

IFUSP/P 358
B.L.F. - USP

publicações

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**INSTITUTO DE FÍSICA
CAIXA POSTAL 20516
01000 - SÃO PAULO - SP
BRASIL**



IFUSP/P-358

7 NOV 1982

INTRODUÇÃO AOS FENÔMENOS CRÍTICOS E MULTICRÍTICOS

por

Silvio R.A. Salinas

Instituto de Física, Universidade de São Paulo

Setembro/1982

INTRODUÇÃO AOS FENÔMENOS CRÍTICOS E MULTICRÍTICOS

Silvio R.A. Salinas

Instituto de Física, Universidade de São Paulo
C.P. 20516, São Paulo, SP, Brasil

RESUMO

Na primeira parte destas notas de aula abordamos o comportamento da matéria nas vizinhanças dos pontos críticos simples. Introduzimos os conceitos de expoentes críticos e de universalidade, descrevemos as teorias clássicas do comportamento crítico e a teoria fenomenológica de escala das funções termodinâmicas e das correlações críticas. Finalmente, encerramos a primeira parte com uma descrição da teoria do grupo de renormalização, que fornece as bases microscópicas para as leis de escala. Na segunda parte destas notas estudamos quatro tipos de pontos multicríticos que já foram detectados em cristais: pontos tricríticos, bicríticos, tetracríticos e pontos de Lifshitz. Descrevemos a teoria de Landau e a formulação das leis de escala nas vizinhanças destes pontos. Também descrevemos as principais características de alguns modelos teóricos que produzem pontos multicríticos - o metamagneto de Ising e o modelo BEG, que apresentam pontos tricríticos, e o modelo ANNNI, que apresenta um ponto de Lifshitz. Descrevemos a abordagem de grupo de renormalização no espaço de Fourier para o metamagneto de Ising e as novas técnicas de aproximantes diferenciais parciais para analisar o comportamento de escala nas vizinhanças dos pontos multicríticos.

ABSTRACT

In the first part of these notes we treat the behavior of matter in the neighborhood of simple critical points. We introduce the concepts of critical exponents and universality, and we describe the classical theories of the critical behavior and the phenomenological scaling theories of the thermodynamic functions and the critical correlations. Finally, we end the first part with a description of the theory of the renormalization group, which gives the microscopic bases of the scaling laws. In the second part of these notes we study four types of multicritical points which have already been detected in solid crystals: tricritical, bicritical, tetracritical, and Lifshitz points. We describe Landau's theory and the formulation of the scaling laws in the neighborhood of these points. Also, we describe the main features of some theoretical models which produce multicritical points - the Ising metamagnet and the BEG model, which exhibit tricritical points, and the ANNNI model, which exhibits a Lifshitz point. We present the renormalization group approach in the Fourier space to the Ising metamagnet, and the new techniques of partial differential approximants to analyze the scaling behavior in the neighborhood of the multicritical points.

1. COMPORTAMENTO CRÍTICO - INTRODUÇÃO

Pontos críticos e multicríticos ocorrem num grande número de sistemas - fluidos simples e misturas de fluidos, materiais magnéticos, cristais líquidos, superfluidos, materiais ferroelétricos, ligas, etc.. Inicialmente vamos abordar apenas os pontos críticos usuais e considerar as propriedades da matéria nas suas vizinhanças⁽¹⁾. Aliás, poderíamos desta forma caracterizar um novo estado da matéria - o estado crítico. Na segunda parte destas notas vamos nos ocupar com a questão dos pontos multicríticos.

Todos conhecem o diagrama de fases de um fluido simples, como a água, que está esquematizado na Fig. 1a. Estamos usando um espaço de "campos", que são variáveis intensivas da termodinâmica, assumindo os mesmos valores em duas fases que coexistem. As linhas cheias mais fortes do diagrama $p \times T$ são linhas de coexistência de fases (transformações de primeira ordem). Há um ponto triplo, onde coexistem três fases, e um ponto crítico, que corresponde ao "terminus" de uma linha de primeira ordem. Pode-se notar que é possível passar do estado gasoso ao estado líquido sem nenhuma anomalia termodinâmica.

Talvez um diagrama de fases da densidade contra a temperatura seja até mais conhecido (ver a Fig. 1b). Como agora estamos usando variáveis mistas, um campo e uma densidade, surgem claramente as regiões de coexistência de fases. Observando mais detalhadamente a região crítica, nas vizinhanças de ρ_c e T_c , podemos traçar um gráfico de $\psi \equiv \rho_L - \rho_G$, isto é, da diferença entre as densidades das fases líquida e gasosa, em função da temperatura (ver Fig. 2). Curvas desta natureza foram analisadas por Guggenheim⁽²⁾ há cerca de quarenta anos no caso de vários gases simples para $T \lesssim T_c$. Em geral temos

$$\psi \equiv \rho_L - \rho_G \sim (T_c - T)^{1/3} \quad (1.1)$$

A grandeza ψ é o parâmetro de ordem da transição, que neste caso exibe um comportamento típico das transições de segunda ordem - é diferente de zero abaixo de T_c , mas se anula acima de T_c . Na realidade ψ poderia ser definido de outras formas, como $\rho_L - \rho_c$, por exemplo, mas

sempre dando uma medida da diferença entre as duas fases.

Nestas notas vamos nos concentrar no caso de sólidos, em que a transição de fases envolve uma quebra de simetria - há então uma fase ordenada, que tem simetria mais baixa, e uma fase desordenada. Neste caso fica bem clara a definição de parâmetro de ordem. Como exemplo, vamos estudar um ferromagneto, cujo diagrama de fases em termos de variáveis de campo está esquematizado na Fig. 3. A situação é análoga à da Fig. 1a, embora a alta simetria do ferromagneto torne este sistema bastante mais atraente sob o ponto de vista teórico. O gráfico da magnetização M em função do campo H (que deve ser o campo interno, devidamente corrigido para eliminar os efeitos de desmagnetização), esquematizado na Fig. 4, permite uma boa caracterização da magnetização espontânea, $M_0(T) \equiv M(T, H \rightarrow 0^+)$, que pode ser tomada como o parâmetro de ordem ψ do sistema. Nas vizinhanças do ponto crítico, a variação de ψ com a temperatura pode novamente ser caracterizada pelo gráfico da Fig. 2. Deve-se notar que sempre há uma variável termodinâmica canonicamente conjugada ao parâmetro de ordem - no caso de um fluido o conjugado de $\rho_L - \rho_G$ é $\mu_L - \mu_G$, a diferença entre os potenciais químicos, enquanto no caso de um ferromagneto o conjugado é o campo magnético interno. Em geral vamos dizer que ζ é o campo conjugado a ψ (no ponto crítico temos $T = T_c$ e $\zeta = 0$).

Prosseguindo nesta mesma linha podemos citar uma série de exemplos de parâmetros de ordem. No caso de um antiferromagneto, que será considerado em detalhe mais adiante, o parâmetro de ordem pode ser dado pela magnetização espontânea de subrede (também chamada de magnetização "staggered", ou alternada). Neste caso o campo conjugado é um campo alternado, que muda de direção em cada subrede. O campo físico, que se consegue no laboratório depois de corrigidos os efeitos de desmagnetização, está acoplado à magnetização termodinâmica. O campo alternado, no entanto, tem grande utilidade teórica, embora raramente, só por acaso, possa ser realizado experimentalmente.

1.1. EXPOENTES CRÍTICOS. UNIVERSALIDADE

As proximidades da região crítica têm sido caracterizadas pe

los "expoentes críticos". Vamos utilizar a linguagem do ferromagnetismo para definir alguns expoentes (a transposição para outros sistemas é bastante óbvia):

(i) o expoente β é definido pela relação

$$\psi \sim \beta |t|^\beta, \quad (1)$$

onde $t \equiv (T - T_c)/T_c$ e $\psi = M(T, H \rightarrow 0^+)$, isto é, ψ é o parâmetro de ordem com o campo conjugado $\zeta = 0$. O sinal \sim designa um comportamento assintótico nas proximidades do ponto crítico. Valores típicos de β estão na faixa entre 0,31 e 0,34. Assim, por exemplo, para o latão $\beta \approx 0,293$, para o dióxido de carbono $\beta \approx 0,321$, e para o xenônio $\beta \approx 0,31$.

(ii) o expoente γ está relacionado à suscetibilidade $\chi(T, H) \equiv (\partial M / \partial H)_T$, isto é, à resposta da variável termodinâmica associada ao parâmetro de ordem a um estímulo produzido por seu campo conjugado. Assim temos

$$\chi(T, H = 0) \sim \begin{cases} C_+ |t|^{-\gamma} & \text{para } T > T_c \\ C_- |t|^{-\gamma'} & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (2)$$

Em geral os expoentes γ e γ' estão numa faixa entre 1,23 e 1,25 para fluidos ou materiais magnéticos anisotrópicos. Para materiais magnéticos altamente isotrópicos estes expoentes estão em geral entre 1,35 e 1,39.

(iii) o expoente δ está associado à isoterma crítica, sendo definido pela relação

$$H \sim |M(T = T_c, H)|^\delta \quad (3)$$

Valores típicos de δ estão entre 4,2 e 4,5.

(iv) o expoente α , associado ao calor específico, é definido pe

la relação

$$c_{\psi \equiv 0} \sim \begin{cases} A_+ |t|^{-\alpha} & \text{para } T > T_c \\ A_- |t|^{-\alpha'} & \text{para } T < T_c \end{cases} \quad (4)$$

Em geral α e α' são muito pequenos mas positivos. Nesta notação uma divergência fraca, de caráter logarítmico, seria caracterizada por $\alpha = 0$; por outro lado, $\alpha = 0$ também pode significar um calor específico finito na temperatura crítica, com uma possível descontinuidade ou então uma forma de cúspide em torno de T_c . A notação $\psi \equiv 0$ significa volume constante no caso de fluidos, ou campo nulo no caso de ferromagnetos.

Deve-se observar que sempre há uma certa ambigüidade na medida dos expoentes críticos. Qual a região assintótica? Será que o comportamento assintótico já teria sido atingido? Estas questões se tornam ainda mais graves na presença de fenômenos de cruzamento, que serão considerados mais adiante. No entanto, cabe aqui um compromisso entre o teórico e o físico experimental. Talvez muitas dúvidas se dissipem pela observação de dados experimentais obtidos com extremo cuidado e paciência⁽³⁾ - num papel log-log estes dados muitas vezes podem ser associados a retas por várias décadas de valores de $\log |t|$.

É importante notar que os valores dos índices críticos são aproximadamente os mesmos para materiais tão diversos como fluidos ou cristais ferromagnéticos. Quais são então os fatores que definem os índices críticos? Modernamente se reconhece que a "classe de universalidade" à qual pertence um certo ponto crítico é independente da maior parte dos detalhes das interações microscópicas que estão em jogo, mas depende de algumas propriedades fundamentais:

(i) a dimensionalidade espacial d do sistema. Nos casos ordinários $d = 3$; $d = 2$ em fenômenos de superfície; $d = 4$ representa uma espécie de fronteira de grande interesse teórico.

(ii) a simetria do parâmetro de ordem, representada normalmente pelo número n de componentes de ψ . No caso de ferro ou

antiferromagnetos uniaxiais $n = 1$; $n = 2$ na transição superfluida; $n = 3$ para ferromagnetos cúbicos isotrópicos. Em linguagem mais técnica, n é a dimensão da representação irredutível associada ao parâmetro de ordem.

(iii) o alcance das forças microscópicas de interação. Em geral, nas situações de interesse físico, as interações são de curto alcance. As forças de longo alcance são as interações dipolares e as forças elásticas, por exemplo, que em muitos casos desempenham um papel secundário.

1.2. TEORIAS CLÁSSICAS DO COMPORTAMENTO CRÍTICO

A equação de van der Waals para a transição líquido-gás de um fluido, que já completou mais de um século de existência, constitui a primeira tentativa teórica bem sucedida de explicar o comportamento crítico. As teorias de Curie-Weiss para o ferromagnetismo, de Bragg-Williams para as ligas binárias, de Néel para o antiferromagnetismo, constituem também exemplos análogos ao da teoria de van der Waals. To das estas teorias do comportamento crítico, geralmente conhecidas como teorias de campo médio ou campo efetivo, bem como os seus vários tipos de aperfeiçoamentos ou generalizações, acabam produzindo uma expressão para a energia livre que tem uma forma geral proposta por Landau⁽⁴⁾ em 1937. Na linguagem dos ferromagnetos a energia livre de Landau é dada por

$$G(T, H) = -MH + A + BM^2 + CM^4 + \dots \quad (5)$$

onde os coeficientes A, B, C, \dots são funções analíticas da temperatura (devido à simetria do ferromagneto não surgem nesta expansão as potências ímpares da magnetização). Nas vizinhanças de um ponto crítico usual A e C devem ser praticamente constantes, ao passo que B deve variar linearmente com a temperatura. Assim temos

$$A(T) \approx A(T_c) \quad (6a)$$

$$B(T) \approx B(T_c) \quad , \quad \text{onde } B > 0 \quad (6b)$$

e

$$C(T) \approx C(T_c) > 0 \quad (6c)$$

Para campo nulo e nas vizinhanças de T_c , a energia livre pode ser representada esquematicamente pelos gráficos da Fig. 5.

A partir das Eqs. (5) e (6) é fácil mostrar que a magnetização espontânea será dada por

$$M_0^2 \sim -\frac{B}{2C} (T - T_c) \quad , \quad (7)$$

ou seja, $\beta = 1/2$. Por outro lado, a suscetibilidade a campo nulo será dada assintoticamente por

$$X \sim \frac{1}{2B} (T - T_c)^{-1} \quad \text{para } T > T_c \quad (8a)$$

e

$$X \sim \frac{1}{4B} (T_c - T)^{-1} \quad \text{para } T < T_c \quad (8b)$$

Isto indica que $\gamma = \gamma' = 1$ e que $C+/C- = 2$. A isoterma crítica será dada por

$$H \sim 4CM^3 \quad , \quad (9)$$

ou seja, $\delta = 3$. Também é possível mostrar que o calor específico a campo nulo não diverge, sofrendo apenas uma descontinuidade através de T_c . Então temos $\alpha = \alpha' = 0$.

É interessante observar que os expoentes críticos clássicos satisfazem as desigualdades

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad (\text{Rushbrooke}) \quad , \quad (10)$$

$$\alpha' + \beta(1+\delta) \geq 2 \quad (\text{Griffiths}) \quad (11)$$

como igualdades estritas. Estas desigualdades podem ser provadas em termos bem gerais, para fluidos ou ferromagnetos, com base apenas em argumentos de convexidade ou de estabilidade termodinâmica⁽⁵⁾. Também é interessante notar que nas proximidades do ponto crítico temos

$$G(T,H) - A \sim - \frac{H^2}{2\beta(T-T_c)} = - \frac{1}{2\beta} (T-T_c)^2 \left[\frac{H}{(T-T_c)^{3/2}} \right]^2 \quad (12)$$

ou seja,

$$G(T,H) - A \sim t^{2-\alpha} F\left(\frac{H}{t^\Delta}\right) \quad (13)$$

com

$$F(x) = (\text{constante}) \cdot x^2 \quad (14)$$

e $\Delta = \beta\delta$. A Eq. (13) constitui a chamada "forma de escala" da energia livre clássica.

1.3. O MODELO DE ISING⁽⁶⁾ E AS FALHAS DAS TEORIAS CLÁSSICAS

Os valores dos expoentes críticos obtidos através da energia livre de Landau estão em franco desacordo com os resultados experimentais mencionados na seção 1.1. Também estão em desacordo com alguns cálculos rigorosos de modelos estatísticos e com resultados obtidos através de análises das expansões em séries de certas grandezas termodinâmicas.

Na realidade há muito poucos modelos estatísticos não triviais que podem ser resolvidos exatamente. Daí vem a importância do modelo de Ising, que pode ser definido pelo hamiltoniano

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \quad (15)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$, $\forall i$, e a primeira soma é sobre os vizinhos mais próximos de uma rede cristalina. Em uma dimensão ($d = 1$), as funções termo dinâmicas do modelo de Ising são perfeitamente analíticas. Em $d = 2$, para $H = 0$, Onsager produziu uma solução famosa, a partir da qual obtemos $\alpha = \alpha' = 0$ (divergência logarítmica) e $\beta = 1/8$. Outro resultado rigoroso⁽⁷⁾ em $d = 2$ é $\gamma = \gamma' = 7/4$. É interessante observar que a desigualdade de Rushbrooke (Eq. 10) é obedecida como uma igualdade embora o novo conjunto de valores dos índices α , β e γ seja diferente tanto dos dados experimentais quanto dos resultados clássicos.

