \frac{1}{2} \quad \text{para } \alpha = 0 \quad . \quad (B.8)$$

Para $\alpha = \alpha_c$ conclui-se da eq.(B.5) que a concentração crítica é definida para $M=1$ quando $\gamma \pm (1 - \delta) \geq 0$ e $1 + \delta + \gamma \geq 0$, e para $M > 1$ com $\gamma \pm (1 - \delta) > 0$ e $1 + \delta + \gamma > 0$, e nestes casos é dada por:

$$p_c^- = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right] & \text{para } \delta = 1 \quad , \\ \frac{1}{2} & \text{para } \delta \neq 1. \end{cases} \quad (B.9)$$

Para $\gamma \pm (1 - \delta) < 0$ e $1 + \delta + \gamma \geq 0$, a eq.(1.28) com o auxílio das eqs.(1.10), (B.1) e (B.2) toma a seguinte forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + c_H t (1 - \varepsilon) e^{[2\alpha - M(1 + \delta + \gamma)/2]K}}{1 - c_H e^{-MK(1 + \delta + \gamma)/2}} \quad , \quad (B.10)$$

onde

$$c_H = \frac{1 + (-1)^M}{b_H} \quad . \quad (B.11)$$

Neste caso α crítico é definido apenas para M par e é dado por:

$$\alpha_c = \frac{M}{4} (1 + \delta + \gamma) \quad . \quad (B.12)$$

Para $\alpha \neq \alpha_c$ a concentração crítica, obtida da eq.(B.10), é dada pelas eqs.(B.7) e (B.8).

Para $\alpha = \alpha_c$ usando-se as eqs. (1.29), (B.10) e (B.11), conclui-se que a concentração crítica é definida apenas para M par, e é dada pela seguinte expressão:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - c_M) \right] \quad (B.13)$$

Como deve-se ter $\alpha_c \neq 0$, o resultado acima reduz-se ao valor mostrado na eq. (B.7).

Para $1 + \delta + \gamma < 0$, o sistema não apresenta ordem em $T=0$.

B2 MODELO COM ANISOTROPIA UNIAXIAL

O cálculo das concentrações críticas de uma maneira mais geral com anisotropia uniaxial D diferente de zero e $s=1$ e $3/2$, será feito de maneira análoga ao realizado no modelo sem anisotropia uniaxial com $s=1/2$, ou seja, toma-se o limite $T \rightarrow 0$ na eq. (2.13) e usando-se a eq. (1.18), como também os resultados encontrados para a diagonalização da matriz T_{ij} , exibidos no apêndice A. Portanto, fazendo-se $\omega=0$ ($D=0$) obtém-se os resultados para o modelo sem anisotropia uniaxial.

Em todos os casos que serão discutidos a seguir, a partir dos resultados obtidos, pode-se mostrar que para $\alpha \neq \alpha_c$ as concentrações críticas são também dadas pelas eqs. (B.7) e (B.8). Assim sendo serão apresentados apenas as concentrações críticas para $\alpha = \alpha_c$.

B2.1 $s=1$

Os resultados que serão apresentados são válidos apenas para $D \neq 0$. Para $D=0$, as concentrações críticas são idênticas às obtidas para $s=1/2$.

Tomando-se o limite $T \rightarrow 0$ na eq.(2.13), e considerando-se os termos dominantes com sua dependência com M , obtém-se para $X_M(h^-)$ e $X_M(h^+)$:

$$X_M(h^-) \cong \left\{ \begin{array}{l}
 \text{a) } \omega + \tau^- \geq 0 \\
 c_M e^{M[\bar{D} + \bar{K} \pm 2h^-]} \\
 \\
 \text{b) } \omega + \tau^- < 0 \\
 \text{b1) } \omega - 2\gamma + \tau^- \leq 0 \text{ e } \omega - \gamma \leq 0 \\
 d_M \\
 \text{b2) } \omega - 2\gamma + \tau^- > 0 \text{ e/ou } \omega - \gamma > 0 \\
 \text{I) } -\omega + \tau^- > 0 \\
 2e^{M[\bar{D} \pm 2h^-]/2} \quad \text{para } M \text{ par} \\
 e_M e^{(M+1)\bar{D}/2 + \bar{K} \pm (M+1)h^-} \quad \text{para } M \text{ ímpar} \quad (\text{B.14}) \\
 \text{e } \omega - \gamma + \tau^- > 0 \\
 f_M e^{(M-1)(\bar{D} \pm 2h^-)/2} \quad \text{para } M \text{ ímpar } \neq 1 \\
 \text{e } \omega - \gamma + \tau^- \leq 0 \\
 \\
 \text{II) } -\omega + \tau^- \leq 0 \\
 g_M e^{M[\bar{D} - \bar{K}]} \quad \text{para } M \text{ par} \\
 i_M e^{M\bar{D} - (M-2)\bar{K} \pm 2h^-} \quad \text{para } M \text{ ímpar e} \\
 \omega - \gamma + \tau^- > 0 \\
 f_M e^{(M-1)[\bar{D} - \bar{K}]} \quad \text{para } M \text{ ímpar e} \\
 \omega - \gamma + \tau^- \leq 0
 \end{array} \right.$$

$$X_H(h^+) \cong \left\{ \begin{array}{l}
\text{a) } \omega + \tau^+ \geq 0 \\
c_H e^{M[\bar{D} + \bar{K} + 2h^+]} \\
\text{b) } \omega + \tau^+ < 0 \\
\text{b1) } \omega - 2\gamma + \tau^+ \leq 0 \text{ e } \omega - \gamma \leq 0 \\
d_H \\
\text{b2) } \omega - 2\gamma + \tau^+ > 0 \text{ e/ou } \omega - \gamma > 0 \\
\text{I) } -\omega + \tau^+ > 0 \\
2e^{M[\bar{D} + 2h^+]/2} \quad \text{para M par} \\
e_H e^{(M+1)\bar{D}/2 + \bar{K} + (M+1)h^+} \quad \text{para M ímpar e } \omega - \gamma + \tau^+ > 0 \\
f_H e^{(M-1)(\bar{D} + 2h^+)/2} \quad \text{para M ímpar } \neq 1 \text{ e } \omega - \gamma + \tau^+ \leq 0 \\
\text{II) } -\omega + \tau^+ \leq 0 \\
g_H e^{M[\bar{D} - \bar{K}]} \quad \text{para M par} \\
i_H e^{M\bar{D} - (M-2)\bar{K} + 2h^+} \quad \text{para M ímpar e } \omega - \gamma + \tau^+ > 0 \\
f_H e^{(M-1)[\bar{D} - \bar{K}]} \quad \text{para M ímpar e } \omega - \gamma + \tau^+ \leq 0
\end{array} \right. \quad (\text{B.15})$$

onde τ^- , τ^+ , c_H , d_H , e_H , f_H , g_H e i_H , são definidos pelas seguintes expressões:

$$\tau^- = 2\gamma \pm (1 - \delta) \quad , \quad \tau^+ = 2\gamma + 1 + \delta \quad , \quad (\text{B.16})$$

$$c_M = \begin{cases} 1 & \text{para } \omega + \tau^\pm > 0, \\ \phi_M & \text{para } \omega + \tau^\pm = 0, \end{cases} \quad (\text{B.17})$$

onde ϕ_M é definido por:

$$\phi_M = \lambda_1^M + \lambda_2^M + \lambda_3^M \quad (\text{B.18})$$

com

$$\lambda_i = 2\alpha_1 \cos \left\{ \frac{1}{3} \left[\theta_0 + 2\pi(i-1) \right] \right\} + \frac{1}{3} \quad (i=1, 2 \text{ e } 3), \quad (\text{B.19})$$

e α_1 e θ_0 são dados por:

$$\alpha_1 = \frac{2}{3} \quad (\text{B.20})$$

$$\theta_0 = \arccos \left(\frac{11}{12} \right) \quad (\text{B.21})$$

$$d_M = \begin{cases} \xi_M & \text{para } -\gamma + \tau^\pm = 0, \\ \phi_M & \text{para } -\gamma + \tau^\pm > 0, \\ 2 + (-1)^M & \text{para } -\gamma + \tau^\pm < 0, \\ 1 & \text{para } \omega - 2\gamma + \tau^\pm < 0 \text{ e } \omega - \gamma < 0, \end{cases} \quad (\text{B.22})$$