Em $d = 3$ não há soluções exatas para as funções termodinâmicas do modelo de Ising. No entanto, nos últimos trinta anos foram desenvolvidas técnicas de expansões em série⁽⁸⁾, de altas ou de baixas temperaturas, que com um enorme trabalho permitem a obtenção de valores para os índices críticos, dentro de um certo intervalo de erro. Na tabela abaixo indicamos os melhores valores para os índices críticos de modelo de Ising tridimensional por ocasião da publicação do terceiro volume da série sobre fenômenos críticos editada por Domb e Green (1974).

TABELA DE EXPOENTES CRÍTICOS

	Landau	Ising $d = 2$	Ising $d = 3$	Experiência	Esférico $d = 3$
β	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{8}$	$\approx \frac{5}{16} = 0,312$ (5)	0,3 - 0,35	$\frac{1}{2}$
γ, γ'	1	$\frac{7}{4}$	$\approx \frac{5}{4} = 1,25$	1,2 - 1,4	$\gamma = 2$
δ	3	15	$\approx 5,00$ (5)	4,2 - 4,8	5
α, α'	0	0(log)	$\approx \frac{1}{8} = 0,125$	≈ 0	-1

A tabela acima indica claramente que o modelo de Ising tridi

mensional, apesar de toda a sua simplicidade, apresenta valores para os expoentes críticos que se situam nas proximidades da faixa experimental. Os valores clássicos devem ser seguramente descartados (mais adiante vamos ver que eles seriam válidos para uma situação em que $d \geq 4$). Por curiosidade incluímos na última coluna da tabela os valores exatos obtidos para o modelo esférico⁽⁹⁾, que corresponde a uma situação bastante artificial em que as variáveis de spin pertencem ao domínio dos reais, mas com a restrição global de que $\sum_i \sigma_i^2 = N$.

Antes de encerrar esta seção seria interessante apontar que há várias maneiras de resolver aproximadamente o modelo de Ising, sempre produzindo uma expressão do tipo da Eq. (5) e, portanto, expoentes clássicos⁽¹⁰⁾. Por exemplo, basta supor que a magnetização m por spin esteja fixa e escrever a energia livre na forma

$$G(m) = U - TS \quad (16)$$

onde

$$S = k_B \ln \frac{N!}{N_+! N_-!} \quad (17)$$

com $M = Nm = N_+ - N_-$ e $N = N_+ + N_-$. Se pudéssemos obter uma expressão rigorosa para a energia interna U com o vínculo de m fixo o problema poderia ser resolvido exatamente (bastaria retirar o vínculo, minimizando G em relação a m). A aproximação usual de campo médio consiste em partir da Eq. (5) e fazer

$$U = \langle H \rangle \approx \frac{qN}{2} m^2 - HNm \quad (18)$$

onde q é o número de vizinhos na rede. Agora é simples escrever a energia livre $G(m)$ na forma de Landau.

1.4. TEORIAS DE ESCALA DO COMPORTAMENTO CRÍTICO

A expansão da energia livre em uma série de potências do pa-

râmetro de ordem é uma hipótese demasiadamente forte. Para o próprio modelo de Ising bidimensional a solução de Onsager indica que não é possível escrever esta série com coeficientes que sejam funções analíticas da temperatura. As modernas hipóteses de escala, por outro lado, são mais fracas, propõem apenas certas formas gerais para os potenciais termodinâmicos, e não produzem valores para os expoentes críticos. Embora não permitam uma abordagem microscópica dos fenômenos críticos, as hipóteses de escala apontam um caminho para generalizar as equações de van der Waals ou de Curie-Weiss. O embasamento microscópico das teorias de escala será fornecido posteriormente pela moderna teoria do grupo de renormalização.

A hipótese de escala consiste na suposição de que, nas proximidades do ponto crítico, a parte singular da energia livre possa ser escrita na forma de uma função homogênea generalizada, isto é,

$$G_{\text{sing}}(t, H) = \lambda G(\lambda^a t, \lambda^b H) \quad (19)$$

onde λ assume qualquer valor e os expoentes a e b são dois parâmetros. Em particular, fazendo $\lambda^a t = 1$ temos

$$G_{\text{sing}}(t, H) = t^{-\frac{1}{a}} G\left(1, \frac{H}{t^{b/a}}\right) \quad (20)$$

Chamando $G(1, x) \equiv F(x)$ e redefinindo os expoentes a e b temos finalmente

$$G_{\text{sing}}(t, H) = t^{2-\alpha} F\left(\frac{H}{t^\Delta}\right) \quad (21)$$

A partir desta última expressão todos os índices críticos termodinâmicos podem ser escritos em termos de α e Δ . É fácil verificar que as desigualdades de Griffiths e de Rushbrooke, por exemplo, são imediatamente satisfeitas como igualdades.

Em particular, a magnetização é dada por

$$M \equiv \left(\frac{\partial G}{\partial H}\right)_T = t^{2-\alpha-\Delta} F'\left(\frac{H}{t^\Delta}\right) = t^\beta Y\left(\frac{H}{t^\Delta}\right) \quad (22)$$

Esta expressão pode ser reescrita na forma

$$\frac{M(t,H)}{t^\beta} = Y\left(\frac{H}{t^\Delta}\right), \quad (23)$$

dônde vem a sugestão para a denominação "lei de escala". De fato, quando M/t^β for colocada num gráfico em função de H/t^Δ os dados experimentais nas vizinhanças do ponto crítico devem se situar ao longo de duas curvas universais definidas pela função $Y(x)$ (que pode ser diferente acima e abaixo de T_c). Neste sentido, β e Δ são os expoentes que definem as escalas apropriadas para a magnetização e o campo magnético respectivamente. Há excelentes confirmações experimentais das leis de escala⁽¹¹⁾. Na Fig.6 apresentamos o ajuste de Ho e Litster⁽¹²⁾ para os dados experimentais obtidos com o composto Cr Br_3 .

1.5. TEORIA DE ESCALA DAS CORRELAÇÕES CRÍTICAS

Nós definimos o ponto crítico como o "terminus" de uma linha de primeira ordem, o ponto onde o parâmetro de ordem vai a zero. Uma definição alternativa, mais microscópica, pode ser dada através da divergência do comprimento de correlação associado ao parâmetro de ordem. Na prática estas duas definições são equivalentes.

Seja então $\psi(\vec{r})$ uma variável microscópica ou quase-microscópica associada ao parâmetro de ordem ψ (pode ser a densidade de partículas, num fluido, ou a magnetização total, num ferromagneto, numa pequena região com centro em \vec{r}). A função de correlação de pares é definida por

$$\Gamma(\vec{r}) \equiv \langle \psi(\vec{r}) \psi(0) \rangle - \langle \psi(\vec{r}) \rangle \langle \psi(0) \rangle, \quad (24)$$

onde já estamos considerando uma situação com simetria translacional. Normalmente, a transformada de Fourier de Γ é diretamente acessível em experiências de espalhamento de luz ou de nêutrons.

No ponto crítico Γ decai como uma lei de potência,

$$\Gamma \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad \text{para } r \rightarrow \infty, \quad (25)$$

ficando assim definido o expoente η . Fora do ponto crítico Γ decai exponencialmente para r grande,

$$\Gamma \sim \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right), \quad (26)$$

onde o comprimento de correlação ξ , para $\zeta = 0$ e T próximo de T_c , é dado por

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad \text{ou} \quad \xi' \sim |t|^{-\nu'}, \quad (27)$$

ficando desta forma definidos os expoentes ν e ν' para T maior ou menor do que T_c respectivamente.

As teorias clássicas, do tipo campo médio, que no contexto das correlações críticas foram inicialmente desenvolvidas por Ornstein e Zernike, fornecem os valores $\eta = 0$ e $\nu = \nu' = 1/2$, independentemente da dimensionalidade do sistema. Os resultados exatos de Onsager e Kaufmann para o modelo de Ising bidimensional dão $\eta = 1/4$ e $\nu = \nu' = 1$, em marcante desacordo com os resultados clássicos. Para o modelo de Ising tridimensional, as melhores análises das séries de altas temperaturas até há poucos anos⁽⁸⁾ atrás forneciam os valores $\eta = 0,05(2)$ e $\nu = 0,643(3)$. Nas experiências, η se situa entre 0,03 e 0,1, enquanto ν fica entre 0,62 e 0,7, definitivamente distante dos valores clássicos.

Podemos agora construir uma teoria de escala para as funções de correlação:

$$\Gamma(r,t,H) = \lambda \Gamma(\lambda^a r, \lambda^b t, \lambda^c H) = t^{-1/b} F\left(\frac{r}{t^{a/b}}, \frac{H}{t^{c/b}}\right). \quad (28)$$

Escolhendo convenientemente os expoentes a , b e c temos finalmente a forma de escala

$$\Gamma(r,t,H) = t^{\nu(d-2+\eta)} F\left(\frac{r}{t^{-\nu}}, \frac{H}{t^\Delta}\right). \quad (29)$$

Expressando a suscetibilidade termodinâmica como uma soma sobre correlações (teorema da flutuação - dissipação da mecânica estatística) obtemos a relação de Fisher

$$\gamma = (2-\eta)\nu, \quad (30)$$

que pode ser rigorosamente provada como uma desigualdade, $(2-\eta)\nu \geq \gamma$, sob certas condições⁽⁵⁾. Portanto, η e ν estão relacionados, não são expoentes críticos independentes. Isto significa que há, na realidade, apenas três expoentes independentes - dois termodinâmicos e um relacionado às correlações.

Será que é possível expressar todos os expoentes críticos em termos de dois expoentes termodinâmicos? A resposta afirmativa a esta questão é fornecida pela relação de hiperescala,

$$2\beta = -\gamma + \nu d \quad \text{ou} \quad d\nu = 2 - \alpha \quad (31)$$

que constituiu, até a recente publicação de um trabalho de Nickel⁽¹³⁾, um dos pontos mais controvertidos das teorias de escala. Houve até quem afirmasse que as relações de escala envolvendo a dimensionalidade não seriam válidas para o modelo de Ising em $d = 3$, ou quem tentasse definir a dimensão anômala do vácuo.

$$w^* = d - \frac{2-\alpha}{\nu} \quad (32)$$

De fato, numa análise recente das expansões em altas temperaturas para o modelo de Ising tridimensional, Baker⁽¹⁴⁾ estima os expoentes críticos $\Delta = 1,563 \pm 0,003$, $\gamma = 1,250 \pm 0,003$ e $\nu = 0,640 - 0,637$. A partir destes valores temos $2\Delta - d\nu - \gamma = -0,038 \pm 0,012$, que é definitivamente diferente de zero! Além disto os valores disponíveis estavam em concordância com as desigualdades $d\nu \geq 2 - \alpha$ e $d\nu + \gamma \geq \Delta$, que podem ser estabelecidas mediante algumas hipóteses gerais sobre o comportamento das funções de correlação.

A relação de hiperescala pode ser obtida heurísticamente de

várias maneiras. Basta, por exemplo, comparar a forma de escala da energia livre,

$$G(T,H) = t^{2-\alpha} F\left(\frac{H}{t^\Delta}\right), \quad (33)$$

com uma forma para a energia livre por spin obtida através da relação

$$G(T,H) = \frac{G_{\text{total}}}{L^d}, \quad (34)$$

onde L é a dimensão macroscópica da rede. Perto do ponto crítico temos $L \sim \xi \sim t^{-\nu}$. Portanto, devemos ter $2 - \alpha = d\nu$. A validade da relação de hiperescala para o modelo de Ising tridimensional foi indicada num trabalho recente de Nickel⁽¹³⁾ que conseguiu obter 21 termos para a série de altas temperaturas da função de correlação de pares na rede cúbica de corpo centrado (cinco termos a mais do que nos trabalhos anteriores!). Uma análise preliminar desta série mostrou que $\nu = 0,631 \pm 0,003$ e $\gamma = 1,239 \pm 0,002$, ou seja, apesar das expectativas o expoente γ não deve assumir o valor mais atraente $5/4$. Estes novos resultados são consistentes com os cálculos de grupo de renormalização de Le Guillou e Zinn-Justin⁽¹⁵⁾, $\gamma = 1,241 \pm 0,002$ e $\nu = 0,630 \pm 0,0015$. Portanto, vindicada a hipótese de hiperescala, este é um bom momento para iniciar a apresentação do esquema do grupo de renormalização, que tenta uma justificativa microscópica para as relações fenomenológicas apresentadas nas duas últimas seções.

1.6. O ESQUEMA DO GRUPO DE RENORMALIZAÇÃO⁽¹⁶⁾

O esquema do grupo de renormalização (GR) forma uma base conceitual para as idéias de universalidade e para as formas de escala. Poderíamos mesmo dizer, embora haja discordâncias, que o esquema do GR fornece as bases microscópicas que estavam faltando nas teorias de escala. Além disto, o GR proporciona uma técnica muito eficiente para calcular valores para os expoentes críticos e nisto, sem dúvida, reside todo o seu sucesso.

Nas proximidades do ponto crítico o comprimento de correlação ξ é muito grande, muito maior do que a distância mínima representada pelo parâmetro da rede. Portanto, segundo a idéia inicial de Kadanoff, é possível diminuir o número de graus de liberdade de um sistema - num modelo de spins, por exemplo, os spins situados dentro de um bloco de dimensão b , com $b \ll \xi$, teriam um comportamento coerente e seriam substituídos por uma nova variável efetiva de spin. Esta transformação de escala, envolvendo um fator b nos comprimentos e um fator c no valor dos spins, conduziria a um novo hamiltoniano H' com a mesma forma de H . Assim podem ser obtidas relações de recorrência, presumivelmente analíticas, entre os parâmetros de H' e de H . Na criticalidade, após um certo número de transformações, depois que se eliminam os aspectos irrelevantes do hamiltoniano inicial, devemos atingir um ponto fixo H^* da transformação. Isto se verifica porque na criticalidade ξ vai a infinito, não se alterando com uma mudança na escala de comprimentos.

Numa linguagem um pouco mais matemática as etapas do GR são as seguintes:

(i) dado $\bar{H}[\sigma] \equiv H[\sigma]/k_B T$, obtêm-se $\bar{H}'[\sigma']$ pela transformação R ,

$$H' = RH, \quad (35)$$

onde a barra na ação \bar{H} vai ser omitida para simplificar a notação. A transformação R deve preservar a função de partição, isto é,

$$Z_N[H] = \text{Tr} e^H = \text{Tr}' e^{H'} = Z_{N'}[H'] \quad (36)$$

onde $N' = N/b^d$. Como já dissemos, a transformação R implica uma mudança de escala

$$\vec{r} + \vec{r}' = \frac{\vec{r}}{b}, \quad (37)$$

que preserva a densidade espacial dos graus de liberdade, e uma renor-

malização dos spins.

$$\sigma_{\vec{r}} \rightarrow \sigma'_{\vec{r}'} = \frac{\sigma_{\vec{r}}}{c}, \quad (38)$$

que geralmente preserva a magnitude das flutuações críticas (na realidade o fator c pode até ser diferente em cada etapa da transformação, isto é, podemos ter $c = c(H)$).

(ii) feita a transformação R , podemos escrever as novas expressões para a energia livre por spin e para a função de correlação de pares,

$$G[H'] = b^d G[H] \quad (39)$$

e

$$\Gamma\left[\frac{\vec{r}}{b}; H'\right] = c^2 \Gamma\left[\vec{r}; H\right] \quad (40)$$

(iii) agora a transformação deve ser repetida várias vezes,

$$H' = RH, \quad H'' = RH', \quad \dots \quad (41)$$

Na criticalidade devemos atingir um ponto fixo da transformação,

$$H^* = RH^* \quad (42)$$

Nestas condições temos

$$\Gamma(\vec{r}; H^*) = c^{*2} \Gamma\left(\frac{\vec{r}}{b}; H^*\right) \quad (43)$$

Como a função de correlação de pares na criticalidade deve ser dada assintoticamente pela expressão (25), já temos aqui uma informação sobre o índice crítico η ,

$$b \frac{d-2+\eta}{2} = c^* \quad (44)$$

Perto da criticalidade podemos linearizar o hamiltoniano H em torno de H^* . Assim temos

$$RH = R(H^* + hQ) = H^* + h L Q + \dots \quad (45)$$

onde L é um operador linear. Escrevendo agora Q numa representação diagonal em termos dos autovetores de L temos

$$H^* = H + \sum_j h_j Q_j \quad (46)$$

com

$$H' = H^* + \sum_j h_j \Lambda_j Q_j, \quad (47)$$

onde vamos escrever $\Lambda_j = b^{\lambda_j}$ para garantir a propriedade de semigrupo da transformação R .