onde ξ_M é definido também pela eq.(B.20) com α_1 e θ_0 dados por:

$$\alpha_1 = \frac{\sqrt{7}}{3}, \quad \theta_0 = \arccos \left(-\frac{\sqrt{7}}{14} \right). \quad (\text{B.23})$$

$$e_M = \begin{cases} \frac{2M}{3} & \text{para } M \text{ ímpar} \neq 1, \\ 1 & \text{para } M=1, \end{cases} \quad (\text{B.24})$$

$$f_M = \begin{cases} \frac{4M}{3} & \text{para } M \text{ ímpar} \neq 1 \text{ e } \omega - \gamma + \tau^\pm = 0, \\ \frac{2M}{3} & \text{para } M \text{ ímpar} \neq 1 \text{ e } \omega - \gamma + \tau^\pm < 0, \\ 2 & \text{para } M=1 \text{ e } \omega - \gamma + \tau^\pm = 0, \\ 1 & \text{para } M=1 \text{ e } \omega - \gamma + \tau^\pm < 0, \end{cases} \quad (\text{B.25})$$

$$g_M = \begin{cases} 2^{1+M/2} & \text{para } -\omega + \tau^\pm = 0, \\ 2 & \text{para } -\omega + \tau^\pm < 0, \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

$$i_M = \begin{cases} 0 & \text{para } M \text{ ímpar e } -\omega + \tau^\pm = 0, \\ \frac{2M}{3} & \text{para } M \text{ ímpar} \neq 1 \text{ e } -\omega + \tau^\pm < 0, \\ 1 & \text{para } M=1 \text{ e } -\omega + \tau^\pm < 0, \end{cases} \quad (\text{B.27})$$

As combinações das condições $\omega + \tau^- \geq 0$ e $\omega + \tau^- < 0$ com $\omega + \tau^+ \geq 0$ e $\omega + \tau^+ < 0$, bem como de suas sub-divisões exibidas nas eqs. (B.16) e (B.17) serão consideradas isoladamente, com exceção da sub-divisão $\omega + \tau^- \geq 0$ e $\omega + \tau^+ < 0$, em que o sistema não exhibe ordem no estado fundamental.

B2.1.1 $\omega + \tau^\pm \geq 0$

Para M arbitrário, $\omega + \tau^- \geq 0$ e $\omega + \tau^+ > 0$ ou $\omega + \tau^- = 0$ e $\omega + \tau^+ = 0$, com a substituição das eqs. (1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq. (2.13), na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon) e^{[2\alpha - M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)]K}}{1 - e^{-MK[1 + \delta \mp 1 \pm \delta]}} \quad (\text{B.28})$$

Da eq. (B.28), nota-se que α crítico é definido também pela equação (B.6), considerando-se $u=1$.

Das eqs. (2.14), (B.17) e (B.28), conclui-se que a concentração crítica é definida para $M=1$ e $\omega + \tau^- > 0$, M arbitrário com

$\omega+\tau^->0$ e $\omega+\tau^+>0$ ou $\omega+\tau^-=0$ e $\omega+\tau^+=0$ e nestes casos é definida pela eq.(B.9). Entretanto, para $\omega+\tau^->0$ e $\omega+\tau^+=0$, o sistema apresenta-se desordenado no estado fundamental.

B2.1.2 $\omega+\tau^-<0$ e $\omega+\tau^+\geq 0$

1º Caso: $\omega-2\gamma+\tau^-\leq 0$ e $\omega-\gamma\leq 0$

Fazendo-se uso das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) a eq.(2.13), fornece a seguinte relação:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (d_H/c_H)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - M(1+\delta + \omega + \gamma)]K}}{1 - (d_H/c_H)e^{-MK[1 + \delta + \omega + \gamma]}} \quad (B.29)$$

Para este caso, tem-se para α crítico o seguinte valor:

$$\alpha_c = \frac{M}{2}[1+\delta+\omega+\gamma] \quad (B.30)$$

Das eqs.(2.14), (B.17), (B.22) e (B.29), conclui-se que a concentração crítica não é definida somente para M par quando $-\gamma+\tau^-<0$. Para os outros casos é dada por:

$$p_c^- = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - d_H/c_H \right) \right] \quad (B.31)$$

2º Caso: $\omega-2\gamma+\tau^->0$ e/ou $\omega-\gamma>0$

a) $-\omega+\tau^->0$

M par

Nesta expansão, usando-se as eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (2/c_H)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - M(2+2\delta + 1 \pm \delta + \omega + 2\gamma)]K}}{1 - (2/c_H)e^{-M[2+2\delta + 1 \pm \delta + \omega + 2\gamma]K}} \quad (B.32)$$

A partir da eq.(B.32), determina-se para α crítico as seguintes relações:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{M}{4}[1+3\delta+\omega+2\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{M}{4}[3+\delta+\omega+2\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.33})$$

Das eqs.(2.14), (B.17) e (B.32), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_c = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - 2/c_H \right) \right] \quad (\text{B.34})$$

M ímpar

Para $\omega - \gamma + \tau > 0$, com a substituição das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \frac{(1+\varepsilon) + (e_H/c_H t (1-\varepsilon)) e^{[2\alpha - \{M(2+2\delta+1+\delta+\omega+2\gamma) + 1+\delta-\omega-2\gamma\}/2]K}}{1 - (e_H/c_H e^{-K[M(1+\delta + 1+\delta+\omega+2\gamma) + 1+\delta-\omega-2\gamma]/2})} \right] \quad (\text{B.35})$$

A eq.(B.45), fornece para α crítico as seguintes relações:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4}[M(1+3\delta+\omega+2\gamma) - 1 + \delta - \omega - 2\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4}[M(3+\delta+\omega+2\gamma) + 1 - \delta - \omega - 2\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.36})$$

Para $\alpha = \alpha_c$ executando-se cálculo com as eqs.(2.14), (B.17), (B.24) e (B.35) conclui-se que a concentração crítica não é definida apenas para M ímpar > 3 e $\omega + \tau > 0$, nos demais casos é dada por:

$$p_c = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - e_H/c_H \right) \right] \quad (\text{B.37})$$

Para $\omega - \gamma + \tau \leq 0$, a substituição das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13), na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + (f_M/c_M)t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - \{M(2+2\delta+1+\delta+\omega+2\gamma)+1+\delta-\omega\}/2]K}}{1 - (f_M/c_M)e^{-K[M(2+2\delta+1+\delta+\omega+2\gamma)+1+\delta-\omega]/2}} \quad (B.38)$$

Para este caso α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4}[M(1+3\delta+\omega+2\gamma)-1+\delta-\omega] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4}[M(3+\delta+\omega+2\gamma)+1-\delta-\omega] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (B.39)$$

Das eqs.(2.14), (B.17), (B.25) e (B.38), conclui-se que a concentração crítica não é definida apenas para M ímpar > 3 quando $\omega - \gamma + \tau^- < 0$ e $\omega + \tau^+ > 0$ com ω arbitrário. Nos demais casos é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - f_M/c_M \right) \right] \quad (B.40)$$

b) $-\omega + \tau^- \leq 0$

M par

Considerando-se as eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + (g_M/c_M)t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - M(1 + \delta + 2\omega)]K}}{1 - (g_M/c_M)e^{-MK[1 + \delta + 2\omega]}} \quad (B.41)$$

Para este caso, tem-se para α crítico a seguinte relação:

$$\alpha_c = \frac{M}{2}[1 + \delta + 2\omega] \quad (B.42)$$

Das eqs.(2.14), (B.17), (B.26) e (B.41), conclui-se que a concentração crítica somente é definida para $-\omega + \tau^- < 0$ e $\omega + \tau^+ \geq 0$ ou $-\omega + \tau^- = 0$ e $\omega + \tau^+ = 0$, e é dada pela seguinte expressão:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - g_M/c_M \right) \right] \quad (B.43)$$

M ímpar

Para $\omega - \gamma + \tau > 0$, a substituição das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) permite escrever a eq.(2.13), na seguinte forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + (i_H/c_H)t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - \{M(1+\delta+2\gamma) \mp 1 \pm \delta - 2\gamma\}]K}}{1 - (i_H/c_H)e^{-[M(1 + \delta + 2\gamma) \mp 1 \pm \delta - 2\gamma]K}} \quad (B.44)$$

Neste caso α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2}[M(1+\delta+2\gamma) - 1 + \delta - 2\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{2}[M(1+\delta+2\gamma) + 1 - \delta - 2\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (B.45)$$

Das eqs.(2.14), (B.17), (B.27) e (B.44), conclui-se que a concentração crítica não é definida apenas para M ímpar > 3 e $\omega + \tau > 0$ com ω arbitrário, enquanto que nos demais casos é dada por:

$$p_c = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - i_H/c_H \right) \right] \quad (B.46)$$

Para $\omega - \gamma + \tau \leq 0$, efetuando-se cálculo com as eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) a eq.(2.13) fornece a seguinte relação:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + (f_H/c_H)t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - \{M(1 + \delta + 2\gamma) + \omega - \gamma\}]K}}{1 - (f_H/c_H)e^{-[M(1 + \delta + 2\gamma) + \omega - \gamma]K}} \quad (B.47)$$

A eq.(B.47) fornece para α crítico a seguinte relação:

$$\alpha_c = \frac{1}{2}[M(1+\delta+2\gamma) + \omega - \gamma] \quad (B.48)$$

Considerando-se as eqs.(2.14), (B.17), (B.25) e (B.47), conclui-se que a concentração crítica não é definida para a combinação a seguir, M ímpar > 3 para $\omega - \gamma + \tau < 0$ e $\omega + \tau > 0$ com ω arbitrário. Nos

demais casos é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - f_M/c_M \right) \right] \quad (B.49)$$

B2.1.3 $\omega + \tau^- < 0$ e $\omega + \tau^+ < 0$

Nesta sub-divisão será tratado somente o caso $\omega - 2\gamma + \tau^\pm > 0$ e/ou $\omega - \gamma > 0$, uma vez que para $\omega - \gamma + \tau^\pm \leq 0$ e $\omega - \gamma \leq 0$, o sistema não apresenta ordem no estado fundamental. Este caso será tratado fazendo-se uso das seguintes combinações $-\omega + \tau^- > 0$ ou $-\omega + \tau^- \leq 0$ com $-\omega + \tau^+ > 0$ ou $-\omega + \tau^+ \leq 0$, com exceção feita à combinação $\omega - 2\gamma + \tau^- > 0$ e $\omega - 2\gamma + \tau^+ \leq 0$, na qual o sistema não apresenta ordem no estado fundamental.

a) $-\omega + \tau^- > 0$ e $-\omega + \tau^+ > 0$

M par

Usando-se as eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) a eq.(2.13) pode ser escrita na seguinte forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon) e^{[2\alpha - M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-MK[1 + \delta \mp 1 \pm \delta]/2}} \quad (B.50)$$

Também neste caso α crítico é definido pela equação (B.6), considerando-se o valor 1/2 para u.

Das eqs.(2.14) e (B.50), tem-se a concentração crítica é dada pela eq.(B.9).

M ímpar

Para $\omega - \gamma + \tau^- > 0$ e $\omega - \gamma + \tau^+ > 0$, substituindo-se as eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) na eq.(2.13), encontra-se a seguinte relação:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon) e^{[2\alpha - (M+1)(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-K(M+1)(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2}} \quad (B.51)$$

Neste caso, obtém-se para α crítico as seguintes relações:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2} (M+1)\delta & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{2} (M+1) & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.52})$$

Das eqs.(2.14) e (B.51), conclui-se que a concentração crítica é dada pela eq.(B.9).

Para $\omega - \gamma + \tau^- \leq 0$ e $\omega - \gamma + \tau^+ > 0$, a eq.(2.13) com o auxílio das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15), dá como resultado a seguinte equação:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \epsilon) + (f_M/e_M)t(1 - \epsilon)e^{[2\alpha - (1 + \delta + \omega + \gamma)/2]K}}{1 - (f_M/e_M)e^{-K(1 + \delta + \omega + \gamma)/2}}. \quad (\text{B.53})$$

Também neste caso α crítico é dado pela eq.(B.30) para $M=1$.

Das eqs.(2.14), (B.24), (B.25) e (B.53), conclui-se que a concentração crítica é dada por:

$$p_c^- = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) & \text{para } \omega - \gamma + \tau^- = 0, \\ \frac{1}{2} & \text{para } \omega - \gamma + \tau^- < 0. \end{cases} \quad (\text{B.54})$$

Para $\omega - \gamma + \tau^\pm \leq 0$ ou $\omega - \gamma + \tau^\pm \leq 0$ e $\omega - \gamma \leq 0$, o sistema não exhibe ordem em $T=0$.

b) $-\omega + \tau^- \leq 0$ e $-\omega + \tau^+ > 0$

M par

Usando-se as eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \epsilon) + (g_M/2)t(1 - \epsilon)e^{[2\alpha - M(1 + \delta - \omega + 2\gamma)/2]K}}{1 - (g_M/2)e^{-MK[1 + \delta - \omega + 2\gamma]/2}}. \quad (\text{B.55})$$

Para este caso, tem-se para α crítico a seguinte relação:

$$\alpha_c = \frac{1}{4}M[1+\delta-\omega+2\gamma] \quad (B.56)$$

Das eqs.(2.14), (B.26) e (B.55), nota-se que a concentração crítica somente é definida para $M=2$ com $-\omega+\tau^-=0$, e para M par $\neq 2$ com $-\omega+\tau^-<0$, sendo nestes casos é dada por:

$$p_c^- = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right] & \text{para } M=2 \text{ e } -\omega+\tau^-=0, \\ \frac{1}{2} & \text{para } M \text{ par e } -\omega+\tau^-<0. \end{cases} \quad (B.57)$$

M ímpar

Para $\omega-\gamma+\tau^->0$ e $\omega-\gamma+\tau^+>0$, com a substituição das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13), na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (i_H/e_H)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - \{(M+1)(1+\delta+\omega) \mp 2 \pm 2\delta - 2\gamma\}/2]K}}{1 - (i_H/e_H)e^{-K[(M+1)(1+\delta+\omega) \mp 2 \pm 2\delta - 2\gamma]/2}} \quad (B.58)$$

Da eq.(B.58), verifica-se que α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4}[(M+1)(1+\delta+\omega) - 2 + 2\delta - 2\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4}[(M+1)(1+\delta+\omega) + 2 - 2\delta - 2\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (B.59)$$

Das eqs.(2.14), (B.24), (B.27) e (B.58), conclui-se que a concentração crítica é dada pela eq.(B.9).

Para $\omega-\gamma+\tau^- \leq 0$ e $\omega-\gamma+\tau^+ > 0$, fazendo-se uso das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (f_H/e_H)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - \{M(1+\delta-\omega) + 1 + \delta + 3\omega\}/2]K}}{1 - (f_H/e_H)e^{-K[M(1+\delta-\omega) + 1 + \delta + 3\omega]/2}} \quad (B.60)$$

Neste caso α crítico é definido pela seguinte expressão:

$$\alpha_c = \frac{1}{4}[M(1+\delta-\omega)+1+\delta+3\gamma] \quad . \quad (B.61)$$

Considerando-se as eqs.(2.14), (B.24), (B.25) e (B.90), conclui-se que a concentração crítica é definida também pela eq.(B.54).

Para $\omega-\gamma+\tau^-\leq 0$ e $\omega-\gamma+\tau^+\leq 0$, com a substituição das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) na eq.(2.13), tem-se:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - \{M(1+\delta-\omega + 2\gamma)+1+\delta+ 3\omega - 2\gamma\}/2]K}}{1 - e^{-K[M(1 + \delta - \omega + 2\gamma) 1 + \delta + 3\omega - 2\gamma]/2}} \quad . \quad (B.62)$$

A partir da eq.(B.62), nota-se que α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \frac{1}{4}[M(1+\delta+\omega+2\gamma)1+\delta+3\omega-2\gamma] \quad . \quad (B.63)$$

Substituindo-se as eqs.(2.14) e (B.25) na eq.(B.62), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_c = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2\sqrt{2}} \right] & \text{para } \omega - \gamma + \tau^- < 0 \text{ e } \omega - \gamma + \tau^+ = 0 , \\ \frac{1}{2} & \text{para } \omega - \gamma + \tau^- = 0 \text{ e } \omega - \gamma + \tau^+ < 0 . \end{cases} \quad (B.64)$$

Para $\omega-\gamma+\tau^-=0$ e $\omega-\gamma+\tau^+<0$ ou $-\omega+\tau^\pm=0$, o sistema não se ordena em $T=0$.

c) $-\omega+\tau^-\leq 0$ e $-\omega+\tau^+\leq 0$

Para este caso, o sistema só apresenta ordem no estado fundamental para M ímpar e $\omega-\gamma+\tau^+>0$.