Temos agora uma base clara para discutir as idéias de universalidade e formular as teorias de escala. O conjunto de valores $\{h_j\}$ parametriza o hamiltoniano inicial, e as sucessivas iterações definem linhas de fluxo no espaço dos h_j 's. Para $\lambda_j > 0$, o operador Q_j é chamado relevante; para $\lambda_j < 0$, o operador Q_j é irrelevante. É claro que após um número grande de iterações apenas os operadores relevantes permanecem, conduzindo o hamiltoniano para longe do ponto fixo. Portanto, na criticalidade devemos zerar todos os parâmetros h_j que correspondem a operadores relevantes (o caso de um operador marginal, para o qual $\lambda_j = 0$, precisa ser tratado à parte). Diferentes pontos fixos H^* devem corresponder a diferentes "classes de universalidade" crítica; no espaço dos parâmetros há regiões distintas que podem produzir fluxos para cada um destes pontos fixos.

No caso de um ponto crítico usual há dois operadores relevantes - na linguagem dos ferromagnetos, um deles poderia ser identifica-

do com a energia e o outro com a magnetização. Assim, podemos fazer $h_1 = t$ e $h_2 = H$. Na criticalidade devemos ter $h_1 = h_2 = 0$, ou seja, $t = H = 0$.

A teoria de escala surge naturalmente a partir desta formulação. Após ℓ iterações, a energia livre pode ser escrita como

$$G(h_1, h_2, h_3, \dots) = b^{-d\ell} G(b^{\lambda_1 \ell} h_1, b^{\lambda_2 \ell} h_2, b^{\lambda_3 \ell} h_3, \dots) = \\ = h_1^{d/\lambda_1} G(1, \frac{h_2}{h_1^{\lambda_2/\lambda_1}}, \frac{h_3}{h_1^{\lambda_3/\lambda_1}}, \dots) \quad (48)$$

Com $h_1 = t$, $h_2 = H$, e $h_3 = g$ temos:

$$\frac{d}{\lambda_1} = 2 - \alpha, \text{ ou seja, } \lambda_1 = \frac{d}{2-\alpha} > 0, \quad (49)$$

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \Delta = \beta\delta > 0, \quad (50)$$

e

$$\frac{\lambda_3}{\lambda_1} = \phi, \quad (51)$$

onde ϕ é denominado expoente de cruzamento. Como $\lambda_3 < 0$ temos $\phi < 0$, de tal forma que assintoticamente, mesmo para $g \neq 0$, vem

$$G(h_1, h_2, h_3, \dots) \approx t^{2-\alpha} G(1, \frac{H}{t}, 0, 0, \dots), \quad (52)$$

que é a hipótese de escala para a energia livre nas vizinhanças de um ponto crítico.

A teoria de escala para a função de correlação de dois pontos é construída de maneira análoga:

$$\Gamma(\vec{r}; t, H, g, \dots) = b^{-(d-2+\eta)} \Gamma\left(\frac{r}{b}; b^{\lambda_1} t, b^{\lambda_2} H, b^{\lambda_3} g, \dots\right) =$$

$$= t^{\frac{d-2+\eta}{\lambda_1}} \Gamma\left[\frac{r}{t^{-1/\lambda_1}}; 1, \frac{H}{t^{\lambda_2/\lambda_1}}, \frac{g}{t^{\lambda_3/\lambda_1}}, \dots\right] \quad (53)$$

onde $1/\lambda_1 = \nu$, ou seja $2-\alpha = d\nu$, ficando imediatamente satisfeita a relação de hiperscala. Além disto o teorema da flutuação-dissipação dá

$$\gamma = \frac{2-\eta}{\lambda_1} \quad \text{ou} \quad \lambda_2 = \frac{2+d}{2} - \frac{\eta}{2} \quad (54)$$

Portanto, λ_1 e λ_2 (ou λ_1 e c) são suficientes para determinar todos os expoentes associados a um ponto crítico.

1.7. A EXPANSÃO EM $\epsilon = 4-d$

Atualmente há vários esquemas para realizar aproximadamente a transformação R. Só existem cálculos exatos em $d = 1$ (17) (para vários modelos, inclusive para modelos que têm transições de fases), e começam a surgir alguns resultados rigorosos para tentar justificações de todo este esquema (18).

A técnica de expansão em torno de $d = 4$, proposta por Wilson e Fisher (16), teve um enorme sucesso devido à facilidade de trabalhar com o parâmetro pequeno $\epsilon = 4-d$. Como exemplo, vamos partir de um hamiltoniano isotrópico a campo nulo, dado pela expressão

$$H = -\sum_{\vec{r}, \vec{r}'} \frac{1}{2} J(\vec{r}-\vec{r}') \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}'} \quad (55)$$

onde $\vec{S}_{\vec{r}}$ representa um spin n-vetorial na posição \vec{r} e $J(\vec{r}-\vec{r}')$ é uma interação de intercâmbio de curto alcance. A função de partição do sistema será dada por

$$Z = \sum_{\{\vec{S}\}} e^{-\beta H} = \prod_{\vec{r}} \int d^n \vec{S}_{\vec{r}} \delta(\vec{S}_{\vec{r}}^2 - S^2) e^{-\beta H} \quad (56)$$

Substituindo agora a função δ por um fator de peso, isto é, fazendo

$$\delta(\vec{S}_{\vec{r}}^2 - S^2) \rightarrow \exp\left[-\frac{1}{2} \vec{S}_{\vec{r}}^2 - u \left|\vec{S}_{\vec{r}}\right|^2\right] \quad (57)$$

e passando para a representação de Fourier dos spins, podemos escrever a função de partição na forma

$$Z = \int d \begin{bmatrix} \vec{\sigma}_{\vec{q}} \\ \vec{q} \end{bmatrix} e^{\bar{H}} \quad (58)$$

onde

$$\bar{H} = -\frac{1}{2} \int \left[r + q^2 + o(q^4) \right] \vec{\sigma}_{\vec{q}} \cdot \vec{\sigma}_{-\vec{q}} -$$

$$- u \int \int \int \left(\vec{\sigma}_{\vec{q}} \cdot \vec{\sigma}_{\vec{q}'} \right) \left(\vec{\sigma}_{\vec{q}'} \cdot \vec{\sigma}_{-\vec{q}-\vec{q}'} \right) + \dots \quad (59)$$

com $r = (\text{constante}) (T-T_0)$, $u > 0$, e o vetor \vec{q} limitado à primeira zona de Brillouin (isto é, com $|\vec{q}| \leq \pi/a$, onde a é o parâmetro da rede). Para um hamiltoniano mais geral é claro que os coeficientes dos termos de spin seriam muito mais complicados.

A transformação de GR consiste agora na eliminação dos graus de liberdade correspondentes a valores do vetor de onda \vec{q} situados numa coroa externa da zona de Brillouin, definida por $1/b \leq |\vec{q}|a/\pi \leq 1$ (ou seja, são eliminadas as flutuações de spin correspondentes a pequenos comprimentos de onda). Esta eliminação é feita de maneira aproximada, supondo-se que u seja pequeno (de ordem menor ou igual a ϵ), e utilizando as propriedades da integral gaussiana para tratar o termo quártico perturbativamente. O hamiltoniano \bar{H} terá a mesma forma que \bar{H} com as seguintes relações de recorrência em ordem dominante,

$$r' = b^2 \left[r + 4(n+2)u A_1 \right] \quad (60)$$

e

$$u' = u \left[1 + \varepsilon \ln b - 4(n+8)u A_2 \right], \quad (61)$$

onde A_1 e A_2 são constantes estruturais produzidas pela integração d-dimensional. Além disto ainda temos

$$c^2 = b^{2-d+0(u^2)}, \quad (62)$$

ou seja, $\eta = 0(\varepsilon^2)$. É fácil verificar que as relações de recorrência (60) e (61) conduzem a um ponto fixo trivial $r^* = u^* = 0$ e a um ponto fixo não trivial

$$r^* = -\frac{A_1}{A_2} \frac{\ln b}{1 - \frac{1}{b^2}} \frac{n+2}{n+8} \varepsilon \quad (63)$$

e

$$u^* = \frac{\varepsilon \ln b}{4(n+8)A_2}, \quad (64)$$

que só é estável para $\varepsilon > 0$ (ou seja, $d < 4$). Na Fig. 7 esboçamos os diagramas de fluxo para $d < 4$ (quando o ponto fixo não trivial pode ser atingido através de um certo eixo) e para $d > 4$ (quando o ponto fixo não trivial é totalmente instável).

Diagonalizando as relações de recorrência em torno do ponto fixo não trivial temos

$$\lambda_1 = 2 - \frac{n+2}{n+8} \varepsilon + 0(\varepsilon^2), \quad (65)$$

e

$$\lambda_u = -\varepsilon + 0(\varepsilon^2). \quad (66)$$

É notável observar que nestas expressões, em perfeito acordo com as idéias de universalidade, apenas comparecem a dimensionalidade d da rede cristalina e o número de componentes n do parâmetro de ordem. Como $\lambda_u < 0$ para $d < 4$, a variável u é irrelevante. Portanto, em ordem ε todos os expoentes críticos podem ser calculados a partir de (65) e da relação $\eta = 0(\varepsilon^2)$. Em particular, para $n = 1$ (modelo de Ising) e $d = 3$ temos $\beta = 0,3$; $\gamma = 1,2$; $\delta = 5$; $\alpha = 0,2$; $\nu = 0,6$, que podem ser comparados com os valores apresentados na tabela da seção 4. É interessante observar que $\phi_u = \lambda_u/\lambda_1 = -\varepsilon/2$, ou seja $\phi_u = -0,5$ em $d = 3$, o que pode acarretar certas correções nas formas assintóticas de escala. Para $d > 4$, por outro lado, apenas o ponto fixo trivial pode ser atingido, e todos os expoentes críticos assumem os seus valores clássicos.

NOTAS E REFERÊNCIAS DA PARTE I

- (1) Até inícios da década de 70, antes do aparecimento da técnica de grupo de renormalização, há vários trabalhos de revisão sobre fenômenos críticos: M.E. Fisher, "Lectures in Theoretical Physics", VII C (Boulder, Univ. Colorado Press), 1965; M.E. Fisher, Repts. Progr. Phys. 30, 615 (1967); P. Heller, Repts. Progr. Phys. 30, 731 (1967); L.P. Kadanoff et al., Rev. Mod. Phys. 39, 395 (1967); H.E. Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena" (Oxford Univ. Press), 1971.
- Trabalhos de revisão mais atualizados podem ser encontrados nos vários volumes da série "Phase Transitions and Critical Phenomena", editada por C. Domb e M.S. Green (Academic Press), que passaremos a designar por Domb-Green.
- (2) E.A. Guggenheim, J. Chem. Phys. 13, 253 (1945).
- (3) Ver, por exemplo, o trabalho de revisão de P. Heller citado na Ref. 1.
- (4) Ver o capítulo sobre transições de fase de segunda ordem em qualquer das edições do texto de Física Estatística de L.D. Landau e E.M. Lifshitz.
- (5) Ver o artigo de R.B. Griffiths no volume 1 de Domb-Green (1971).
- (6) Há um longo texto sobre o modelo de Ising: B.M. McCoy e T.T. Wu, "The Two-Dimensional Ising Model" (Cambridge, Mass., Harvard Univ. Press), 1973. Uma das soluções mais elegantes do modelo de Ising bidimensional, através da redução a um sistema de férmions, foi obtida por T.D. Schultz, D.C. Mattis e E.H. Lieb, Rev. Mod. Phys. 36, 856 (1964).
- (7) D.B. Abraham, J. Stat. Phys. 19, 349 (1978).
- (8) Ver, por exemplo, o volume 3 de Domb-Green (1974).
- (9) T.H. Berlin e M. Kac, Phys. Rev. 86, 821 (1952). Ver, por exemplo, o artigo de G.S. Joyce no volume 2 de Domb-Green (1971).
- (10) Ver por exemplo, L.G. Ferreira, S.R. Salinas e M.J. Oliveira, Phys. Status Sol. (b) 83, 229 (1977).

- (11) Ver, por exemplo, as seguintes revisões de trabalhos experimentais: M. Vicentini-Missoni, Escola de Varenna de 1970; nº 51, ed. por M.S. Green (Academic Press, Nova York), 1971; L.J. De Jongh e A.R. Miedema, Adv. Phys. 23, 1 (1974).
- (12) J.T. Ho e J.D. Litster, Phys. Rev. B2, 4523 (1970).
- (13) B. Nickel, Escola de Cargèse sobre Transições de Fases, 1980; B. Nickel, Physica 106A, 48 (1981).
- (14) G.A. Baker Jr., Phys. Rev. B 15, 1552 (1977).
- (15) J.C. Le Guillou e J. Zinn-Justin, Phys. Rev. B 21, 3976 (1980).
- (16) Ver o excelente artigo de revisão de M.E. Fisher, Rev. Mod. Phys. 46, 597 (1974). Para maiores detalhes ver também K.G. Wilson e J. Kogut, Phys. Rept. 12C, 75 (1974). O volume 6 de Domb-Green (1976) é inteiramente dedicado às técnicas de grupo de renormalização.
- (17) Ver, por exemplo, D.R. Nelson e M.E. Fisher, Ann. Phys. 91, 226 (1975).
- (18) R.B. Griffiths, Physica 106A, 59 (1981).

11. COMPORTAMENTO MULTICRÍTICO - INTRODUÇÃO

Os pontos críticos usuais raramente ocorrem de forma tão simples, num diagrama de fases bidimensional, em termos de temperatura e do campo conjugado ao parâmetro de ordem. Geralmente há alguma outra variável termodinâmica - como a pressão, a composição, um campo magnético aplicado - que aumenta a dimensionalidade do diagrama de fases e produz uma linha (ou superfície) de pontos críticos. Estas linhas podem terminar, por exemplo, em um ponto multicrítico.

Nestas notas vamos considerar quatro tipos de pontos multicríticos cuja existência real está mais ou menos bem estabelecida, ou seja, que já foram detectados em sistemas fluidos ou sólidos. Os pontos tricríticos foram detectados em misturas de $\text{He}^3\text{-He}^4$, em materiais meta magnéticos, em sólidos sob pressão e em misturas de três componentes fluidos. Desde que o nome foi proposto por Griffiths⁽¹⁾ em 1970, eles têm sido exaustivamente estudados através de técnicas de campo médio, de expansões em séries de altas temperaturas na presença de um campo, de simulações de Monte Carlo e de grupo de renormalização. Hoje em dia está bem estabelecido que os expoentes tricríticos em $d=3$ são dados pelas teorias clássicas com possíveis correções logarítmicas.

Os pontos bicríticos, batizados com este nome por Fisher e Nelson⁽²⁾ em 1974, foram detectados no diagrama campo x temperatura de cristais antiferromagnéticos com baixa anisotropia. Ainda não foram detectados em fluidos, pois neste caso seria necessário trabalhar com uma mistura de pelo menos sete componentes! Os pontos tetracríticos estão conceitualmente perto dos pontos bicríticos e também já foram detectados em alguns cristais antiferromagnéticos. Há um número grande de trabalhos teóricos sobre estes pontos multicríticos, inclusive estudos detalhados das formas de escala. Recentemente, Fisher⁽³⁾ propôs uma nova técnica de análise de expansões em séries de duas variáveis, especialmente projetada para dar informações sobre o comportamento termodinâmico nas vizinhanças dos pontos multicríticos. Nós testamos esta técnica, em colaboração com Jürgen Stilck⁽⁴⁾, e vamos tentar explicá-la na última seção destas notas.

Finalmente, vamos estudar os pontos de Lifshitz que foram propostos teoricamente por Hornreich, Luban e Shtrikman⁽⁵⁾ em 1975, mas que só foram detectados experimentalmente há pouco mais de um ano, em cristais de MnP, por Carlos Becerra e Nei Oliveira de São Paulo e Shapira e Chang do MIT⁽⁶⁾. Recentemente, em colaboração com Carlos Yokoi e Maurício Coutinho Filho⁽⁷⁾ estudamos o efeito da aplicação de um campo magnético sobre um modelo de Ising com interações axialmente competitivas que exhibe um ponto de Lifshitz. Estudamos⁽⁸⁾ também um modelo para explicar as experiências de Becerra e colaboradores nas vizinhanças do ponto de Lifshitz do MnP. (Ver o trabalho de Maurício Coutinho Filho⁽⁹⁾ nos anais deste Simpósio).