Para $\omega-\gamma+\tau^->0$ e $\omega-\gamma+\tau^+>0$, a substituição das eqs.(1.10), (B.14) e (B.15) pode-se escrever a eq.(2.13), na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - (1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-K[1 + \delta \mp 1 \pm \delta]/2}} \quad (B.65)$$

Também neste caso α crítico é dado pela eq.(B.6), considerando-se $M=1$ e $u=1/2$.

Das eqs.(2.14) e (B.65), conclui-se que a concentração crítica é definida apenas para $-\omega+\tau^-<0$ e $-\omega+\tau^+<0$ e neste caso é dada pela eq.(B.9).

Para $\omega-\gamma+\tau^-\leq 0$ e $\omega-\gamma+\tau^+>0$, a substituição das eqs.(1.10), (B.22) e (B.23) na eq.(2.13) dá como resultado a seguinte expressão:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + (f_M/i_M)t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - (1 + \delta + \omega + \gamma)]K}}{1 - (f_M/i_M)e^{-K[1 + \delta + \omega + \gamma]}} \quad (B.66)$$

Para este caso α crítico é definido por:

$$\alpha_c = \frac{1}{2}[1 + \delta + \omega + \gamma] \quad (B.67)$$

A eq.(B.66) com o auxílio das relações (2.14), (B.27), (B.25), fornece para a concentração crítica os mesmos valores definidos pela eq.(B.54). Contudo, para M ímpar com $-\omega+\tau^-=0$ e $-\omega+\tau^+=0$, o sistema não possui ordem no estado fundamental.

B2.2 $s = 3/2$

Tomando-se o limite $T \rightarrow 0$ na equação (1.18) e considerando-se a dependência dos termos dominantes $X_M(h^-)$ e $X_M(h^+)$ com M , tem-se

$X_H(h^-) \cong$

a) $2\omega + \rho^- \geq 0$

$$j_H e^{M[9(\bar{D} + \bar{K}) \pm 3h^-]}$$

b) $2\omega + \rho^- < 0$

b1) $\omega - \gamma \leq 0$

$$k_H e^{M(\bar{D} + \bar{K} \pm h^-)}$$

b2) $\omega - \gamma > 0$

I) M par

$$-2\omega + \rho^- \geq 0$$

$$q_H e^{M(5\bar{D} - 3\bar{K} \pm h^-)}$$

$$-2\omega + \rho^- < 0$$

i) $-\omega + \rho^- > 0$

$$2e^{M(5\bar{D} + 3\bar{K} \pm 2h^-)}$$

ii) $-\omega + \rho^- \leq 0$

$$q_H e^{9M(\bar{D} - \bar{K})}$$

II) M ímpar

$$2\omega - \gamma + \rho^- \leq 0$$

$$l_H e^{M(5\bar{D} + 3\bar{K} \pm 2h^-) - 4\bar{D} - 2\bar{K} \mp h^-}$$

$$2\omega - \gamma + \rho^- > 0$$

$$-2\omega + \rho^- \geq 0$$

$$r_H e^{M(5\bar{D} - 3\bar{K} \pm h^-) + 4\bar{D} + 12\bar{K} \pm 2h^-}$$

$$-2\omega + \rho^- < 0$$

i) $-\omega + \rho^- > 0$

$$m e^{M(5\bar{D} + 3\bar{K} \pm 2h^-) + 4\bar{D} + 6\bar{K} \pm h^-}$$

ii) $-\omega + \rho^- \leq 0$

$$r_H e^{9M(\bar{D} - \bar{K}) + 18\bar{K} \pm 3h^-}$$

(B.68)

$$\begin{aligned}
X_H(h^+) \cong & \left\{ \begin{array}{l}
\text{a) } 2\omega + \rho^+ \geq 0 \\
j_M e^{M[9(\bar{D} + \bar{K}) + 3h^+]} \\
\text{b) } 2\omega + \rho^+ < 0 \\
\text{b1) } \omega - \gamma \leq 0 \\
k_M e^{M(\bar{D} + \bar{K} + h^+)} \\
\text{b2) } \omega - \gamma > 0 \\
\text{I) } M \text{ par} \\
-2\omega + \rho^+ \geq 0 \\
q_M e^{M(5\bar{D} - 3\bar{K} + h^+)} \\
-2\omega + \rho^+ < 0 \\
\text{i) } -\omega + \rho^+ > 0 \\
2e^{M(5\bar{D} + 3\bar{K} + 2h^+)} \\
\text{ii) } -\omega + \rho^+ \leq 0 \\
q_M e^{9M(\bar{D} - \bar{K})} \\
\text{II) } M \text{ ímpar} \\
2\omega - \gamma + \rho^+ \leq 0 \\
l_M e^{M(5\bar{D} + 3\bar{K} + 2h^+) - 4\bar{D} - 2\bar{K} - h^+} \\
2\omega - \gamma + \rho^+ > 0 \\
-2\omega + \rho^+ \geq 0 \\
r_M e^{M(5\bar{D} - 3\bar{K} + h^+) + 4\bar{D} + 12\bar{K} + 2h^+} \\
-2\omega + \rho^+ < 0 \\
\text{i) } -\omega + \rho^+ > 0 \\
M e^{M(5\bar{D} + 3\bar{K} + 2h^+) + 4\bar{D} + 6\bar{K} + h^+} \\
\text{ii) } -\omega + \rho^+ \leq 0 \\
r_M e^{9M(\bar{D} - \bar{K}) + 18\bar{K} + 3h^+}
\end{array} \right. \quad (\text{B.69})
\end{aligned}$$

onde ρ^- , ρ^+ , j_M , k_M , l_M , q_M e r_M , são definidos pelas seguintes expressões:

$$\rho^- = 3\gamma \pm (1 - \delta) \quad , \quad \rho^+ = 3\gamma + 1 + \delta \quad , \quad (\text{B.70})$$

$$j_H = \begin{cases} 1 & \text{para } 2\omega + \rho^\pm > 0, \\ (2)^{-M} \left[(1 + \sqrt{5})^M + (1 - \sqrt{5})^M \right] & \text{para } 2\omega + \rho^\pm = 0 \text{ e } \omega \neq 0, \\ (2)^{-M} \left[(1 + \sqrt{13})^M + (1 - \sqrt{13})^M \right] & \text{para } 2\omega + \rho^\pm = 0 \text{ e } \omega = 0, \end{cases} \quad (\text{B.71})$$

$$k_H = \begin{cases} (2)^{-M} \left[(1 + \sqrt{5})^M + (1 - \sqrt{5})^M \right] & \text{para } \omega - \gamma = 0, \\ 1 & \text{para } \omega - \gamma < 0. \end{cases} \quad (\text{B.72})$$

$$l_H = \begin{cases} 2M & \text{para } 2\omega - \gamma + \rho^\pm = 0, \\ M & \text{para } 2\omega - \gamma + \rho^\pm < 0. \end{cases} \quad (\text{B.73})$$

$$q_H = \begin{cases} 2^{M/2} & \text{para } -2\omega + \rho^\pm = 0, \\ 2 & \text{para } -2\omega + \rho^\pm < 0. \end{cases} \quad (\text{B.74})$$

$$r_H = \begin{cases} M & \text{para } -2\omega + \rho^\pm > 0, \\ M2^{(M-1)/2} & \text{para } -2\omega + \rho^\pm = 0. \end{cases} \quad (\text{B.75})$$

As combinações das condições $2\omega + \rho^- \geq 0$ ou $2\omega + \rho^- < 0$ com $2\omega + \rho^+ \geq 0$ ou $2\omega + \rho^+ < 0$, bem como de suas sub-divisões exibidas nas eqs. (B.68) e (B.69) serão tratadas separadamente, com exceção do caso $2\omega + \rho^- > 0$ e $2\omega + \rho^+ < 0$, em que o sistema não exibe ordem no estado fundamental.

B2.2.1 $2\omega + \rho^\pm \geq 0$

Para M arbitrário, $2\omega + \rho^- \geq 0$ e $2\omega + \rho^+ > 0$ ou $2\omega + \rho^- = 0$ e $2\omega + \rho^+ = 0$, das eqs. (1.10), (B.68) e (B.69) pode-se escrever a eq. (2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \epsilon) + t(1 - \epsilon)e^{[2\alpha - 3M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-3MK[1 + \delta \mp 1 \pm \delta]/2}}. \quad (\text{B.77})$$

Também neste caso α crítico é dado pela eq. (B.6) para $u=3/2$.

Das eqs. (2.14), (B.71) e (B.77), conclui-se que a concentração crítica é definida pela eq. (B.9). No entanto, para

$2\omega + \rho^- > 0$ e $2\omega + \rho^+ = 0$, o sistema apresenta-se ordem em $T=0$.

B2.2.2 $2\omega + \rho^- < 0$ e $2\omega + \rho^+ \geq 0$

1º Caso: $\omega - \gamma \leq 0$

Considerando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) a eq.(2.13) pode ser escrita, na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (k_H/j_H)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - M(3+3\delta + 1 \pm \delta + 4\omega + 4\gamma)/2]K}}{1 - (k_H/j_H)e^{-MK[3 + 3\delta + 1 \pm \delta + 4\omega + 4\gamma]/2}} \quad (B.78)$$

A partir da eq.(B.78), verifica-se que α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{M}{2} [1+2\delta+2\omega+2\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{M}{2} [2+\delta+2\omega+2\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (B.79)$$

Das eqs.(2.14), (B.71), (B.72) e (B.78), nota-se que a concentração crítica é definida para M arbitrário quando $\omega - \gamma < 0$ e $2\omega + \rho^+ > 0$, $\omega - \gamma = 0$ e $2\omega + \rho^+ = 0$, $\omega - \gamma < 0$ e $2\omega + \rho^+ = 0$, $M=1$ com $\omega - \gamma = 0$ e $2\omega + \rho^+ > 0$ e é dada por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - k_H/j_H \right) \right] \quad (B.80)$$

2º Caso: $\omega - \gamma > 0$

a) M par

$-2\omega + \rho^- \geq 0$

Operando-se com as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69), a eq.(2.13) fornece a seguinte relação:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (q_H/j_H)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - M(3+3\delta + 1 \pm \delta + 2\omega + 6\gamma)/2]K}}{1 - (q_H/j_H)e^{-MK[3 + 3\delta + 1 \pm \delta + 2\omega + 6\gamma]/2}} \quad (B.81)$$

Neste caso, obtém-se para α crítico as seguintes expressões:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2}M[1+2\delta+\omega+3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{2}M[2+\delta+\omega+3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.82})$$

A eq.(1.139) com o auxílio das relações (2.14), (B.71), (B.74) (B.81), fornece para a concentração crítica a seguinte expressão:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - k_H/j_H \right) \right] \quad (\text{B.83})$$

$$-2\omega + \rho^- < 0$$

$$\text{i) } -\omega + \rho^- > 0$$

Para esta expansão, utilizando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) pode-se reescrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K} (1+\epsilon) + (2/j_H)t(1-\epsilon)e^{[2\alpha - M(3+3\delta + 2 \pm 2\delta + 2\omega + 3\gamma)/2]K}}{1 - (2/j_H)e^{-MK[3 + 3\delta + 2 \pm 2\delta + 2\omega + 3\gamma]/2}} \right] \quad (\text{B.84})$$

A partir da eq.(B.84), define-se α crítico como:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{M}{4}[1+5\delta+2\omega+3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{M}{4}[5+\delta+2\omega+3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.85})$$

Substituindo-se as eqs.(2.14), (B.71) na eq.(B.84), nota-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - 2/j_H \right) \right] \quad (\text{B.86})$$

$$\text{ii) } -\omega + \rho^- \leq 0$$

Usando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69), a eq.(2.13) é

redefinida assumindo a forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (q_M/j_M)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - 3M(1+\delta+9\gamma)/2]K}}{1 - (q_M/j_M)e^{-3MK[1+\delta+9\gamma]/2}} \quad (B.87)$$

Neste caso determina-se para α crítico a seguinte expressão:

$$\alpha_c = \frac{3}{4}M[1+\delta+9\gamma] \quad (B.88)$$

A partir da eq.(B.87), considerando-se as eqs.(2.14), (B.71), (B.74), conclui-se que a concentração crítica também é definida pela eq.(B.83). Porém, para $-\omega+\rho^-=0$ e $2\omega+\rho^+>0$, o estado fundamental do sistema não apresenta ordem.

b) M ímpar

$$2\omega-\gamma+\rho^-\leq 0$$

Usando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (l_M/j_M)t(1-\varepsilon)e^{[2\alpha - \{M(3+3\delta+2\pm 2\delta+2\omega+3\gamma)\pm 1\mp\delta+2\omega+\gamma\}/2]K}}{1 - (l_M/j_M)e^{-K[M(3+3\delta+2\pm 2\delta+2\omega+3\gamma)\pm 1\mp\delta+2\omega+\gamma]/2}} \quad (B.89)$$

Da eq.(B.89), nota-se que α_c crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4}[M(1+5\delta+2\omega+3\gamma)+1-\delta+2\omega+\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4}[M(5+\delta+2\omega+3\gamma)+1-\delta+2\omega+\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (B.90)$$

Utilizando-se as eq.(B.89), (2.14) (B.71) e (B.73), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - l_M/j_M \right) \right] \quad (B.91)$$

$$2\omega-\gamma+\rho^->0$$

i) $-2\omega+\rho^- \geq 0$

A substituição das eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) a eq.(2.13), pode ser escrita na seguinte forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + \vartheta_M t(1-\varepsilon) e^{[2\alpha - \{M(3+3\delta+1+\delta+2\omega+3\gamma)+2\pm 2\delta-2\omega-3\gamma\}/2]K}}{1 - \vartheta_M e^{-K[M(3+3\delta+1+\delta+2\omega+3\gamma)+2\pm 2\delta-2\omega-3\gamma]}/2}} \quad (B.92)$$

onde ϑ_M é definido por:

$$\vartheta_M = r_M/j_M \quad (B.93)$$

Este caso fornece para α crítico as seguintes relações:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4}[2M(1+2\delta+2\omega+3\gamma)-2+2\delta-2\omega-3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4}[2M(2+\delta+2\omega+3\gamma)+2-2\delta-2\omega-3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (B.94)$$

Das eqs.(2.14), (B.92) e (B.93), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - \vartheta_M) \right] \quad (B.95)$$

$$\text{ii) } -2\omega + \rho^- < 0$$

$$-\omega + \rho^- > 0$$

Combinando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) a eq.(2.13), assume a seguinte forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (M/j_M) t(1-\varepsilon) e^{[2\alpha - \{M(3+3\delta+2\pm 2\delta+2\omega+3\gamma)+1+\delta-2\omega-3\gamma\}/2]K}}{1 - (M/j_M) e^{-K[M(3+3\delta+2\pm 2\delta+2\omega+3\gamma)+1+\delta-2\omega-3\gamma]}/2}} \quad (B.96)$$

Da eq.(B.96), conclui-se que α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4} [M(1+5\delta+2\omega+3\gamma) - 1 + \delta - 2\omega - 3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4} [M(5+\delta+2\omega+3\gamma) + 1 - \delta - 2\omega - 3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.97})$$

Das eqs.(2.14), (B.71) e (B.96), conclui-se que a concentração crítica somente é definida para $M=1$ e $2\omega+\rho^+>0$, M ímpar e $2\omega+\rho^+=0$ e é dada por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - M/j_H \right) \right] \quad (\text{B.98})$$

Quando $2\omega+\rho^+>0$, o sistema apresenta-se desordenado em $T=0$.

$$-\omega+\rho^- \leq 0$$

Usando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) pode-se escrever a eq.(2.13), na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K} (1+\varepsilon) + (r_H/j_H) t (1-\varepsilon) e^{[2\alpha - 3\{M(1+\delta+3\gamma) \mp 1 \pm \delta - 3\gamma\}/2]K}}{1 - (r_H/j_H) e^{-3K[M(1+\delta+3\gamma) \mp 1 \pm \delta - 3\gamma]/2}} \right] \quad (\text{B.99})$$

Neste caso α crítico é dado pelas seguintes relações:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2} [M(1+\delta+3\gamma) - 1 + \delta - 3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{2} [M(1+\delta+3\gamma) + 1 - \delta - 3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.100})$$

Considerando-se as eqs.(2.14), (B.71), (B.74) e (B.99), verifica-se que a concentração crítica somente é definida para $M=1$ e $2\omega+\rho^+>0$, M ímpar e $2\omega+\rho^+=0$, e é dada por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - r_H/j_H \right) \right] \quad (\text{B.101})$$

B2.2.3 $2\omega + \rho^- < 0$ e $2\omega + \rho^+ < 0$

1º Caso: $\omega - \gamma \leq 0$

A substituição das eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) permite reescrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-MK[1 + \delta \mp 1 \pm \delta]/2}}. \quad (B.102)$$

A eq.(B.102), fornece para α crítico os mesmos resultados definidos pela eq.(B.6), utilizando-se para u o valor $1/2$.