11.1. PONTOS TRICRÍTICOS - DEFINIÇÃO E FENOMENOLOGIA

Vamos tomar como exemplo um sistema antiferromagnético uniaxial. No espaço $H_{st} \times T$ há uma linha de coexistência de fases que termina num ponto crítico, dado pela temperatura de Néel (ver a Fig. 3 onde está esquematizado o diagrama análogo $H \times T$ de um ferromagneto). Agora, se aplicarmos um campo H real surge uma linha λ de pontos críticos (a linha de Néel) que termina no ponto (H_{tr}, T_{tr}) , denominada do ponto tricrítico (ver a Fig. 8). Para temperaturas inferiores a T_{tr} a linha cheia indica uma transição de primeira ordem. O nome ponto tricrítico não é muito feliz, mas está consagrado na literatura. Se colocarmos um outro eixo representando o campo alternado H_{st} , temos 3 linhas de pontos críticos terminando no ponto tricrítico. A superfície hachurada no plano $H_{st}=0$ representaria na realidade uma superfície de coexistência de duas fases antiferromagnéticas (cuja única distinção seria dada pela translação de um parâmetro da rede); no ponto tricrítico estas duas fases se tornam idênticas à fase paramagnética.

Pontos tricríticos foram observados em vários materiais magnéticos de alta anisotropia - que neste caso são chamados metamagnetos - como FeCl_2 , DAG, $\text{CsCoCl}_3 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$, $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, DyPO_4 , etc.. Há alguns anos Stryjevski e Giordano⁽¹⁰⁾ publicaram uma excelente revisão dos trabalhos experimentais em sistemas magnéticos. É interessante observar um gráfico de magnetização (que é a densidade conjugada ao campo H) con

tra a temperatura ao longo da linha de Néel e depois ao longo da curva de coexistência (ver a Fig. 8b). Abaixo de T_{tr} há coexistência de uma fase paramagnética (com magnetização maior, mas com magnetização alternada nula), e uma fase antiferromagnética (com magnetização menor, mas com magnetização alternada diferente de zero). Na realidade, quando o campo H não é corrigido devido aos efeitos de desmagnetização, o diagrama $H \times T$ experimental acaba tendo a forma da Fig. 8b; no entanto, como foi dito na primeira parte destas notas, estamos sempre considerando um campo magnético aplicado devidamente corrigido. A magnetização em função do campo para várias temperaturas fixas é dada então pelos esquemas da Fig. 9. Para $T=T_{tr}$, a derivada $\partial M/\partial H$ diverge quando $H \rightarrow H_{tr}$.

Pontos tricríticos também foram detectados em misturas de He^3 - He^4 e em misturas de três componentes fluidos⁽¹¹⁾. Aliás, Griffiths introduziu a definição de ponto tricrítico em conexão com uma análise do diagrama de fases de misturas de He^3 com He^4 sob pressão de vapor (ver os gráficos esquemáticos da Fig. 10).

É importante observar que no diagrama $H \times T$ a transição, quer de primeira quanto de segunda ordem, sempre ocorre entre as fases antiferro e paramagnética, envolvendo, portanto, a mesma mudança de simetria. Isto indica que um único parâmetro de ordem ψ é suficiente para descrever o ponto tricrítico. Então a energia livre de Landau nas vizinhanças de um ponto tricrítico de um cristal metamagnético pode ser escrita, para $H_{st}=0$, na forma

$$G(T,H) = A(T,H) + B(T,H)\psi^2 + C(T,H)\psi^4 + D(T,H)\psi^6 + \dots, \quad (1)$$

onde os termos ímpares não foram incluídos devido à simetria do sistema metamagnético (é claro que para misturas de fluidos também teríamos os termos ímpares em ψ). A linha de pontos críticos é definida pela condição

$$B(T,H) = 0, \quad \text{com } C,D > 0, \quad (2)$$

e o ponto tricrítico é dado por

$$B(T,H) = C(T,H) = 0, \quad \text{com } D > 0. \quad (3)$$

Agora é fácil calcular vários conjuntos de expoentes tricríticos (que, em geral, assumem valores distintos dos expoentes críticos usuais) e mostrar que, no ponto tricrítico, a linha λ de pontos críticos se encontra tangencialmente com a linha de primeira ordem.

Para construir uma teoria de escala temos que inicialmente definir os eixos de escala apropriados. No plano $H_{st} \times T$, devido à simetria do diagrama de fases, a escolha é óbvia, mas no plano $H \times T$ a situação é mais complicada. Normalmente⁽¹²⁾ um dos eixos (a chamada direção fraca) é escolhido paralelamente à curva de coexistência; o outro eixo é um tanto arbitrário, contanto que não seja paralelo à direção fraca. Vamos então fazer a escolha indicada na Fig. 11, onde $H_1(T)$ é a equação da tangente à curva de coexistência no ponto tricrítico, $g \equiv H - H_1(T)$ e $t = (T - T_c)/T_c$.

Então temos

$$G(t, H_{st}, g) = \lambda G(\lambda^a t, \lambda^b H_{st}, \lambda^c g) = t^{-1/a} G\left(1, \frac{H_{st}}{t^{b/a}}, \frac{g}{t^{c/a}}\right), \quad (4)$$

ou seja, a parte singular da energia livre nas vizinhanças do ponto tricrítico obedece a equação de escala

$$G(t, H_{st}, g) = t^{(2-\alpha)} F\left(\frac{H_{st}}{t^\Delta}, \frac{g}{t^\phi}\right), \quad (5)$$

onde os expoentes α , Δ e ϕ caracterizam o comportamento tricrítico. Para $H_{st}=0$, a função $F(0,x)$ deve ter singularidades pelo menos em dois valores de x , correspondentes às linhas de primeira e de segunda ordem. Assim, as duas linhas devem ser descritas assintoticamente pela mesma expressão

$$g = (\text{constante}) t^\phi, \quad (6)$$

onde o expoente de cruzamento ϕ deve ser maior do que 1 a fim de que

haja tangencialidade no ponto tricrítico. Usando-se a expansão de Landau é fácil verificar que $\phi=2$, $\Delta=5/2$ e $\alpha=-1$. No entanto, há maneiras alternativas de definir os expoentes tricríticos e até mesmo certa confusão na literatura (ver, por exemplo, algumas propostas de notação sugeridas por Griffiths⁽¹³⁾).

É importante observar que o comportamento crítico ao longo da linha λ deve ser assintoticamente idêntico ao comportamento no ponto crítico usual $H=0$, $T=T_N$. No entanto, à medida que nos aproximamos do ponto tricrítico fica cada vez menor a região assintótica em que se verificam os valores dos expoentes críticos usuais. O expoente de cruzamento ϕ dá uma idéia da largura desta região assintótica: em termos da temperatura teríamos algo como $\Delta T \sim (H_{tr} - H)^\phi$. Na linguagem do GR podemos dizer que a linha λ pertence a uma classe de universalidade crítica caracterizada por um mesmo hamiltoniano fixo H_λ^* - nas vizinhanças deste ponto fixo o operador magnetização é irrelevante e o expoente ϕ é negativo. Por outro lado o ponto tricrítico pertence a uma outra classe de universalidade, caracterizada por um hamiltoniano fixo H_{tr}^* , nas vizinhanças do qual há três operadores relevantes.

As formas de escala foram testadas experimentalmente em vários materiais⁽¹⁰⁾. No caso do DAG, por exemplo, Giordano e Wolf⁽¹⁴⁾ obtêm os valores experimentais $\phi = (1,95 \pm 0,11)$; $\beta_U = (1,00 \pm 0,05)$; $\gamma_U = (1,01 \pm 0,07)$; $\delta_U = (2,1 \pm 0,2)$ e $\alpha_t = (0,52 \pm 0,05)$, em grande concordância com as previsões da teoria de Landau: $\phi=2$, $\beta_U=1$, $\gamma_U=1$, $\delta_U=2$ e $\alpha_t=1/2$. Na Fig. 12 reproduzimos a curva experimental de Giordano e Wolf para a magnetização contra a temperatura do DAG. As experiências com misturas de He^3 - He^4 também produzem expoentes tricríticos em concordância com os valores clássicos⁽¹⁵⁾. Recentemente Salomon e Shang⁽¹⁶⁾ publicaram uma análise da forma de escala para a magnetização de cristais de $FeCl_2$; os resultados são bastante razoáveis quando os dados são ajustados a uma equação do tipo

$$\frac{m}{t^{2-\alpha-\phi}} = Y \left(\frac{g}{t^\phi} \right), \quad (7)$$

onde $\beta_U = 2-\alpha-\phi = 1$ e $\phi = \beta_U \delta_U = 2$, mas há melhorias sensíveis no a-

juste quando se usa uma forma de escala mais complicada que já leva em conta certas correções logarítmicas previstas pelos cálculos de GR.

II.2. PONTOS BICRÍTICOS E TETRACRÍTICOS - DEFINIÇÃO E FENOMENOLOGIA

O diagrama de fases de um cristal antiferromagnético de baixa anisotropia é normalmente dado pela Fig. 13, onde $H_{||}$ é o campo interno na direção do eixo fácil. No ponto bicrítico duas linhas do tipo λ , $T'_C(H)$ e $T''_C(H)$, encontram-se tangencialmente com uma linha de coexistência de fases. Na região de baixas temperaturas há duas fases ordenadas distintas - a fase de Néel, para campos baixos, em que o parâmetro de ordem é a magnetização alternada na direção do eixo fácil, e a fase "spin-flop", para campos mais altos, em que o parâmetro de ordem é a magnetização alternada num plano normal ao eixo fácil. Portanto, há dois parâmetros de ordem, ψ_1 e ψ_2 , sendo que ψ_1 tem uma componente ($n_1=1$; é do tipo Ising) e ψ_2 pode ter uma ou duas componentes ($n_2=1$, do tipo Ising, ou $n_2=2$, do tipo XY). No momento há uma série de resultados experimentais que corroboram este tipo de diagrama: medidas de Rohrer⁽¹⁷⁾ para o $GdAlO_3$, de Oliveira, Paduan-Filho e Salinas⁽¹⁸⁾ para o $NiCl_2 \cdot 6H_2O$, de Shapira e Becerra⁽¹⁹⁾ para o MnF_2 , e de Basten, Frikkøe e de Jonge⁽²⁰⁾ para o $CsMnBr_3 \cdot 2D_2O$.

O ponto tetracrítico está bastante próximo do ponto bicrítico e pode ser explicado pelo mesmo esquema conceitual. Novamente temos dois parâmetros de ordem distintos, só que ao invés da linha de primeira ordem há uma fase intermediária, em que $\psi_1 \neq 0$ e $\psi_2 \neq 0$ (Ver o diagrama de fases da Fig. 14). A motivação para o nome tetracrítico fica então óbvia - há quatro linhas do tipo λ que se encontram neste ponto. No entanto, a existência experimental dos pontos tetracríticos ainda não está tão bem estabelecida - no diagrama de fases $H_{||} \times T$ há medidas de Basten⁽²¹⁾, para compostos de $CoBr_2 \cdot 6H_2O$ parcialmente deutêrados, evidenciando a existência de um ponto tetracrítico, mas com a fase intermediária numa faixa muito pequena de campos. Por outro lado, no diagrama de fases $H_\perp \times T$, com $H_{||}=H_B$, onde H_\perp é um campo aplicado ao longo da direção intermediária, Rohrer e Gerber⁽²²⁾ mostraram de maneira inequívoca a existência de um ponto tetracrítico em cristais de

GdAlO₃.

Num sistema antiferromagnético com baixa anisotropia a energia livre de Landau pode ser escrita na forma

$$G = A_0(T,H) + B_1(T,H)\psi_1^2 + B_2(T,H)\psi_2^2 + C_1(T,H)\psi_1^4 + C_2(T,H)\psi_2^4 + 2C_{12}(T,H)\psi_1^2\psi_2^2 + \dots \quad (8)$$

Minimizando esta expressão com relação a ψ_1 e a ψ_2 , é fácil verificar que as linhas do tipo λ , $T_C^I(H)$ e $T_C^II(H)$, são dadas respectivamente por $B_1=0$ ou $B_2=0$, com os coeficientes dos termos quárticos positivos. O ponto bicrítico é definido por $B_1=B_2=0$, com $C_{12}^2 < C_1C_2$. Caso esta desigualdade seja invertida teremos um ponto tetracrítico. É interessante observar que a teoria de Landau prevê que as linhas do tipo λ se encontram no ponto multicrítico formando um certo ângulo (pois B_1 e B_2 devem ser escritos na forma $a(T-T_B) + b(H-H_B)$). A tangencialidade destas linhas no ponto multicrítico é um resultado novo, que foi proporcionado pelas teorias de escala e que tem sido confirmado por todas as experiências.

Para construir uma teoria de escala nas vizinhanças do ponto bicrítico temos que inicialmente definir os melhores eixos de escala. Um deles é claramente dado pela reta tangente à linha de coexistência de fases no ponto bicrítico (direção fraca), mas há uma certa arbitrariedade na escolha de outro eixo. Tem sido verificado experimentalmente (mas também através de cálculos de GR e dos novos aproximantes diferenciais parciais) que a melhor escolha de eixos é dada por

$$\bar{g} = g - pt \quad (9)$$

$$\bar{t} = t + qg \quad (10)$$

onde $g = H^2 - H_B^2$, $t = (T - T_B)/T_B$, $p = T_B(dH_\phi^2/dT)_B$ e q é escolhido de tal forma que $T_B < \bar{T} < T_N$ (ver Fig. 15). Então a parte singular da energia livre é escrita na forma

$$G(\bar{t}, \bar{g}) = \bar{t}^{2-\alpha} F\left(\frac{\bar{g}}{\bar{t}^\phi}\right) \quad (11)$$

onde α e ϕ são os expoentes bicríticos. Nas vizinhanças do ponto bicrítico, as linhas críticas $T_C^I(H)$ e $T_C^II(H)$ são definidas por $\bar{g}_c/\bar{t}^\phi = +\omega_1$ ou $-\omega_1$, respectivamente, onde ω_1 e ω_2 são duas constantes não universais. Assim temos

$$\begin{aligned} [H_C^I(T)]^2 &= H_B^2 + pt + \omega_1 \left[t + q(H_C^I{}^2 - H_B^2) \right]^\phi = \\ &= H_B^2 + pt + C_1 t^\phi + C_2 t^{2\phi-1} + C_3 t^{3\phi-1} + \dots \quad (12) \end{aligned}$$

e uma expressão assintótica idêntica para $H_C^II(T)$.

Ao longo da fronteira T_C^II os índices críticos devem ser do tipo Ising ($n_1=1$), enquanto que ao longo de T_C^I eles podem ser do tipo Ising ($n_2=1$), para materiais ortorrômbicos, ou do tipo XY ($n_2=2$), para materiais uniaxiais. Portanto, os expoentes bicríticos ou são do tipo XY ($n=n_1+n_2=2$) ou do tipo Heisenberg ($n=n_1+n_2=3$). No contexto de um cálculo de GR⁽²³⁾ os valores estimados de ϕ são muito próximos da unidade: $\phi(n=3) \approx 1,25$ e $\phi(n=2) \approx 1,18$. Portanto, a expansão (12) de H_C^I em potências de t^ϕ acaba tendo pouca utilidade prática e Fisher⁽²⁾ propôs uma forma de fixar o valor de q , correta pelo menos em primeira ordem na anisotropia e na variável $\epsilon = 4-d$,

$$q(n) = \frac{n+2}{3n} q_1 \quad ; \quad q_1 = \frac{1}{T_B} \left(\frac{dT_C^II}{dH^2} \right)_{H=0} \quad (13)$$

Embora as amplitudes ω_1 e ω_2 não sejam universais, os cálculos de GR indicam os seguintes valores para a razão $Q(n) = \omega_1/\omega_2$: $Q(2)=1$ (devido à simetria do hamiltoniano reduzido nas proximidades do ponto bicrítico) e $Q(3) = 2+0(\epsilon)$. Estimativas numéricas baseadas em expansões em séries de altas temperaturas⁽²⁴⁾ dão um valor mais definido, $Q(3) = 2,51$ em $d=3$.

Esta teoria de escala tem sido comparada satisfatoriamente com vários dados experimentais⁽²⁵⁾ e com pelo menos uma simulação do tipo Monte Carlo⁽²⁶⁾. No caso do $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ⁽¹⁸⁾ (ver Fig. 16) foi seguido um ajuste satisfatório dos dados com $n=2$ (usando a temperatura T_B e a amplitude ω_λ como parâmetros ajustáveis). Permitindo também flutuações nos valores de q , de ϕ e da razão Q obtiveram-se os resultados: $\phi = 1,29 \pm 0,07$ e $Q = 1,06 \pm 0,22$, com valores de q que fornecem \bar{T} no intervalo entre T_B e T_N .

Um estudo experimental detalhado da própria forma de escala foi recentemente realizado por Basten, Frikkee e de Jonge⁽²⁰⁾, no caso do antiferromagneto ortorrômbico $\text{CsMnBr}_3 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$, através de medidas de difração de nêutrons (que dão informações diretas sobre o comportamento das magnetizações alternadas). As formas de escala prevêm que

$$M_{st}^{''}(\bar{g}, \bar{t}) = |\bar{t}|^\beta Y_{\pm} \left(\frac{\bar{g}}{|\bar{t}|^\phi} \right) \quad (14)$$

Quando $n=2$ espera-se que, devido à simetria do problema, a mesma função de escala funcione para $M_{st}^{''}$ e M_{st}^{+} . Escrevendo $x = \bar{g}/\omega\bar{t}^\phi$ temos: (a) para $x \rightarrow 1$, a função de escala deve ser da forma $Y_{\pm}^{'',+}(x) \sim (x-1)^{\beta_1}$, onde β_1 é o expoente crítico do modelo de Ising ($d=3, n=1$); (b) para $x \rightarrow 0$, isto é, ao longo do eixo $\bar{g}=0$, devemos ter $Y_{\pm}^{'',+}(x) \sim \text{constante}$; (c) para $x \rightarrow \infty$, isto é, ao longo do eixo $\bar{t}=0$, vem $Y_{\pm}^{'',+}(x) \sim x^{\beta/\phi}$. Como se pode verificar na Fig. 17, estas previsões são bem acolhidas pelos dados experimentais.

11.3. PONTO DE LIFSHITZ - DEFINIÇÃO E FENOMENOLOGIA

O ponto de Lifshitz foi proposto há alguns anos⁽⁵⁾ mas só foi detectado experimentalmente há muito pouco tempo em cristais de MnP ⁽⁶⁾. Na região do ponto de Lifshitz, o diagrama de fases no plano $H \times T$ dos cristais de MnP está esquematizado na Fig. 18a. Há uma fase desordenada, paramagnética, separada por duas linhas críticas, $H_0(T)$ e $H_\lambda(T)$, das duas fases ordenadas. Na fase ferromagnética o parâmetro de ordem ψ é uma componente da magnetização perpendicular à direção do campo a-

plicado (nas experiências realizadas por Becerra e colaboradores⁽⁶⁾ o campo H foi aplicado ao longo da direção intermediária do cristal). Na fase "fan" esta componente da magnetização exibe um comportamento oscilatório que, nas proximidades da linha λ , pode ser caracterizado por um vetor de onda \vec{q} na direção normal ao plano definido por H e pelo eixo fácil. Na Fig. 18b esquematizamos a variação de q com a temperatura ao longo da linha λ - isto nos permite definir um novo expoente crítico β_q , tal que $q \sim (T_L - T)^{\beta_q}$ para $T \rightarrow T_L^-$. De certa forma a fase ferromagnética corresponde ao limite da fase "fan" para comprimentos de onda infinitos. No entanto, o interior da fase "fan" talvez apresente características muito ricas - pode ser que constitua um exemplo de fase incomensurável, ou que talvez seja formada por uma sucessão de fases comensuráveis, com valores distintos do comprimento de onda. No ponto de Lifshitz, as fases "fan" e ferromagnética, que coexistem ao longo da linha de primeira ordem, tornam-se idênticas à fase paramagnética. Em princípio poderíamos pensar num ponto de Lifshitz caracterizado por um parâmetro de ordem ψ de n componentes e por uma oscilação na fase modulada em m ($m \leq d$) direções (o ponto de Lifshitz no MnP é caracterizado por $n=m=1$ e $d=3$).

A energia livre de Landau nas vizinhanças do ponto de Lifshitz pode ser escrita na forma

$$G = G_0 + \int d^3\vec{r} \left\{ A \psi^2(\vec{r}) + B \psi^4(\vec{r}) + \dots + a \left[\vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \right]^2 + b \left[\vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}) \right]^2 + \dots \right\} \quad (15)$$

onde os coeficientes A, B, a, b são funções analíticas de T e H . A linha $H_0(T)$ é caracterizada por $A=0$ com $B, a, b > 0$. O ponto de Lifshitz é dado por $A=a=0$ com $B, b > 0$. É fácil mostrar que as três linhas do diagrama de fases se encontram tangencialmente no ponto de Lifshitz (de acordo com as experiências de Becerra e colaboradores) e que $\beta_q = 1/2$ (em razoável concordância com as experiências de difração de nêutrons efetuadas por Moon e colaboradores⁽⁶⁾). Um resultado interessante da teoria de Landau é o valor assintótico da razão

$$\frac{H_0(T) - H_1(T)}{H_\lambda(T) - H_1(T)} = \sqrt{6} + 2 \quad (16)$$

que pode ser comparado com os dados experimentais (as medidas em MnP indicam um valor cerca de 30% mais baixo).

Uma teoria de escala para o ponto de Lifshitz em MnP pode ser construída tomando como um dos eixos a direção paralela à linha de primeira ordem ($\bar{g}=0$) e escolhendo o outro eixo, por exemplo, ao longo da direção de H ($\bar{t}=0$). Analogamente aos casos dos pontos tricríticos ou bicríticos temos $\bar{g} = g-pt$ e $\bar{t}=t$, com $g = H-H_L$, $t = (T-T_L)/T_L$ e $p \equiv T_L [dH_1(T)/dT]_{T=T_L}$. As linhas de transição devem ser assintoticamente dados por $\bar{g} = (\text{constante}) |\bar{t}|^\phi$. Usando este esquema Becerra e colaboradores ajustaram o diagrama de fases do MnP com $1/\phi=0,63 \pm 0,04$. O resultado da teoria de Landau é $\phi=2$, mas um cálculo de GR em primeira ordem em ϵ (onde agora $\epsilon=1,5$ para $d=3$) dá $1/\phi=0,625$ (27). Embora este valor também esteja sendo indicado por cálculos de Monte Carlo (28), ainda é bom proceder com certa cautela frente a uma concordância tão grande entre os resultados teóricos e os dados experimentais!

11.4. O MODELO DE ISING METAMAGNÉTICO

Tanto os pontos tricríticos quanto os pontos de Lifshitz, que podem ser explicados através de um parâmetro de ordem com $n=1$, são produzidos teoricamente através de modelos de Ising adequadamente escolhidos. Para realizar um ponto tricrítico basta escolher um modelo de Ising em $d=3$, na presença de um campo magnético, com interações ferro magnéticas ($J>0$) entre primeiros vizinhos no plano $x-y$, e interações antiferromagnéticas ($J' = -RJ < 0$) entre primeiros vizinhos na direção z . Num cálculo de campo médio (29), dependendo da razão R podemos obter essencialmente três tipos de diagramas de fases, conforme os esquemas da Fig. 19. Apenas no caso (b) temos um ponto tricrítico. No caso (c), que nunca foi realizado experimentalmente, a linha de primeira ordem termina num ponto crítico terminal duplo (DCE). Os mesmos tipos de diagramas de fases são obtidos considerando-se um modelo de Ising em

$d=3$ com interações competitivas entre primeiros e segundos vizinhos.

Embora não haja soluções exatas, a forma geral destes diagramas de fase tem sido confirmada pela análise de expansões em séries de altas temperaturas (30) e por simulações de Monte Carlo (31). Não se pode dizer que as análises numéricas sejam muito conclusivas, mas certamente elas não estão em desacordo com o caráter clássico do comportamento termodinâmico nas vizinhanças do ponto tricrítico. Recentemente Jurgen Stilck (32) tentou analisar, com a técnica dos aproximantes diferenciais parciais, as séries de altas temperaturas obtidas por Stanley e colaboradores (30) - aparentemente ou as séries são muito curtas ou as correções logarítmicas ao comportamento clássico impedem a obtenção de resultados mais conclusivos.

O primeiro cálculo de GR nas vizinhanças de um ponto multicrítico foi efetuado por Wegner e Riedel (33) no caso dos pontos tricríticos. Wegner e Riedel introduziram flutuações na energia livre de Landau, formularam a primeira teoria de escala, definiram o expoente de cruzamento e verificaram que a dimensão crítica é $d=3$. Isto é, para $d>3$ o comportamento tricrítico é clássico, mas deve haver importantes correções logarítmicas nos expoentes e nas formas de escala em $d=3$ (tais correções, no entanto, ainda não foram detectadas experimentalmente de maneira cabal (16)). Para o modelo de Ising metamagnético na presença de um campo, há um cálculo de GR efetuado por Nelson e Fisher (34), cujas etapas iniciais foram depois utilizadas para o estudo dos pontos bicríticos e tetracríticos (23). Vale a pena apresentar alguns resultados deste cálculo:

(i) O hamiltoniano inicial, definido numa rede cúbica d -dimensional, que pode ser subdividida em camadas do tipo A e do tipo B, com interações de troca ferromagnéticas dentro das camadas e antiferromagnéticas entre as camadas, é dado pela expressão

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{R}, \vec{R}'} J(\vec{R}-\vec{R}') \sigma_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R}'} - H \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{R}} \sigma_{\vec{R}} - H^+ \sum_{\vec{R}} \sigma_{\vec{R}} \quad (17)$$

onde \vec{k}_0 é um vetor primitivo da zona de Brillouin na direção normal

às camadas. Deve-se observar que, por conveniência, os spins de uma das subredes foram invertidos - assim H é o campo magnético, H^+ é o campo alternado e $J(\vec{r}-\vec{r}')$ é um parâmetro de troca essencialmente positivo.

(ii) Como há uma competição entre um ordenamento ferromagnético e outro antiferromagnético, é preciso tomar algum cuidado para fazer a integração na coroa externa da zona de Brillouin. Nelson e Fisher, para evitar este problema, definiram duas variáveis distintas de spin, correspondentes às duas subredes A e B do modelo metamagnético. Assim temos.

$$\sigma_{\pm}(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R} \in A} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \sigma_{\vec{R}} \pm \frac{1}{2} \sum_{\vec{R} \in B} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \sigma_{\vec{R}}, \quad (18)$$

onde σ_+ se acopla ao campo alternado, enquanto σ_- se acopla ao campo aplicado. Desta maneira o hamiltoniano reduzido pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \bar{H} = & - \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} (r_1 + q_{11}^2 + K_1 q_1^2) \sigma_{1,q} \sigma_{1,-q} - \\ & - \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} (r_2 + q_{11}^2 + K_2 q_1^2) \sigma_{2,q} \sigma_{2,-q} + h_1 \sigma_{1,0} + h_2 \sigma_{2,0} - \\ & - \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \int_{\vec{q}''} \left[u_{11} \sigma_{1,q} \sigma_{1,q'} \sigma_{1,q''} \sigma_{1,-q-q'-q''} + \right. \\ & + 2u_{12} \sigma_{1,q} \sigma_{1,q'} \sigma_{2,q''} \sigma_{2,-q-q'-q''} + \\ & \left. + u_{22} \sigma_{2,q} \sigma_{2,q'} \sigma_{2,q''} \sigma_{2,-q-q'-q''} \right], \quad (19) \end{aligned}$$

onde $\sigma_{1,q}$ e $\sigma_{2,q}$ correspondem respectivamente ao rescalonamento

das variáveis $\sigma_+(\vec{q})$ e $\sigma_-(\vec{q})$, com a notação vetorial de \vec{q} omitida por simplicidade, h_2 é proporcional ao campo direto, h_1 ao campo alternado, e os fatores positivos K_1 e K_2 estão relacionados com os valores anisotrópicos dos parâmetros de troca. O vetor \vec{q} é d-dimensional, com d-1 componentes perpendiculares e uma componente paralela (q_{11}) à direção de anisotropia do metamagneto de Ising.

(iii) A etapa seguinte consiste em redefinir q_1 , ou seja, lidar-se de K_1 fazendo $K=K_2/K_1$ e, o que é mais essencial, em fazer um deslocamento das variáveis $\sigma_{1,q}$ e $\sigma_{2,q}$ para se livrar dos termos lineares no hamiltoniano reduzido. É fácil mostrar que

$$\begin{aligned} \bar{H} = & - \frac{1}{2} \int_{\vec{q}} \left[(r_{11} + q^2) \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 + 2 r_{12} \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_2 + \right. \\ & + (r_{22} + q_{11}^2 + K q_1^2) \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 \left. \right] - \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \left[\omega_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_2 + \right. \\ & + \omega_2 \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 + \omega_3 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 + \omega_4 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \left. \right] - \\ & - \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \int_{\vec{q}''} \left[u_{11} \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 + 2u_{12} \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 + u_{22} \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 \right], \quad (20) \end{aligned}$$

onde os índices de conservação do momento foram omitidos para maior simplicidade. Quando o campo alternado h_1 se anula temos $r_{12}=\omega_3=\omega_4=0$, ou seja, ainda restam termos cruzados de ordem cúbica e quártica que, no esquema do GR, vão ser tratados perturbativamente.

(iv) Agora a teoria de perturbação pode ser desenvolvida da maneira usual, envolvendo dois propagadores distintos

$$G_1^{-1} = r_{11} + e_1 q^2 \quad (21)$$

e

$$G_2^{-1} = r_{22} + e_2 (q_{11}^2 + K q_1^2), \quad (22)$$

onde estamos incluindo as amplitudes e_1 e e_2 que serão escolhidas logo abaixo. Estes dois propagadores refletem a competição entre os dois campos de spins - σ_1 que está relacionado com a magnetização alternada e que se torna crítico, e σ_2 que está relacionado com a magnetização e que permanece fora da criticalidade. Em cada etapa da recorrência devemos fazer um novo deslocamento da variável $\bar{\sigma}_2$ a fim de anular o coeficiente do termo em h_2 . Já podemos antecipar que os parâmetros u_{22} , u_{12} e w_2 serão altamente irrelevantes. A etapa mais delicada consiste na escolha dos fatores c_1 e c_2 de reescalonamento das variáveis de spin - ao invés de fazer $e_1=e_2=1$ e manter constantes os coeficientes dos termos quadráticos em q , vamos escolher c_1 e c_2 tal que $e_1=1$ (como é usual), mas que o termo r_{22} permaneça fixo (isto é, que o campo de spins $\bar{\sigma}_2$ não se aproxima da criticalidade). Nestas circunstâncias é que os parâmetros e_2 , u_{22} , u_{12} e w_2 são irrelevantes. Assim, após um certo número de iterações o hamiltoniano reduzido pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \bar{H} \approx & -\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} (r_{11}+q^2) \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 - \frac{1}{2} r_{22} \int_{\vec{q}} \bar{\sigma}_2 \bar{\sigma}_2 - \\ & - w_1 \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_2 - u_{11} \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \int_{\vec{q}''} \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1 \bar{\sigma}_1. \end{aligned} \quad (23)$$

Utilizando as relações de recorrência em ordem dominante em $\epsilon = 4-d$, é fácil obter os pontos fixos e desenhar um diagrama de fases no subespaço (u_{11}, x) , com $x = w_1^2/r_{22}$, $u_{11} = 0(\epsilon)$ e $w_1 = 0(\epsilon^{1/2})$ (ver a Fig. 20). Há quatro pontos fixos: (1) o ponto fixo I, de caráter gaussiano, totalmente instável; (2) o ponto fixo II, do tipo Ising, que só pode ser atingido a campo nulo; (3) o ponto fixo III, também do tipo Ising, que pode ser atingido em campos pequenos e (4) o ponto fixo IV, de caráter gaussiano, que é atingido para $x = u_{11}/2$ e que determina o caráter clássico do comportamento tricrítico. Para $x > u_{11}/2$, as linhas de fluxo se dirigem para valores negativos de u_{11} e deve ocorrer uma transição de primeira ordem.

(v) Finalmente, para fazer um contato com a teoria de Riedel e Wegner⁽³³⁾, basta partir da Eq. (23) e integrar as variáveis não críticas $\bar{\sigma}_2$. Assim obtemos

$$\bar{H} \approx -\frac{1}{2} \int_{\vec{q}} (r_{11}+q^2) \sigma_1 \sigma_1 - \bar{u} \int_{\vec{q}} \int_{\vec{q}'} \int_{\vec{q}''} \sigma_1 \sigma_1 \sigma_1 \sigma_1 \quad (23)$$

com

$$\bar{u} = u_{11} - \frac{w_1^2}{2r_{22}} \quad (24)$$

Comparando com a Eq. 1, que dá a forma da energia livre de Landau nas proximidades de um ponto tricrítico, obtemos a mesma condição de tricriticalidade do parágrafo anterior ($r_{11}=0$ e $\bar{u}=0$).

11.5. O MODELO BEG

O modelo de Blume, Emery e Griffiths⁽³⁵⁾, que estamos chamando de modelo BEG, foi inicialmente proposto para explicar o ponto tricrítico em misturas de He^3 com He^4 . Pode-se pensar num gás de rede em que cada célula esteja ocupada por um átomo de He^3 ou então por um átomo de He^4 que pode se encontrar em duas situações (normal ou superfluido). Considerando apenas interações entre vizinhos mais próximos isto conduz a um modelo de Ising com spin 1.