Das eqs.(2.14) e (B.102), nota-se que para a concentração crítica também é dada pela eq.(B.9).

2º Caso: $\omega - \gamma > 0$

a) M par

I) $-2\omega + \rho^\pm \geq 0$

Nesta expansão a eq.(2.13) com o auxílio das eqs.(1.10), (B.68) e (B.69), é redefinida assumindo a forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-K[M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]}}. \quad (B.103)$$

Para este caso α crítico é dado pela eq.(B.6) considerando o valor $1/2$ para u .

Das eqs.(2.14), (B.103), conclui-se que a concentração crítica é pela eq.(B.9).

II) $-2\omega + \rho^- < 0$

i) $-2\omega + \rho^+ < 0$

$-\omega + \rho^\pm > 0$

Usando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69), a eq.(2.13) pode

ser escrita na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)]K}}{1 - e^{-MK[1 + \delta \mp 1 \pm \delta]}} . \quad (\text{B.104})$$

A partir da eq.(B.104), verifica-se que α crítico é dado pela eq.(B.6) com $u=1$ e utilizando-se as eqs.(2.14), conclui-se que a concentração crítica é definida pela eq.(B.9).

$$-\omega + \rho^- \leq 0 \text{ e } -\omega + \rho^+ > 0$$

Fazendo-se uso das eqs.(1.10), (B.68) e (B.69), pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + (q_H/2)t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - M(1 + \delta - \omega + 3\gamma)/2]K}}{1 - (q_H/2)e^{-MK[1 + \delta - \omega + 3\gamma]/2}} . \quad (\text{B.105})$$

Neste caso α crítico é definido por:

$$\alpha_c = \frac{1}{2}M[1 + \delta - 2\omega + 3\gamma] . \quad (\text{B.106})$$

Das eqs.(2.14), (B.74) e (B.105), observa-se que a concentração crítica é definida para M par e $-\omega + \rho^- < 0$, $M=2$ e $-\omega + \rho^- = 0$, e é dada por:

$$p_c^- = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } M \text{ par e } -\omega + \rho^- < 0 , \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) & \text{para } M=2 \text{ e } -\omega + \rho^- = 0 . \end{cases} \quad (\text{B.107})$$

$$\text{ii) } -2\omega + \rho^+ \geq 0$$

$$-\omega + \rho^- > 0$$

A substituição das eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) na eq.(2.13)

permite reescrevê-la na seguinte forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + (2/l_M)t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - M(1 + \delta + 2 + 2\delta - 3\gamma)/2]K}}{1 - (2/l_M)e^{-MK[1 + \delta + 2 + 2\delta - 3\gamma]/2}} . \quad (B.108)$$

Neste caso α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4}M[-1+3\delta-3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1 , \\ \frac{1}{4}M[3-\delta-3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1 . \end{cases} \quad (B.109)$$

Das eqs.(2.14), (B.108) e (B.74), verifica-se que a concentração crítica é dada por:

$$p_c^- = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(1 - 2/l_M \right) \right] . \quad (B.110)$$

$$-\omega + \rho^- \leq 0$$

Substituindo-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) na eq.(2.13), encontra-se a seguinte relação:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon)e^{[2\alpha - M((1 + \delta - 2\omega + 3\gamma)/2)]K}}{1 - e^{-MK[1 + \delta - 2\omega + 3\gamma]/2}} . \quad (B.111)$$

Para este caso α crítico é definido pela seguinte expressão:

$$\alpha_c = \frac{1}{4}M[1+\delta-2\omega+3\gamma] . \quad (B.112)$$

Das eqs.(2.14), (B.74) e (B.111), conclui-se que a concentração crítica não é definida para $M \text{ par} > 2$ quando $-\omega + \rho^- = 0$ e

$-2\omega+\rho^+>0$, sendo nos demais casos dada por:

$$p_{\bar{c}} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } -\omega+\rho^-<0 \text{ e } -2\omega+\rho^+>0 \text{ ou } -\omega+\rho^-=0 \text{ e } -2\omega+\rho^+=0 , \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right] & \text{para } M=2, -\omega+\rho^-=0 \text{ e } -2\omega+\rho^+>0 , \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} (1 - 2^{-M/2}) \right] & \text{para } -\omega+\rho^-<0 \text{ e } -2\omega+\rho^+=0 . \end{cases} \quad (\text{B.113})$$

b) M Ímpar

I) $-2\omega+\rho^\pm \geq 0$

Utilizando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) pode-se reescrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t \left(\frac{1 - \varepsilon}{2} \right)^{[2\alpha - (M+2)(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-K(M+2)(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2}} . \quad (\text{B.114})$$

Neste caso, obtém-se para α crítico as seguintes expressões:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2} [M+2] \delta & \text{para } 0 \leq \delta < 1 , \\ \frac{1}{2} [M+2] & \text{para } \delta \geq 1 . \end{cases} \quad (\text{B.115})$$

Das eqs.(2.14), (B.74) e (B.114), conclui-se que a concentração crítica não é definida para M ímpar >3 como $-2\omega+\rho^\pm=0$ e $-2\omega+\rho^\pm>0$, sendo nos outros casos dada por:

$$p_{\bar{c}} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } -2\omega+\rho^+>0 , \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} (1 - 2^{-(M-1)/2}) \right] & \text{para } -2\omega+\rho^+=0 . \end{cases} \quad (\text{B.116})$$

$$\text{II) } -2\omega + \rho^- < 0$$

$$\text{i) } -2\omega + \rho^+ < 0$$

$$-\omega + \rho^\pm > 0$$

Operando-se com as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69), pode-se escrever a eq.(2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon) e^{[2\alpha - (2M+1)(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-K(2M+1)(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2}}. \quad (\text{B.117})$$

Neste caso α crítico é definido por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2}[2M+1]\delta & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{2}[2M+1] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.118})$$

A partir das eqs.(2.14) e (B.117), conclui-se que a concentração crítica também é dada pela eq.(B.9).

$$-\omega + \rho^\pm \leq 0$$

Considerando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) a eq.(2.13), pode ser escrita na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1 + \varepsilon) + t(1 - \varepsilon) e^{[2\alpha - 3(1 + \delta \mp 1 \pm \delta)/2]K}}{1 - e^{-3K[1 + \delta \mp 1 \pm \delta]/2}}. \quad (\text{B.119})$$

Neste caso α crítico é dado pela eq.(B.9) com $u=3/2$ e $M=1$.

Das eqs.(2.14), (B.75) e (B.119), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } -\omega + \rho^- = 0 \text{ e } -\omega + \rho^+ < 0, \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2^{(M-1)/2}} \right) \right] & \text{para } -\omega + \rho^- = 0 \text{ e } -\omega + \rho^+ = 0. \\ & -\omega + \rho^- \leq 0 \text{ e } -\omega + \rho^+ > 0 \end{cases} \quad (\text{B.120})$$

Considerando-se as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69), a eq.(2.13) pode ser redefinida como:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\epsilon) + z_H t (1-\epsilon) e^{[2\alpha - \{2M(1+\delta - \omega + 3\gamma) + 1 + \delta + 3 + 3\delta + 2\omega - 6\gamma\}/2]K}}{1 - z_H e^{-K[2M(1+\delta - \omega + 3\gamma) + 1 + \delta + 3 + 3\delta + 2\omega - 6\gamma]/2}} \quad (\text{B.121})$$

onde z_H é definido por:

$$z_H = r_H/M \quad (\text{B.122})$$

A eq.(B.121) fornece para α crítico as seguintes relações:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2} [M(1+\delta - \omega + 3\gamma) - 1 + 2\delta + \omega - 3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{2} [M(1+\delta - \omega + 3\gamma) + 2 - \delta + \omega - 3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases} \quad (\text{B.123})$$

Das eqs.(2.14), (B.121) e (B.122), verifica-se que a concentração crítica não é definida somente para M ímpar > 3 com $-\omega + \rho^- = 0$, sendo nos outros casos dada pela eq.(B.107), trocando-se M par por M ímpar e $M=2$ por $M=3$.

$$\begin{aligned} \text{ii) } -2\omega + \rho^+ &\geq 0 \\ -\omega + \rho^- &> 0 \end{aligned}$$

Considerando-se as eqs. (1.10), (B.68) e (B.69), pode-se escrever a eq. (2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + (M/q_M) t (1-\varepsilon) e^{[2\alpha - \{M((1+\delta+2+2\delta-3\gamma)+2+2\delta+1+\delta+3\gamma)\}/2]K}}{1 - (M/q_M) e^{-K[M(1+\delta+2+2\delta-3\gamma)+2+2\delta+1+\delta+3\gamma]/2}}$$

(B.124)

Para este caso α crítico é definido por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4} [M(-1+3\delta-3\gamma)+1+3\delta+3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4} [M(3-\delta-3\gamma)+3+\delta+3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases}$$

(B.125)

Das eqs. (2.14), (B.74) e (B.124), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} \left(1 - M/l_M \right) \right]$$

(B.126)

$-\omega + \rho^- \leq 0$

Efetando-se cálculo com as eqs. (1.10), (B.68) e (B.69), pode-se escrever a eq. (2.13) na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + t(1-\varepsilon) e^{[2\alpha - \{M(1+\delta-2\omega+3\gamma)+2+2\delta+3+3\delta+2\omega-3\gamma\}/2]K}}{1 - e^{-K[M(1+\delta-2\omega+3\gamma)+2+2\delta+3+3\delta+2\omega-3\gamma]/2}}$$

(B.127)

Neste caso α crítico é definido por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{4} [M(1+\delta-2\omega+3\gamma)-1+5\delta+2\omega-3\gamma] & \text{para } 0 \leq \delta < 1, \\ \frac{1}{4} [M(1+\delta-2\omega+3\gamma)+5-\delta+2\omega-3\gamma] & \text{para } \delta \geq 1. \end{cases}$$

(B.128)

As eqs.(2.14), (B.75) e (B.127), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } -\omega+\rho^-<0 \text{ e } -2\omega+\rho^+>0 \text{ ou} \\ & -\omega+\rho^-=0 \text{ e } -2\omega+\rho^+=0 , \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2^{(M-1)/2}} \right) \right] & \text{para } -\omega+\rho^-<0 \text{ e } -2\omega+\rho^+=0 , \\ \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - 2^{(M-1)/2} \right) \right] & \text{para } -\omega+\rho^-=0 \text{ e } -2\omega+\rho^+>0 . \end{cases} \quad (\text{B.129})$$

III) $2\omega-\gamma+\rho^\pm \leq 0$

Operando-se com as eqs.(1.10), (B.68) e (B.69) vê-se que a eq.(2.13) pode ser escrita na forma:

$$p \cong \frac{1}{2} \left[1 - \frac{e^{-2\alpha K}}{t} \right] \frac{(1+\varepsilon) + t(1-\varepsilon) e^{[2\alpha - \{M(1+\delta \mp 1 \pm \delta) - 1 - \delta \pm 1 \mp \delta\}/2]K}}{1 - e^{-K[M(1 + \delta \mp 1 \pm \delta) - 1 - \delta \pm 1 \mp \delta]/2}} . \quad (\text{B.130})$$

Para este caso α crítico é dado por:

$$\alpha_c = \begin{cases} \frac{1}{2} [\delta(M-1)] & \text{para } 0 \leq \delta < 1 , \\ \frac{1}{2} [M-1] & \text{para } \delta \geq 1 . \end{cases} \quad (\text{B.131})$$

Das eqs.(2.14) e (B.130), conclui-se que a concentração crítica é definida por:

$$p_{\bar{c}} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{para } 2\omega-\gamma+\rho^-<0 , \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \right) & \text{para } 2\omega-\gamma+\rho^-=0 . \end{cases} \quad (\text{B.132})$$

APÊNDICE C

CÁLCULO DOS TRAÇOS SOBRE OS OPERADORES $\bar{\sigma}$

O cálculo do traço indicado na eq.(3.1), será feito expandindo-se a exponencial $\exp(H_{ij})$ em séries de potências (Stanley, 1971) considerando-se o caso mais geral com anisotropia uniaxial diferente de zero. O passo seguinte consiste em efetuar o cálculo dos traços parciais da série obtida. Assim tem-se:

$$\text{Tr} \left[\exp(H_{ij}) \right] = \text{Tr} \left[e^{H_{1,ij}} \cdot e^{H_{2,ij}} \cdot e^{H_{3,ij}} \right] \quad (C.1)$$

onde $H_{1,ij}$, $H_{2,ij}$ e $H_{3,ij}$ são definidos por:

$$H_{1,ij} = \tilde{K} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} \bar{\sigma}_{k+1} \quad (C.2)$$

$$H_{2,ij} = h_{ij} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij} \quad (C.3)$$

$$H_{3,ij} = \tilde{D} \sum_{k=1}^M \bar{\sigma}_{k,ij}^2 \quad (C.4)$$

onde, por simplicidade de notação, são omitidos daqui em diante os índices nos operadores $\bar{\sigma}$'s que identificam a ligação que está sendo decorada.

Expandindo-se em série de potências a exponencial dada pela equação (C.1) e considerando-se as eqs.(C.2)-(C.4), obtém-se:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[e^{H_1} \cdot e^{H_2} \cdot e^{H_3} \right] = \text{Tr} \left\{ 1 + \frac{1}{1!} \left\{ H_1 + H_2 + H_3 \right\} + \frac{1}{2!} \left\{ H_1^2 + 2H_1H_2 + \right. \right. \\ \left. \left. + 2H_1H_3 + 2H_2H_3 + H_2^2 + H_3^2 \right\} + \frac{1}{3!} \left\{ H_1^3 + 3H_1^2H_2 + 3H_1H_2^2 + H_2^3 + 3H_1^2H_3 + \right. \right. \\ \left. \left. + 6H_1H_2H_3 + 3H_2^2H_3 + 3H_1H_3^2 + 3H_2H_3^2 + H_3^3 \right\} + \frac{1}{4!} \left\{ H_1^4 + 4H_1^3H_2 + 6H_1^2H_2^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + 4H_1H_2^3 + H_2^4 + 4H_1^3H_3 + 12H_1^2H_2H_3 + 12H_1H_2^2H_3 + 4H_2^3H_3 + 6H_1^2H_3^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + 12H_1H_2H_3^2 + 6H_2^2H_3^2 + 4H_1H_3^3 + 4H_2H_3^3 + H_3^4 \right\} \dots \right\} . \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Efetuando-se os traços dos termos da equação (C.5) até a quarta ordem, encontra-se os seguintes resultados:

$$\text{Tr}(1) = (2s+1)^M, \quad (\text{C.6})$$

$$\text{Tr}(H_3) = M\tilde{D}(2s+1)^M \left(\frac{1}{3}s(s+1) \right), \quad (\text{C.7})$$

$$\text{Tr}(H_1^2) = M\tilde{K}^2(2s+1)^M \left(\frac{1}{3}s(s+1) \right)^2, \quad (\text{C.8})$$

$$\text{Tr}(H_2^2) = Mh_{ij}^2(2s+1)^M \left(\frac{1}{3}s(s+1) \right), \quad (\text{C.9})$$

$$\text{Tr}(H_3^2) = M\tilde{D}^2(2s+1)^M \left(\frac{1}{15}s(s+1)(3s^2+3s-1) \right) + (M-1) \left(\frac{1}{3}s(s+1) \right)^2, \quad (\text{C.10})$$

$$\text{Tr}(H_1H_2^2) = 2M\tilde{K}h_{ij}^2(2s+1)^M \left(\frac{1}{3}s(s+1) \right)^2, \quad (\text{C.11})$$