O modelo BEG é bastante natural para estudar uma mistura de 3 componentes fluidos. Vamos chamar de P_i^α uma variável que assume o valor 1 se a i -ésima célula de uma rede estiver ocupada por um átomo do tipo α e o valor zero de outra forma. É claro que $P_i^\alpha + P_i^\beta + P_i^\gamma = 1$. Considerando apenas interações entre primeiros vizinhos, a energia total do sistema pode ser escrita na forma

$$-\frac{H}{k_B T} = \sum_i (u_a P_i^\alpha + u_b P_i^\beta + u_c P_i^\gamma) -$$

$$-\frac{1}{q} \sum_{(ij)} \left[a(p_i^\beta p_j^\gamma + p_i^\gamma p_j^\beta) + b(p_i^\alpha p_j^\gamma + p_i^\gamma p_j^\alpha) + c(p_i^\alpha p_j^\beta + p_i^\beta p_j^\alpha) \right], \quad (25)$$

onde q é o número de coordenação da rede, e as grandezas

$$\xi_k = \frac{u_k}{\xi}, \quad (26)$$

com $k = a, b, c$ e $\xi_a + \xi_b + \xi_c = 1$, representam as atividades de cada um dos três componentes fluidos. Este modelo depende, portanto, de cinco parâmetros independentes.

Fazendo $S_i = p_i^\alpha - p_i^\beta$, é fácil reescrever a Eq. (26) na forma de um hamiltoniano de Ising com spin $S=1$:

$$-\frac{H}{k_B T} = H \sum_i S_i - D \sum_i S_i^2 + \frac{1}{q} \sum_{(ij)} \left[J S_i S_j + K S_i^2 S_j^2 + \frac{1}{2} H_3 S_i S_j (S_i + S_j) \right]. \quad (27)$$

Na literatura recente há um grande número de análise deste tipo de modelo⁽³⁶⁾, especialmente num espaço mais restrito de parâmetros - não há dúvidas de que há um ponto tricrítico no diagrama de fases $Dx(k_B T/J)$, para $H=H_3=0$. Utilizando o esquema de GR de Migdal e Kadanoff em $d=2$, acaba de ser publicada⁽³⁷⁾ uma análise dos diagramas de fluxos e dos pontos fixos do modelo BEG no espaço completo de 5 parâmetros (mas no domínio de valores de D , J e K que correspondem a um estado fundamental ferromagnético). O resultado desta análise é extremamente rico - há um ponto fixo caracterizado por 5 parâmetros relevantes (o ponto de Potts de três estados, correspondente ao hamiltoniano inicial com $H=H_3=0$, $K=3J$ e $D=2J$), três pontos fixos tricríticos caracterizados por 4 parâmetros relevantes (no subespaço par, isto é, com $H=H_3=0$), e mais um número grande de pontos fixos críticos.

11.6. O MODELO ANNNI

Talvez a maneira mais simples de produzir um ponto de Lifshitz seja através de um modelo de Ising numa rede cúbica simples com interações ferromagnéticas ($J_1 > 0$) entre vizinhos mais próximos e anti-ferromagnéticas ($J_2 < 0$) entre segundo vizinhos ao longo de uma das direções da rede. Este modelo, que foi proposto⁽³⁸⁾ há vários anos para explicar certas propriedades de cristais de terras raras, tem sido recentemente estudado através de várias técnicas⁽³⁹⁾. Na Fig. 21 esquematizamos o diagrama de fases no plano $T \times p$, onde $p = -J_2/J_1$. O estado fundamental é conhecido exatamente: para $p > 1/2$ há uma fase antiferromagnética em que duas camadas com spins para cima se sucedem a duas camadas com spins para baixo (é o que chamamos de antifase $(2,2) \equiv \langle 2,2 \rangle$). Cálculos de campo médio e simulações de Monte Carlo indicam que, para um certo valor fixo de $p > 1/2$, à medida que a temperatura aumenta ocorrem transições (que na aproximação de campo médio são de primeira ordem) entre fases moduladas distintas que podem ser caracterizadas por um vetor de onda q . Dentro de cada fase modulada a magnetização por camada $m(z)$ tem uma variação praticamente senoidal, sendo portanto bem descrita pelo vetor de onda q do seu harmônio principal. Recentemente, em colaboração com Carlos Yokoi e Maurício Coutinho Filho, analisamos o diagrama de fases global do modelo ANNNI, na presença de um campo magnético aplicado, na aproximação de campo médio⁽⁷⁾. Os resultados desta análise, bem como a análise de um modelo do tipo X-Y adequado aos cristais de MnP ⁽⁸⁾, estão apresentados no trabalho de Maurício Coutinho Filho⁽⁹⁾.

Recentemente Fisher e Selke⁽⁴⁰⁾ utilizaram expansões em séries de baixas temperaturas para analisar as fases moduladas nas vizinhanças do ponto de multifase $T=0$, $p=1/2$. Os resultados obtidos podem ser resumidos na Fig. 22, onde a notação $\langle 2^n, 3 \rangle$ significa uma sequência periódica de n pares de camadas com spins apontando predominantemente dois para cima e dois para baixo, seguida por três camadas apontando predominantemente para cima, ou para baixo, a fim de manter o caráter antiferromagnético da fase. Assim temos

$$\begin{aligned}
 \langle 3 \rangle &\equiv \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow & q &= \frac{2\pi}{6} = \frac{\pi}{3} \\
 \langle 2,3 \rangle &\equiv \uparrow & q &= \frac{2\pi}{10} \times 2 = \frac{2\pi}{5} \\
 \langle 2^2,3 \rangle &\equiv \uparrow & q &= \frac{2\pi}{14} \times 3 = \frac{3\pi}{7} \\
 \langle 2^3,3 \rangle &\equiv \uparrow & q &= \frac{2\pi}{18} \times 4 = \frac{4\pi}{9} \\
 &\dots\dots\dots & & \\
 \langle 2^j,3 \rangle &\dots\dots\dots & q &= \frac{j\pi}{2j+1} \quad ; \quad j = n+1
 \end{aligned}$$

Para uma temperatura fixa, podemos fazer um gráfico dos valores dos harmônicos principais contra a variável p (ver a Fig. 23). A medida que p aumenta os degraus vão se tornando cada vez menores, sugerindo desta forma um comportamento do tipo "escada do diabo". Para p grande e T próximo de T_λ , longe do ponto de multifase, este comportamento também foi recentemente analisado por Bak e von Boehm⁽³⁸⁾ utilizando técnicas da teoria de sólitons.

11.7. A TÉCNICA DOS APROXIMANTES DIFERENCIAIS PARCIAIS

Há pouco tempo^(3,4,41) foi sugerida uma nova classe de aproximantes diferenciais para testar as formas de escala e obter valores numéricos para os parâmetros multicríticos. Vamos supor que uma grandeza termodinâmica nas vizinhanças de um ponto multicrítico (x_c, y_c) possa ser escrita na forma

$$f(x,y) = (\Delta\bar{x})^{-\gamma} z \left[\frac{\Delta\bar{y}}{|\Delta\bar{x}|^\phi} \right], \tag{28}$$

onde

$$\Delta\bar{x} = \Delta x - \frac{1}{e_2} \Delta y \tag{29}$$

e

$$\Delta\bar{y} = \Delta y - e_1 \Delta x, \tag{30}$$

com $\Delta x = x - x_c$ e $\Delta y = y - y_c$. Então é fácil verificar que $f(x,y)$ obedece a equação diferencial a derivadas parciais

$$(\Delta\bar{x} + \frac{\phi}{e_2} \Delta\bar{y}) \frac{\partial f}{\partial \Delta\bar{x}} + (e_1 \Delta\bar{x} + \phi \Delta\bar{y}) \frac{\partial f}{\partial \Delta\bar{y}} = -\gamma \left(1 - \frac{e_1}{e_2} \right) f \tag{31}$$

Normalmente é possível obter um certo número de termos de uma expansão em séries de potências da função $f(x,y)$,

$$f(x,y) \rightarrow F(x,y) = \sum_{k,k' \in \mathbb{N}} f_{kk'} x^k y^{k'} \tag{32}$$

Vamos então encontrar três polinômios $P_L(x,y)$, $Q_M(x,y)$ e $R_N(x,y)$ tal que a equação diferencial

$$P_L(x,y) F(x,y) = Q_M(x,y) \frac{\partial F(x,y)}{\partial x} + R_N(x,y) \frac{\partial F(x,y)}{\partial y} \tag{33}$$

seja automaticamente satisfeita para certas condições convenientes de contorno.

Comparando as duas equações diferenciais (31) e (33) vemos que o ponto multicrítico pode ser estimado pela intersecção das curvas $Q_M(x,y) = 0$ e $R_N(x,y) = 0$. Além disto, expandindo os polinômios P_L , Q_M e R_N em torno do ponto multicrítico, obtemos estimativas para os eixos de escala e para os parâmetros γ e ϕ . Assim temos

$$P_L(x,y) \approx P_c, \tag{34a}$$

$$Q_M(x,y) \approx Q_1 \Delta x + Q_2 \Delta y, \tag{34b}$$

e

$$R_N(x,y) \approx R_1 \Delta x + R_2 \Delta y, \tag{34c}$$

donde vem que

$$e_{1,2} = \frac{1}{2} \frac{R_2 - R_1}{Q_2} \pm \frac{1}{2} \left[\left(\frac{R_2 - R_1}{Q_2} \right)^2 + 4 \frac{R_1}{Q_2} \right]^{1/2}, \quad (35)$$

$$\gamma = \frac{P_c}{e_2 Q_2 - R_2} \quad (36)$$

e

$$\phi = -1 - \frac{\gamma(Q_1 + Q_2)}{P_c} \quad (37)$$

Parametrizando x e y em termos de uma nova variável t podemos ainda integrar numericamente a equação diferencial e obter uma estimativa da própria função de escala $Z(z)$.

Em colaboração com Jürgen Stilck⁽⁴⁾ realizamos recentemente uma série de testes destes aproximantes. No caso de funções conhecidas, capazes de simular as formas de escala, os aproximantes produzem excelentes estimativas dos parâmetros multicríticos sem ultrapassar a capacidade do computador utilizado. No entanto, quando tentamos estimativas com boa precisão do cruzamento dimensional (entre $d=2$ e $d=3$) no modelo de Ising, constatamos que as expansões em séries existentes na literatura são ainda um pouco curtas.

Fisher e colaboradores⁽⁴¹⁾ empregaram um grande esforço para analisar as propriedades bicríticas do modelo de Heisenberg clássico anisotrópico,

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[J_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{\parallel} S_i^z S_j^z \right], \quad (38)$$

onde se distinguem os três tipos de comportamento:

- (a) $0 \leq J_{\perp} < J_{\parallel}$ - tipo Ising ($n=1$) ;
- (b) $J_{\perp} = J_{\parallel}$ - tipo Heisenberg ($n=3$) ;

(c) $J_{\perp} > J_{\parallel} \geq 0$ - tipo XY ($n=2$) .

Neste caso a variável g é dada por

$$g = \frac{J_{\perp} - J_{\parallel}}{J}, \quad (39)$$

onde $J = \frac{2}{3} J_{\perp} + \frac{1}{3} J_{\parallel}$, e a série que foi analisada é a da suscetibilidade total

$$\chi = \frac{2}{3} \chi_{\perp}(T, g) + \frac{1}{3} \chi_{\parallel}(T, g) \quad (40)$$

Longos testes das formas de escala, bem como estimativas dos parâmetros multicríticos, são descritos por Fisher e Chen⁽⁴⁰⁾. Entre as estimativas mais interessantes temos $Q(n=3) = 2,34 \pm 0,08$, que corrige o valor adotado anteriormente, mas que ainda não concorda com os dados experimentais (para o MnF_2 , por exemplo, Rohrer e King⁽⁴²⁾ obtêm $Q = 1,56 \pm 0,35$).

NOTAS E REFERÊNCIAS DA PARTE II

- (1) R.B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. 24, 715 (1970).
- (2) M.E. Fisher e D.R. Nelson, Phys. Rev. Lett. 32, 1350 (1974); M.E. Fisher, Phys. Rev. Lett. 34, 1634 (1975).
- (3) M.E. Fisher, Physica 86-88b, 590 (1977).
- (4) J.F. Stilck e S.R. Salinas, J. Phys. A 14, 2027 (1981).
- (5) R.M. Hornreich, M. Luban e S. Shtrikman, Phys. Rev. Lett. 35, 1678 (1975). Ver também R.M. Hornreich, J. Magn. Magn. Mater. 15-18, 387 (1980).
- (6) C.C. Becerra, Y. Shapira, N.F. Oliveira Jr. e T.S. Chang, Phys. Rev. Lett. 44, 1672 (1980); Y. Shapira, C.C. Becerra, N.F. Oliveira Jr. e T.S. Chang, Phys. Rev. B 24, 2780 (1981). Os primeiros resultados de difração de nêutrons estão publicados em R.M. Moon, J. W. Cable e Y. Shapira, J. Appl. Phys. 52, 2025 (1981).
- (7) C.S.O. Yokoi, M.D. Coutinho-Filho e S.R. Salinas, Phys. Rev. B 24, 4047 (1981).
- (8) C.S.O. Yokoi, M.D. Coutinho-Filho e S.R. Salinas, Phys. Rev. B 24, 5430 (1981).
- (9) M.D. Coutinho-Filho, VII Simpósio Brasileiro de Física Teórica, Rio de Janeiro, 1982.
- (10) E. Stryjewski e N. Giordano, Adv. Phys. 26, 487 (1977).
- (11) R.B. Griffiths e B. Widom, Phys. Rev. A 8, 2173 (1973). Ver o trabalho introdutório de R.B. Griffiths, Physica 73, 174 (1974).
- (12) Ver, por exemplo, R.B. Griffiths e J.C. Wheeler, Phys. Rev. A 2, 1047 (1970).
- (13) R.B. Griffiths, Phys. Rev. B 7, 545 (1973).
- (14) N. Giordano e W.P. Wolf, Phys. Rev. Lett. 35, 799 (1975). Ver também N. Giordano, Phys. Rev. B 14, 2927 (1976).
- (15) E.K. Riedel, H. Meyer e J. Behringer, J. Low Temp. Phys. 26, 369 (1976).
- (16) M.B. Salamon e H.T. Shang, Phys. Rev. Lett. 44, 879 (1980).
- (17) H. Rohrer, Phys. Rev. Lett. 34, 1638 (1975).
- (18) N.F. Oliveira Jr., A. Paduan-Filho e S.R. Salinas, Phys. Lett. 55A, 293 (1975). Ver também N.F. Oliveira Jr., A. Paduan-Filho, S.R. Salinas e C.C. Becerra, Phys. Rev. B 18, 6165 (1978).

- (19) Y. Shapira e C.C. Becerra, Phys. Lett. 57A, 483 (1976).
- (20) J.A.J. Basten, E. Frikkee e W.J.M. de Jonge, Phys. Rev. Lett. 42, 897 (1979).
- (21) J.A.J. Basten, Tese de Doutorado, "Netherlands Energy Research Foundation", 1979.
- (22) H. Rohrer e C. Gerber, Phys. Rev. Lett. 38, 909 (1977).
- (23) J.M. Kosterlitz, D.R. Nelson e M.E. Fisher, Phys. Rev. B 13, 412 (1976).
- (24) P. Pfeuty, D. Jasnow e M.E. Fisher, Phys. Rev. B 10, 2088 (1974).
- (25) C.C. Becerra, VII Simpósio Brasileiro de Física Teórica, Rio de Janeiro, 1982.
- (26) D.P. Landau e K. Binder, Phys. Rev. B 17, 2328 (1978).
- (27) D. Mukamel e M. Luban, Phys. Rev. B 18, 3631 (1978).
- (28) W. Selke, Z. Phys. B 29, 133 (1978); W. Selke, J. Phys. C 13, L261 (1980).
- (29) Ver o excelente artigo de revisão de J.M. Kincaid e E.G.D. Cohen, Phys. Repts. 22, 57 (1975).
- (30) Ver M. Wortis, F. Harbus e H.E. Stanley, Phys. Rev. B 11, 2689 (1975) e as referências citadas neste trabalho.
- (31) D.P. Landau, Phys. Rev. B 14, 4054 (1976).
- (32) J.F. Stilck, Dissertação de Mestrado, IFUSP, 1980.
- (33) E.K. Riedel, Phys. Rev. Lett. 28, 675 (1972); E.K. Riedel e F.J. Wegner, Phys. Rev. Lett. 29, 349 (1972); F.J. Wegner e E.K. Riedel, Phys. Rev. B 7, 248 (1973).
- (34) D.R. Nelson e M.E. Fisher, Phys. Rev. B 11, 1030 (1975).
- (35) M. Blume, V.J. Emery e R.B. Griffiths, Phys. Rev. A 4, 1071 (1971).
- (36) Ver, por exemplo, S. Sarbach e M.E. Fisher, Phys. Rev. B 18, 2350 (1978); Phys. Rev. B 20, 2797 (1979).
- (37) M. Kaufman, R.B. Griffiths, J.M. Yeomans e M.E. Fisher, Phys. Rev. B 23, 3448 (1981).
- (38) R.J. Elliott, Phys. Rev. 124, 346 (1961).
- (39) Resultados de expansões em séries de altas temperaturas: S. Redner e H.E. Stanley, Phys. Rev. B 16, 4901 (1977); J. Phys. C 10, 4765 (1977). Resultados de Monte Carlo: W. Selke e M.E. Fisher, Phys. Rev. B 20, 257 (1979). Resultados de campo médio: P. Bak e J. von Boehm, Phys. Rev. B 21, 5297 (1980).

- (40) M.E. Fisher e W. Selke, Phys. Rev. Lett. 44, 1502 (1980); Proc. R. Soc. (Londres) 302, 1 (1981).
- (41) M.E. Fisher e R.M. Kerr, Phys. Rev. Lett. 39, 667 (1977); M.E. Fisher e J.H. Chen, Proc. 1980 Cargèse Summer Institute on Phase Transitions.
- (42) A.R. King e H. Rohrer, Phys. Rev. B 19, 5864 (1979).

AGRADECIMENTOS

Estas notas de aula foram freqüentemente baseadas em excelentes artigos de revisão dos Professores Robert B. Griffiths e Michael E. Fisher, cuja clareza e profundidade têm sido essenciais para o desenvolvimento das pesquisas em transições de fases. Agradecemos discussões e comentários de vários colegas, especialmente de Carlos S.O. Yokoi, Jürgen F. Stilck, Maurício D. Coutinho-Filho e Vera B. Henriques.

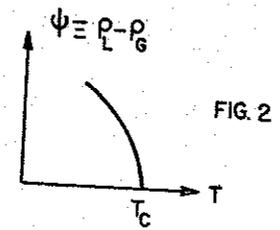
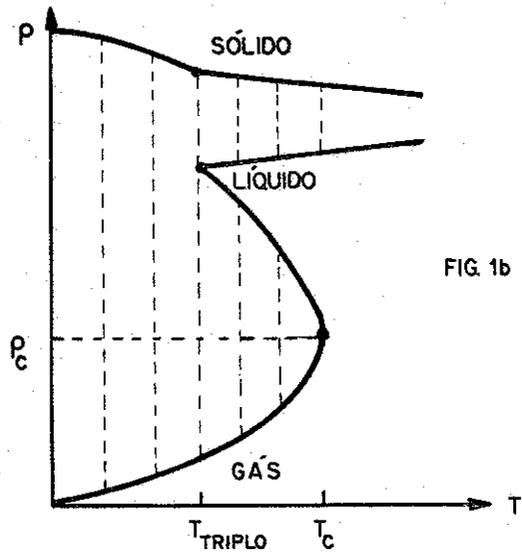
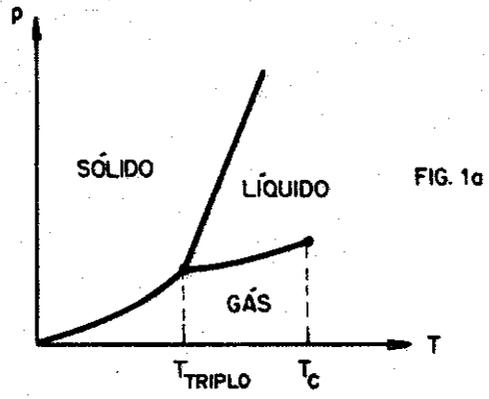
CABEÇALHOS DAS FIGURAS

- FIG. 1 - (a) Esboço do diagrama de fases de um fluido simples no plano pressão (p) - temperatura (T). As linhas grossas indicam transições de primeira ordem (coexistência de fases). Também estão indicadas as temperaturas do ponto triplo e do ponto crítico. (b) Gráfico esquemático da densidade contra a temperatura de um fluido simples. As linhas tracejadas indicam a coexistência de fases.
- FIG. 2 - Parâmetro de ordem da transição líquido-gás.
- FIG. 3 - Gráfico esquemático do diagrama de fases campo x temperatura de um ferromagneto simples. A linha grossa indica uma região de coexistência de duas fases ferromagnéticas distintas.
- FIG. 4 - Magnetização de um ferromagneto uniaxial simples em função do campo magnético para diferentes valores da temperatura.
- FIG. 5 - Gráficos esquemáticos da energia livre de Landau nas vizinhanças da temperatura crítica.
- FIG. 6 - Verificação da forma de escala para a magnetização, Eq. (23), nas vizinhanças do ponto crítico do ferromagneto CrBr_3 . Os dados experimentais foram adaptados do trabalho de Ho e Litster⁽¹²⁾.
- FIG. 7 - Diagramas de fluxo no espaço r - u . Para $d < 4$ o ponto fixo trivial é instável e o ponto fixo não trivial fica situado na região física do diagrama. Para $d > 4$ a situação se inverte.
- FIG. 8 - (a) Esboço do diagrama de fases de um cristal metamagnético no plano campo magnético - temperatura. A linha mais forte, de transições de primeira ordem, é tangencial à linha λ no ponto tricrítico. A superfície hachurada indica a coexistência de duas fases antiferromagnéticas. (b) Gráfico esquemático da magnetização contra a temperatura ao longo das linhas de transição. A região de coexistência de fases, paramagnética (P) - antiferromagnética (A), está indicada na figura.

- FIG. 9 - Gráfico esquemático da magnetização de um cristal metamagnético em função do campo interno para diferentes valores da temperatura.
- FIG. 10 - Gráfico esquemático do comportamento termodinâmico de uma mistura de He^3 com He^4 nas vizinhanças do ponto tricrítico. Em (a) temos a concentração de $\text{He}^3(x)$ contra a temperatura (T). Abaixo de T_{tr} há uma região de coexistência entre uma fase superfluida (S) e uma fase normal (N). O diagrama de fases no espaço dos campos, onde Δ é a diferença entre os potenciais químicos do He^3 e do He^4 , está esboçado na parte (b) - a linha mais forte indica uma transição de primeira ordem.
- FIG. 11 - Eixos de escala nas vizinhanças de um ponto tricrítico.
- FIG. 12 - Curvas experimentais de Giordano e Wolf⁽¹⁴⁾ para a magnetização contra a temperatura nas vizinhanças do ponto tricrítico do cristal metamagnético DAG.
- FIG. 13 - Esboço do diagrama de fases de um antiferromagneto de baixa anisotropia. $H_{||}$ é o campo interno na direção fácil do cristal. A linha mais forte indica uma transição de primeira ordem entre as fases antiferromagnética (ou de Néel, N) e "spin-flop" (SF). No ponto bicrítico as linhas do tipo λ , T_C^I e T_C^A , encontram-se tangencialmente com a linha de primeira ordem.
- FIG. 14 - Esboço do diagrama de fases nas vizinhanças do ponto tetracrítico de um cristal antiferromagnético. Todas as linhas são do tipo λ e se encontram tangencialmente no ponto tetracrítico (T_4, H_4).
- FIG. 15 - Eixos de escala nas vizinhanças de um ponto bicrítico.
- FIG. 16 - Diagrama de fases do $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ nas vizinhanças do ponto bicrítico⁽¹⁸⁾. A curva cheia, que se adapta melhor aos dados experimentais, indica um ajuste com uma teoria de escala usando $n=2$. A curva tracejada corresponde a $n=3$.

- FIG. 17 - Teste das formas de escala nas vizinhanças do ponto bicrítico do cristal antiferromagnético $\text{CsMnBr}_3 \cdot 2\text{D}_2\text{O}$ ⁽²⁰⁾.
- FIG. 18 - (a) Esboço do diagrama de fases dos cristais de fosfato de manganês, no plano H-T, nas vizinhanças do ponto de Lifshitz. O campo H está aplicado na direção intermediária e as setas indicam a direção da magnetização por camada (na fase "fan" a magnetização tem uma componente oscilatória). No ponto de Lifshitz, a linha mais forte $H_1(T)$, de transições de primeira ordem, encontra-se tangencialmente com as linhas de segunda ordem. (b) Vetor de onda crítico ao longo da linha de segunda ordem $H_\lambda(T)$ (ao longo de $H_0(T)$ temos $q_c=0$).
- FIG. 19 - Gráficos esquemáticos dos diagramas de fases que podem ser obtidos, dependendo da razão R, no caso de um modelo de Ising tridimensional com interações ferromagnéticas ($J > 0$) nos planos e antiferromagnéticos ($-RJ < 0$) entre planos. As linhas mais fortes indicam transições de primeira ordem. Em (b) temos um ponto tricrítico; em (c) há um ponto crítico terminal duplo (DCE).
- FIG. 20 - Diagrama de fluxos do modelo de Ising metamagnético no espaço (u_i, x) . (I) é um ponto fixo gaussiano. (II) e (III) são pontos fixos do tipo Ising. (IV) é o ponto fixo gaussiano que determina o comportamento tricrítico.
- FIG. 21 - (a) Esboço do diagrama de fases do modelo ANNNI no plano p-T. As setas indicam a magnetização por camada no estado fundamental. No ponto de Lifshitz a linha mais forte $T_1(p)$, de transições de primeira ordem, encontra-se tangencialmente com as linhas de segunda ordem. (b) Esboço da variação do vetor de onda crítico com a temperatura ao longo da linha para-modulada.
- FIG. 22 - Esboço do diagrama de fases do modelo ANNNI nas vizinhanças do ponto de multifase⁽⁴⁰⁾.

FIG. 23 - Gráfico esquemático dos valores dos harmônicos principais das fases moduladas (adaptado do trabalho de Fisher e Selke⁽⁴⁰⁾).



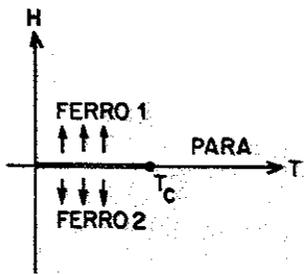


FIG. 3

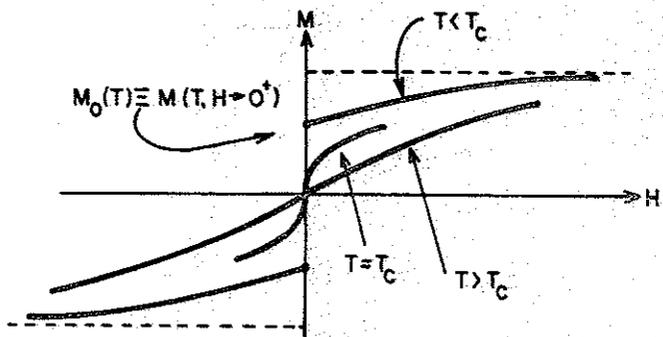


FIG. 4

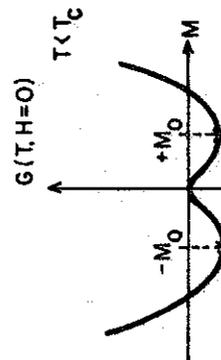


FIG. 5b

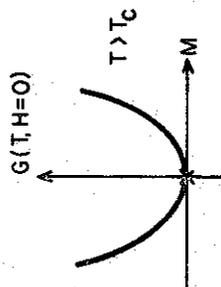


FIG. 5a

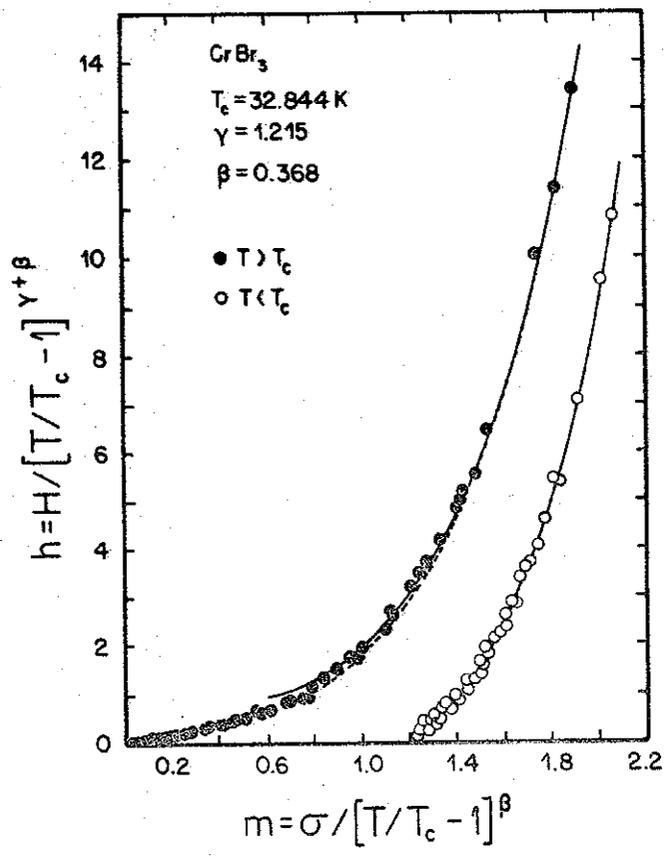


FIG. 6

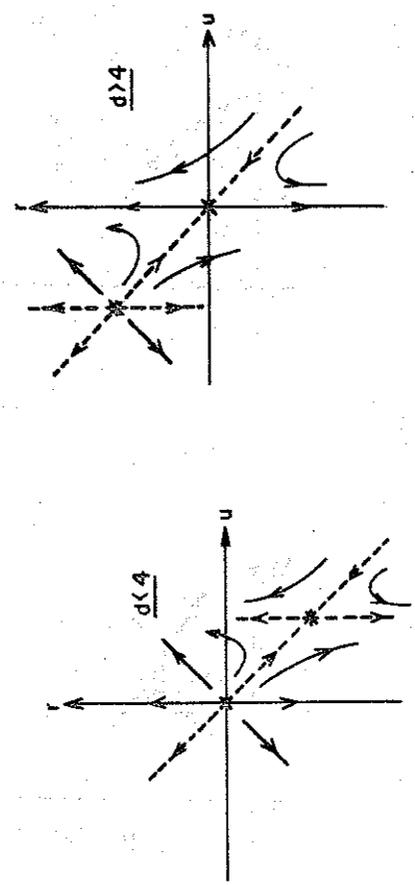


FIG. 7

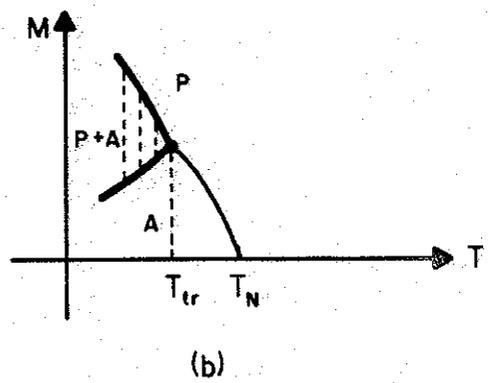
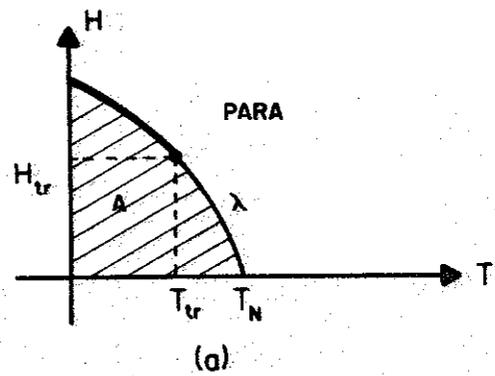


FIG. 8

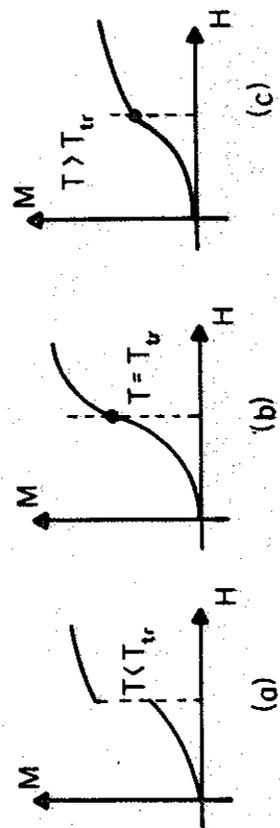


FIG. 9

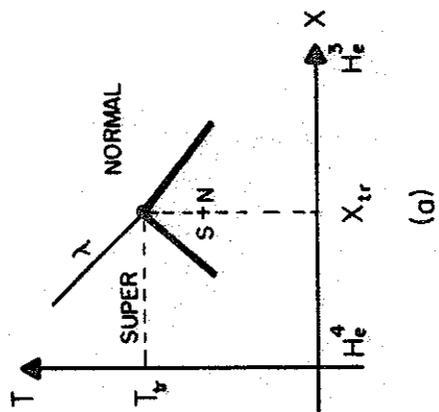
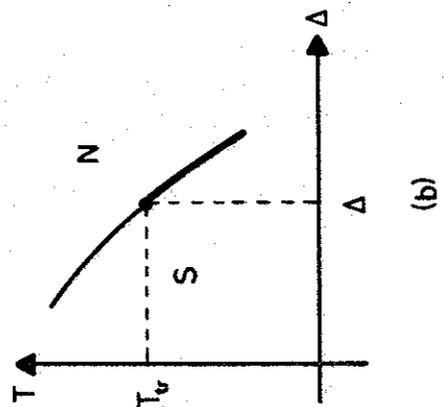