$$\text{Tr}(H_1^2H_3) = M\tilde{K}^2\tilde{D}(2s+1)^M \left[\frac{2}{45}s^2(s+1)^2(3s^2+3s-1) + (M-2) \left(\frac{1}{3}s(s+1) \right)^3 \right], \quad (\text{C.12})$$

$$\text{Tr} \left(H_2^2 H_3 \right) = M h_{i,j}^2 \tilde{D} (2s+1)^M \left[\frac{1}{15} s (s+1) (3s^2 + 3s - 1) + (M-1) \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^2 \right] , \quad (\text{C.13})$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(H_3^3 \right) &= M \tilde{D}^3 (2s+1)^M \left\{ \frac{s}{21} (s+1) (3s^4 + 6s^3 - 3s + 1) + \frac{3(M-1)}{45} s^2 (s+1)^2 X \right. \\ &\left. X (3s^2 + 3s - 1) + (M-1)(M-2) \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^3 \right\} , \quad (\text{C.14}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(H_1^4 \right) &= \tilde{K}^4 (2s+1)^M \left\{ \left[\frac{s}{15} (s+1) (3s^2 + 3s - 1) \right]^2 + \frac{12}{5} (M-2) \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^3 X \right. \\ &\left. X (3s^2 + 3s - 1) + 3M(M-1) \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^4 \right\} , \quad (\text{C.15}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(H_1^2 H_2^2 \right) &= M \tilde{K}^2 h_{i,j}^2 (2s+1)^M \left\{ \left[\frac{1}{5} \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^2 (3s^2 + 3s - 1) \right] + (M+2) X \right. \\ &\left. X \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^3 \right\} , \quad (\text{C.16}) \end{aligned}$$

$$\text{Tr} \left(H_2^4 \right) = M h_{i,j}^4 (2s+1)^M \left\{ \left[\frac{1}{15} s (s+1) (3s^2 + 3s - 1) \right] + 3(M-1) \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^2 \right\} , \quad (\text{C.17})$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(H_1 H_2^2 H_3 \right) &= 2M \tilde{D} \tilde{K} h_{i,j}^2 (2s+1)^M \left\{ \left[\frac{2}{45} s^2 (s+1)^2 (3s^2 + 3s - 1) \right] + (M-2) X \right. \\ &\left. X \left(\frac{1}{3} s (s+1) \right)^3 \right\} , \quad (\text{C.18}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left(H_1^2 H_3^2 \right) &= M \tilde{K}^2 \tilde{D}^2 (2s+1)^M \left\{ \frac{2}{63} s(s+1) (3s^4 + 6s^3 - 3s + 1) + 5(M-2) X \right. \\
&X \left[\frac{1}{63} s^3 (s+1)^3 (3s^2 + 3s - 1) \right] + \left[\frac{1}{15} s(s+1) (3s^2 + 3s - 1) \right]^2 + (M-2)(M-3) X \\
&\left. X \left[\frac{1}{3} s(s+1) \right]^4 \right\} , \tag{C.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left(H_2^2 H_3^2 \right) &= M h_{ij}^2 \tilde{D}^2 (2s+1)^M \left\{ \frac{1}{21} s(s+1) (3s^4 + 3s^3 - 3s + 1) + 3(M-1) X \right. \\
&X \left[\frac{1}{45} s^2 (s+1)^2 (3s^2 + 3s - 1) \right] + 2(M-1)(M-2) \left[\frac{1}{3} s(s+1) \right]^3 \left. \right\} , \tag{C.20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr} \left(H_3^4 \right) &= M \tilde{D}^4 (2s+1)^M \left\{ \frac{s}{45} (s+1) (5s^6 + 15s^5 + 5s^4 - 15s^3 - s^2 + 9s - 3) + \right. \\
&+ \frac{4s^2}{45} (s+1)^2 (3s^4 + 6s^3 - 3s + 1) + 3(M-1) \left[\frac{s}{15} (s+1) (3s^2 + 3s - 1) \right]^2 + \\
&\left. + 6(M-1)(M-2) \left[\frac{1}{135} s^3 (s+1)^3 (3s^2 + 3s - 1) \right] + (M-1)(M-2)(M-3) \left[\frac{1}{3} s(2s+1) \right]^4 \right\} , \tag{C.21}
\end{aligned}$$

Afim de obter-se resultados finitos para o comportamento crítico do sistema , renormaliza-se as interações entre os spins $\bar{\sigma}$ e os spins σ com M na forma:

$$J \rightarrow \frac{J}{\sqrt{M}} , \quad D \rightarrow \frac{D}{M} . \tag{C.22}$$

Substituindo-se as eqs.(C.6)-(C.21) na equação (C.1), e considerando-se a equação (C.22), encontra-se:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[e^{H_{ij}} \right] &= (2s+1)^M \left\{ 1 + \frac{1}{1!} \left[\frac{1}{2} \tilde{K}^2 \left(\frac{1}{3} s(s+1) \right)^2 + \left(\frac{1}{2} h_{ij}^2 + \tilde{D} \right) \left(\frac{1}{3} s(s+1) \right) \right] + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{2!} \left[\frac{1}{2} \tilde{K}^2 \left(\frac{1}{3} s(s+1) \right)^2 + \left(\frac{1}{2} h_{ij}^2 + \tilde{D} \right) \left(\frac{1}{3} s(s+1) \right) \right]^2 + \dots \right\} \quad (C.23) \end{aligned}$$

A partir desses resultados encontrados para os traços parciais de ordem mais baixa, tomando-se o $\lim M \rightarrow \infty$, pode-se concluir que a equação anterior pode ser escrita na seguinte forma:

$$\text{Tr} \left[e^{H_{ij}} \right] = (2s+1)^M e^{\frac{\tilde{K}^2 (s(s+1))^2}{18} + \frac{\left(\frac{1}{2} h_{ij}^2 + \tilde{D} \right) (s(s+1))}{3}} \quad (C.24)$$

REFERÊNCIAS

- Birkhoff, K. e Maclane, S., *A Survey of Modern Algebra* (Macmilan Publishing, New York, 1977).
- Brout, R., *Phys. Rev.* 115, 824 (1959)
- Coutinho, S., Sá Barreto, F. C. e dos Santos, R. J. V., *Physica* A196, 461-475 (1993).
- dos Santos, R. J. V. e Coutinho, S., *J. Phys.* A20, 5667 (1987).
- dos Santos, R. J. V., Fittipaldi, I. P., Alstrom, P. e Stanley, H. E., *Phys. Rev.* B40, 4527 (1989).
- dos Santos, R. J. V. Sá Barreto, F. C. e Coutinho, S., *J. Phys.* A23, 2563 (1990).
- Gonçalves, L.L., *Int. J. Mod. Phys.* B5, 675 (1991).
- Gonçalves, L.L. e Horiguchi, T., *Physica* A127, 587 (1984).
- Hattori, M. e Nakano, H., *Prog. Theor. Phys.* 40, 958 (1968).
- Horiguchi, T. e Gonçalves, L. L., *Physica* A120, 600 (1983).
- Ising, E., *Z. Phys.* 31, 253 (1925).
- Lyra, M.L. e Cavalcanti, Solange. B., *Phys. Rev.* B45, 8021 (1991).
- McCoy, B.M. e Wu, T.T., *The Two-Dimensional Ising Model* (Harvard University Press, Cambridge, Mass., 1973) pag.34.
- Nakano, H., *Theor. Phys.* 39, 1121 (1968)
- Onsager, L., *Phys. Rev.* 65, 117 (1944).
- Paul Prbasaj e Mattis, Daniel C., *Phys. Rev.*, B44, 2384 (1991).

- Rayna, G., *REDUCE, Software for Algebraic Computation*
(Springer-Verlag, New York, 1987).
- Stanley, H.E., *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford, 1971) pag.135.
- Suzuki, M. Tsujiyama, B. e Katsura, S., *J. Phys. Math.* 8, 124, (1967).
- Syozi, I., *Prog. Theor. Phys.* 6, 306 (1951).
- Syozi, I., *Prog. Theor. Phys.* 34, 189 (1965).
- Syozi, I., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 1 Editado por C. Domb e M.S. Green (Academic Press, London, 1972), pag. 269.
- Temperley, H. N. V., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 1, Editado por C. Domb e M.S. Green (Academic Press, London, 1972), pag. 227.
- Yang, C. N., *Phys. Rev.* 85, 808 (1952).