FIG. 10

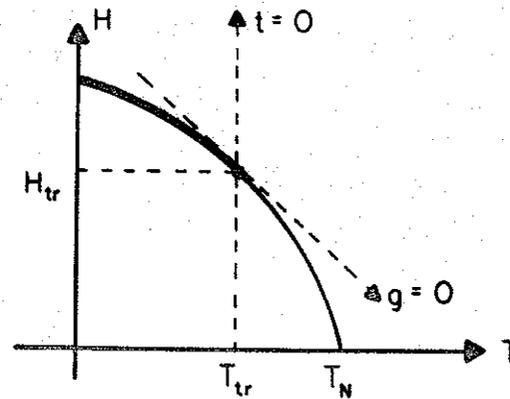


FIG. 11

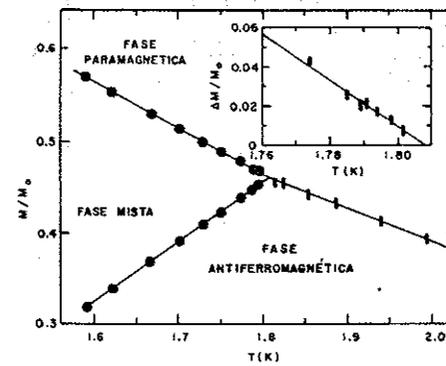


FIG. 12

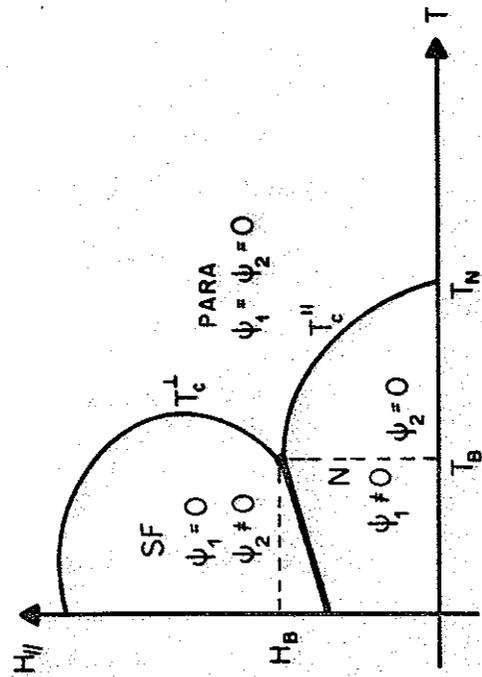


FIG. 13

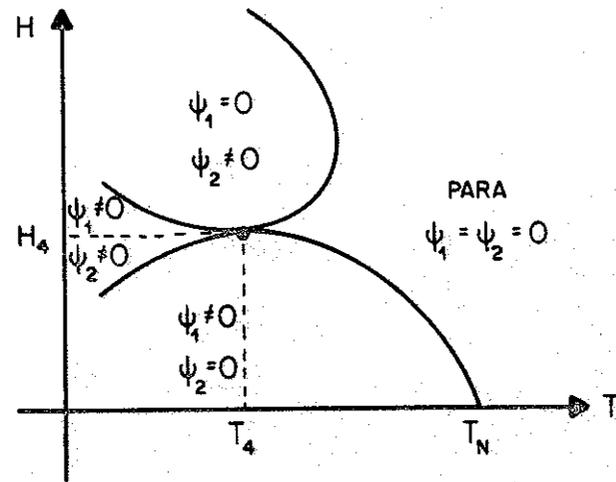


FIG. 14

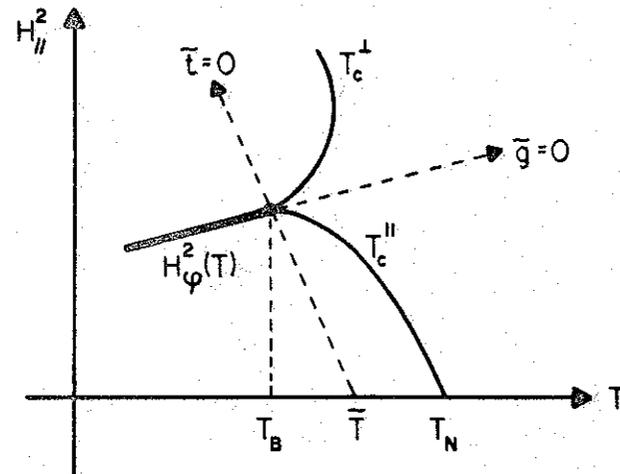


FIG. 15

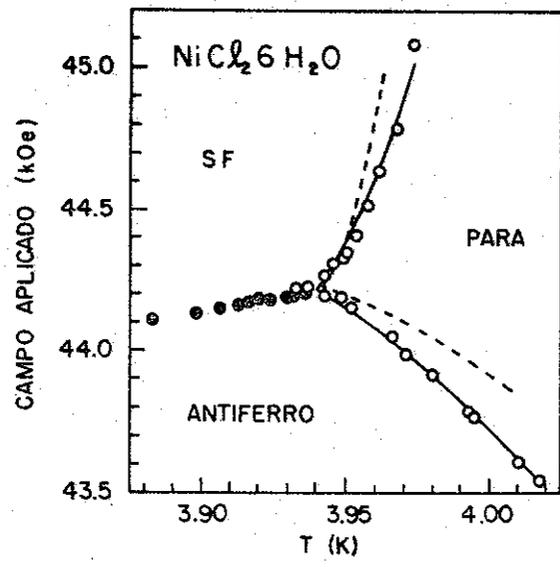


FIG. 16

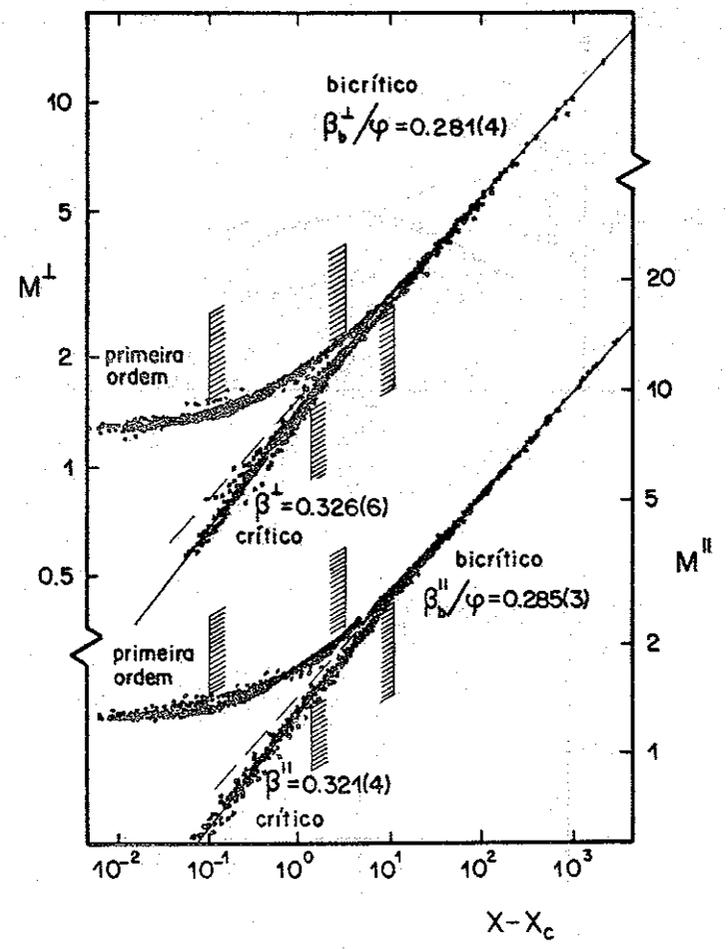


FIG. 17

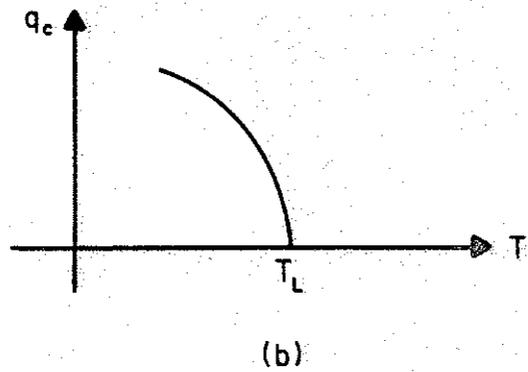
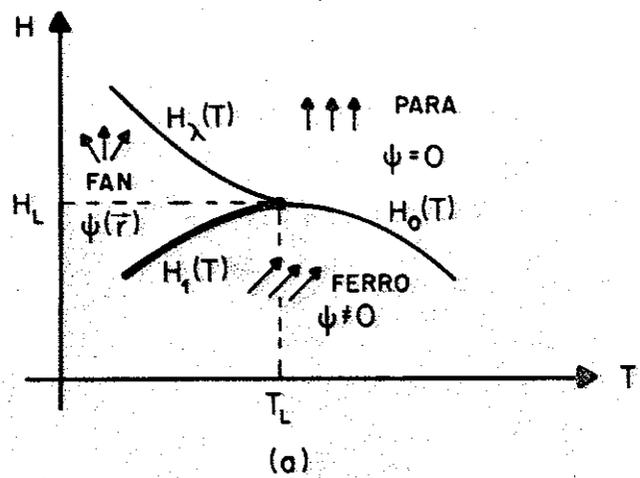


FIG.18

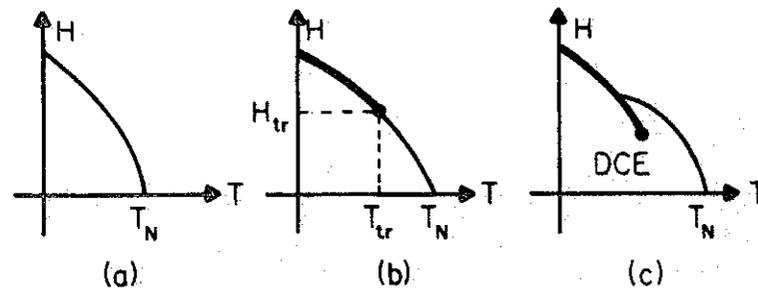


FIG.19

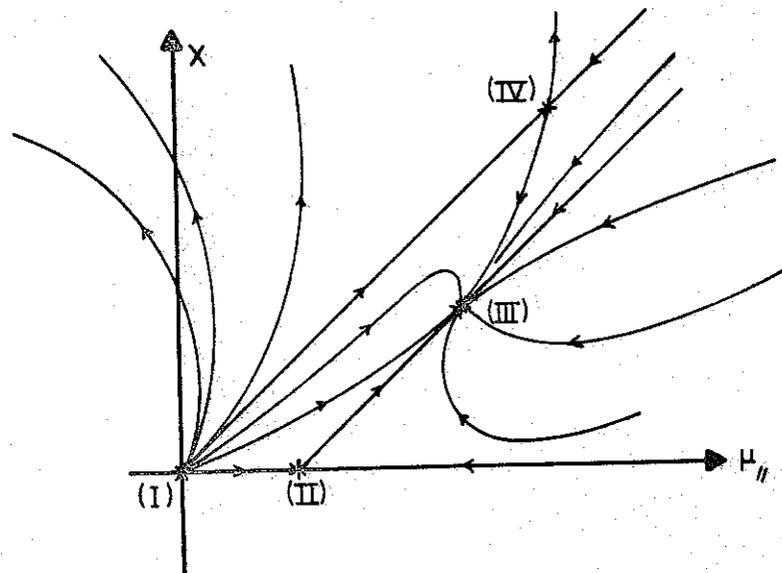


FIG.20

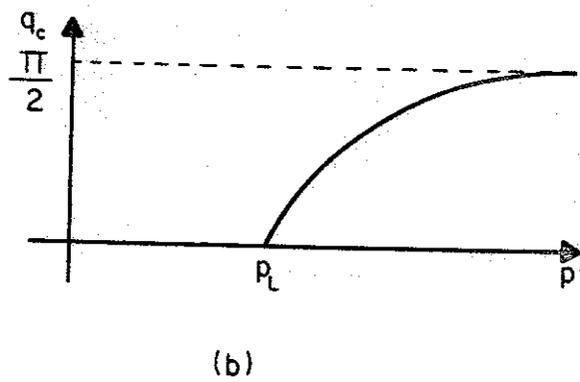
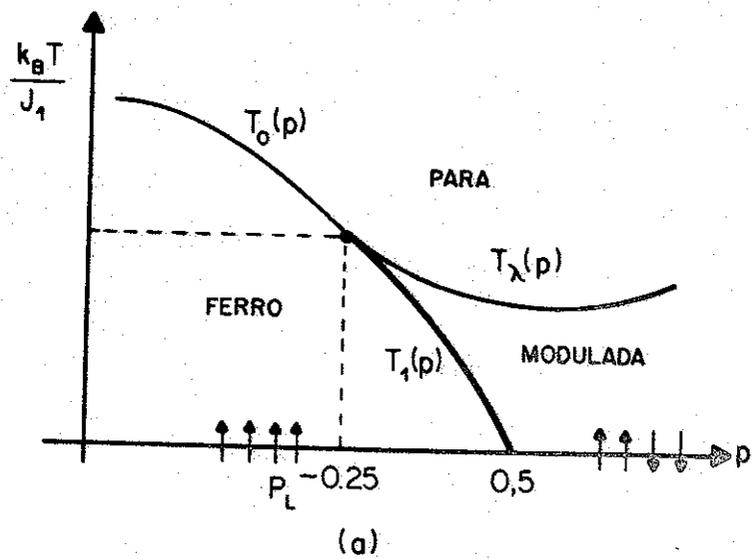


FIG. 21

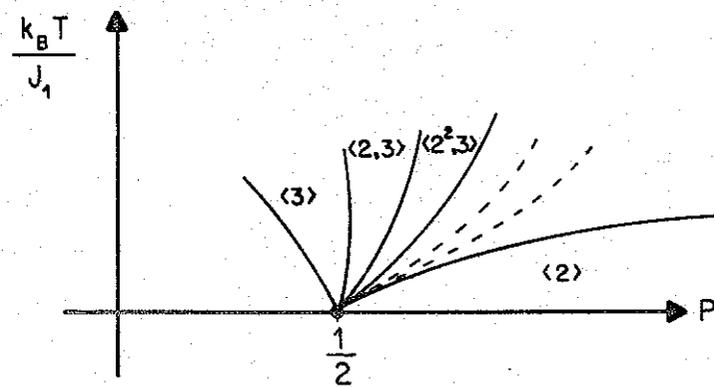


FIG. 22

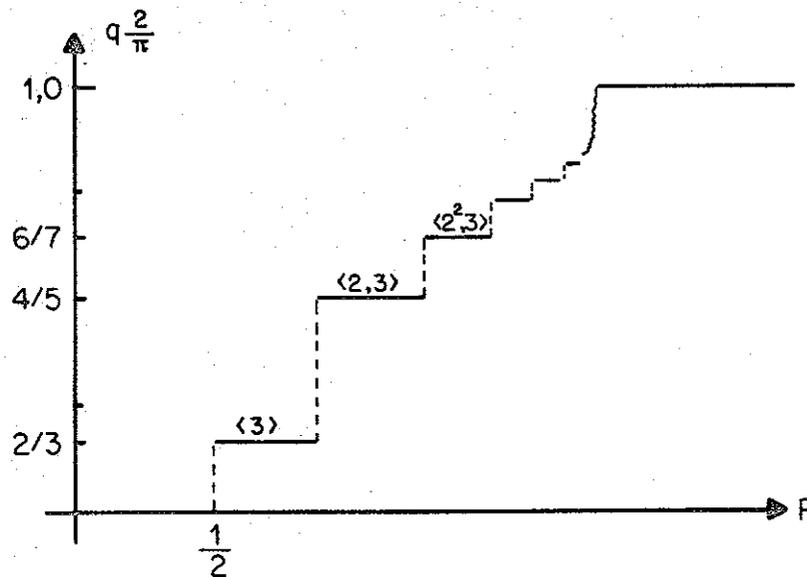


FIG. 23